

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SINALOA
FACULTAD DE CIENCIAS FISICO-MATEMATICAS
MAESTRIA EN FISICA



CARACTERIZACIÓN DE PELÍCULAS SEMICONDUCTORAS DE
 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ EN FASE CÚBICA POR MEDIO DE
FOTOLUMINISCENCIA

TESIS

QUE COMO REQUISITO PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN FÍSICA

PRESENTA:

JUAN JAZZIEL FAVELA LÓPEZ

DIRECTORES DE TESIS:

DRA. YENNY LUCERO CASALLAS MORENO
DR. CRISTO MANUEL YEE RENDON

Culiacán, Sinaloa, Febrero de 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

Las investigaciones de estructuras semiconductoras son las bases para el desarrollo tecnológico de dispositivos, tales como diodos emisores de luz, láseres y celdas solares, son esenciales para la mayoría de las aplicaciones tecnológicas que utilizamos hoy en día.

Este trabajo presenta un estudio de películas de InGaN en fase cúbica crecidas por la técnica de epitaxia de haces moleculares sobre sustratos de GaAs. Las películas fueron crecidas variando las temperaturas del sustrato y de la celda de indio para conseguir que estas películas tuvieran un band gap óptico en la región del verde del espectro. Las muestras fueron caracterizadas por medio de las técnicas de reflectancia, fotoluminiscencia y difracción de rayos x. Se encuentra que, para ciertos espesores de las películas en este estudio, en algunas de ellas hay interferencia en el espectro de PL, esta interferencia puede ser removida empleando reflectancia. De los estudios se concluye que se consiguieron películas crecidas a temperaturas cercanas a 560 °C en la incorporación de In, de las cuales se tienen concentraciones de In del 25.5% al 21.5% para la fase cúbica y hexagonal respectivamente, apropiadas para la emisión verde tanto en fase cúbica como hexagonal.

ABSTRACT

The investigations of semiconductor structures are the basis for the technological development of materials and nanostructured systems, such as light-emitting diodes, lasers and solar cells, they are a fundamental basis for most of the technological devices that we usually use on a daily basis.

This work presents a study of *InGaN* films in cubic phase grown using the molecular beam epitaxy technique on *GaAs* substrate, the films were grown varying the temperatures the substrate and Indium cell with the intention of achieving films with an optical band in the green region of the spectrum. The samples were characterized by means of reflectance, photoluminescence and x-ray diffraction. It is found that for the thicknesses of the films used in this study that some of the samples shows an interference signal in the *PL* spectrum, this interference can be removed using reflectance. From the studies it is concluded that films with appropriate *In* concentrations for emission in the green emission both for cubic and hexagonal phase.

AGRADECIMIENTOS

A mi padre y madre por su apoyo incondicional no solo para realizar este trabajo, sino el apoyo que siempre me han brindado para seguir adelante.

A la Facultad de Ciencias Físico – Matemáticas (FCFM), por la gran formación académica que me brindo.

A Dr. Cristo Manuel Yee Rendon y al Dra. Yenny Lucero Casallas Moreno por todo el conocimiento y guía que me brindo no solo en clases, sino también en el laboratorio y por permitirme trabajar en este proyecto con el grupo de óptica de la facultad.

A Dr. Maximo Lopez Lopez y la Dra. Yenny Casallas del IPN por facilitarme el uso de las muestras utilizadas en este trabajo.

A mis amigos, tanto los de la escuela como los exteriores, que en todo momento mostraron apoyo para poder realizar este trabajo.

Al consejo nacional de ciencia y tecnología (CONACYT), el cual me brindo ayuda monetaria mediante la beca nacional (CVU 998750) y me permitió realizar este proyecto.

INDICE DE CONTENIDO V

Resumen	II
Abstract.....	III
Agradecimientos.....	IV
Índice de contenido.....	V
Índice de figuras.....	VII.
Índice de tablas	IX
1 Introducción.....	1
1.1 Motivación.....	3
1.2 Objetivos.....	3
1.3 Estructura de la Tesis.....	4
2 Marco teórico.....	5
2.1 Teoría de los semiconductores.....	5
2.1.1 Estructuras cristalinas.....	6
2.1.2 Sistema de índices para los planos de un cristal.....	8
2.1.3 Análisis de Fourier	9
2.1.4 Condiciones de difracción.....	11
2.1.5 Bandas de Energía.....	12
2.1.6 Aproximación de masas efectivas.....	14
2.1.7 Absorciones ópticas para transiciones no excitónicas.....	17
3 Método de síntesis y técnicas de caracterización.....	18
3.1 Método de síntesis.....	18
3.2 Caracterización	20
3.3 Difracción de rayos x.....	21
3.4 Fotoluminiscencia.....	23
3.4.1 Tipo de detectores	26
3.4.2 Tipos de transiciones.....	29
3.4.3 Band gap directo.....	32
3.5 Fotorreflectancia	35
3.5.1 Espectroscopia de modulación.....	35
3.5.2 Mecanismo de modulación.....	37

4	Arreglo experimental	40
4.1	Descripción de la técnica de fotorreflectancia	40
4.2	Procedimiento de normalización.....	41
4.3	Configuración Experimental.....	42
4.4	Descripción de la técnica de fotoluminiscencia.....	43
5	Resultados	46
5.1	Caracterización Óptica.....	48
5.2	Difracción de rayos X	48
5.3	Análisis de las muestras	50
5.3.1	Distintas concentraciones.....	52
5.3.2	Interferencia de la Reflectancia.....	53
5.3.3	Muestra m540.....	55
5.3.4	Muestra m545.....	57
5.3.5	Muestra m546.....	67
5.3.6	Muestra m547.....	83
5.3.7	Muestra m566.....	91
5.3.8	Luminiscencia, concentración y condiciones de crecimiento	95
6	Conclusiones	96
7	Referencias.....	97

INDICE DE FIGURAS

Figura 2-1 Estructuras cristalinas. a) Estructura zinc-blenda. b) Estructura del diamante.....	7
Figura 2-2 Tabla periódica de elementos. Señalando los elementos del grupo III-V.....	7
Figura 2-3 Primera zona de Brillouin. Se resaltan los puntos de alta simetría.	8
Figura 2-4 plano (100) sombreado para una estructura cubica.....	9
Figura 2-5 Estructura de bandas electrónicas de GaN. a) Fase wurtzita. b) Fase zinc-blenda [12].	16
Figura 3-1 Esquema de un sistema de crecimiento MBE. Se señalan los principales componentes por el cual está conformado.	19
Figura 3-2 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 a la superficie desde el vacío [10].	21
Figura 3-3 Diagrama donde se muestra cómo se aplica la Ley de Bragg.	22
Figura 3-4 Diagrama donde se muestra el proceso para una medición de difracción de rayos x.	23
Figura 3-5 Diagrama de bloques de los aparatos utilizados para la medición del espectro de excitación [16].	24
Figura 3-6 Descripción del principio de funcionamiento de un fotodiodo de avalancha, los pares electrón-huecos primarios son generados mediante la absorción de fotones con $h\nu > E_g(1)$. Ahora un par se disocia, lo que provoca que, tanto un electron como un hueco se aceleren en direcciones opuestas causado por el campo fuerte en la capa intrínseca de la estructura p-i-n polarizada inversamente, al ganar la suficiente energía, el electrón acelerado (o hueco) mediante ionización por impacto crea un nuevo par electrón hueco (2), (3) y el proceso se repite, similar a una avalancha.[16].	28
Figura 3-7 Proceso de fotoluminiscencia en un semiconductor.	30
Figura 3-8 diagrama en el que se muestra la recombinación de un par electrón-hueco libre.[16].	32
Figura 3-9 Representación esquemática del efecto de fotorreflectancia para una muestra tipo n. a) La muestra está sin perturbar. b) La muestra es perturbada esto causa la creación de pares electrón-hueco. ...	39
Figura 4-1 Diagrama esquemático del arreglo experimental de fotorreflectancia utilizado. Se señala mediante flechas el sentido y seguimiento que se llevó a cabo en el arreglo experimental.	41
Figura 4-2 Arreglo experimental de PR utilizado para las mediciones.	43
Figura 4-3 Diagrama del arreglo experimental de la técnica de PL.....	44
Figura 4-4 Arreglo experimental de PL utilizado para las mediciones	45
Figura 5-1 Estructura de crecimiento para las muestras m540, m545, m546, m547 y m566.	46
Figura 5-2 Difracción de rayos X de InGaN/GaN crecido sobre sustratos 3C-SiC [31].	49
Figura 5-3 Mapa del espacio recíproco de una reflexión asimétrica de Bragg (113) de GaN/InxGa1 – xN/GaN cúbico. [36].	52
Figura 5-4 RSM de a) heteroestructura b) heteroestructura dual con una película de 200-nm de InGaN crecida a 700 °C [40].	53
Figura 5-5 Muestra 540 de GaN de 100 nm crecida sobre un sustrato de GaAs(100).	55
Figura 5-6 Medición de PL de la muestra 540.	56
Figura 5-7 Emisión verde de la muestra M545.	57
Figura 5-8 Espectro de PL para la muestra m545.	58
Figura 5-9 PL de la muestra 545 medida a distintos ángulos.	59
Figura 5-10 Patrón de XRD para la muestra m545.	60
Figura 5-11 XRD para la muestra m545 enfocado en la región de c-GaN-InGaN (002).	61
Figura 5-12 Zona de XRD donde se enfoca en la emisión de c-InGaN.	62
Figura 5-13 XRD para la muestra m545 en la zona de c-InN (002).	63
Figura 5-14 Espectro de XRD para la muestra m545 en la zona de h-GaN (0002).	64
Figura 5-15 Espectro de XRD para la muestra m545 en la zona de h-InN (01-11)	64
Figura 5-16 XRD para la muestra m545 en la zona de GaAs (002).	65
Figura 5-17 Muestra m546 con luminiscencia predominante en el azul.	67
Figura 5-18 Espectro de PR vs R-derivada para la muestra m546.	68
Figura 5-19 Comparación de R vs PL para muestra m546, la cual nos da indicios de una posible interferencia en la región 2.5 a 3 eV.	69

Figura 5-20 Comparación de la reflectancia para la muestra m546 a distintos ángulos, 15°,45° y 75°	70
Figura 5-21 Funciones de interferencia para la muestra m546 en distintos ángulos.....	71
Figura 5-22 Espectro de PL para la muestra m546 a distintos ángulos.....	72
Figura 5-23 Simulación de ajuste gaussiano en el cual se aproxima la medición de PL -obtenida para la muestra m546 medida a 0°.....	73
Figura 5-24 Simulación de ajuste gaussiano en el cual se aproxima la medición de PL obtenida para la muestra m546 medida a 42°.....	73
Figura 5-25 Simulación de ajuste gaussiano en el cual se aproxima la medición de PL obtenida para la muestra m546 medida a 75°.....	74
Figura 5-26 Ajuste del espectro simulado de PL para la muestra m546.....	75
Figura 5-27 XRD para la muestra m546 en toda la región de interés, señalando las regiones en las que nos enfocaremos	76
Figura 5-28 XRD para la muestra m546 enfocado en la región de c-GaN-InGaN (002).....	77
Figura 5-29 XRD para la muestra m546 enfocado en la región de InGaN.....	78
Figura 5-30 XRD para la muestra m546 enfocado en la región de c-InN (002).....	79
Figura 5-31 XRD para la muestra m546 enfocado en la región de h-GaN (0002).....	80
Figura 5-32 XRD para la muestra m546 enfocado en la región de GaAs.....	80
Figura 5-33 muestra m547 con luminiscencia predominante en el verde.....	83
Figura 5-34 Espectro de PL para la muestra m547 en la cual tenemos 2 emisiones de InGaN.....	84
Figura 5-35 XRD para la muestra m547 en toda la región de interés, señalando las regiones en las que nos enfocaremos.....	86
Figura 5-36 XRD para la muestra m547 enfocado en la región de c-GaN (002).....	86
Figura 5-37 XRD para la muestra m547 enfocado en la región de c-InN (002).....	87
Figura 5-38 XRD para la muestra m547 enfocado en la región de h-GaN (0002).....	88
Figura 5-39 XRD para la muestra m547 enfocado en la región de GaAs (002).....	88
Figura 5-40 Fotoluminiscencia de la muestra M566.....	91
Figura 5-41 PL de la muestra M566 empleando un mini espectrómetro.....	92
Figura 5-42 Espectro de PL para la muestra m546 ajustado a 3 picos señalados en la misma.....	93

INDICE DE TABLAS

Tabla 5-1 Parámetros nominales de muestras de InGaN/GaAs.....	47
Tabla 5-2 Mediciones experimentales obtenidas para cada muestra.....	51
Tabla 5-3 Parámetros de ajuste de PL para la muestra m540.....	55
Tabla 5-4 Parámetros de ajuste de PL de muestra M545.....	59
Tabla 5-5 Parámetros de ajuste de XRD para la muestra 545	62
Tabla 5-6 Parámetros de los picos de XRD que identifican las fases de la película y del sustrato.....	65
Tabla 5-7 Constates de red cúbica obtenidas del espectro de XRD, así como estimación de la concentración del InGaN por Ley de Vegard.....	66
Tabla 5-8 Estimación de la concentración de In para la muestra M545 a partir del valor de emisión de PL	66
Tabla 5-9 Ajustes de PL de la muestra m546, donde se expresa la señal del InGaN y una señal de defectos .	75
Tabla 5-10 Parámetros de ajuste de XRD de los picos asociados al GaN y al InGaN.....	78
Tabla 5-11 Parámetros de los picos de XRD que identifican las fases de la película y del sustrato.....	81
Tabla 5-12 Constates de red cúbica obtenidas del espectro de XRD, así como estimación de la concentración del InGaN por Ley de Vegard.....	81
Tabla 5-13 Estimación de la concentración de In para la muestra M546 a partir del valor de emisión de PL.	81
Tabla 5-14 Parámetros de ajuste de PL de la muestra 547	84
Tabla 5-15 Ajuste de XRD de la muestra, donde se nota que está presente la fase cubica del GaN pero no hay evidencia de InGaN en fase cubica.	87
Tabla 5-16 Parámetros de los picos de XRD que identifican las fases de la película y del sustrato.....	89
Tabla 5-17 Constates de red cubica obtenidas del espectro de XRD, así como estimación de las concentraciones del InGaN por Ley de Vegard.....	89
Tabla 5-18 Estimación de las concentraciones de In para la muestra M547 a partir del valor de emisión de PL.....	90
Tabla 5-19 Parámetros de ajuste de PL de muestra M566.....	92
Tabla 5-20 Concentración de Indio estimada de la emisión de PL.....	93
Tabla 5-21 Comparación de los valores de concentración y emisión de las muestras con respecto a sus condiciones de crecimiento. *valor que corresponden a h-InGaN.....	95

1 INTRODUCCIÓN

En la actualidad el GaN y el InGaN son la base de la mayoría de los LEDs modernos que operan en la región entre los 350 nm y 500 nm aproximadamente la cual corresponde al UV-vis del espectro electromagnético, estos dispositivos utilizan capas de estos elementos como región activa para la emisión de luz.

El GaN se emplea en los dispositivos electrónicos por sus cualidades deseables como son su alta temperatura de fusión y alto voltaje de ruptura. Es por ello que el GaN es adecuado para la aplicación de dispositivos de alta potencia y alta frecuencia. Además, debido a la excelente inercia química y las propiedades mecánicas de los nitruros III, los dispositivos electrónicos basados en GaN, son adecuados para trabajar en entornos hostiles como en el medio ambiente, fuertes medios cáusticos y el espacio exterior.

El InGaN representa uno de los puntos culminantes del desarrollo de materiales semiconductores, para entender su funcionamiento, se requiere conocer que es lo que hace a un semiconductor muy útil, es por ello que se hará un repaso de estructura de banda electrónica para un sólido cristalino ideal. Un pionero de esta área fue F. Bloch, famoso por el teorema que lleva su nombre y que explica el comportamiento de los portadores de carga dentro del sólido cristalino. Con el estudio de la estructura de banda de los semiconductores, se dio inicio a una revolución en el área de materiales que hasta ese entonces era dominada por la investigación de fenómenos atómicos.

La investigación sobre GaN comenzó a principios de los años veinte del siglo XX. En 1928, el primer GaN en polvo fue sintetizado por Johnson a través de la reacción de Ga metálico y NH_3 [1]. De los 60 a los 70, se prestó más atención a la investigación sobre síntesis de GaN y a sus propiedades físicas [2].

El primer dispositivo basado en GaN, fue un diodo emisor de luz con la estructura metal-aislante-semiconductor (por sus siglas en ingles MIS) en el cual el GaN fue dopado con Zn y fue fabricado por Pankove et al. en 1971 [3]. En este trabajo además del GaN dopado con

zinc, se utilizaron contactos de indio para energizar la estructura, emitiendo a 475 nm bajo una tensión de trabajo de 60 a 100 voltios con una eficiencia muy baja. La invención y aplicación de nuevas técnicas de síntesis de cristales en los años 70 y 80, tales como deposición química de vapor metal-orgánica (por sus siglas en inglés MOCVD) y epitaxia de haz molecular (por sus siglas en inglés MBE), han impulsado el desarrollo de la investigación de GaN. Sin embargo, la calidad de las capas de nitruro III todavía no eran satisfactorias para el requisito de los dispositivos eficientes.

En 1986, Amano et al [4] sugirieron un procedimiento de crecimiento en dos pasos para mejorar la calidad de la capa de GaN insertando una capa de nucleación de AlN a 77 K antes del crecimiento del GaN. Nakamura et al [5] encontraron que la capa de nucleación GaN crecida entre las temperaturas de 450 a 600°C ayudaba a un mejor crecimiento de la capa de GaN de alta calidad de tiempo de vida útil. Después de este avance, la calidad de GaN se mejoró dramáticamente, lo que sentó las bases para la realización de dispositivos basados en GaN.

Las técnicas de crecimientos epitaxial, permite crecer materiales donde se tiene control de su diseño, lo que permite crear sistemas modelo para la investigación de ciertos fenómenos, tales como, el transporte electrones-caliente (del inglés, hot-electron), y el efecto Hall cuántico fraccionario [6].

Posteriormente, en la década de los 90, se empezó a incorporar indio al GaN para formar la aleación ternaria de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, la cual logró emisiones más centradas en el azul. Un ejemplo de la preferencia en el uso de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en vez del uso de solo GaN, es mencionado en el artículo de Shuji Nakamura en 1998, donde detalla el papel de las imperfecciones estructurales en diodos emisores de luz azul y diodos laser basado en $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [7].

En el presente trabajo se busca estudiar las propiedades ópticas y efectos de dopaje del $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ crecidas sobre sustratos de GaAs (100) por medio de la técnica de crecimiento de epitaxia de haces moleculares (MBE). Las técnicas de caracterización óptica que se utilizan son reflectancia, fotoluminiscencia, y la técnica de caracterización estructural es la de difracción de rayos X, con dichas técnicas se hará un análisis para llevar a cabo una evaluación del efecto de la incorporación de indio y de la temperatura de crecimiento en las propiedades ópticas estructurales de las capas de InGaN.

El área de semiconductores basados en InGaN, es un tema actual de desarrollo científico y tecnológico y la presente tesis, está enfocada a desarrollar una técnica de caracterización óptica no destructiva que nos permita estudiar este tipo de muestras, específicamente la incorporación de indio y la calidad cristalina.

1.1 MOTIVACIÓN

Los estudios experimentales de las propiedades ópticas de materiales nos brindan información de suma importancia para comprender el funcionamiento de estos mismos y sus aplicaciones en la ciencia como son emisores eficientes en LEDs y diodos de luz verdes y azules, por lo que, en el presente trabajo, nos enfocaremos en buscar una relación entre las propiedades ópticas y el dopaje, también para poder caracterizar y establecer la calidad cristalina de las películas de InGaN.

1.2 OBJETIVOS

Objetivo general

- Evaluar la incorporación de In en la aleación de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fase cúbica-meta estable y evaluar su calidad cristalina por medio del análisis de sus propiedades ópticas mediante espectroscopia de Fotoluminiscencia.

Objetivos particulares

- Obtener la emisión de las aleaciones de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fase cúbica meta estable al variar el contenido de In.
- Caracterizar las muestras estructuralmente mediante la técnica de rayos X de alta resolución.

- Realizar un estudio detallado de todas las transiciones ópticas que se producen en las películas y que pueden ser originadas por la incorporación de In y ver cómo cambian esas transiciones con la incorporación del mismo elemento.
- Buscar la presencia de fases secundarias como InN y GaN.
- Enviar un trabajo a un congreso de la especialidad.

1.3 ESTRUCTURA DE LA TESIS

La estructura básica de este trabajo es la siguiente: En el Marco teórico se da una descripción general de la teoría de semiconductores, como son, las estructuras cristalinas, bandas de energía, aproximación de masas efectivas. Posteriormente, se describen los métodos de síntesis y caracterización, donde mencionamos el método utilizado para el crecimiento de las muestras y de las tres técnicas utilizadas para caracterizarlas, las cuales son difracción de rayos x, fotoluminiscencia y reflectancia. Después, se muestra el arreglo experimental y sus especificaciones. Posteriormente se presentan los resultados obtenidos en el trabajo experimental. Finalmente se presentan las conclusiones y perspectivas.

2 MARCO TEÓRICO

2.1 TEORÍA DE LOS SEMICONDUCTORES

El término de semiconductor se refiere a un material en el cual sus propiedades eléctricas, en particular su resistencia puede ser variada y se puede comportar tanto como conductor o aislante. Para ponerlo en contexto un material conductor es aquel en el que la carga se puede mover fácilmente, soporta un flujo de carga cuando una fuente de voltaje de magnitud limitada se aplica a través de sus terminales, un aislante en cambio no permite este flujo. Así, por lo tanto, un semiconductor es un material que posee un nivel de conductividad sobre algún punto entre los extremos de un aislante y un conductor [8].

El material semiconductor más usado para dispositivos opto electrónicos es el GaAs el cual está formado por los elementos arsénico y galio los cuales forman un semiconductor tipo N.

En la actualidad existen muchas técnicas para crecer y dopar materiales semiconductores una de las técnicas más apreciadas para la investigación es la técnica de Epitaxial de Haz Molecular, o MBE por sus siglas en inglés (Molecular Beam Epitaxy), la cual es muy precisa y en consecuencia obtenemos materiales con composición química controlada así como espesores lo cual permite una gran flexibilidad para diseñar materiales en los que se puede controlar tanto sus propiedades ópticas como eléctricas.

2.1.1 Estructuras cristalinas

En 1912 Laue en su famoso trabajo “Efectos de interferencia con rayos Roentgen” establece que los sólidos cristalinos son una distribución tridimensional periódica de las moléculas o átomos. Las estructuras cristalinas se forman ya que la naturaleza siempre tiende a buscar el estado con menor energía posible, normalmente esos estados son estructuras simples y periódicas. Sucede de que muchos de los semiconductores que tienen aplicaciones prácticas tienen una estructura cristalina.

El semiconductor más empleado en electrónica es el Silicio, su estructura cristalina es la estructura del diamante, como se muestra en la **Figura 2-1**. A su vez los semiconductores del grupo III-V (véase **Figura 2-2**) son de interés por sus propiedades ópticas y entre ellos destaca el GaAs, este tienen una red cristalina tipo zinc-blenda como se muestra en la **Figura 2-1** la cual está formada por dos redes fcc desplazadas un cuarto a lo largo de la diagonal del cubo [9], donde cada red fcc está formada por un tipo de átomo ya sea galio, Ga, o arsénico, Ar, y cada átomo está ligado a cuatro átomos del otro tipo. Además del GaAs existe otro material muy importante dentro de los III-V este es el GaN, el cual en particular tiene dos fases la Wurzita y la Zinc Blenda esta última es una fase meta-estable. En el presente trabajo se empleará la fase cúbica la cual se induce durante el crecimiento del GaN y del InGaN, sin embargo, se destaca que la contribución del presente trabajo es hacia la caracterización óptica de dichos materiales y no al crecimiento del mismo por lo que se abordara de manera breve como fue su crecimiento ya que el crecimiento no es el objetivo de este trabajo.

Si bien su estructura cristalina es importante, para analizar sus propiedades ópticas y electrónicas es igualmente relevante el espacio recíproco del mismo. Así a partir de la red fcc que está en el espacio real, se construye la red recíproca que en este caso es una bcc y que está en el espacio de momentos, a esta red le corresponde una zona de Brillouin como el de la **Figura 2-3**, en esta se puede observar el punto Π que viene dado por el vector de momento cristalino con componentes [000], también las direcciones de alta simetría χ [100], Σ [110], y otras, las cuales se etiquetan con letras griegas.

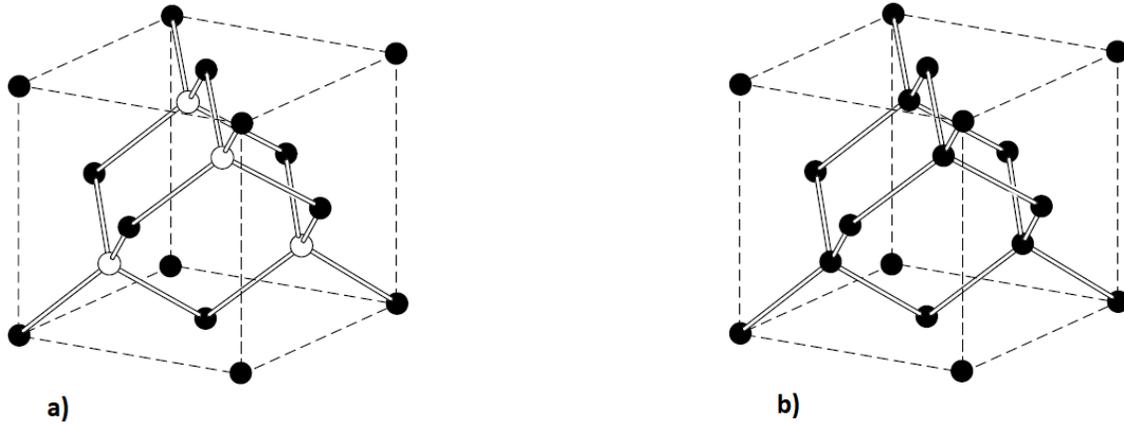


Figura 2-1 Estructuras cristalinas. a) Estructura zinc-blenda. b) Estructura del diamante.

																Grupo III - V					
hydrogen 1 H 1.0079															helium 2 He 4.0026						
lithium 3 Li 6.941	beryllium 4 Be 9.0122															boron 5 B 10.811	carbon 6 C 12.011	nitrogen 7 N 14.007	oxygen 8 O 15.999	fluorine 9 F 18.998	neon 10 Ne 20.180
sodium 11 Na 22.990	magnesium 12 Mg 24.305															aluminum 13 Al 26.982	silicon 14 Si 28.086	phosphorus 15 P 30.974	sulfur 16 S 32.065	chlorine 17 Cl 35.453	argon 18 Ar 39.948
potassium 19 K 39.098	calcium 20 Ca 40.078	scandium 21 Sc 44.956	titanium 22 Ti 47.867	vanadium 23 V 50.942	chromium 24 Cr 51.996	manganese 25 Mn 54.938	iron 26 Fe 55.845	cobalt 27 Co 58.933	nickel 28 Ni 58.693	copper 29 Cu 63.546	zinc 30 Zn 65.39	gallium 31 Ga 69.723	germanium 32 Ge 72.61	arsenic 33 As 74.922	selenium 34 Se 78.96	bromine 35 Br 79.904	krypton 36 Kr 83.80				
rubidium 37 Rb 85.468	strontium 38 Sr 87.62	yttrium 39 Y 88.906	zirconium 40 Zr 91.224	niobium 41 Nb 92.906	molybdenum 42 Mo 95.94	technetium 43 Tc [98]	ruthenium 44 Ru 101.07	rhodium 45 Rh 102.91	palladium 46 Pd 106.42	silver 47 Ag 107.87	cadmium 48 Cd 112.41	indium 49 In 114.82	tin 50 Sn 118.71	antimony 51 Sb 121.76	tellurium 52 Te 127.60	iodine 53 I 126.90	xenon 54 Xe 131.29				
caesium 55 Cs 132.91	barium 56 Ba 137.33	* 57-70	lutetium 71 Lu 174.97	hafnium 72 Hf 178.49	tantalum 73 Ta 180.95	tungsten 74 W 183.84	rhenium 75 Re 186.21	osmium 76 Os 190.23	iridium 77 Ir 192.22	platinum 78 Pt 195.08	gold 79 Au 196.97	mercury 80 Hg 200.59	thallium 81 Tl 204.38	lead 82 Pb 207.2	bismuth 83 Bi 208.98	polonium 84 Po [209]	astatine 85 At [210]	radon 86 Rn [222]			
francium 87 Fr [223]	radium 88 Ra [226]	** 89-102	lawrencium 103 Lr [262]	rutherfordium 104 Rf [261]	dubnium 105 Db [262]	seaborgium 106 Sg [266]	bohrium 107 Bh [264]	hassium 108 Hs [269]	meitnerium 109 Mt [268]	unnilium 110 Uun [271]	ununium 111 Uuu [272]	unbibium 112 Uub [277]	ununquadium 114 Uuq [289]								
* Lanthanide series																					
lanthanum 57 La 138.91	cerium 58 Ce 140.12	praseodymium 59 Pr 140.91	neodymium 60 Nd 144.24	promethium 61 Pm [145]	samarium 62 Sm 150.36	europium 63 Eu 151.96	gadolinium 64 Gd 157.25	terbium 65 Tb 158.93	dysprosium 66 Dy 162.50	holmium 67 Ho 164.93	erbium 68 Er 167.26	thulium 69 Tm 168.93	ytterbium 70 Yb 173.04								
** Actinide series																					
actinium 89 Ac [227]	thorium 90 Th 232.04	protactinium 91 Pa 231.04	uranium 92 U 238.03	neptunium 93 Np [237]	plutonium 94 Pu [244]	americium 95 Am [243]	curium 96 Cm [247]	berkelium 97 Bk [247]	californium 98 Cf [251]	einsteinium 99 Es [252]	fermium 100 Fm [257]	mendelevium 101 Md [258]	nobelium 102 No [259]								

Figura 2-2 Tabla periódica de elementos. Señalando los elementos del grupo III-V.

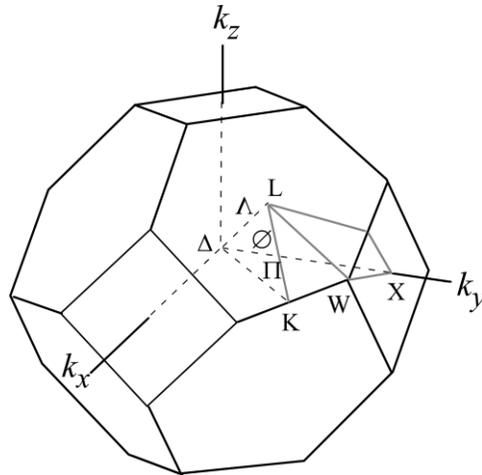


Figura 2-3 Primera zona de Brillouin. Se resaltan los puntos de alta simetría.

2.1.2 Sistema de índices para los planos de un cristal

Para determinar la orientación de un plano en un cristal es necesario tres puntos en el plano que lo determinen, los cuales no deben de ser colineales, estos puntos pueden ser dados en términos de las constantes de red a_1, a_2, a_3 . Una forma fácil de identificar un plano es siguiendo las siguientes reglas:

1. Encuentre la intercepción del plano con los ejes de las contantes de red a_1, a_2, a_3 .
2. Ahora tome el recíproco de esos números y conviértalos en enteros conservando la misma proporción.

Un ejemplo, digamos que tiene un plano con valores de intercepción 2,1,4. Tomamos su recíproco $1/2, 1, 1/4$ y ahora los convertimos en valores enteros 2,4,1 por lo que el plano seria de la forma (241), ahora para denotar que en algún índice el valor es negativo se agrega una barra sobre el numero digamos que en el caso anterior la primera intercepción era negativa, para este caso se denotara de la siguiente forma ($\bar{2}41$).

También, se puede dar el caso, en donde una o más de una de las constantes de red “nunca” intercepten con el plano, supongamos que tenemos una estructura cúbica, y buscamos un plano como el de la Figura 2-4, para este caso consideraremos que los valores de intercepción son $1, \infty, \infty$ es decir, interceptan en las otras constantes de red en el “infinito” De esta forma tomando su recíproco tenemos $1, \frac{1}{\infty}, \frac{1}{\infty}$ ahora considerando que $\frac{1}{\infty} \rightarrow 0$ tomaremos como el plano es de la forma $(1,0,0)$, a esta nomenclatura se le suele llamar índices de Miller con los índices de forma (hkl) .

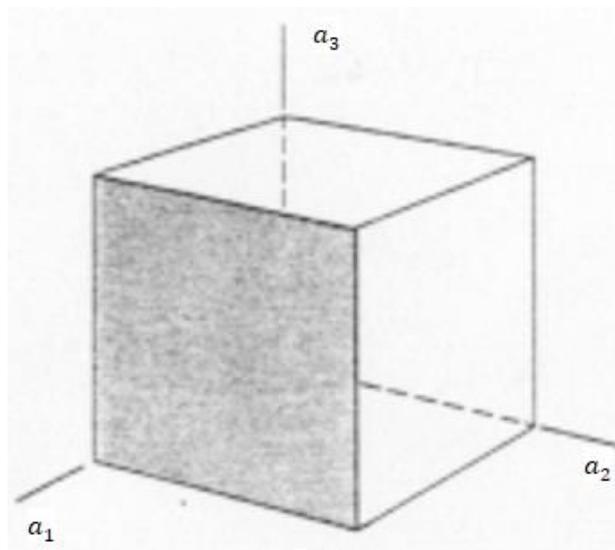


Figura 2-4 plano (100) sombreado para una estructura cubica.

2.1.3 Análisis de Fourier

Sabemos que un cristal es invariante ante cualquier transformación de la forma $\mathbf{T} = u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3$ donde u_1, u_2, u_3 son enteros y a_1, a_2, a_3 son los ejes del cristal, cabe aclarar que tal propiedad local del cristal, ya sea la concentración de carga, el número de densidad

de electrones o la densidad del momento magnético también son invariantes ante T, por lo que tomando la densidad de números de electrones $n(\mathbf{r})$, se cumple que

$$n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = n(\mathbf{r})$$

Esta condición de periodicidad nos permite aplicar un análisis de Fourier, ahora consideremos una función $n(x)$ en una dimensión con periodo a en la dirección de x , expandimos esta función en series de Fourier:

$$n(x) = n_0 + \sum_{p>0} [C_p \cos(2\pi px/a) + S_p \sin(2\pi px/a)]$$

Con p un entero positivo y C_p, S_p los coeficientes de Fourier. Se cumple que $n(x+a) = n(x)$ por la periodicidad en a . Escribiéndolo de forma compacta tenemos que es de la forma:

$$n(x) = \sum_p n_p \exp(i2\pi px/a)$$

Donde ahora p corresponde a todos los enteros, y n_p es un coeficiente complejo, pero para asegurar que $n(x)$ sea real pondremos la condición de $n_p = n_{-p}^*$.

Nombrando $\varphi = 2\pi px/a$ y realizando la suma de los términos de p obtenemos:

$$n_p(\cos \varphi + i \sin \varphi) + n_{-p}(\cos \varphi - i \sin \varphi) = (n_p + n_{-p}) \cos \varphi + i(n_p - n_{-p}) \sin \varphi$$

Por lo que se puede reescribir de la siguiente forma $2\text{Re}\{n_p\} \cos \varphi - 2\text{Im}\{n_p\} \sin \varphi$ y mientras la condición de $n_p = n_{-p}^*$ entonces el número de densidad es una función real.

Ahora tomando la versión para 3 dimensiones tenemos

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

Ahora veamos de qué forma son los vectores de la red recíproca, construyéndolos de la forma

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$

Ahora si $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ eran vectores primitivos de la red del cristal, entonces $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ lo serán de la red recíproca por lo que satisfacen $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$

Por lo que los puntos en la red reciproca son mapeados por

$$\mathbf{G} = v_1 \mathbf{b}_1 + v_2 \mathbf{b}_2 + v_3 \mathbf{b}_3$$

Con v_1, v_2, v_3 enteros, y \mathbf{G} es el vector de la red reciproca.[9]

2.1.4 Condiciones de difracción

La amplitud del vector del campo eléctrico o magnético en una dispersión de la onda electromagnética dispersa es proporcional a la cantidad la cual es llamada amplitud de dispersión F :

$$F = \int dV n(\mathbf{r}) \exp [i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}] = \int dV n(\mathbf{r}) \exp (-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$

Donde $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = -\Delta\mathbf{k}$, aquí $\Delta\mathbf{k}$ mide el cambio en el vector de onda y es llamado el vector de dispersión.

Ahora sustituyendo la forma de $n(\mathbf{r})$ ya antes expresada tenemos:

$$F = \int dV n_G \exp [i(\mathbf{G} - \Delta\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}]$$

Cuando el vector de dispersión es igual al vector de la red reciproca tenemos $\mathbf{G} = \Delta\mathbf{k}$

Por lo que $F = Vn_G$, ahora, en una dispersión elástica, la energía del foton $\hbar\omega$ se conserva, por lo que la frecuencia del haz emergente $\omega' = ck'$ es equivalente a la frecuencia del haz incidente. Como las magnitudes de \mathbf{k} y \mathbf{k}' son equivalentes, se cumple $k^2 = k'^2$, por lo que con la condición antes mencionada y con $\mathbf{G} = \Delta\mathbf{k}$ obtenemos:

$$\mathbf{k} + \mathbf{G} = \mathbf{k}' \rightarrow (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 = k'^2 \rightarrow 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} + G^2 = 0$$

Si \mathbf{G} es un vector de la red reciproca, entonces $-\mathbf{G}$ también lo es, por lo que sustituyéndolo en la última ecuación obtenemos:

$$2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^2$$

Esta expresión es usada para la condición de difracción. Como ejemplo para la ley de Bragg, la distancia $d(hkl)$ entre el plano paralelo de la red que es normal a la dirección de $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ es $d(hkl) = 2\pi/|\mathbf{G}|$ por lo que al sustituir en $2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^2$ obtenemos $2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) \sin \theta = 2\pi/d(hkl)$ donde θ es el ángulo entre haz incidente y el plano. Ahora recordando que los índices hkl tienen un factor en común digamos n podemos reescribir la última ecuación de la forma:

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

Con d la distancia entre planos paralelos adyacentes con índices $h/n, k/n, l/n$. [9]

2.1.5 Bandas de Energía

Utilizando el modelo del electrón libre en los metales nos permite de una manera precisa calcular los valores de capacidades caloríficas, conductividad térmica, conductividad eléctrica, entre otras, pero este modelo no es suficiente para poder distinguir entre un metal y un aislante o semiconductor. La resistividad eléctrica tiene un gran rango de trabajo, ya que se pueden encontrar materiales del orden de $10^{-10} \Omega \cdot cm$ a $1K$ de temperatura y el cual sería un metal puro, materiales con resistividad de hasta $10^{22} \Omega \cdot cm$ son un buen aislante, por tanto, tenemos 32 órdenes de magnitud para valores de la resistividad, por lo cual es una medida que nos ayuda a diferenciar entre un conductor, un aislante o un semiconductor. Alternativamente un semiconductor se puede definir como aquel cuyo band gap de energía para cierta excitación electrónica este entre 0 y 3 electrón volts (eV) aproximadamente, aunque estos rangos de band gap pueden variar levemente [10].

Todo material tiene electrones, y la manera de obtener una conductividad eléctrica es midiendo cuantos electrones responden ante un campo eléctrico aplicado. Ahora bien, sería de suponer que si hay más electrones presentes entonces se debería tener una mejor conductividad y esto no siempre es cierto, así para entender por qué, aunque hay electrones

en el material, no todos contribuyen de igual manera a la conducción de corriente se debe de entender cómo es que un electrón se comporta dentro del material.

Para ello comencemos con un átomo completamente aislado, las funciones de onda que describen a sus electrones serán las atómicas y por tanto los niveles de energía de este están muy definidos.

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 un gran cantidad de niveles muy próximos entre sí, tanto que la descripción de niveles discretos pierde su valor y se empieza a definir en términos de bandas de energía. Si bien la evolución de niveles discretos a bandas es un proceso complicado de calcular, se tiene que bajo ciertas circunstancias aparecen separación entre estas bandas, así para energía que se encuentran en la separación entre banda no existe ningún electrón con energía en dicha región si a esta región se le conoce como brecha o band gap (brecha en inglés) de energía prohibida. El ancho de las bandas y de los band gaps entre ellas, dependerá del tipo de átomos, el tipo de enlaces entre ellos y la estructura cristalina del material.

La banda más importante en un material por ser la que determina las propiedades ópticas y electrónicas, y la que usaremos de aquí en adelante, es la correspondiente a la que forman los electrones de la capa más externa de un átomo, esta banda se denomina banda de valencia y a la primera banda que se encuentra por encima de esta última que se denomina banda de conducción.

La energía que se necesita para que un electrón pase de la banda de valencia a la de conducción le llamamos energía de band gap. Es precisamente el band gap del material que sirve como región activa y es el parámetro más importante requerido para el diseño de dispositivos optoelectrónicos.

Se pueden distinguir dos tipos de semiconductores, los de band gap directo y los de band gap indirecto; los primeros son aquellos que al aplicarles una energía igual o mayor a su band gap, que puede darse al absorber un fotón, un electrón de la banda de valencia pasa a la banda

de conducción conservando su momento y con la menor energía posible, definida 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 el momento cristalino es cero.

Un material de band gap indirecto es aquel que al aplicarles una energía igual o mayor que la de su band gap, un electrón de la banda de valencia pasa a la de conducción, pero no con su menor energía posible, sino que lleva una energía E_1, E_2, \dots . Cuando un electrón pasa de la banda de valencia a la de conducción, el estado que ocupaba queda vacío, este estado vacío se denomina hueco. Estos huecos normalmente se tratan como si fueran partículas con carga de magnitud igual a la del electrón que paso a la banda de conducción, pero con signo positivo.

En el presente trabajo se medirá el band gap InGaN. Se tiene que en la literatura hay valores contradictorios sobre el band gap del InGaN sobre todo aquel que está en fase cúbica, se ha propuesto y corroborado varios modelos para el band gap de InGaN como función del contenido de In que son no lineales. El modelo más simple y más usado es aquel que se ajusta por un modelo cuadrático en cual tiene una interpolación lineal entre el band gap del GaN y el InAs con la adición de un término cuadrático de curvatura (bowing parameter) [11].

2.1.6 Aproximación de masas efectivas

Para describir la estructura de bandas de un pozo cuántico utilizaremos la aproximación de masas efectivas, para material de bulto InGaN, por ser una estructura cristalina su función de onda es de la forma:

$$\psi_n^c = G_n^c(z)u_{c0} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.1)$$

Donde n es el número de la sub-banda, u_{c0} es la función de Bloch en la celda periódica $k = 0$ para la banda de conducción (valencia) del pozo, \mathbf{k} es el vector de onda perpendicular a la dirección de crecimiento del material, y $G_n(z)$ es la función envolvente determinada por la solución de la ecuación de Schrödinger, véase Apéndice B:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{d^2 G_n^c(z)}{dz^2} + V(z)G_n^c(z) = E_n^c G_n^c(z) \quad (2.2)$$

Que es la ecuación a resolver y donde $m^*(z)$ es la masa efectiva del electrón (hueco) en los materiales, E_n^c es la energía de la n -ésima sub-banda en $k = 0$. La estructura es como se muestra en la **Figura 2-5**.

Los niveles de energía tienen dependencia del vector de onda de la sub-banda n del electrón(hueco) y son de la forma:

$$E_n^c(k) = E_n^c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (2.3)$$

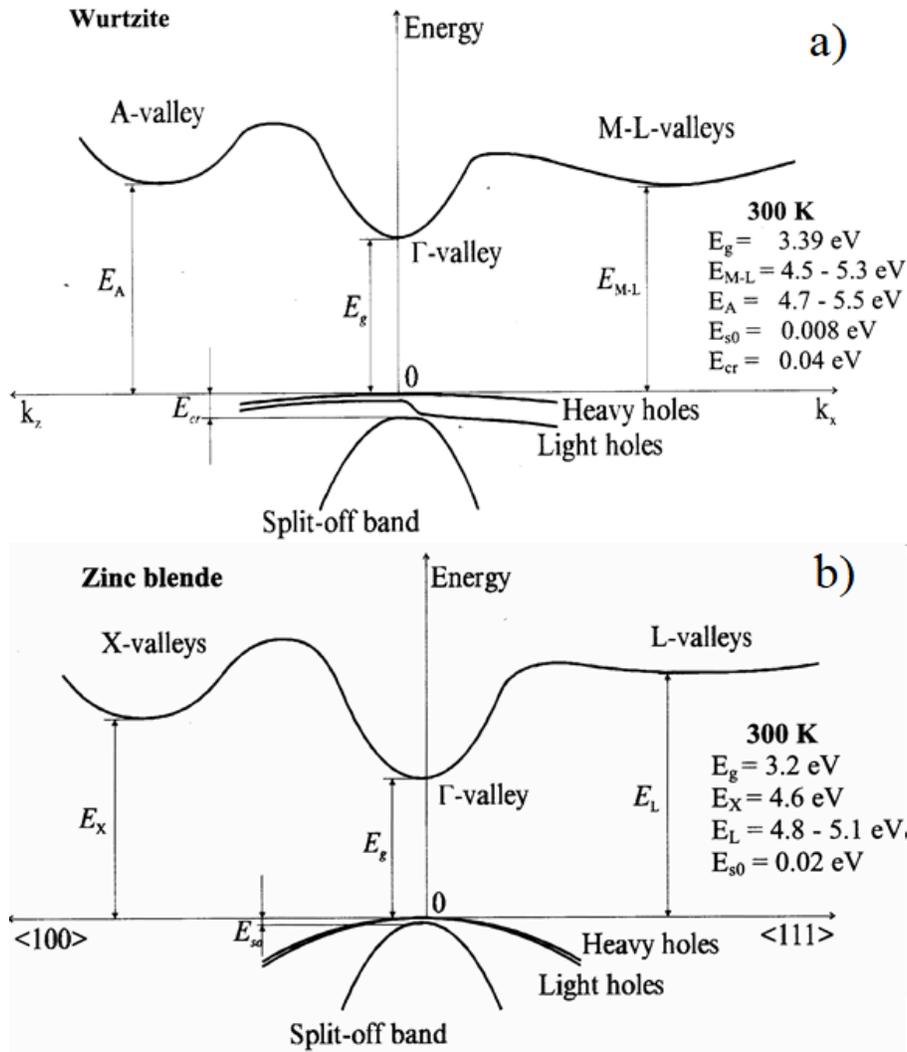


Figura 2-5 Estructura de bandas electrónicas de GaN. a) Fase wurtzita. b) Fase zinc-blenda [12].

En la estructura de la blenda de zinc, el potencial de interfaz $V(z)$ provoca una mezcla entre el carácter de agujero pesado y ligero en la banda de valencia para k fuera del punto Γ , como consecuencia, el procedimiento para calcular la banda de valencia se complica.

Las funciones de onda del pozo cuántico para huecos son más complicadas que solo lo descrito. Sin embargo, debido a la forma del Hamiltoniano Luttinger que describe la banda de valencia, el modelo simple de una banda descrito es preciso para el cálculo de las funciones y energías de la onda de valencia en $k = 0$.

2.1.7 Absorciones ópticas para transiciones no excitónicas

La absorción óptica para transiciones entre la 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 $\alpha_{nm}(\hbar\omega)$, está caracterizada por un sobresalto de absorción en $E_{cv}^{nm}(0)$ que continua con una magnitud constante a altas energías. Esta forma de la absorción surge de la suma sobre el espacio k y es característica de la densidad de estados constante para un sistema dos-dimensional.

La reflectancia modulada que se usará para caracterizar al sistema hará empleo de que esta absorción óptica puede ser modulada si se cambia el campo eléctrico superficial de la muestra dando lugar a una forma de línea característica en la vecindad del punto crítico, en este caso el borde de absorción que inicia con la transición de los niveles del electrón a hueco.

3 MÉTODO DE SÍNTESIS Y TÉCNICAS DE CARACTERIZACIÓN

3.1 MÉTODO DE SÍNTESIS

En el presente trabajo se estudian muestras que fueron sintetizadas en el equipo C21 RF-MBE del 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 Moreno.

El método que aparece con frecuencia en la literatura para III-nitruros es Epitaxia de haz molecular (MBE) [13,14]. MBE es un método de crecimiento de cristales sofisticado y ampliamente adoptado, que ha sido discutido en muchos libros de texto y documentos [15]. Es un crecimiento fuera del equilibrio termodinámico en el que los procesos cinéticos dominan el crecimiento.

MBE es un proceso epitaxial que implica la reacción de uno o más haces moleculares con una superficie cristalina – en este caso el sustrato – bajo condiciones de ultra-alto vacío (10^{-10} Torr). En un proceso epitaxial, el sustrato en forma de oblea actúa como la semilla del cristal. Estos haces moleculares son creados mediante un calentamiento de un material de origen hasta vaporizarlo dentro de una celda con un pequeño orificio, ya que el vapor sale de la celda por el pequeño orificio, estas moléculas forman un haz colimado. Dado que están ante un ambiente de alto vacío hace que estas moléculas puedan viajar varios metros balísticamente sin colisionar [10]. Comúnmente hay más de una de estas celdas, por lo que se pueden tener haces de cada elemento necesario para crecer materiales en bulto. MBE permite la precisa fabricación de materiales en bulto semiconductores obteniendo películas delgadas de una fracción de micrón, aunque es una técnica muy lenta, ya que típicamente crece $1 \mu\text{m/hr}$.

El crecimiento de MBE se realiza normalmente con una temperatura relativamente baja, lo que de manera general hace que este sea un proceso lento y se tenga control del mismo. Gracias a las condiciones de ultra alto vacío empleado es posible monitorear su crecimiento

y caracterizar el material sin exponerlas al medio ambiente. Durante el crecimiento de manera rutinaria se emplea reflexión difracción de electrones de alta energía (RHEED), microscopía de transmisión (STM) con lo que se logra el crecimiento con una precisión de una capa monoatómica. Así se puede obtener una buena interfaz y una gran calidad del material mediante el uso de crecimiento de MBE.

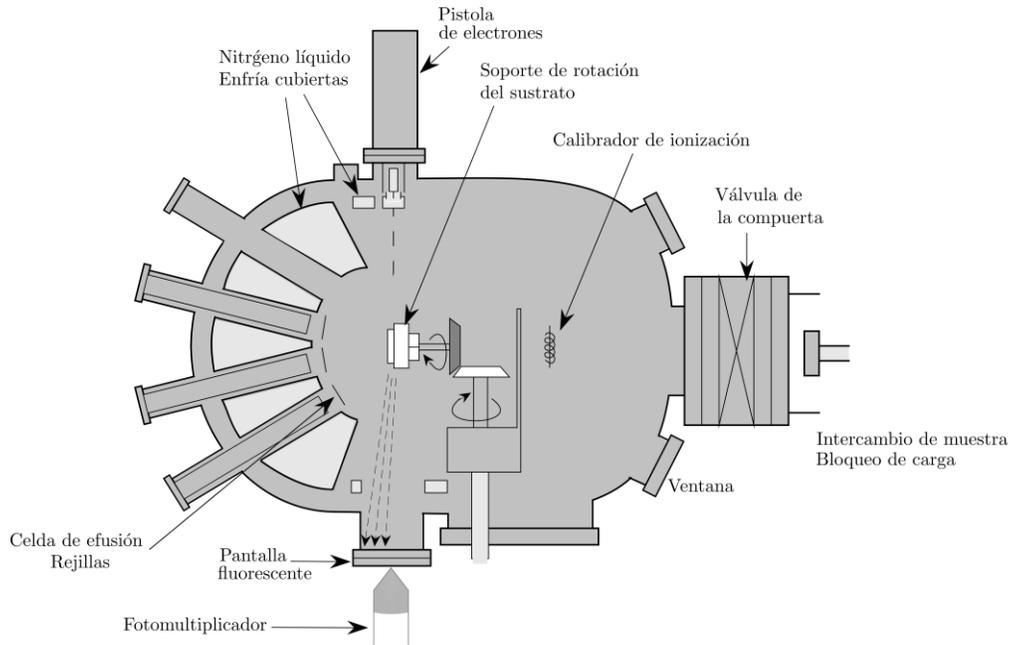


Figura 3-1 Esquema de un sistema de crecimiento MBE. Se señalan los principales componentes por el cual está conformado.

En la **Figura 3-1** se muestra un esquema de un sistema MBE, en el que el sustrato se encuentra en condiciones de ultra-alto vacío, con presión menor a 10^{-9} Torr, (UHV) y su temperatura puede ser modificada mediante un filamento calefactor. Los átomos o moléculas del material que se desea crecer llegan a la superficie del sustrato en forma de haces moleculares. Los haces moleculares de cada una de las especies se suelen producir mediante evaporación en células de efusión tipo Knudsen. En los sistemas MBE, la composición y los niveles de dopaje dependen, principalmente, de la relación entre los diferentes haces moleculares. Esta última puede variarse fácilmente modificando el ritmo de evaporación de las distintas especies en las células Knudsen.

Para facilitar la incorporación de los átomos/moléculas en aquellos puntos del cristal energéticamente favorables, se emplean velocidades de crecimiento del orden de $1 \mu\text{m/h}$ ($\sim 1 \text{ ML/s}$), lo que permite obtener el crecimiento epitaxial.

Las condiciones de UHV, características del MBE, logra la mínima incorporación de impurezas no deseadas y posibilitan un gran control y caracterización en técnicas como son el RHEED, la espectroscopía de electrones Auger (AES) o el sistema QMS con línea de visión directa.

A diferencia de otras técnicas de crecimiento epitaxial, como las epitaxias en fase líquida (LPE) y en fase vapor (CVD), el crecimiento por MBE se caracteriza por proceder lejos del equilibrio termodinámico, estando gobernado por la cinética de los procesos resultantes de la interacción entre los haces moleculares y la superficie del sustrato. Algunos de los principales procesos son: la difusión, la incorporación al cristal, la desorción y la descomposición.

3.2 CARACTERIZACIÓN

En un semiconductor, su band gap de energía suele estar entre 0 y los 3 eV aproximadamente, por tanto, un fotón con una energía igual o mayor a su band gap, puede excitar un electrón de la banda de valencia y llevarlo a la banda de conducción, esto da como resultado un espectro óptico del semiconductor. Del espectro óptico se puede obtener una gran variedad de información de sobre el material. Para cada material la luz suele interactuar con las vibraciones de la red o fonones, con electrones localizados tanto en defectos del material crecidas dentro de él como en el volumen o bulto. Si bien el material en bulto es importante muchas veces su función principal es la de servir como matriz en donde los defectos serán las que jueguen el papel primordial en las propiedades ópticas del material por lo que los estudios de estos mismos son muy importantes.

En la **Figura 3-2** se muestran los principales procesos ópticos que ocurren cuando a un medio es expuesto a un haz de luz, en la superficie del medio, una fracción del haz incidente se transmite y el resto se refleja. Dentro del medio, una parte de la radiación es absorbida, esta mediante calor o vibraciones de la red en caso de llegar a ser un cristal. Los procesos con mayor intensidad suele ser la reflexión y la absorción, ya que en estos métodos se involucran ordenes menores de interacción entre las ondas electromagnéticas y las excitaciones elementales dentro del medio [10].

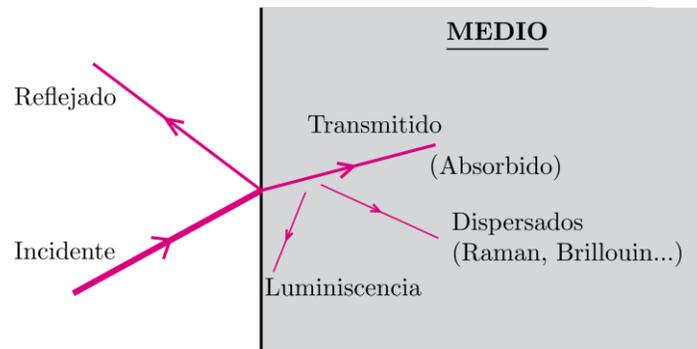


Figura 3-2 Diagrama que muestra los principales procesos ópticos en una transición de un medio a otro. En este caso se asume que el haz incidente llega a la superficie desde el vacío [10]

En la espectroscopia se utiliza la medida de la intensidad y la longitud de onda de la energía que emana o interacciona con el material, generando transiciones entre los estados energéticos característicos del material, en este trabajo nos centraremos en la fotoreflectancia, fotoluminiscencia y difracción de rayos x.

3.3 DIFRACCIÓN DE RAYOS X

La difracción de rayos x, aplicada como una técnica no destructiva es ampliamente utilizada para estudiar la composición, calidad y forma estructural de los cristales semiconductores. En 1913, W.L. Bragg observó cómo los sólidos cristalinos tienen patrones de difracción muy característicos, con intensos picos cuya intensidad depende de λ y de la orientación del cristal respecto de la fuente de rayos X. Bragg explicó sus observaciones considerando que los cristales están formados por familias de planos atómicos paralelos separados periódicamente. De manera empírica, Bragg encontró que para obtener picos de difracción es necesario que los rayos X se reflejen especularmente en cada plano de átomos y los rayos reflejados por cada plano de átomos interfieran de manera constructiva.

Si se supone que los rayos X se reflejan especularmente, la diferencia de camino entre rayos reflejados en diferentes planos atómicos es igual a $2d\sin\theta$, con d como la distancia entre planos y θ el ángulo con que inciden los rayos X sobre el cristal.

Para que los rayos reflejados en los distintos planos interfieran constructivamente es necesario que las diferencias entre sus recorridos sean igual a un múltiplo entero de λ . Es decir que se cumple que:

$$n\lambda = 2d\text{sen}\theta, (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Esta ecuación se conoce como “Ley de Bragg” y permite determinar, experimentalmente, la distancia entre planos atómicos, d , midiendo el ángulo θ para un valor conocido de λ .

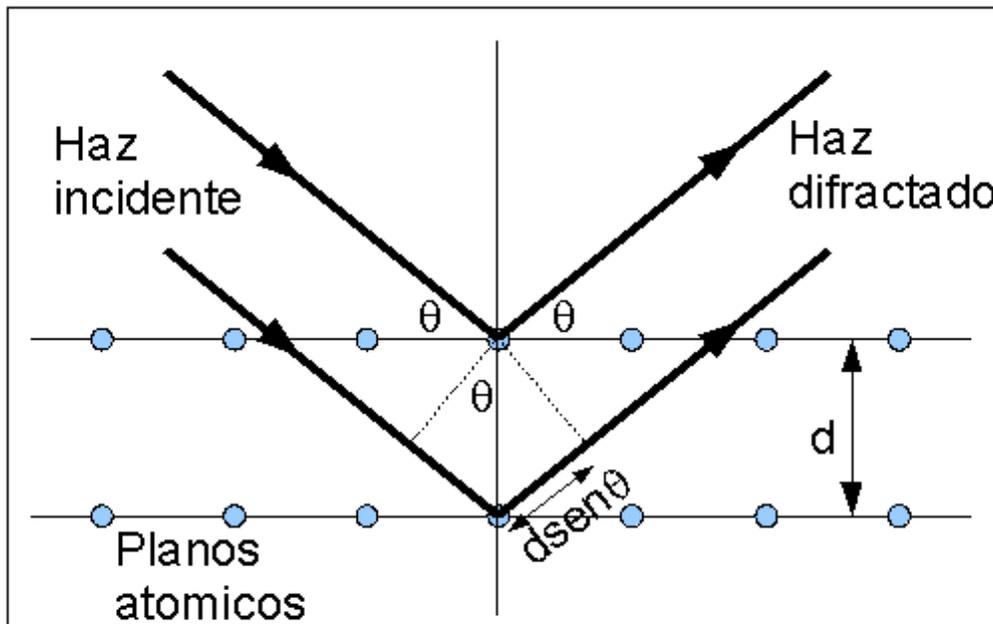


Figura 3-3 Diagrama donde se muestra cómo se aplica la Ley de Bragg.

De esta forma se pueden realizar diferentes tipos de medición variando ciertos parámetros.

El ángulo de incidencia, ω , se define entre la fuente de rayos X y la muestra.

- El ángulo difractado, 2θ , se define entre el haz incidente y el ángulo del detector.

- Tipo de escaneos:

- Una curva oscilante es un gráfico de la intensidad de los rayos X frente a ω

- Un escaneo de detector traza la intensidad de los rayos X frente a 2θ sin cambiar ω

–Un escaneo acoplado es un gráfico de la intensidad de los rayos X dispersos frente a 2θ , pero ω también cambia de una manera que está vinculada a 2θ de modo que $\omega = \frac{1}{2}(2\theta) + offset$

- Se utiliza un escaneo acoplado para medir el ángulo de difracción de Bragg.

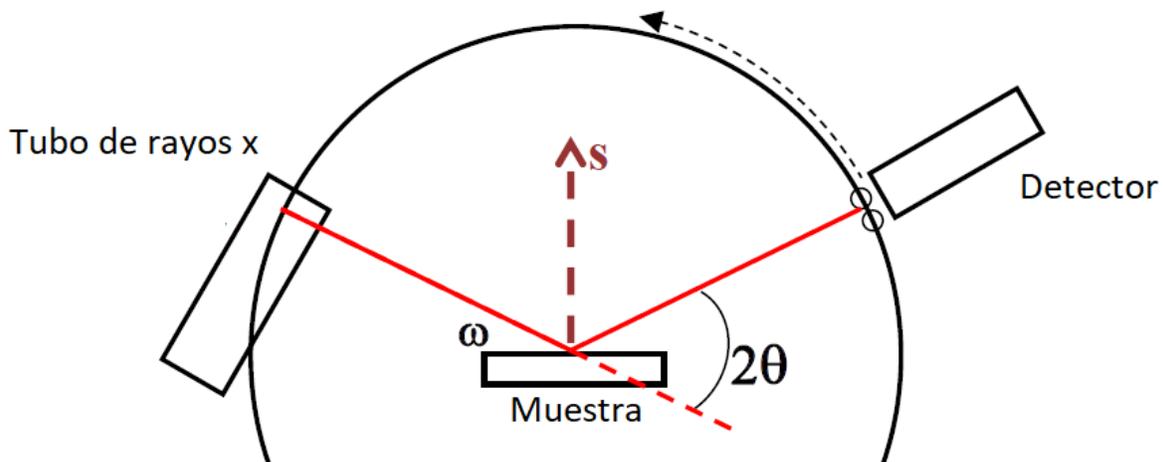


Figura 3-4 Diagrama donde se muestra el proceso para una medición de difracción de rayos x.

3.4 FOTOLUMINISCENCIA

La fotoluminiscencia (PL) es la emisión de luz de la materia después de ser excitada con fotones, en la cual se toma la radiación dispersada de la luminiscencia en un espectro y posteriormente es detectada y registrada.

Un esquema muy general de lo antes mencionado de un experimento de luminiscencia consiste en, tener una fuente de excitación para la muestra, la cual causa la radiación de luminiscencia, dicha radiación es capturada por un detector la cual transforma la señal óptica en una señal eléctrica, la cual usualmente es procesada por un dispositivo eléctrico (multímetro) y posteriormente registrada en una computadora, de esta forma se obtiene una emisión de la intensidad I_{lum} versus la emisión de longitud de onda λ_0 , el cual es llamado “espectro de emisión”. Cabe aclarar que el caso de “fotoluminiscencia” la fuente de excitación

la cual causa la radiación es óptica, es decir la fuente suele ser un monocromador o una lámpara.

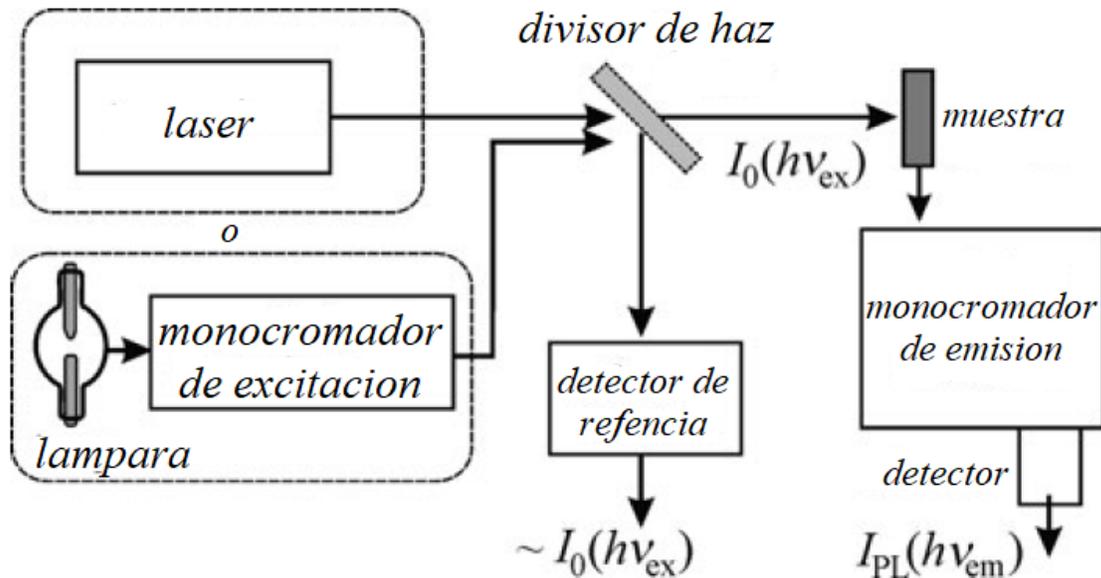


Figura 3-5 Diagrama de bloques de los aparatos utilizados para la medición del espectro de excitación [16].

Ahora basados en el esquema de la **Figura 3-5**, se buscará encontrar la dependencia de la intensidad de la fotoluminiscencia $I_{PL}(\nu_{em})$ en la intensidad de la luz de excitación. Ahora supongamos que tenemos la muestra en forma de placa plano paralela con un grosor “d” y una intensidad de excitación $I_0(h\nu_{ex})$ incidiendo en la misma.

Ahora tomando la ley de Beer-Lambert tenemos que:

$$I(h\nu_{ex}) = I_0(h\nu_{ex}) \exp[-\alpha(h\nu_{ex})d]$$

con $\alpha(h\nu_{ex})$ como el coeficiente de absorción, ahora considerando la corrección de la reflectividad R que se da en la parte frontal de la muestra, tenemos que la parte absorbida de la intensidad de excitación es igual a $I(h\nu_{ex}) = \eta I_0(h\nu_{ex})(1 - R) \exp[-\alpha(h\nu_{ex})d]$.

La intensidad de la fotoluminiscencia es proporcional a la energía absorbida, omitiendo el caso de efectos no lineales, por lo cual es de la forma:

$$I_{PL}(v_{em}) \cong I_0(hv_{ex})(1 - R)(1 - \exp[-\alpha(hv_{ex})d])$$

Donde $\eta \leq 1$ es el coeficiente de proporcionalidad llamado eficiencia, el cual depende de muchas variables, por lo cual tomaremos de forma representativa dos casos extremos:

1.- Una muestra con una absorción débil, lo cual indica la condición de $\alpha(hv_{ex})d \ll 1$, ahora tomando la aproximación en series de Taylor $\exp[-\alpha(hv_{ex})d] \approx 1 - \alpha(hv_{ex})d$ obtenemos:

$$I_{PL}(v_{em}) \cong I_0(hv_{ex})(1 - R)\alpha(hv_{ex})d$$

por lo que si dividimos por $I_0(hv_{ex})$ tenemos

$$\frac{I_{PL}(v_{em})}{I_0(hv_{ex})} = (1 - R)\alpha(hv_{ex})d$$

Lo que nos indica la última ecuación es que el espectro de PL obtenido es proporcional al coeficiente de extinción, por lo cual, esta técnica no solo nos ayudaría a obtener la emisión de band gap, sino también un espectro de absorción relativo de la muestra, siempre teniendo en consideración que solo funcionaría para películas delgadas las cuales el sustrato es muy opaco.

2.- Para una absorción fuerte de la muestra con la condición de $\alpha(hv_{ex})d \gg 1$, lo cual indica $\alpha \approx 10^3 - 10^5 \text{ cm}^{-1}$ y $d \geq 10^{-2} \text{ cm}$ por lo que el término con la exponencial es muy pequeño $\exp[-\alpha(hv_{ex})d] \ll 1$ por lo que tenemos que PL es de la forma:

$$I_{PL}(hv_{em}) \approx \eta I_0(hv_{ex})$$

para este caso el espectro de fotoluminiscencia es básicamente el mismo que el de excitación, por lo cual no obtendrás mucha información sobre la muestra.[16]

3.4.1 Tipo de detectores

Ahora discutamos un poco sobre los fotodetectores y los diversos tipos que existen, uno de los más comunes es el fotomultiplicador (PMT por sus siglas en inglés) el cual es uno de los más sensitivos y usados, aunque esto ha ido cambiando con el tiempo siendo en algunos casos remplazado por detectores con fotodiodos, arreglo de semiconductores o un dispositivo de cámara de carga acoplada (CCD por sus siglas en inglés).

Empezando con el fotomultiplicador (PMT), su forma de detectar es a base de efecto fotoeléctrico exterior y la emisión secundaria de electrones. El PMT consiste de un tubo de vidrio o cuarzo al vacío que contiene fotocátodos, y un arreglo de dinodos y un ánodo en términos generales.

La salida de los electrones pasa por un contacto del fotomultiplicador, un fotón puede expulsar un electrón del fotocátodo solo cuando se cumple la condición $h\nu \geq \phi$ siendo ϕ la función de trabajo del material de fotocátodo, el material del fotocátodo aplicado determinara la sensibilidad espectral del detector, en particular en el corte de longitud de onda larga, por otro lado, para el caso de longitud de onda corta, esta depende del material presente en la ventana de entrada.

Los fotoelectrones son acelerados y estos chocan al primer dinodo, donde cada electrón primario puede liberar δ electrones secundarios, este proceso se repite de forma que los electrones secundarios aceleran y estos chocan con el siguiente dinodo, de esta forma el proceso se repite por lo que al final el número de electrones que tendríamos serian $G = \delta^n$ con n el numero de dinodos. G es llamado ganacia del fotomultiplicador.

El fujo de electrones resultante es colectado por el ánodo, fluye a través de una resistencia de carga y da la señal eléctrica de salida, la cual es tratada por circuitos eléctricos (preamplificadores, por ejemplo)

Se deben de tener varias consideraciones al utilizar un fotomultiplicador, por ejemplo, el rango al cual es más sensitivo, o el rango efectivo por así decirlo, el cual suele ser alrededor de entre 150 nm a 1100 nm, otro factor importante al tener en consideración al utilizarlo es el máximo de corriente en el ánodo I_a la cual tiene valores usualmente de entre 10 a 100 A.

Otra consideración a tomar es el ruido que puede llegar a generar el fotomultiplicador, la cual es llamada corriente oscura, ya que esta misma es provocada por la emisión termiónica de electrones del fotocátodo, que tiene lugar incluso en la oscuridad cuando hay luz que incida en el cátodo.

Por lo que, en términos generales, el fotomultiplicador es un detector muy sensitivo que te ayuda a amplificar la señal que se obtiene, sin embargo, se debe de tener en consideración que el ruido que se puede llegar a obtener también se amplifica.

Pasando el siguiente tipo de detector, el cual es el fotodiodo de avalancha, el principio básico de este es el mismo que para otros fotodetectores semiconductores fotovoltaicos, los cuales utilizan el efecto fotovoltaico interno, al generar un par electrón hueco tras la absorción del fotón.

La carga generada por los fotones se separa en un campo eléctrico establecido a través de la capa de agotamiento de la unión p-n, esto crea un foto voltaje en la salida del detector, esta señal es procesada posteriormente por dispositivos electrónicos, una de las ventajas que tienen estos detectores sobre los fotomultiplicadores es que tienen un rango espectral mucho más amplio, en especial para la región del infrarrojo, por lo que usualmente para una medición en la que se busca una emisión cercana o mayor a 1000 nm suelen ser el remplazo de los fotomultiplicadores.

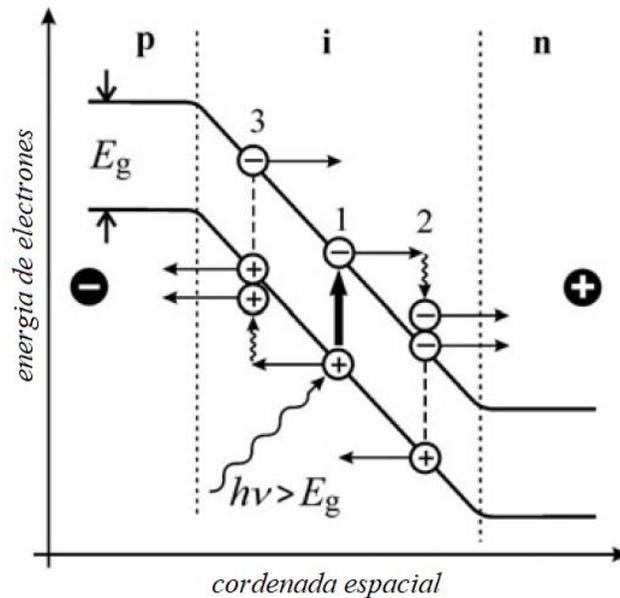


Figura 3-6 Descripción del principio de funcionamiento de un fotodiodo de avalancha, los pares electrón-huecos primarios son generados mediante la absorción de fotones con $h\nu > E_g(1)$. Ahora un par se disocia, lo que provoca que, tanto un electrón como un hueco se aceleren en direcciones opuestas causado por el campo fuerte en la capa intrínseca de la estructura p-i-n polarizada inversamente, al ganar la suficiente energía, el electrón acelerado (o hueco) mediante ionización por impacto crea un nuevo par electrón hueco (2), (3) y el proceso se repite, similar a una avalancha.[16]

El principal diseño y funcionamiento de un fotodiodo de avalancha esta descrito en la **Figura 3-6**, la estructura semiconductor es una unión p-i-n con una alta polarización inversa. Al absorber un fotón con la condición de $h\nu > E_g$ se crea un par electron-hueco, dicho par se disocia debido al fuerte campo eléctrico de la capa intrínseca, por lo que el electrón y el hueco se aceleran en direcciones opuestas, si la energía adquirida por los portadores supera a E_g (esto no siempre sucede ya que los portadores pierden energía al tener colisiones con la red del cristal) esto genera otro par electrón-hueco por ionización de impacto, esto puede llevar a un efecto en cadena, donde el mismo proceso puede repetirse y esto causo un aumento en el número de portados que se tienen.

Por último para los detectores de canal múltiple, en arreglos de forma lineal o dos dimensiones de pequeños dispositivos fotosensibles, son capaces de detectar el flujo de fotones simultáneamente en muchos puntos espaciales, esa es la clara diferencia, ya que en los dos detectores antes mencionados (fotomultiplicadores y fotodiodos de avalancha) eran de un solo canal, eso quiere decir que, solo son capaces de detectar, en un momento, el flujo de fotones en un solo punto en el espacio solamente, por lo que para esta clase de detectores se tiene que hacer un barrido sobre todo el espectro secuencial. Por otro lado, los detectores de canal múltiple, detecta simultáneamente la intensidad en muchos puntos espectrales dentro de algún rango espectral, e incluso obtener todo el espectro deseado sin tener que hacer una medición secuencial como en el caso de los otros dos detectores.

Esto causa una reducción drástica en el tiempo de la toma de la señal, evitando así cierta clase de defectos de inestabilidad o eliminando la inexactitud de la dispersión causada por el mecanismo de análisis mecánico, ya que la medición del espectro completo sería en “tiempo real”.

Dos de los más comunes detectores de canal múltiple son arreglo de fotodiodos y la cámara CCD, el primero corresponde a un arreglo lineal de fotodiodos pequeños formados en una fila. Cada fotodiodo tiene carga inversa y se carga como un capacitor. La luz incidente genera pares electrón-hueco, aumentando así la conductividad eléctrica en el capacitor y descargándolo, posteriormente los diodos registran y se van cargando con una corriente que es proporcional al número de fotones absorbidos. Usualmente el rango espectral en el cual son sensitivos es entre 300 a 1100 nm.

3.4.2 Tipos de transiciones

En la excitación óptica, un fotón es absorbido por el semiconductor, creando un par electrón-hueco que luego se recombina y emite otro fotón, este caso es el más común, pero existen diversos tipos de emisión y recombinación que pueden generarse. Esta técnica tiene la ventaja de que se puede usar para excitar materiales en los que la tecnología de contacto o unión no está adecuadamente desarrollada, o en materiales de alta resistividad donde la electroluminiscencia sería ineficaz o impráctica.

La excitación óptica permite flexibilidad en la configuración de la región excitada y en la elección de la ubicación en el cristal. En algunos casos, es posible seleccionar una fuente de radiación que emita fotones de excitación que tengan una energía cercana al Band gap [17].

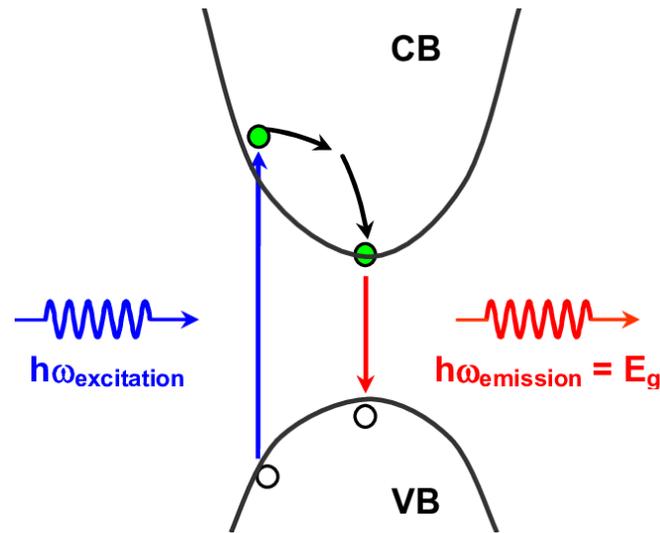


Figura 3-7 Proceso de fotoluminiscencia en un semiconductor.

Nos enfocaremos en fotoluminiscencia (PL) en semiconductores, esta misma la podemos clasificar en clases diferentes, la intrínseca y la extrínseca. La fotoluminiscencia intrínseca se produce principalmente debido a la transición radiativa de banda a banda en un semiconductor de alta pureza incluso a una temperatura relativamente alta, donde al absorber un fotón de energía superior a la energía de banda prohibida E_g , un electrón se excita a la banda de conducción (CB), dejando un agujero en la banda de valencia (VB) y luego se recombina radiativamente para dar lugar a PL de tipo intrínseco. En cambio, la fotoluminiscencia extrínseca es causada principalmente por impurezas metálicas o defectos incorporados intencionalmente en materiales como cristales iónicos y semiconductores, los materiales que se vuelven luminiscentes de esta manera se denominan fósforos. El PL extrínseco se produce entre portadores libres y estados de impureza o defectos.

Ahora, conociendo un poco mejor el proceso de fotoluminiscencia, se mencionarán las principales transiciones que ocurren cercanas a los bordes de la banda [17]:

1. La transición de banda a banda. Este proceso es la típica transición entre bandas que genera la luminiscencia intrínseca. Los electrones en la banda de conducción se recombinan directamente con los huecos en la banda de valencia con emisión de fotones, los cuales tienen la misma energía que el band gap del semiconductor directo.

2. Excitón libre. Si el material es suficientemente puro, el electrón excitado y el hueco pueden unirse mediante la interacción de coulomb en un excitón quasi-hidrogénico, el cual se recombina, emitiendo una línea espectral nítida.

3. Excitón ligado. En presencia de impurezas, se puede obtener un Excitón ligado. El Excitón libre se puede localizar en un donante o aceptor neutro o ionizado, dando lugar al llamado excitón de impurezas complejo. Cuando estos se recombinan, su emisión se caracteriza por un ancho espectral estrecho con una energía menor que la energía libre.

4. Transición de donador a aceptor (D^0, A^0). Cuando las impurezas donadoras yceptoras están presentes en el semiconductor, la interacción coulombiana entre donante y aceptor modifica la energía ligada (en comparación con el caso de impureza aislada) de modo que la energía que separa los estados del donador-aceptor ligados es:

$$h\nu = E_g - E_A - E_D + \frac{q^2}{\epsilon r}$$

5. Transición libre a ligada. Cuando la temperatura es lo suficientemente alta como para ionizar las impurezas, la transición donante-aceptor a baja temperatura puede evolucionar de la transición puramente libre a la transición ligada o dividirse en dos transiciones, la transición DAP y la transición libre a ligada. La posición del pico de energía de la transición libre a ligada está dada por:

$$h\nu_p = E_g(T) - E_i + \frac{1}{2}k_B T$$

donde E_i es la energía ligada a la impureza y el término $\frac{1}{2}k_B T$ resulta de la distribución térmica de los portadores libres en sus bandas.

3.4.3 Band gap directo

Para la transición del tipo par electrón-hueco libre (la primera en la numeración de la lista de las posibles recombinación y transiciones), es de interés el estudio del band gap directo de dicha recombinación.

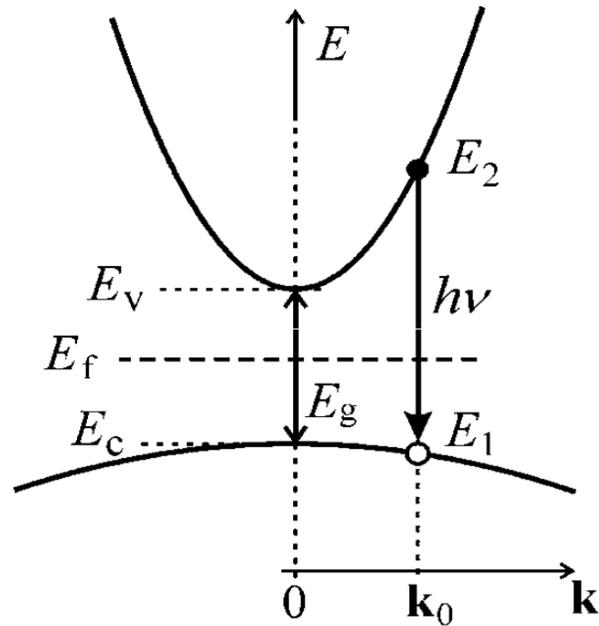


Figura 3-8 diagrama en el que se muestra la recombinación de un par electrón-hueco libre.[16]

Consideremos un electrón con energía E_2 situado cerca del mínimo de la banda de conducción, espontáneamente se recombina con un hueco situado cerca de la parte superior de la banda de valencia con una energía E_1 y un vector k_0 dado por una transición vertical. Lo que se busca es la densidad de probabilidad $I_{sp}(h\nu)$ de la emisión espontánea con un fotón de energía igual a $h\nu = E_2 - E_1$, la cual se ve afectada por la probabilidad de posibles configuraciones de ocupación de los estados de la banda de valencia y conducción ($f_e(\nu)$), la probabilidad asociada a la mecánica cuántica de la transición en forma del valor absoluto de los valores de los elementos de matriz de la transición ($|M|^2$) y por ultimo la densidad conjunta de los estados de electrones y huecos para cada banda correspondiente ($\rho(\nu)$).

Teniendo en consideración los tres factores antes mencionados obtenemos

$$I_{sp}(h\nu) \approx |M|^2 f_e(\nu) \rho(\nu) \approx \frac{1}{\tau_r} f_e(\nu) \rho(\nu)$$

ahora veamos de qué forma es $f_e(\nu)$, para la recombinación radiativa, el estado de energía correspondiente con E_2 en la banda de conducción debe estar ocupado por un electrón, por lo que el estado E_1 debe estar ocupado por un hueco, por lo que la probabilidad resultante es la multiplicación de las probabilidades de cada uno de los estados:

$$f_e(\nu) = f_c f_v = f(E_2)[1 - f(E_1)]$$

donde tenemos en general que $f(E) = \{\exp\left[\frac{(E-E_f)}{k_B T}\right] + 1\}^{-1}$ la cual es la función de distribución de Fermi-Dirac. Ahora consideremos que el semiconductor es intrínseco y tiene un band gap suficientemente amplio, este proceso se lleva a cabo a baja temperatura y además está en un equilibrio térmico, es decir que su nivel de Fermi está localizado en el medio del band gap a una temperatura baja. Con dichas condiciones tenemos que $k_B T \ll \left(\frac{E_g}{2}\right) \approx E_2 - E_f \approx E_f - E_1$, sustituyendo tenemos:

$$f(E_2) = \frac{1}{\exp\left[\frac{(E_2 - E_f)}{k_B T}\right] + 1} \approx \exp[-(E_2 - E_f)/k_B T]$$

$$[1 - f(E_1)] = 1 - \frac{1}{\exp\left[\frac{(E_1 - E_f)}{k_B T}\right] + 1} \approx \frac{\exp\left[\frac{(E_1 - E_f)}{k_B T}\right]}{\exp\left[\frac{(E_1 - E_f)}{k_B T}\right] + 1} \approx \exp[-(E_f - E_1)/k_B T]$$

por lo que tenemos que

$$f_e(\nu) \approx \exp(-h\nu/k_B T)$$

ahora pasemos al siguiente factor, los elementos de matriz de la transición óptica M pueden ser considerados constantes como una buena aproximación en una amplia región de vectores de onda cercanos a los extremos de las bandas. Para este caso tomaremos el inverso del tiempo de vida radiativo proporcional al cuadrado del elemento de la matriz $\left(\frac{1}{\tau_r}\right) \sim |M|^2$. [18] Ahora, por último, para la densidad de estado $\rho(\nu)$, para esto necesitamos la densidad de estados para cada banda (en este caso solo sería en dependencia de las energías ya que es una transición vertical) por lo que tenemos [19,20]:

$$\rho_c(E) = \frac{(2m_e)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} \text{ con } E \geq E_c$$

$$\rho_v(E) = \frac{(2m_h)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} (E_v - E)^{\frac{1}{2}} \text{ con } E \leq E_v$$

Donde m_e y m_h son las masas efectivas correspondientes al electrón y hueco. Ahora utilizando $\rho_c(E_2)dE_2 = \rho(v)dv$ tenemos

$$\rho(v) = \frac{(2m_r)^{\frac{3}{2}}}{2\hbar^2} (hv - E_g)^{\frac{1}{2}} \text{ con } hv \geq E_g$$

Donde $\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_h} + \frac{1}{m_e}$, ahora haciendo una aproximación incremental obtenemos las siguientes relaciones

$$E_2 = E_c + \frac{m_r}{m_e} (hv - E_g)$$

$$E_1 = E_v - \frac{m_r}{m_h} (hv - E_g)$$

Ahora, sabiendo de qué forma es cada uno de los 3 factores que influyen en $I_{sp}(hv)$, tenemos que es aproximadamente:

$$I_{sp}(hv) \approx D_0 (hv - E_g)^{\frac{1}{2}} \exp [-(hv - E_g)/k_B T]$$

Donde $D_0 = \left[\frac{(2m_r)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^2 \tau_r} \right] \exp \left(-\frac{E_g}{k_B T} \right)$ es un parámetro independiente de la energía del foton hv , la forma del espectro de luminiscencia también es llamado distribución de Maxwell-Boltzman, también podemos notar, que el hecho de solo medir luminiscencia o absorción no nos permite determinar el valor de las masas efectivas. **[16]**

3.5 FOTORREFLECTANCIA

La reflectancia es la razón entre la intensidad de la radiación reflejada y la radiación incidente en un medio, en particular trabajaremos con la reflectancia modulada con luz o fotorreflectancia [21]. En un experimento de reflectancia estática, se determina la intensidad de la reflectancia en función de la energía del fotón incidente. Este espectro de energía obtenido está relacionado a las transiciones electrónicas dentro de la estructura del material. Gracias a esta técnica podemos obtener el band gap de energía asociado al material, ya que si un electrón está en la banda de valencia y este pasa a la banda de conducción al ser excitado por un fotón incidente, este electrón pierde energía mediante dispersión por vibraciones de la red o imperfecciones del material, y llega al nivel más bajo de la banda de conducción, en este punto el electrón vuelve a la banda de conducción emitiendo un fotón con una energía igual a la del band gap del material E_{gap} , el problema en este tipo de reflectancia es que no es muy precisa al presentar espectros muy anchos alrededor del band gap, eso causa que la incertidumbre sea muy grande al determinar el band gap real del material, por tanto se suele recurrir a la espectroscopia de modulación al ser proporcional a la derivada de la curva de reflectancia que hace que estos cambios sean más visibles y es por ello que es una herramienta muy útil para estudiar materiales semiconductores.

3.5.1 Espectroscopia de modulación

La espectroscopia de modulación es una variante de la fotorreflectancia la cual se puede lograr fácilmente variando algún parámetro de la técnica. Es posible modular una variedad de parámetros, incluyendo la longitud de onda de el haz incidente, la temperatura de la muestra, un voltaje o un campo magnético aplicado.

Básicamente, estamos interesados en una modulación externa con un Campo electromagnético aplicado mediante la variación foto-inducida en el mismo.

Esta variación consiste en la aplicación de pequeñas perturbaciones periódicas a la muestra (modulación externa), en esta reflectancia modulada puede ser modulando: el campo

eléctrico que sería la electroreflectancia (ER), la temperatura en la termorefectancia, o luz en la fotorreflectancia.

El método que se utilizará en este trabajo será la modulación del campo eléctrico superficial, al ser una modulación que utiliza el campo eléctrico se considera como electro modulación.

Cuando un semiconductor es expuesto a condiciones ambientales, su superficie hace reacción con el aire, esto causa una capa principalmente compuesta de óxidos, sobre esta capa pueden absorberse átomos o moléculas del ambiente generándose un conjunto de estados electrónicos localizados, estas cargas forman una región de cargas 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 las impurezas, pero localizadas en su mayoría en la superficie, esto causa una densidad de estados superficiales que son ocupados por electrones del interior del cristal, ya que los electrones en los estados superficiales crean una barrera de potencial para los otros electrones que llegan a la superficie, esto causa que las bandas de conducción y valencia se curven cerca de la superficie, y por la gran cantidad de estados superficiales se modifica el nivel fermi.

En fotorreflectancia es empleado un láser de mayor energía que el band gap de la muestra e interrumpido mecánicamente como fuente de modulación con el uso de un chopper, de tal forma que cuando el obturador se interpone, las bandas energéticas están curvadas por la ocupación de los estados superficiales que están por encima del nivel de fermi. Cuando el láser incide sobre la muestra, se crean pares electrón-hueco foto-inducidos, que a su vez son separados por el campo eléctrico interno generado en la superficie esto quiere 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 causando que la barrera de potencial baje, aplanando las bandas de energía en la región de carga espacial y esto a su vez cambia la reflectividad. La modulación del campo superficial que es registrado es el espectro de reflexión, es sensible a las transiciones de los puntos críticos de la zona de Brillouin, por lo tanto, el espectro resultante mostrara señales bien definidas del tipo derivada, y a su vez el ruido es casi completamente eliminado.

Los cambios diferenciales en la reflectividad pueden ser relacionados con una perturbación de la función dieléctrica compleja de la 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 en la función dieléctrica compleja con $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$, α y β son los coeficientes de Seraphin que pueden ser expresados como:

$$\alpha = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \varepsilon_1}; \quad \beta = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \varepsilon_2} \quad (3.2)$$

Para la vecindad del band gap de un material se suele considerar $\beta \approx 0$, en el estudio de estructuras multicapas los efectos de interferencia son importantes y eso hace que los coeficientes de Seraphin sean modificados, por tanto, ambos términos $\alpha \Delta \varepsilon_1$ como $\beta \Delta \varepsilon_2$ deben de ser considerados [22].

3.5.2 Mecanismo de modulación

En fotorreflectancia, la modulación de la función dieléctrica es realizada gracias a un láser y un chopper, esto causa la creación de pares electrón-hueco, pero existen otros métodos de modulación como efectos de relleno de banda (Gay, 1968) y termorreflectancia (Nilson, 1969), [25,26] para el caso de la modulación electrón-hueco el láser a utilizar debe de tener una energía que debe de estar arriba de la energía del band gap del material que se está estudiando.

Estudios iniciales han mostrado el hecho de que la fotorreflectancia, es simplemente una modulación del campo eléctrico incorporado (Asnes, 1970; Cerdeira and Cardona, 1969) [27,28]. El mecanismo detrás de PR ya fue mencionado anteriormente, sin embargo, consideramos pertinente repetir la explicación para darle completas a lo vertido en esta sección.

Así se tiene que cuando un semiconductor es expuesto a condiciones ambientales, en su superficie es formada una capa de óxido. En esta capa son absorbidos átomos y/o moléculas

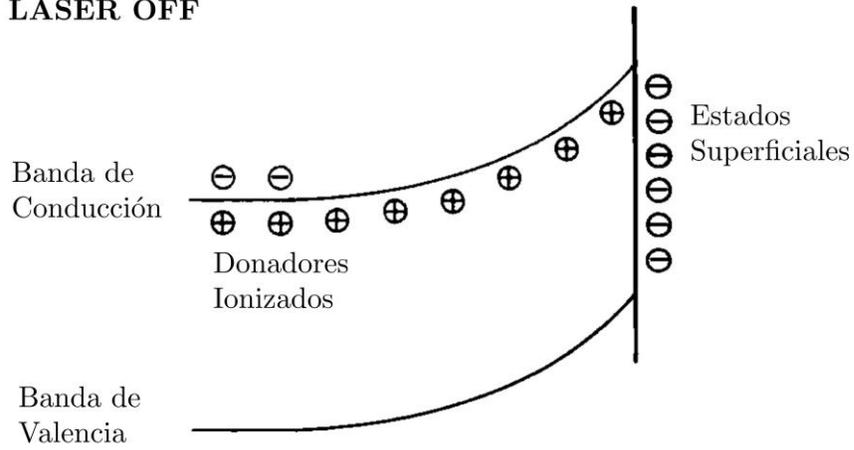
del ambiente generando así un conjunto de estados electrónicos localizados. Este campo intrínseco de la capa causa estados dentro del band gap de energía y genera una densidad de estados superficiales que son ocupados por electrones del cristal.

Esta presencia de los electrones, se crea una barrera de potencial para los demás electrones que llegan a la superficie, esto tiene como consecuencia que las bandas de valencia y de conducción se curven cerca de la superficie. Esta gran cantidad de estados superficiales tiene como consecuencia que se modifique el nivel de fermi y esto a su vez causa que se acerque a energías más altas para materiales tipo n y a energías más bajas para materiales tipo p.

El proceso de modulación radica en la utilización de un láser en el cual un obturador se interpone periódicamente, cuando el obturador se interpone, es decir, cuando el láser no incide en la muestra, los estados superficiales están ocupados y las bandas de energía están curvadas, cuando el láser incide en la muestra y con una energía mayor que la del band gap, se crea PEH foto-inducidos, que al interactuar con el campo interno del material se separan, es decir, los electrones de la banda de valencia son promovidos a la banda de conducción y se difunden dentro del material.

Además, los huecos que quedan en la banda de conducción neutralizan electrones que llegan a la superficie haciendo que la barrera de potencial disminuya, aplanando las bandas de energía en la región de carga espacial y produciendo con esto un cambio en la reflectividad.

(a) LASER OFF



(b) LASER ON

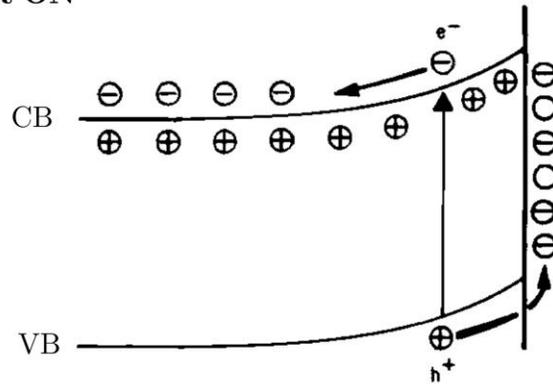


Figura 3-9 Representación esquemática del efecto de fotorreflectancia para una muestra tipo n. a) La muestra está sin perturbar. b) La muestra es perturbada esto causa la creación de pares electrón-hueco.

4 ARREGLO EXPERIMENTAL

4.1 DESCRIPCIÓN DE LA TÉCNICA DE FOTORREFLECTANCIA

La técnica de fotorreflectancia tiene ventajas como que es de una alta resolución con montajes no necesariamente complejos, además de que es una técnica no destructiva. En dicha técnica 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 obturador (chopper).

En la **Figura 4-1**, se muestra el diagrama del arreglo experimental que se implementó en el laboratorio de óptica. El haz de prueba quasi-monocromático se obtiene a partir de una lámpara la cual es dispersada por un monocromador. Este haz quasi-monocromático se hace incidir sobre la muestra. De este modo podemos ir registrando la reflectancia para cada longitud de onda. A la par se hace incidir sobre la muestra un segundo haz esta vez modulado producido por un láser o diodo que pasa a través de un chopper, el cual opera a una frecuencia Ω_m . Esta señal es medida mediante un foto-detector el cual que convierte la intensidad de luz en una señal eléctrica, la cual es analizada mediante un voltímetro y un amplificador lockin.

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 longitud de onda. En el arreglo se obtienen dos señales, una que es proporcional a la reflectividad (R), esta es señal eléctrica DC y 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 $\Delta R/R$ 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.

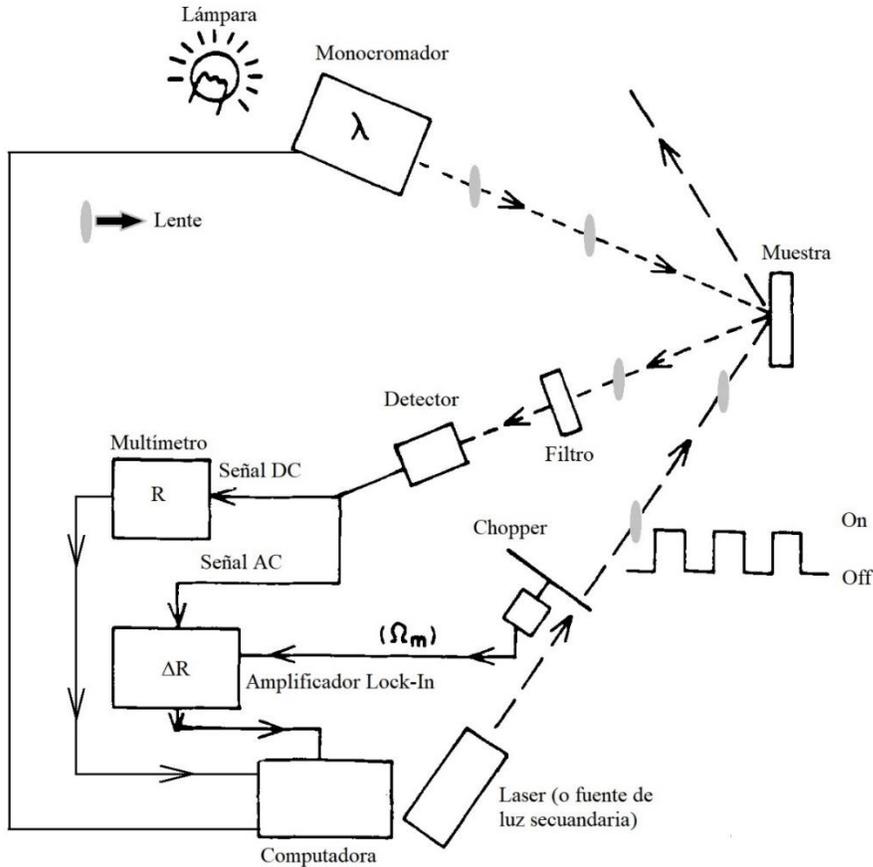


Figura 4-1 Diagrama esquemático del arreglo experimental de fotorreflectancia utilizado. Se señala mediante flechas el sentido y seguimiento que se llevó a cabo en el arreglo experimental.

4.2 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 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.

4.3 CONFIGURACIÓN EXPERIMENTAL

En el presente trabajo se montó un arreglo experimental como se muestra en la **Figura 4-2**, que se utilizó para obtener los espectros de fotorreflectancia de las muestras analizadas. Para esto se utilizaron los siguientes componentes:

- Monocromador Oriel Cornerstone 130 1/8m
- Amplificador Lock-in Stanford SR850
- Multímetro Agilent 344410
- Lámpara de Xenón de 1000W
- 7 lentes biconvexas o plano convexas

- Porta muestras
- Lámpara LED 280nm
- Computadora equipada con tarjeta PCI-GPIB
- Detector de Silicio Thorlabs PDA 100A
- Filtro óptico pasa altas con corte en 325 nm



Figura 4-2 Arreglo experimental de PR utilizado para las mediciones.

Todo el experimento se automatizó a través del uso de una tarjeta PCI-GPIB, la cual permite la comunicación entre el multímetro, el Lock-In, el monocromador y la PC. Esta tarjeta se controla con una interfaz LabVIEW.[30]

4.4 DESCRIPCIÓN DE LA TÉCNICA DE FOTOLUMINISCENCIA

Fotoluminiscencia tiene algunas ventajas sobre otras técnicas, ya que esta es una técnica no destructiva, óptica y la misma no requiere una preparación previa de la muestra. La técnica

consiste en iluminar la muestra con una fuente de excitación una luz con mayor energía a la del gap de la muestra

Como se muestra en el diagrama del experimento de fotoluminiscencia, partimos de la lámpara LED la cual nos dará el haz de excitación. Este haz se hace incidir sobre la muestra y la señal de luminiscencia se enfoca sobre el sistema de detección. Se emplearon dos de ellos el primero que se describe en la **Figura 4-3** y **Figura 4-4**, consiste en un par de lentes para colectar y enfocar en una fibra óptica acoplado a un espectrómetro. Previo a la fibra óptica se coloca un filtro pasa altas en 325 nm para evitar la aparición del armónico del haz de excitación.

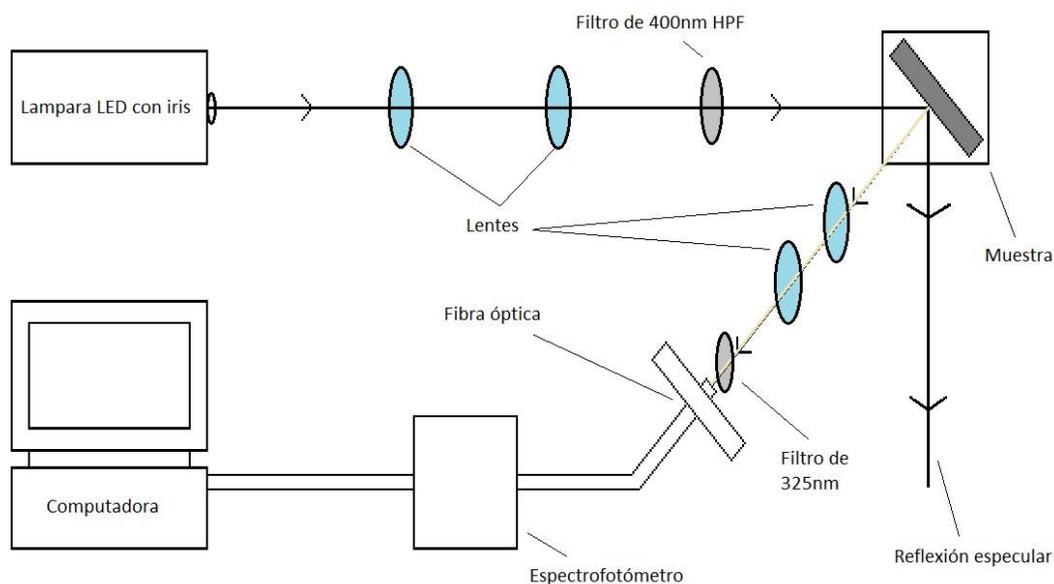


Figura 4-3 Diagrama del arreglo experimental de la técnica de PL

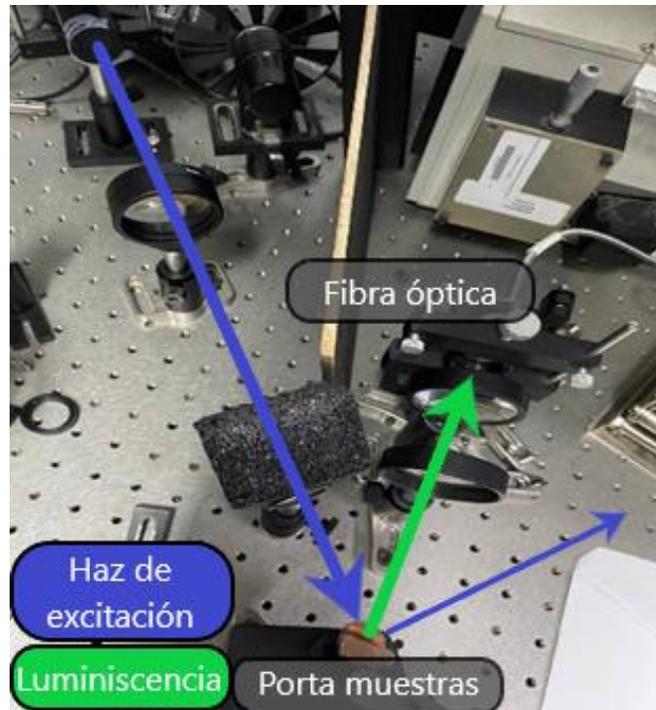


Figura 4-4 Arreglo experimental de PL utilizado para las mediciones

El segundo sistema de detección consiste de un espectrómetro de 0.5 m acoplado a un tubo fotomultiplicador. El tubo tiene una sensibilidad hasta 630 nm. Se tiene que este último arreglo es más sensible y tiene mayor resolución, pero es más lento que el de fibra óptica. Sin embargo, como es de esperarse los espectros son equivalentes siendo la única diferencia la respuesta espectral del sistema de detección.

5 RESULTADOS

El objetivo primordial del trabajo de tesis es el de estudiar el efecto de la incorporación de In en el semiconductor ternario $In_xGa_{1-x}N$ sobre las propiedades ópticas y estructurales. Así como encontrar por medio de la caracterización la incorporación de In adecuada para lograr un band gap óptico en la región verde del espectro. Es importante señalar, que tiene una problemática en la incorporación de In en los crecimientos de GaN, el cual consiste en que para alcanzar altas incorporaciones de In se requiere tener un crecimiento a una temperatura relativamente baja comparada con las temperaturas de crecimiento del GaN de alta calidad. El In además es un material que es susceptible a la segregación, desorción de la superficie de crecimiento y a formar clusters metálicos, por lo que es en general es difícil de incorporar altos valores de In en las películas de GaN y con calidad cristalina. En la literatura se muestra que los valores de In que producen un band gap en la región espectral del verde se encuentran entre 20 y 30%. Así se creció un conjunto de muestras en las cuales se variaron parámetros como la temperatura del sustrato y la temperatura de la celda de In con la intención de ver sus efectos en la calidad cristalina de la película resultante y encontrar el band gap en la región de interés.

m540	m545	m546	m547	m566
4 GaN 100nm	3 InGaN 350nm	3 InGaN 350nm	3 InGaN 350nm	3 InGaN 350nm
3 GaN	2 GaN 100nm	2 GaN 100nm	2 GaN 100nm	2 GaN 100nm
1 GaAs Intrinseco 300nm				
Substrato	Substrato	Substrato	Substrato	Substrato

Figura 5-1 Estructura de crecimiento para las muestras m540, m545, m546, m547 y m566.

Las estructuras fueron crecidas en el Laboratorio de epitaxia de haces moleculares del Centro de Investigación y Estudios Avanzados del IPN, por la Dra. Yenny Casallas y el Dr. Máximo López. La estructura de las películas se muestra en la **Figura 5-1**. Toda la estructura de las películas se creció por epitaxia de haces moleculares asistido por plasma (PA-MBE). Estas películas consisten en un sustrato de GaAs(100), el cual tiene una estructura Blenda de Zinc

cúbica. Se crece sobre el sustrato una capa colchón de GaAs; posteriormente se crece una capa de GaN con estructura Blenda de Zinc cúbica. Luego, sobre esta capa se crece la película de InGaN también con estructura Blenda de Zinc cúbica, con espesores del orden de 350 a 400 nm nominales.

La caracterización estructural se hace mediante difracción de rayos X, la cual se llevó a cabo en la instalación del Cinvestav. La caracterización óptica: reflectancia, fotorreflectancia y fotoluminiscencia fue llevada a cabo en el Laboratorio de Óptica de la FCFM-UAS.

Al analizar los resultados experimentales de fotoluminiscencia, fotorreflectancia y difracción de rayos X, se logró determinar el valor del band gap así como la concentración de In en películas de $In_xGa_{1-x}N$ en la región verde del espectro electromagnético.

Tabla 5-1 Parámetros nominales de muestras de InGaN/GaAs

Muestra	Tsus [C]	Tin[C]
m545	630	560
m546	620	560
m547	640	560
m566	660	575

A continuación, se describen los detalles de las caracterizaciones y los pasos de cómo se analizan cada una de las muestras, empezando por el análisis de las propiedades ópticas; posteriormente, se lleva a cabo la caracterización estructural y finalmente se hacen las comparaciones de las propiedades ópticas y lo estructurales.

5.1 CARACTERIZACIÓN ÓPTICA

Para los casos de fotoluminiscencia se ajustaron los espectros de curvas gaussianas.

$$f(x) = y_0 + \left(\frac{A}{w\sqrt{\frac{\pi}{2}}} \right) e^{-2\left(\frac{x-x_c}{w}\right)^2}$$

donde y_0 es en nivel de offset debido a las señales residuales, w el ancho de la función, x_c es el pico de la señal.

5.2 DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Se busca crecer la fase cubica del InGa_N y para ello se emplea el GaAs_S como sustrato, así la estructura de InGa_N es la misma que la del GaAs; es decir, tipo cúbica centrada en las caras FCC o Blenda de Zinc.

Se tiene de los cursos básicos de estado sólido que la FCC presenta picos para reflexiones que corresponde a plano atómicos en donde los índices de Miller sean todos pares o impares [9]. En particular se tiene que el pico más prominente corresponde al plano (200), un espectro característico de InGaAs en fase cubica sobre un sustrato de SiC se muestra en la **Figura 5-2**. En el difractograma se observa un pico en 20° aproximadamente que se asocia al GaN en fase cúbica y un pico más pequeño 18° en asociado a la InN, el sustrato de SiC es claramente visible en 20.7°. También, es común que durante el crecimiento se tengan inclusiones con fase hexagonal tanto del GaN como del $In_xGa_{1-x}N$ como se observan en el difractograma.

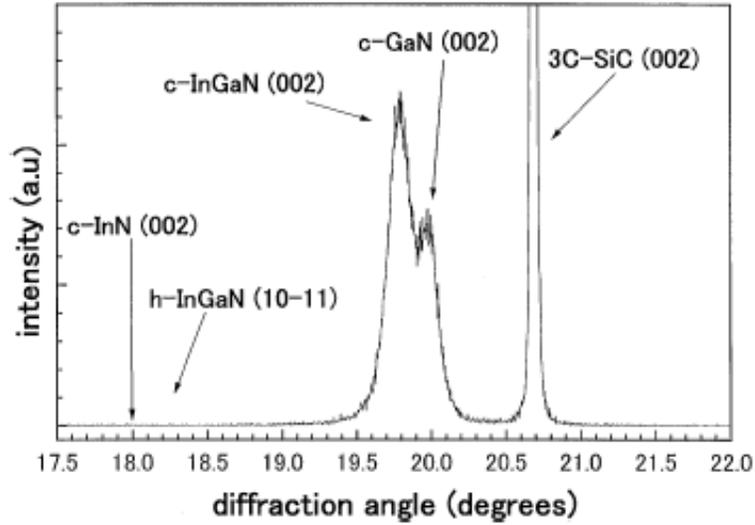


Figura 5-2 Difracción de rayos X de InGaN/GaN crecido sobre sustratos 3C-SiC [31].

En el caso de nuestras muestras se tendrá un espectro similar en donde la difracción del sustrato es la del GaAs. Así, el proceso de deconvolución de la señal de XRD se hace empleando forma de línea gaussianas en donde la posición de estos picos está determinada por la Ley de Bragg y la distancia interplanar.

La ley de Bragg me dice que:

$$\lambda = 2d \sin \theta$$

la distancia entre planos de átomos (hkl) para la estructura cubica está dada por:

$$d^2 = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2}$$

aquí a es la contante de red. De este modo se determina la contante de red asociada a la película de InGaN.

El caso ideal era obtener emisión puramente de InGaN en la fase cúbica, en una de las muestras (m547) se observa una clara emisión en la zona atribuida al InGaN hexagonal, para este caso utilizamos la relación de las constantes de red y la distancia interplanar de la celda hexagonal:

$$\frac{1}{d^2} = \left[\frac{4}{3}(h^2 + k^2 + hk) + l^2 \left(\frac{a}{c} \right)^2 \right] \frac{1}{a^2}$$

para el cual utilizaremos la relación de $c = 1.633a$ para realizar los ajustes.

Comparación de XRD y Fotoluminiscencia

Los difractogramas de XRD nos permitieron obtener una aproximación de la concentración. Para ello se emplea el ajuste de la posición del pico asociado al plano (200) de donde se calcula la constante de red, posteriormente se estima la concentración de In mediante la Ley de Vegard:

$$x = \frac{a_{InGaN} - a_{GaN}}{a_{InN} - a_{GaN}}$$

este se compara directamente con la concentración obtenida a partir del valor del band gap que se obtiene de las mediciones óptica, para ello se emplea la expresión para el band gap como función de la concentración que incluye el parámetro el parámetro de bowing.

$$E_g = E_{GaN}(1 - x) + xE_{InN} - bx(1 - x)$$

para este estudio tomamos como base los valores experimentales que se han reportado en la literatura para el gap del GaN=3.23 eV, para el InN=0.61eV Y un valor de b=1.4 para el caso de las aproximaciones en fase cúbica, en cambio para el ajuste de fase hexagonal se utilizaron los siguientes valores GaN=3.39, para el InN=0.7 eV y un valor de b=2.5 [11,33,34].

5.3 ANÁLISIS DE LAS MUESTRAS

Se obtuvieron las mediciones de PR, R, PL y XRD, notamos que el espectro de PR no estaba modulando a la muestra lo suficiente, al realizar una comparación de PR con la derivada de R, se observa que son muy similares, por lo que en general se tiene que la medición de PR fue difícil de implementar. Y en la mayoría de las muestras no se pudo obtener una señal confiable, es decir no se consiguió llegar a la condición de modulación necesaria para obtener

una señal. Se considera que muy probablemente se tienen muchos defectos en la interfaz los cuales fijan el nivel de la energía de Fermi y hace que el proceso de modulación sea pobre. La señal de PL fue muy clara, por lo que se empleó para determinar la posición del band gap. La medición PR permitió determinar la reflectancia que como veremos más adelante nos sirvió para darnos cuentas que hay un efecto de interferencia en la señal de PL, el cual se remueve para facilitar la identificación de los picos. Así para este estudio, la técnica más útil de caracterización óptica es PL, el inconveniente de esta es que se puede tener señales asociados con defectos y hay que entender como poder diferenciar entre la emisión del band gap o cercana al band gap y la emisión de otro tipo de defectos. Un caso de esto, es la muestra m546 en la que la reflectancia alteraba directamente

el espectro de PL, en la cual en un inicio se creía que la emisión tenía efectos de los defectos del material, pero con un análisis más detallado. al comparar la reflectancia con PL, notamos que este mismo seguía un patrón de interferencia. En resumen, las mediciones para que se lograron realizar para este conjunto de muestras se presentan en la **Tabla 5-2**.

Tabla 5-2 Mediciones experimentales obtenidas para cada muestra

Muestra	PR	PL	XRD
M540	No	Si	No
M545	No	Si	Si
M546	Si	Si	Si
M547	No	Si	Si
M566	Si	Si	No

Teniendo en cuenta la tabla anterior mostraremos los resultados para cada una de las muestras obtenidas, y después se hará una comparación de la mismas en conjunto.

5.3.1 Distintas concentraciones

En la muestra m547 encontramos dos aleaciones de $In_xGa_{1-x}N$ con distintas concentraciones de indio, creemos que esto es causado por el gran desacople reticular entre la capa de GaN y la capa de $In_xGa_{1-x}N$, cuando se incorporan concentraciones de In mayores al 6% [35], ya que el radio de los átomos de In es mayor que el de los átomos de Ga, por lo que el In induce tensiones internas más altas, proporcionando la fuerza necesaria para separación de fase [35]. Las diferentes subcapas de $In_xGa_{1-x}N$ (con concentraciones de In diferentes) presentes en un crecimiento pueden estar tensionadas como se observa en el mapa de espacio recíproco de la **Figura 5-3**, donde la capa de $In_xGa_{1-x}N$ de 3 nm con contenidos de In de $x=0.33$ y $x=0.54$ crecen bajo una tensión de compresión sobre la capa colchón de GaN [36]. Las capas tensionadas del ternario pueden presentarse, siempre y cuando no superen el espesor crítico de la película [37]. Por otra parte, las subcapas de $In_xGa_{1-x}N$ (con concentraciones de In diferentes) pueden presentarse de forma tensionada y relajada, indicando que se superó el espesor crítico del crecimiento y se liberó la tensión de la red. Cuando esto se genera un gran número de defectos en la red. Un ejemplo de una red de $In_xGa_{1-x}N$ tensionada y otra relajada se muestra en la Fig. 3(b), donde el espesor de la capa ternaria es de 200 nm, por lo que se encontró en el mapa de espacio recíproco una concentración de In de 19% y otra de 27% [38].

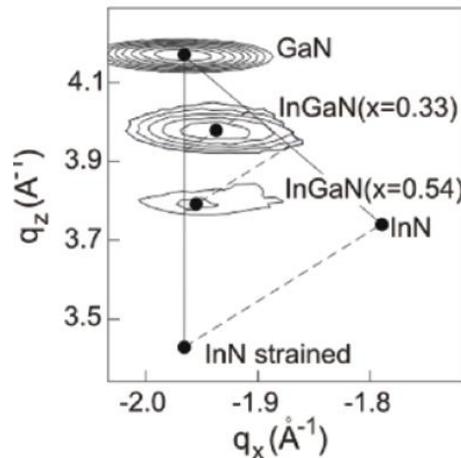


Figura 5-3 Mapa del espacio recíproco de una reflexión asimétrica de Bragg ($\bar{1}\bar{1}3$) de $GaN/In_xGa_{1-x}N/GaN$ cúbico. [36]

una separación de fase crearía dos posibles regiones, una en la cual la red está completamente tensionada y otra donde la red está completamente relajada [39,40].

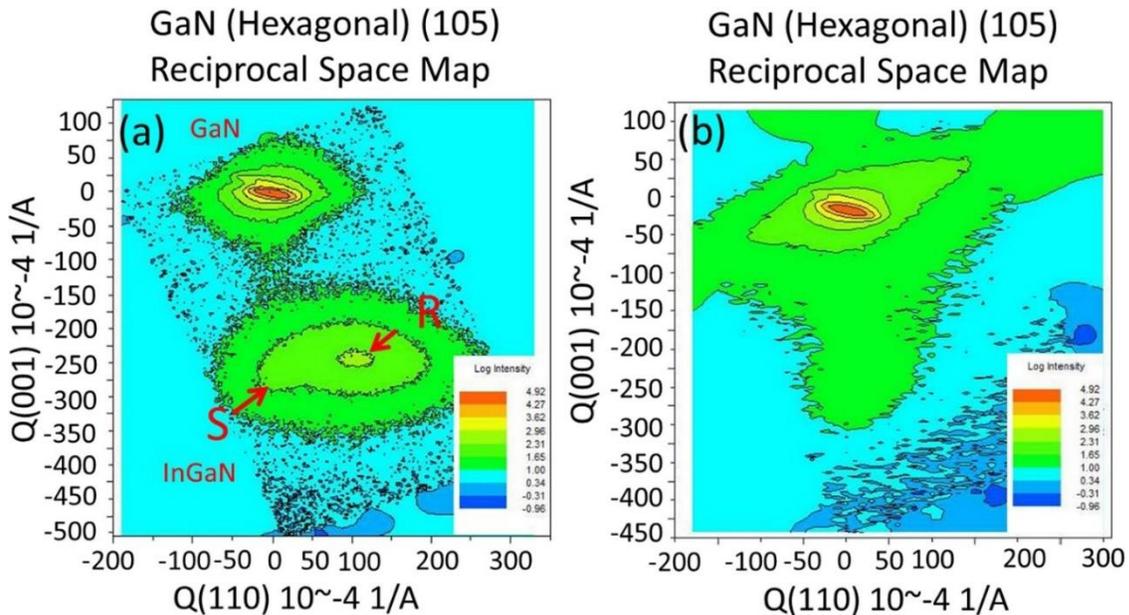


Figura 5-4 RSM de a) heteroestructura b) heteroestructura dual con una película de 200-nm de InGaN crecida a 700 °C [40].

En la **Figura 5-4**, a) se muestra un mapa de espacio recíproco (RSM) donde se observa el efecto que estamos considerando que tenemos en una de nuestras muestras, obteniendo dos distintas regiones de distintas concentraciones de In, se espera hacer la debida medición en un futuro para confirmar completamente lo mencionado en el artículo y así al justificar las 2 concentraciones de indio, pero para propósitos de este trabajo no es posible.

5.3.2 Interferencia de la Reflectancia

Otra problemática que se presentó es que, la razón de utilizar PR es precisamente su sensibilidad a los puntos críticos de la estructura de bandas, sin embargo, en la gran mayoría de las muestras no nos fue posible obtener un espectro. En las dos muestras que se obtuvo PR se observan además oscilaciones en el espectro que nos hace difícil poder identificar la posición del Gap del $In_xGa_{1-x}N$, y de hecho el espectro nos indicaría que probablemente los espesores de la capa de $In_xGa_{1-x}N$ son más pequeños de los nominales ya que por la

longitud de penetración del haz de 285 nm empleado en la modulación este parece ser suficiente para obtener una señal del GaN que esta debajo de la capa. De igual manera notamos una similitud entre la derivada de la reflectancia y la señal de PR como se muestra en la **Figura 5-18** que corresponde a la muestra 546, lo cual nos dice que este espectro tiene interferencia en su señal, esta interferencia es también notoria en el espectro de PL **Figura 5-20** que si no es tomada en cuenta puede conducir a una falsa identificación de la emisión asociada al $In_xGa_{1-x}N$.

Al carecer de la información de PR para un buen número de las muestras bajo estudio, no consideramos el análisis de la señal de PR para obtener el band gap; sin embargo, ya que de los espectros de obtenemos la reflectancia, las mediciones realizadas se utilizaron para eliminar la interferencia en la señal de PL de la muestra 546.

Así a continuación se realizará el estudio empezando por las transiciones de PL y seguido de la caracterización de rayos X. Estos análisis serán de gran importancia ya que permitirán corroborar la concentración que da el análisis de XRD con la concentración obtenida a la emisión de PL. las concentraciones de PL se encuentran por medio de expresiones para el band gap que se reportan en la literatura [11,33,34].

5.3.3 Muestra m540

En esta muestra se logró detectar señal del GaN en fase cubica y hexagonal por medio de PL. Dicha muestra la podemos tomar de referencia para las demás muestras, ya que la señal de GaN en fase hexagonal y en fase cúbica están muy bien localizadas y se corroboran con la literatura. La muestra \neq presenta una luminiscencia en la región UV, por lo que no se puede ver a simple vista, una imagen óptica de la misma se muestra en la **Figura 5-5** y el espectro se presenta en la **Figura 5-6**.

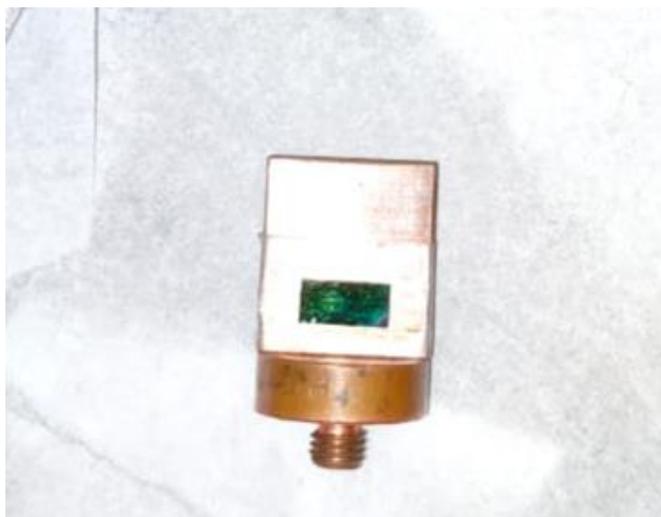


Figura 5-5 Muestra 540 de GaN de 100 nm crecida sobre un sustrato de GaAs(100).

La deconvolucion se realiza con líneas Gaussianas y el espectro nos arroja que hay dos transiciones localizadas en 3.236 y 3.400 eV que se identifican con la señal del GaN en su fase cúbica y su fase hexagonal, los resultados se muestran en la **Tabla 5-3**

Tabla 5-3 Parámetros de ajuste de PL para la muestra m540

PL	E (eV)	Ancho (FWM)	Área (meV)
h-GaN	3.400 ± 0.001	0.207 ± 0.006	$8.5E-4 \pm 1.0E-4$
c-GaN	3.236 ± 0.027	0.335 ± 0.01	$6.4E-4 \pm 1.0E-4$

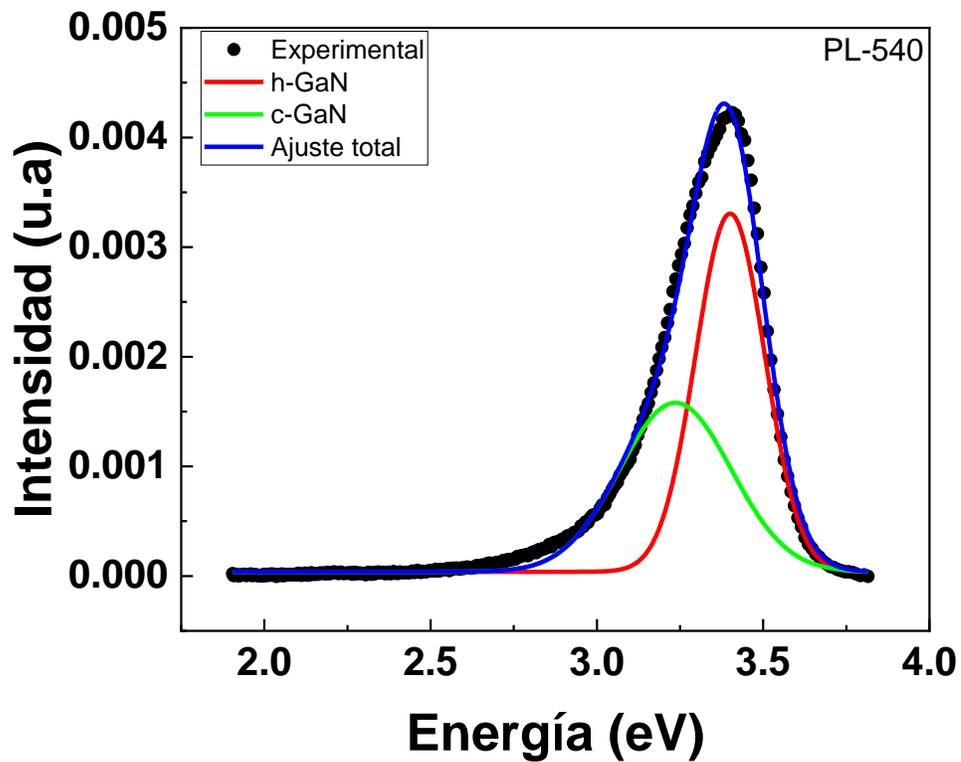


Figura 5-6 Medición de PL de la muestra 540.

Estos valores concuerdan muy bien con los reportados en la literatura. [41,42]. Para esta muestra no se cuenta con difracción de rayos X pero no es tan necesaria ya que esta es la muestra referencia que se sabe es solo GaN.

5.3.4 Muestra m545

Empezamos mostrando el espectro de PL y haciendo el análisis de la deconvolución de esta señal, posteriormente se hará el análisis de XRD y se obtendrá la concentración de In, para por último comparar PL con XRD.

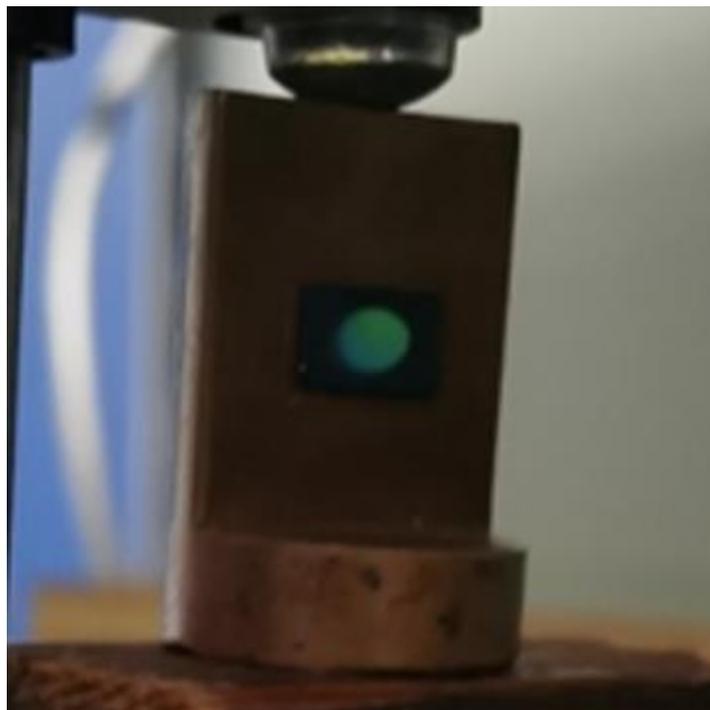


Figura 5-7 Emisión verde de la muestra M545

Esta muestra en particular emite en un color verde intenso tal como se muestra en la **Figura 5-7** se obtiene cuatro picos principales en el ajuste de PL tal como se muestra en la **Figura 5-8**, estos son: 1) la señal del h-GaN a 3.38 eV, 2) Una señal de defectos cercanos a 3 eV, que provocan que no podamos deconvolucionar un pico para el c-GaN ya que esta transición de defectos son más intensas que la emisión del c-GaN, esta línea se suele llamar γ_8 y esta acompañada con transiciones de replicas de fonones por lo que al tener intensidades considerables son atribuidas a excitones fuertemente localizados y no son anchas [43], por otra parte, hay una emisión la cual está centrada en 2.61 eV. en primera instancia se pensó que podrían ser regiones con distinta concentración de In, o bien que se tiene una interferencia por parte de la reflectancia, pero estas ideas fueron descartadas ya que al medir PL de la muestra en distintos ángulos esta señal se atenúa, lo que no indica que podría ser

algo superficial, para ver si no era un efecto de interferencia, se hizo mediciones variando el ángulo de recolección de la luz para comprobar cuáles picos permanecían en la misma posición, por lo que no es producto de la interferencia. Además, al encontrar que existe una emisión en esa región que normalmente se asocia a defectos de la superficie en h-GaN. Como vemos con una línea de 365 del láser este pico, no es tan notorio lo que nos ayuda a sustentar que es un defecto superficial. Buscando en la literatura encontramos que se presenta cuando existe la presencia de h-GaN sin dopar [44].

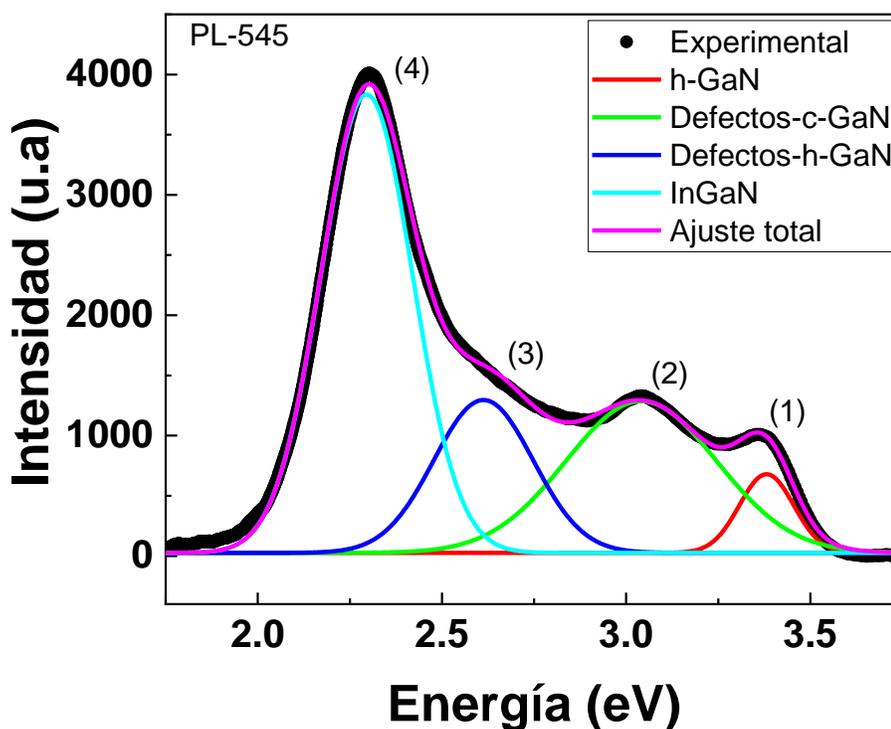


Figura 5-8 Espectro de PL para la muestra m545

La señal importante para nosotros es la emisión centrada en 2.29 eV no varía, sin importar el ángulo y que además es más prominente al utilizar una lámpara de 365 nm (a 0°), y es precisamente esta emisión que es claramente verde la que asociamos al InGaN cúbico. Así los valores del ajuste de PL se presentan en la **Tabla 5-4** Parámetros de ajuste de PL de muestra M545.

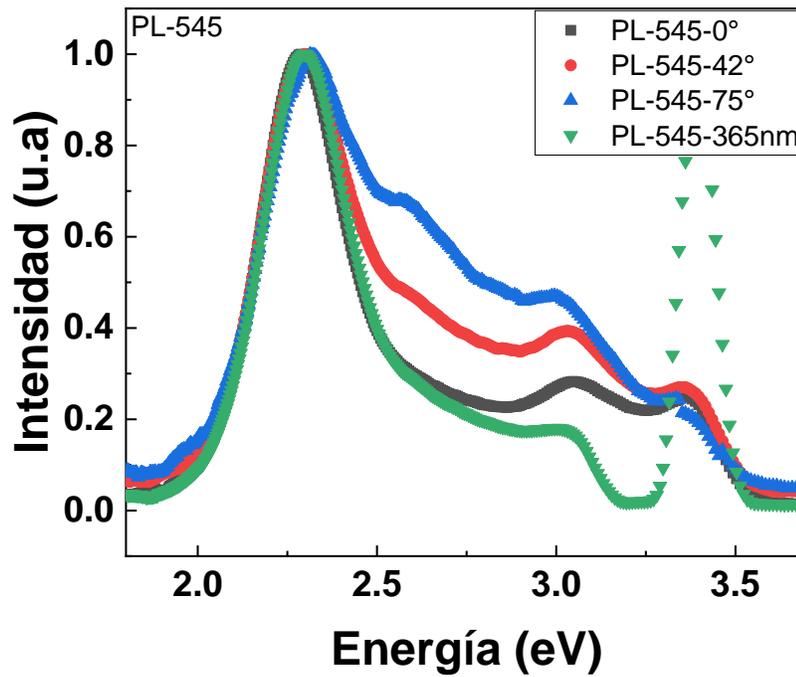


Figura 5-9 PL de la muestra 545 medida a distintos ángulos.

Tabla 5-4 Parámetros de ajuste de PL de muestra M545

PL	E (eV)	Ancho (FWM)	Área (meV)
(1)h-GaN	3.381 ± 0.001	0.147 ± 0.005	120.6 ± 8.3
(2)Defectos-c-GaN	3.040 ± 0.003	0.408 ± 0.01	645.1 ± 22.9
(3)Defectos-h-GaN	2.612 ± 0.002	0.269 ± 0.008	429.1 ± 22.1
(4)InGaN-2	$2.295 \pm 9.9E-4$	0.249 ± 0.001	1189.9 ± 9.8

En la **Figura 5-10** se reporta el patrón de XRD en la zona donde se localizan la señal que en la literatura se asocia con el GaN y el InGaN cúbico, aquí se señalan los picos los cuales van a hacer analizados empezando de derecha a izquierda de la medición de XRD, en la región cercana a $2\theta = 40^\circ$ podemos ver la difracción atribuida al GaN cúbico, y cercano a la región de $2\theta = 38.75^\circ$ observamos la difracción de InGaN cúbico, posteriormente tenemos la difracción correspondiente al InN cúbico la cual se encuentra cercana a $2\theta = 36^\circ$, siguiendo a la gráfica tenemos la difracción correspondiente a GaN hexagonal la cual es alrededor de $2\theta = 34.5^\circ$, el siguiente pico corresponde a InN hexagonal y se encuentra en $2\theta = 33^\circ$, por último tenemos la difracción del sustrato de GaAs el cual está en una región de $2\theta = 31.6^\circ$.

Cabe aclarar no es extraño obtener señal del GaN hexagonal, ya que es el estado natural del mismo.

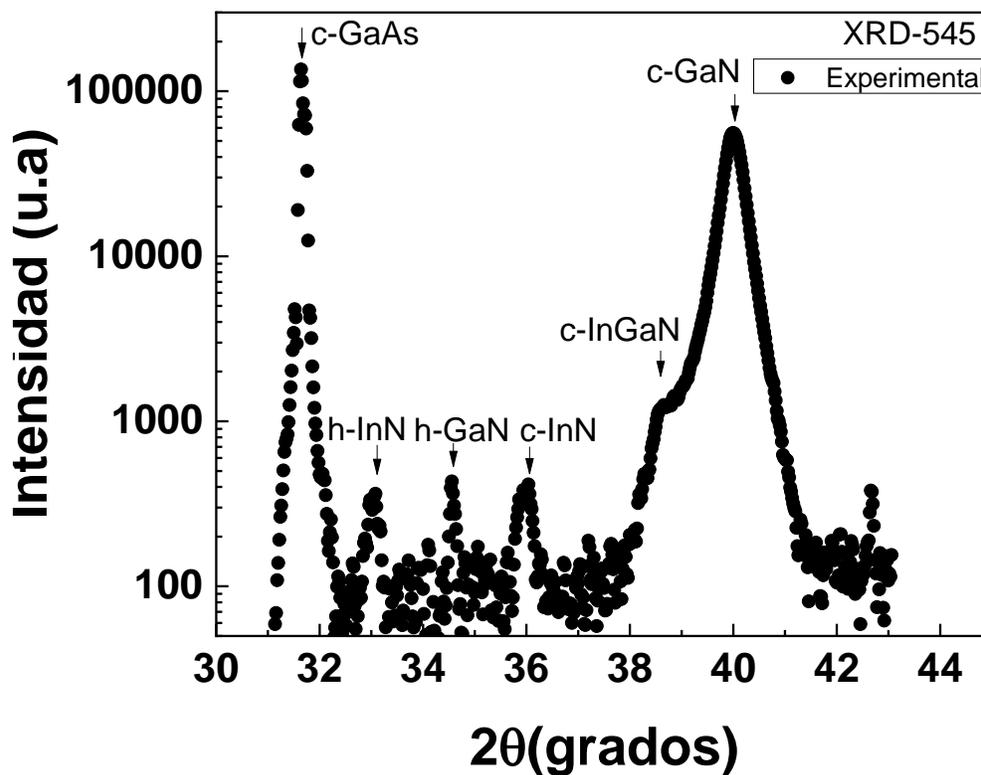


Figura 5-10 Patrón de XRD para la muestra m545.

A continuación, se mostrarán los ajustes de cada uno de los picos que nos ayudan a identificar el InGaN, para reportar una tabla con los valores más importantes de cada ajuste.

En la **Figura 5-11** XRD para la muestra m545 enfocado en la región de c-GaN-InGaN podemos apreciar la región correspondiente a la difracción de c-GaN y c-InGaN, encontrando al c-GaN (002) centrado en $2\theta = 40^\circ$, la difracción atribuida al c-InGaN se encontró centrada en $2\theta = 38.75^\circ$. en la siguiente figura hacemos un acercamiento a la región de InGaN cúbico, ya que este mismo es un poco opacado por la difracción de GaN cúbico.

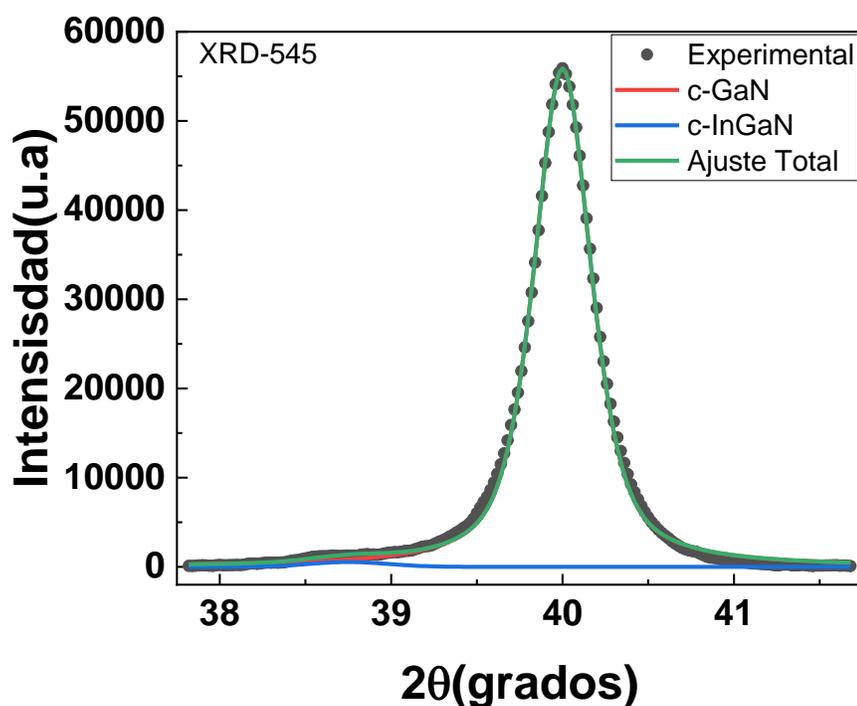


Figura 5-11 XRD para la muestra m545 enfocado en la región de c-GaN-InGaN (002).

Como se muestra en la **Figura 5-11**, la señal cúbica del GaN es muy prominente, pero el hombro en la señal es evidente, sobre todo si se hace un acercamiento a la región en la proximidad de 38.75° como se muestra en la figura **Figura 5-12**, donde claramente se requiere una línea extra para poder ajustar la señal de XRD. Esta señal se asocia con la aleación ternaria de $In_xGa_{1-x}N$. Los resultados del ajuste se reportan en la tabla

Tabla 5-5

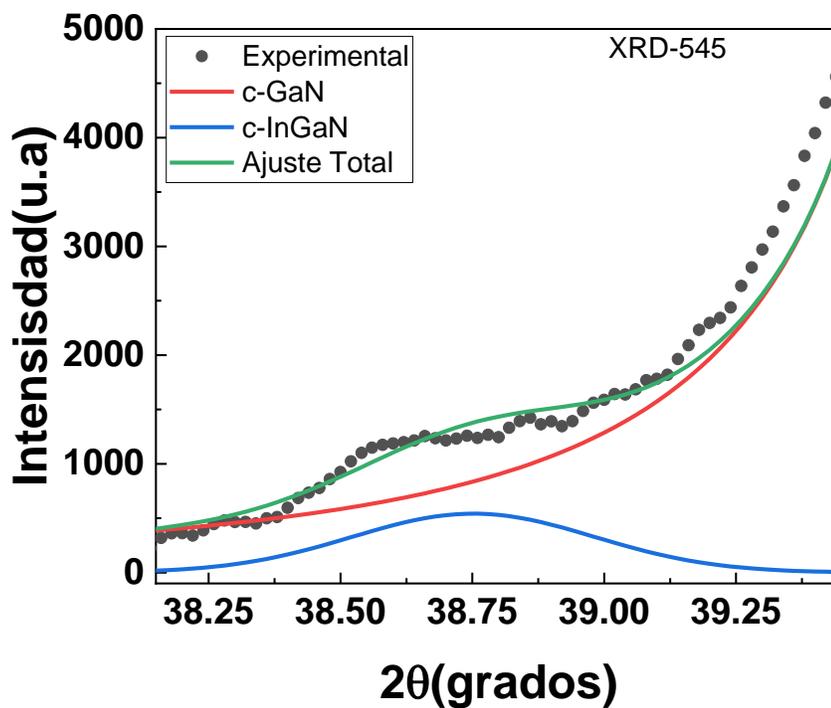


Figura 5-12 Zona de XRD donde se enfoca en la emisión de c-InGaN.

Tabla 5-5 Parámetros de ajuste de XRD para la muestra 545

XRD	c-GaN	c-InGaN
2θ (grados)	40.00	38.75
FWHM (grados)	0.399	0.540
Área	30624.2	328.9

Un análisis similar se realiza para el caso del pico localizado en 36° que en la literatura se asocia al InN en fase cúbica, además se encuentra inclusiones de GaN hexagonal con un pico localizado en 34.5° el cual corresponde a la difracción de plano h-GaN (0002). Así mismo el último pico prominente es el que identifica el sustrato en el plano GaAs (002) el cual se encuentra perfectamente identificado y se localiza en 31.6° . Los parámetros de los ajustes se reportan en la

Tabla 5-6.

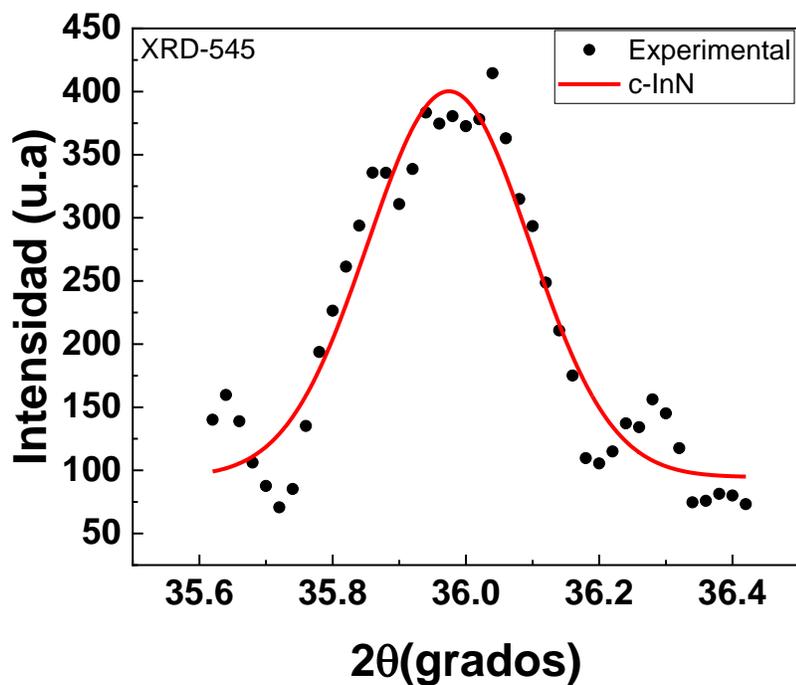


Figura 5-13 XRD para la muestra m545 en la zona de c-InN (002).

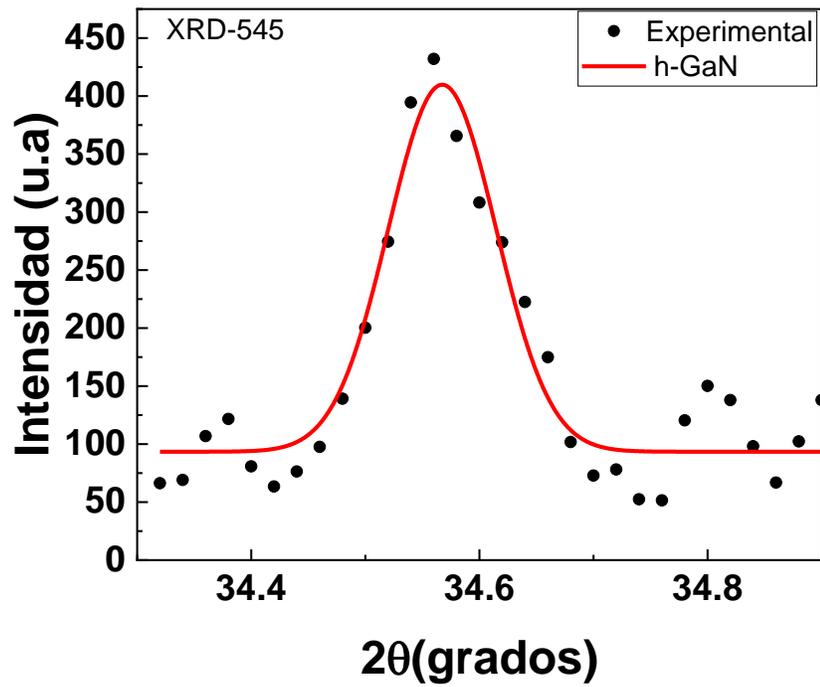


Figura 5-14 Espectro de XRD para la muestra m545 en la zona de h-GaN (0002).

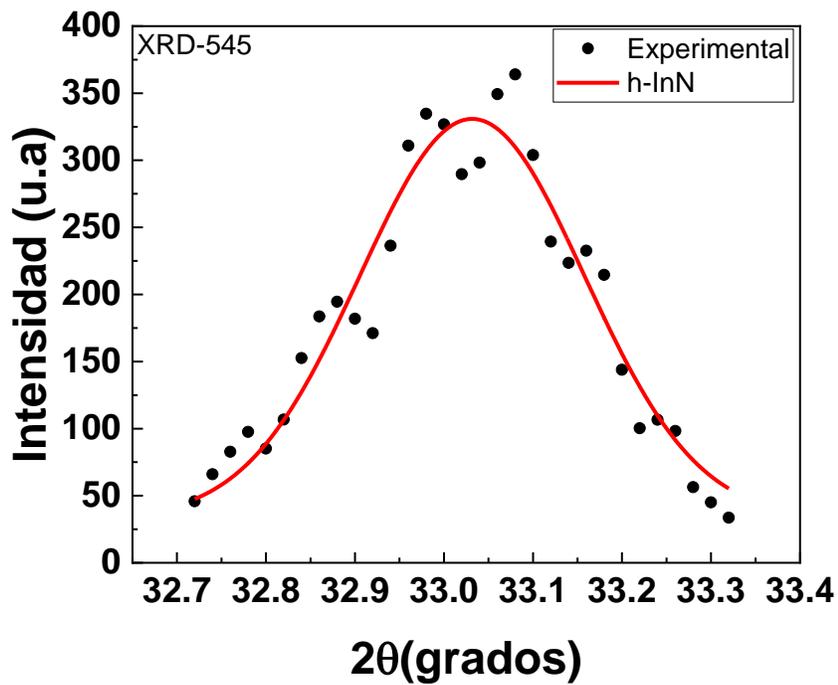


Figura 5-15 Espectro de XRD para la muestra m545 en la zona de h-InN (01-11)

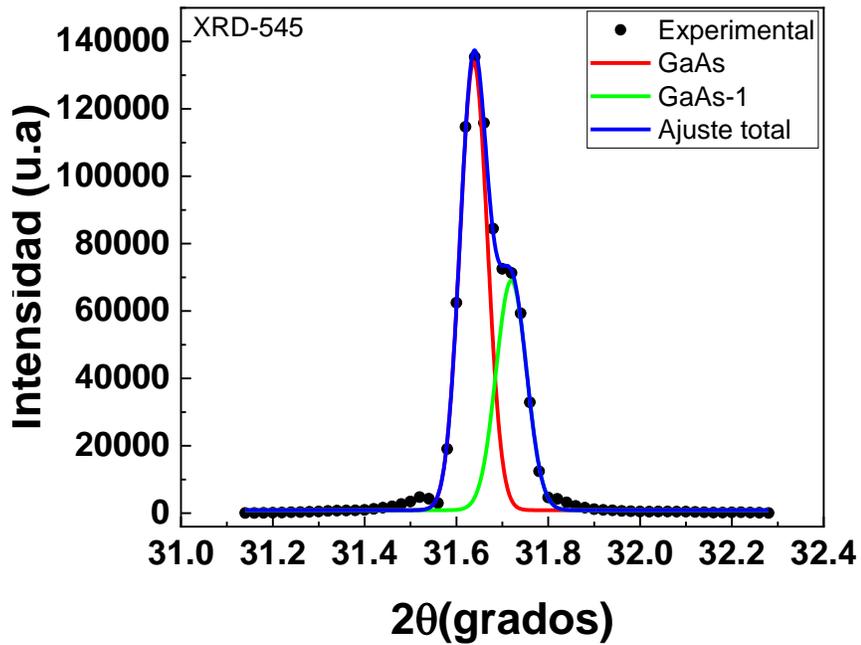


Figura 5-16 XRD para la muestra m545 en la zona de GaAs (002).

Tabla 5-6 Parámetros de los picos de XRD que identifican las fases de la película y del sustrato.

<i>XRD</i>	<i>2θ(grados)</i>	<i>FWHM (grados)</i>	<i>Área</i>
<i>c-InN</i>	35.974 ± 0.005	0.243 ± 0.016	93.1 ± 7.8
<i>h-GaN</i>	34.567 ± 0.003	0.094 ± 0.007	37.5 ± 2.8
<i>h-InN</i>	33.031 ± 0.005	0.252 ± 0.023	94.1 ± 13.6
<i>GaAs</i>	31.637 ± 6.5E-4	0.059 ± 9.9E-4	9967.4 ± 214.5
<i>GaAs-1</i>	31.719 ± 0.001	0.066 ± 0.002	5678.3 ± 218.7

Notamos claramente que los picos más intensos en el espectro son tanto el del sustrato como el c-GaN con anchos muy pequeños lo que nos habla de cristalinidad del sustrato y de las inclusiones presentes en la película la cual debe de contener una cantidad significativa de inclusiones de h-GaN para aparecer en el espectro de rayos X sobre todo con la anchura tan pequeña que tiene. Lo relevante para nosotros en este punto es que definitivamente el espectro de rayos X muestra que hay una presencia de InGaN en nuestras películas.

De las posiciones del InN y el GaN cúbico, así como del InGaN se estiman los valores de sus constantes de red, así finalmente del valor de la constante de red del InGaN se estima un valor de 25.5% para la concentración de In en la película.

Tabla 5-7 Constantes de red cúbica obtenidas del espectro de XRD, así como estimación de la concentración del InGaN por Ley de Vegard

M545	a_{c-GaN} (nm)	a_{c-InN} (nm)	$a_{c-InGaN}$ (nm)	X (concentración %)
XRD	0.450	0.498	0.464	25.5

Tabla 5-8 Estimación de la concentración de In para la muestra M545 a partir del valor de emisión de PL

M545	E (eV)	X (concentración %)
PL	2.295	26.07

De igual manera tenemos que del espectro de PL se tiene una emisión en 2.295 eV que correspondería a una concentración de 26% tal como se reporta en la **Tabla 5-8**. Se tiene entonces que para la muestra M545 que emite en el color verde del espectro 2.295 eV (540 nm) para una concentración del 25.5-26% para InGaN en fase cúbica, que era el objetivo de este trabajo.

5.3.5 Muestra m546

Esta muestra tiene a simple vista una emisión azul, como se muestra en la Figura 5-17. Primero se describirá el espectro de PL donde se aprecian varios picos, que como veremos corresponden a un efecto de interferencia de la señal de PL y que se puede corroborar al comparar PL con la reflectancia de la muestra. Posteriormente se hace el análisis del espectro de XRD para encontrar la concentración de In y compara finalmente las mediciones de PL y XRD.



Figura 5-17 Muestra m546 con luminiscencia predominante en el azul.

Notamos que los espectros de la fotorreflectancia vs la primera derivada de la reflectancia son muy similares, esto nos da un indicio de que en el espectro de fotorreflectancia solo se está observando un patrón de interferencia que es proporcional a la primera derivada de la reflectancia.

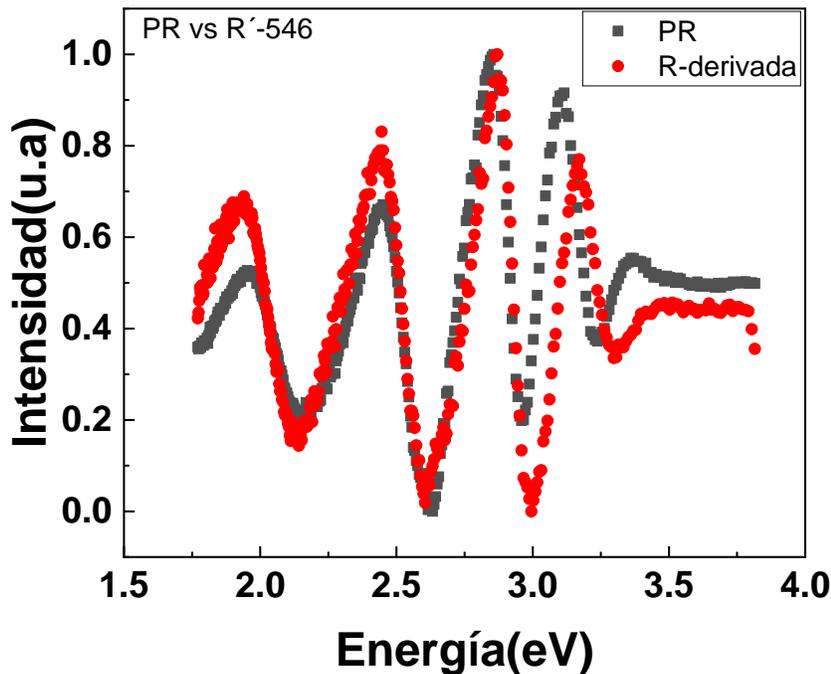


Figura 5-18 Espectro de PR vs R-derivada para la muestra m546.

Por otro lado, al comparar los espectros de R con PL notamos una clara similitud entre los picos obtenidos en PL, ya que algunas oscilaciones de R concuerda con los picos de emisión en el espectro de PL como se muestra en la **Figura 5-19**, este último resultado nos hizo sospechar que la reflectancia estuviera influyendo en los espectros de PL medidos, se buscó analizar a distintos ángulos, al realizar la medición de reflectancia como de PL, aunque cabe aclarar que en un principio se buscaba obtener una medición a 0° de reflectancia, pero el equipo actual no lo permite, por lo cual utilizamos una medición a 15° en su lugar.

Se buscaron distintas técnicas para poder comprobar que la reflectancia podría estar causando interferencia en el espectro de PL, un primer modelo que se encontró en la literatura proponía simular la interferencia como una función coseno multiplicada por un factor [45]

$$I = I_0 \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{ax} + c \right) \right]$$

donde I es la intensidad de oscilación, λ la longitud de onda, a , b , c y I_0 son constantes, en un principio se pensó en utilizar este modelo, pero buscando un poco mas en la literatura, se encontró otro, en el cual, directamente se comprobaría que la reflectancia era la causa de la interferencia.

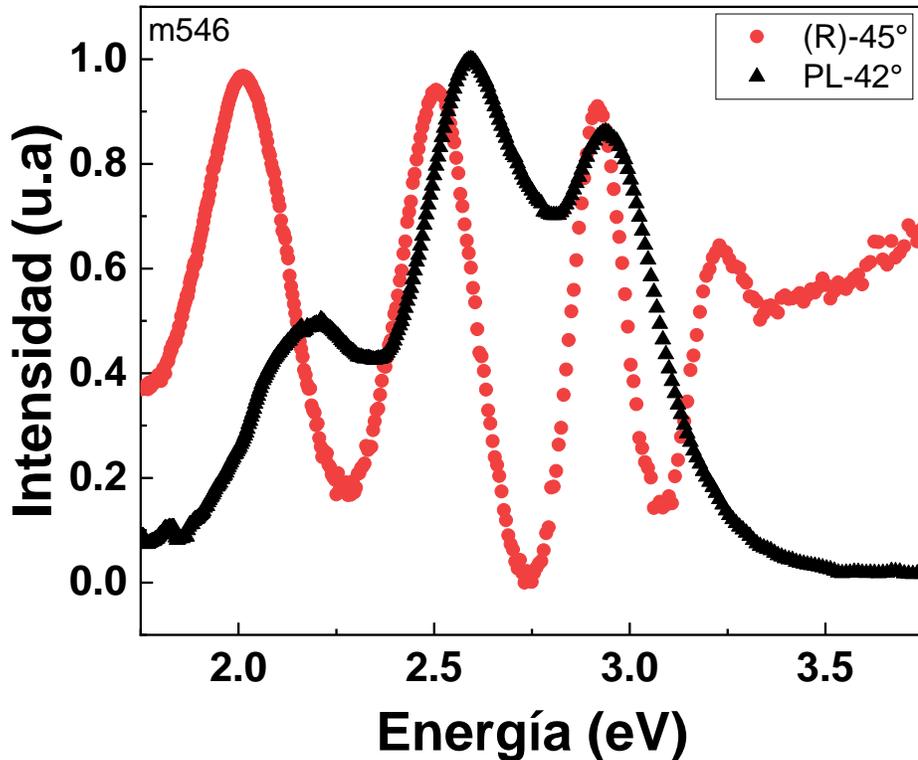


Figura 5-19 Comparación de R vs PL para muestra m546, la cual nos da indicios de una posible interferencia en la región 2.5 a 3 eV.

Ahora bien, pasando al siguiente modelo, para poder realizar y modelar esta interferencia lo podemos generalizar a 2 posibles casos, el primero, en el cual podremos considerar a la función de interferencia (IF) como el equivalente de $(1-R)$ donde R es la reflectancia de la muestra, las condiciones para este caso son que la absorción sea despreciable en la longitud de onda de la emisión de PL, algo que obviamente no es el caso ya que se espera una fuerte absorción en la cercanía del gap, más sin embargo bajo ciertas condiciones como una concentración variable donde se tenga que no se atenué el haz que se refleja en la interfaz

con alto contraste de índice refracción[47], esta interfaz se puede estimar por el número de oscilaciones y concluimos que la interfaz donde se refleja el haz para producir la interferencia es la del GaN/GaAs. Así por la longitud de penetración de nuestro haz que es de 50 nm la luminiscencia se genera cercana a la superficie por lo que para esta muestra se cumple la condiciones para interferencia de haz múltiple, para este caso considerando que hay poca absorción, tomamos que directamente $IF \approx (1 - R)$, en el otro caso al obtener un perfil más profundo de la distribución indicaría una presencia mayor de la interferencia de gran angular, por lo que, para este caso, se tendría que tomar otro método para simular IF desarrollado por Holm et al.[46]. Así el primer paso es el de medir la reflectancia para varios ángulos lo cual mostramos en la **Figura 5-20**.

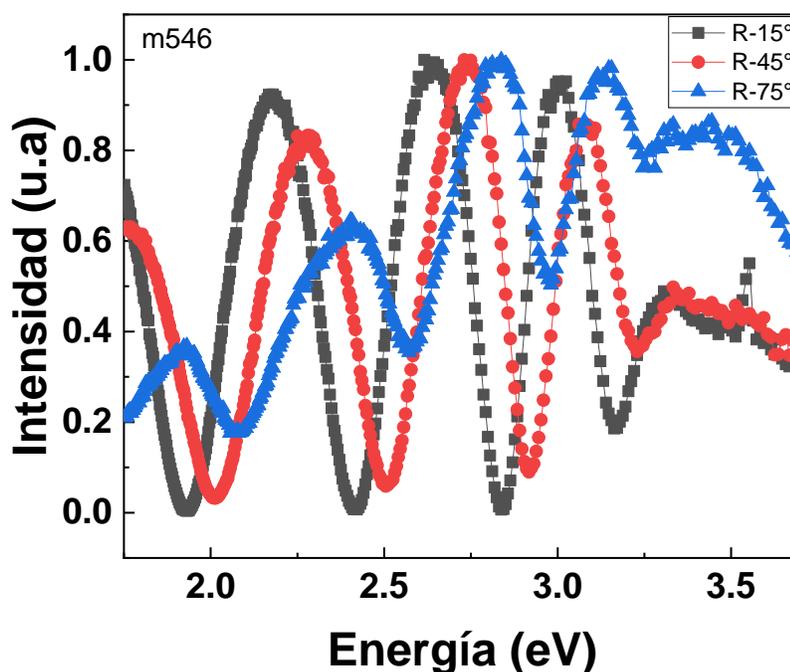


Figura 5-20 Comparación de la reflectancia para la muestra m546 a distintos ángulos, 15°,45° y 75°.

Al saber que se cumple la condición en la cual podemos usar directamente la reflectancia como función de interferencia nos indica en un principio que tenemos interferencia de haz múltiple y que la interferencia del gran angular es mínima, esta función de interferencia se reporta en la figura **Figura 5-21**.

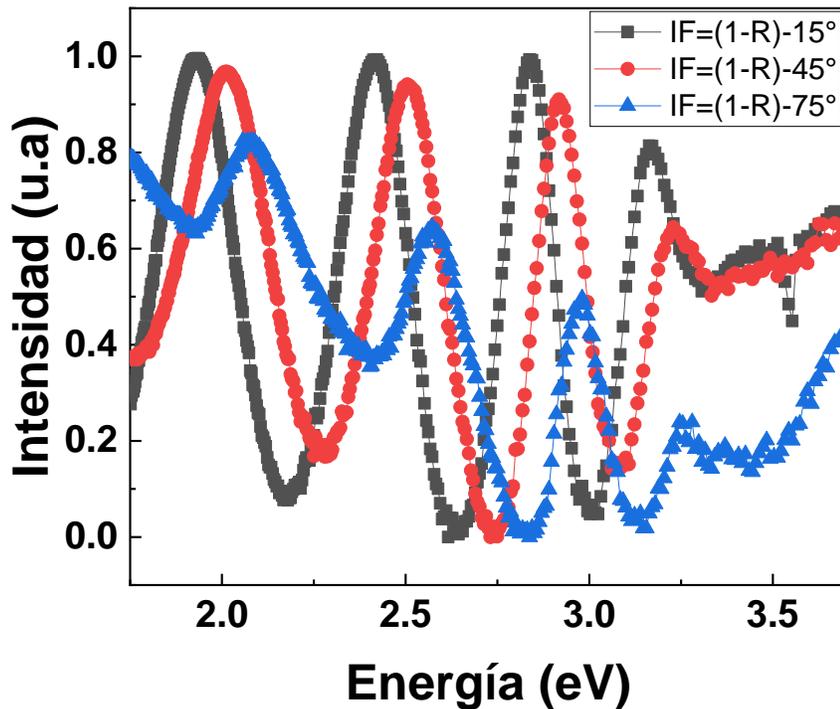


Figura 5-21 Funciones de interferencia para la muestra m546 en distintos ángulos.

En la **Figura 5-22** se muestran los distintos espectros de PL obtenidos variando el ángulo de incidencia normal a la superficie de la muestra, podemos notar que el espectro medido con una lámpara de 365 nm tiene menos oscilaciones producto de que la señal se genera de una región más profunda de la película y no tan superficial como en el caso de 285 nm, eso podría ayudar a explicar el corrimiento que se ve con la señal ya que en este caso la luminiscencia de la película debe de viajar más dentro del mismo material y por ende se absorbe más hacia energías más altas.

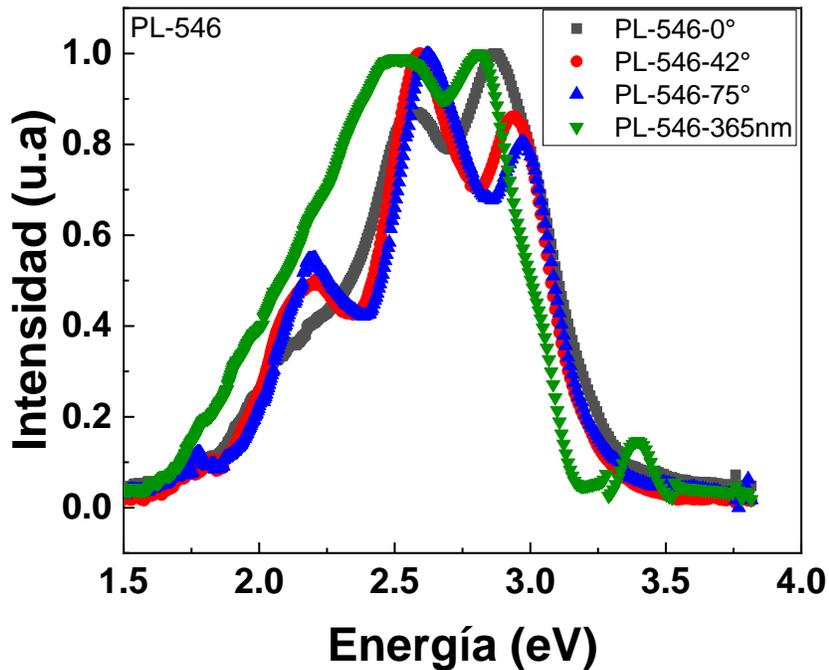


Figura 5-22 Espectro de PL para la muestra m546 a distintos ángulos.

en cambio, las mediciones a 0°, 42° y 75° muestran grandes variaciones, es coherente ya que estas mismas fueron medidas con una lámpara de 285 nm, por lo cual basaremos los ajustes en la medición de 285 nm ya que nos permite notar un cambio más notorio en la interferencia.

Considerando el hecho de que podemos realizar una aproximación del PL medido mediante la fórmula

$$PL_{medido} = (Gaussiana_{simulada}) * (1 - R * c)$$

donde R es la reflectancia medida y c es una constante que ajusta mejor el arreglo [47]. Teniendo siempre en consideración que los resultados de la aproximación utilizando la reflectancia son cercanos a la IF, y se buscara para estudios posteriores un modelo más preciso para la aproximación real de PL.

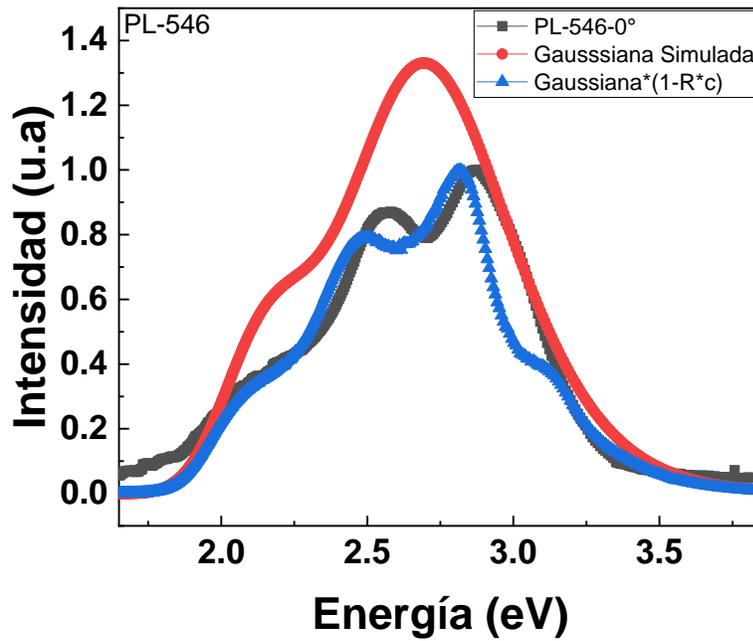


Figura 5-23 Simulación de ajuste gaussiano en el cual se aproxima la medición de PL - obtenida para la muestra m546 medida a 0°.

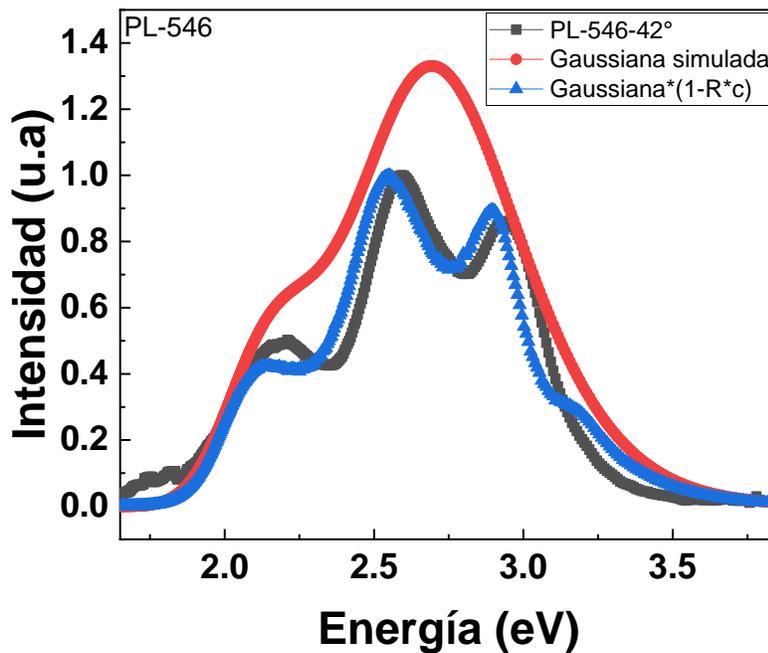


Figura 5-24 Simulación de ajuste gaussiano en el cual se aproxima la medición de PL obtenida para la muestra m546 medida a 42°.

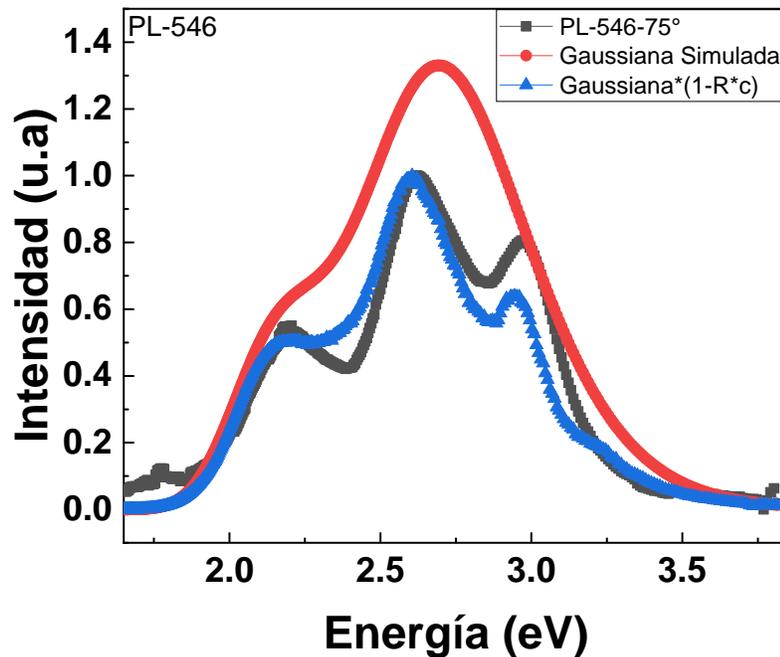


Figura 5-25 Simulación de ajuste gaussiano en el cual se aproxima la medición de PL obtenida para la muestra m546 medida a 75°.

Basado en las tres gráficas anteriores donde realizamos una aproximación del PL medido notamos que no siempre el ajuste en si es perfecto una de las posibles razones es que la función IF cambia en dependencia de la polarización de la luz y el ángulo, aun así, basados en los resultados y notando la similitud para el caso de PL-42°, podemos afirmar que en la muestra m546 se encuentra una clara interferencia la cual podemos remover con la simulación de la función gaussiana, aclarando que para este espectro se necesitó de dos funciones gaussianas para obtener similitudes coherentes con los espectros medidos respecto a los simulados. Lo cual indica que, aun eliminando la interferencia causada por la reflectancia, aún existe una emisión, la cual no corresponde al InGaN y es atribuida a defectos de c-GaN ya que es la luminiscencia típicamente asociada a carbón en sitios de nitrógeno.

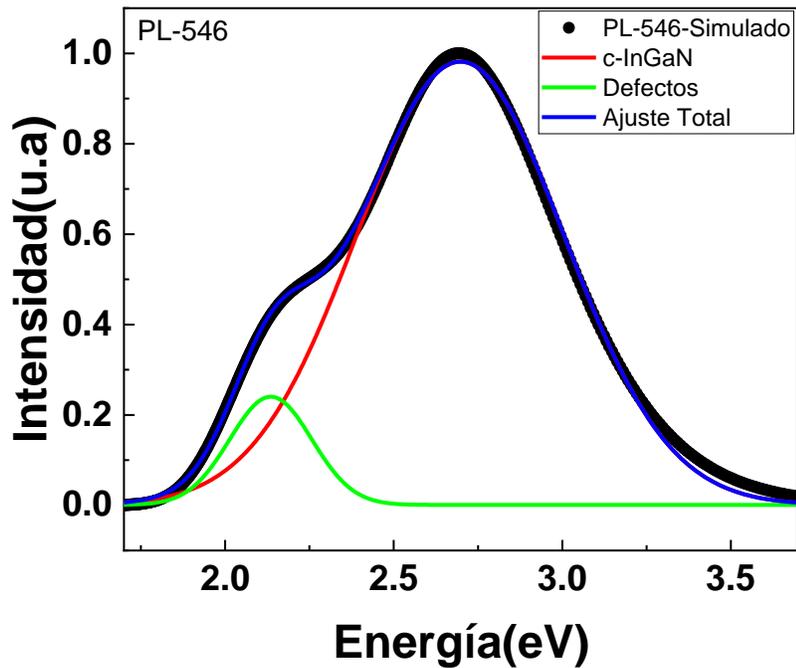


Figura 5-26 Ajuste del espectro simulado de PL para la muestra m546.

Ahora centrándonos en el ajuste de la señal sin inferencia, este se muestra en la **Figura 5-26** y en el cual tenemos una emisión cercana a 2.7 eV atribuida a c-InGaN es notoria la espera de la emisión en esta región, ya que a simple vista la muestra en si emitía en el color azul, sin embargo, también tenemos una emisión alrededor de 2.13 eV y comúnmente estas son vacancia de N sustituidas por carbono u oxígeno [48]. Los datos del ajuste de PL se reportan en la **Tabla 5-9**.

Tabla 5-9 Ajustes de PL de la muestra m546, donde se expresa la señal del InGaN y una señal de defectos

PL	E (eV)	Ancho (FWHM)	Área (meV)
InGaN	$2.697 \pm 6.4E-4$	0.616 ± 0.001	0.757 ± 0.001
Defectos	2.135 ± 0.001	0.243 ± 0.002	0.072 ± 0.001

Ahora, centrándonos en los datos de las mediciones de XRD tomaremos la **Figura 5-27** en donde se grafica la zona de interés, de las cuales haremos un análisis más detallado para cada una de las difracciones, iniciando por la región cercana a $2\theta = 40^\circ$ en donde tenemos la difracciones correspondientes a c-GaN con $2\theta = 39.96^\circ$ y c-InGaN con una difracción en la región cercana a $2\theta = 39.28^\circ$, posteriormente, se alcanza a percibir una difracción cercana a $2\theta = 36^\circ$; sin embargo, esta difracción la cual corresponde a c-InN(002) es del orden del ruido de la medición, por lo que al realizar las aproximaciones de las concentraciones tomaremos un valor de referencia para la constante de red del mismo, el siguiente pico corresponde a la difracción de h-GaN la cual es cercana a $2\theta = 34.5^\circ$ y por último tenemos al sustrato de GaAs el cual está en una región de $2\theta = 31.6^\circ$. Un detalle de esta muestra es que tiene un gran contenido de h-GaN.

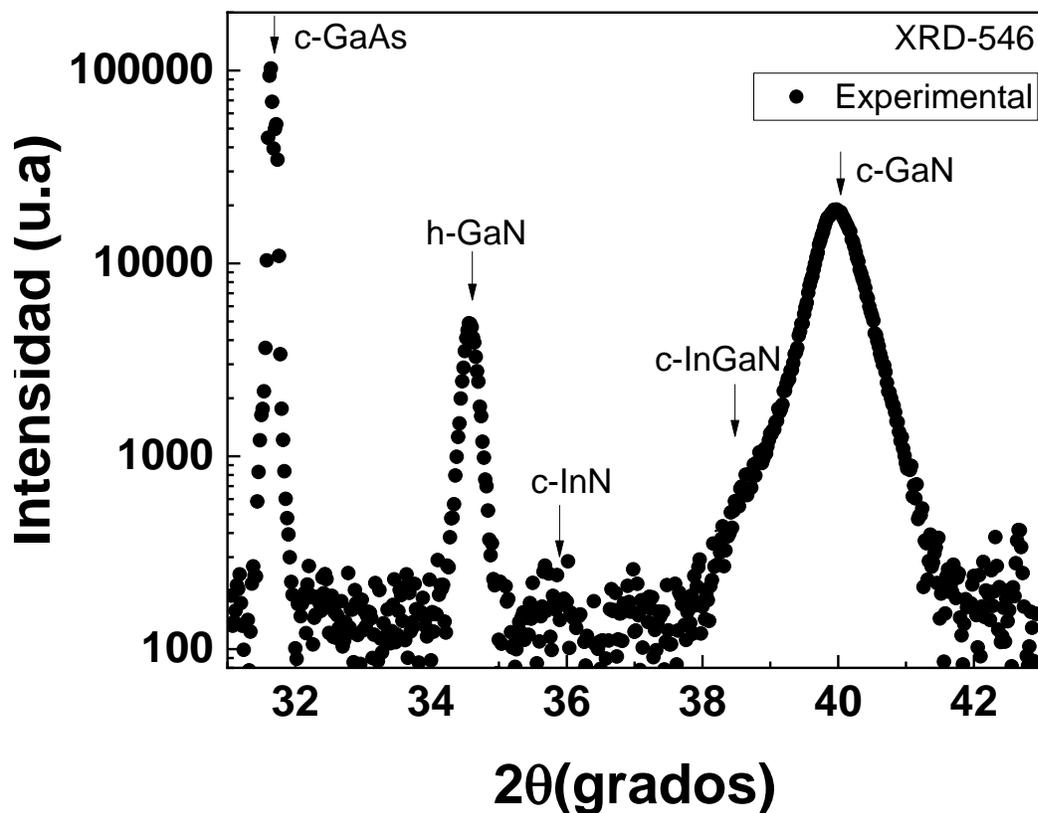


Figura 5-27 XRD para la muestra m546 en toda la región de interés, señalando las regiones en las que nos enfocaremos

A continuación, se mostrarán los ajustes de cada uno de los picos que nos ayudan a identificar el InGaN, para al reportar una tabla de contenido con los valores más importantes de cada ajuste.

Para la **Figura 5-28** XRD para la muestra m546 enfocado en la región de c-GaN-InGaN podemos apreciar la región correspondiente a la difracción de c-GaN y c-InGaN, encontrando al c-GaN centrado en $2\theta = 39.96^\circ$, la difracción atribuida al c-InGaN la cual está centrada en $2\theta = 39.28^\circ$. en la siguiente figura hacemos un acercamiento a la región de InGaN cubico, ya que este mismo es un poco opacado por la difracción de GaN cubico, el ajuste se muestra en **Figura 5-29**

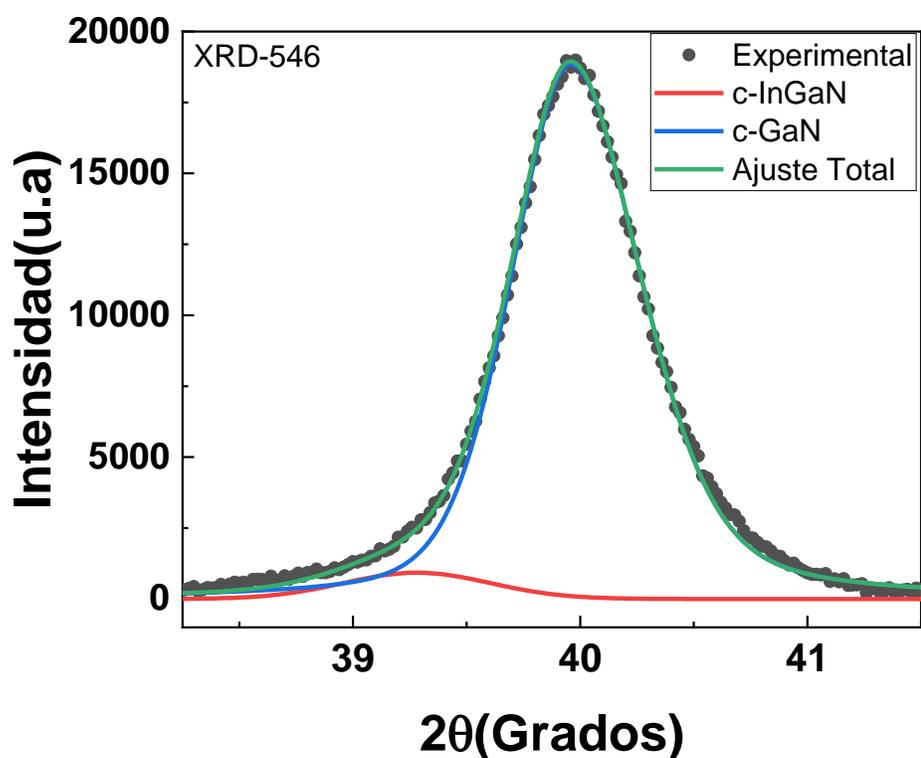


Figura 5-28 XRD para la muestra m546 enfocado en la región de c-GaN-InGaN (002).

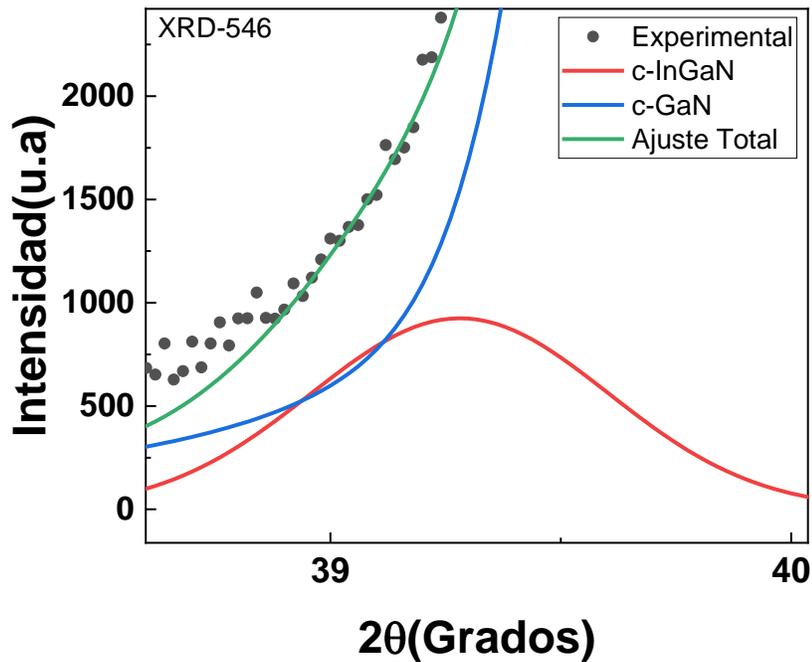


Figura 5-29 XRD para la muestra m546 enfocado en la región de InGaN.

Tabla 5-10 Parámetros de ajuste de XRD de los picos asociados al GaN y al InGaN

XRD	c-GaN	c-InGaN
$2\theta(\text{grados})$	39.96	39.28
FWHM (grados)	0.68	0.76
Área	16019.7	748.2

La señal un poco más ancha del InGaN tanto del GaN respecto a la muestra anterior puede ser atribuida a una mayor variación de concentración en el espesor de la película y probablemente algo de In se segrega hacia la capa de GaN lo que contribuye al ancho de la misma. Los resultados del ajuste se reportan en la **Tabla 5-10**. Un análisis similar se realiza para el caso del pico localizado en 36° que en la literatura se asocia al InN en fase cúbica, aunque para esta muestra solo es representativo, ya que la emisión en esta región es del orden

del ruido **Figura 5-30** . Se encuentra inclusiones de GaN hexagonal con un pico localizado en 34.5° el cual corresponde a esta fase del GaN, esto se muestra en la **Figura 5-31**. Así mismo el ultimo pico prominente es que identifica el sustrato que es GaAs y se localiza en 31.6° **Figura 5-32**. Los parámetros de los ajustes se reportan en la

<i>XRD</i>	$2\theta(\text{grados})$	FWHM (grados)	Área
c-InN	35.68 ± 0.06	0.644 ± 0.71	84.9 ± 204.3
h-GaN	34.57 ± 0.001	0.202 ± 0.002	1132.3 ± 17.9
GaAs	$31.63 \pm 2.6E-4$	$0.050 \pm 5.5E-4$	6747.2 ± 67.2
GaAs-1	$31.71 \pm 5.3E-4$	0.050 ± 0.001	3404.02 ± 67.3

Tabla 5-11.

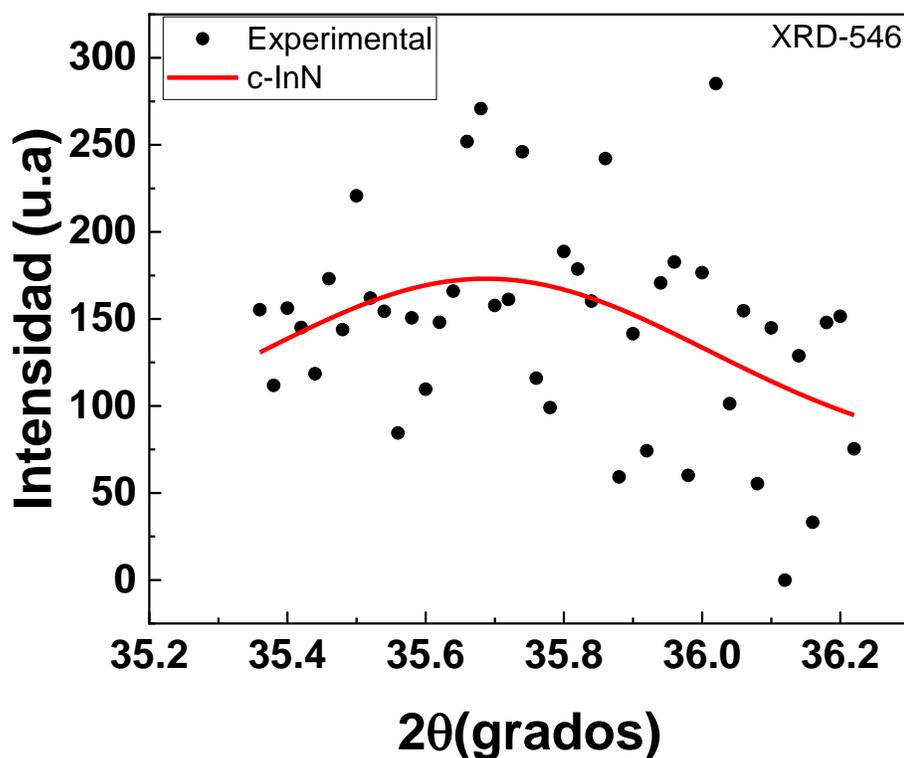


Figura 5-30 XRD para la muestra m546 enfocado en la región de c-InN (002).

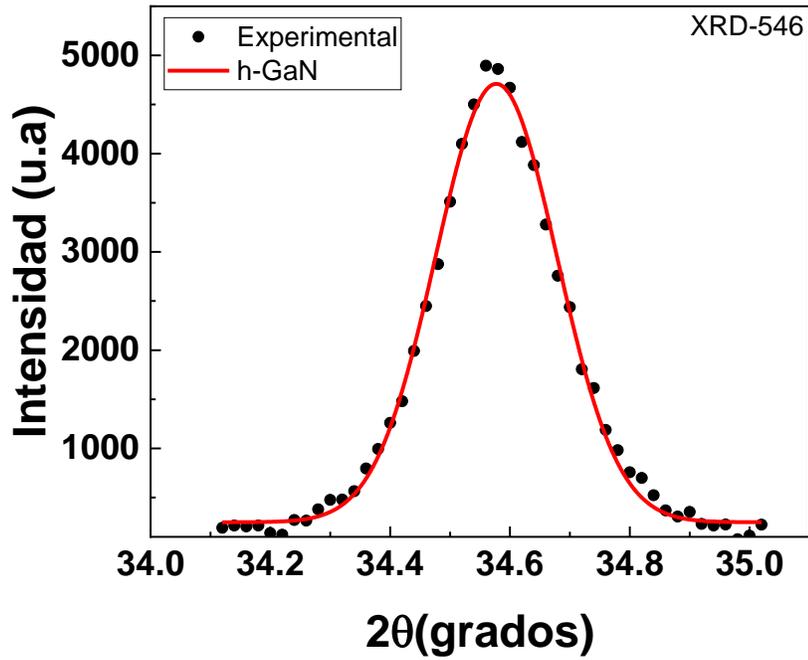


Figura 5-31 XRD para la muestra m546 enfocado en la región de h-GaN (0002).

XRD-546

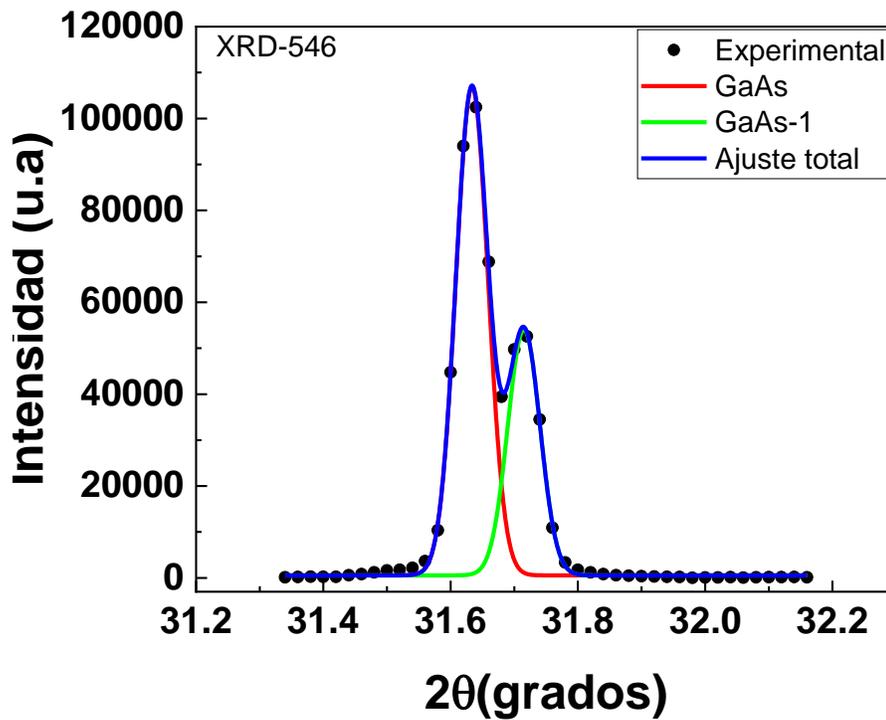


Figura 5-32 XRD para la muestra m546 enfocado en la región de GaAs.

Tabla 5-11 Parámetros de los picos de XRD que identifican las fases de la película y del sustrato.

<i>XRD</i>	<i>2θ(grados)</i>	<i>FWHM (grados)</i>	<i>Área</i>
c-InN	35.68 ± 0.06	0.644 ± 0.71	84.9 ± 204.3
h-GaN	34.57 ± 0.001	0.202 ± 0.002	1132.3 ± 17.9
GaAs	31.63 ± 2.6E-4	0.050 ± 5.5E-4	6747.2 ± 67.2
GaAs-1	31.71 ± 5.3E-4	0.050 ± 0.001	3404.02 ± 67.3

Notamos claramente que los picos asociados al c-GaN y al h-GaN son más anchos que los de la muestra M545, indicando una menor cristalinidad o bien que hay una incorporación moderada del In en la capa del GaN. De las posiciones del InN y el GaN cúbico, así como del InGaN se estiman los valores de sus constantes de red, así finalmente del valor de la constante de red del InGaN se estima un valor de 13.86 % para la concentración de In en la película.

Tabla 5-12 Constates de red cúbica obtenidas del espectro de XRD, así como estimación de la concentración del InGaN por Ley de Vegard.

M546	<i>a_{c-GaN} (nm)</i>	<i>a_{c-InN} (nm)</i>	<i>a_{c-InGaN} (nm)</i>	X (concentración %)
XRD	0.450	0.498	0.458	13.86

Tabla 5-13 Estimación de la concentración de In para la muestra M546 a partir del valor de emisión de PL.

M546	E (eV)	X (concentración %)
PL	2.6977	13.91

De igual manera tenemos que del espectro de PL se tiene una emisión en 2.697 eV que correspondería a una concentración de 13.91% tal como se reporta en la **Tabla 5-12**. Se tiene

entonces que para la muestra M546 que esta emite en el color azul del espectro 2.697 eV (460 nm) para una concentración del 13.86-13.91% para InGaN en fase cúbica.

5.3.6 Muestra m547

Empezamos mostrando el espectro de PL y haciendo el análisis de la deconvolución de esta señal, posteriormente se hará el análisis de XRD y se obtendrá la concentración de In, para por último comparar PL con XRD.



Figura 5-33 muestra m547 con luminiscencia predominante en el verde

La muestra emite en un color verde intenso tal como se muestra en la **Figura 5-32**. En el espectro mostrado en la

Figura 5-34 podemos identificar tres picos, uno asociado al c-GaN, otro asociado a defectos y el ultimo asociado a la película de InGaN, esta única donde podemos ver en el espectro de XRD de InGaN hexagonal. En la cual asociamos dos

PL	(1) c-GaN	(2) InGaN	(3) InGaN-1
E (eV)	3.229	2.836	2.382
Ancho (FWM)	0.395	0.400	0.344
Área (meV)	5.10E-4	2.16E-4	6.90E-4

concentraciones del mismo, una cercana a 2.83 eV y otra en 2.38 eV, también es la única muestra donde asociamos una separación de fase, ya que en los espectros de XRD notamos que existen 2 posibles difracción de h-InGaN y estas mismas se ajustan congruentemente con lo obtenido en la medición de PL, aclarando que para esta muestra se utilizó otro parámetro de bowing ($b=2.5$) sería interesante obtener más datos y detalles de la muestra cuando fue crecida, para poder comprender cuál fue el causa de la aparición de h-InGaN y de la separación de fase de la misma, pero para fines prácticos, en el presente trabajo nos enfocaremos a caracterizar dicha muestra.

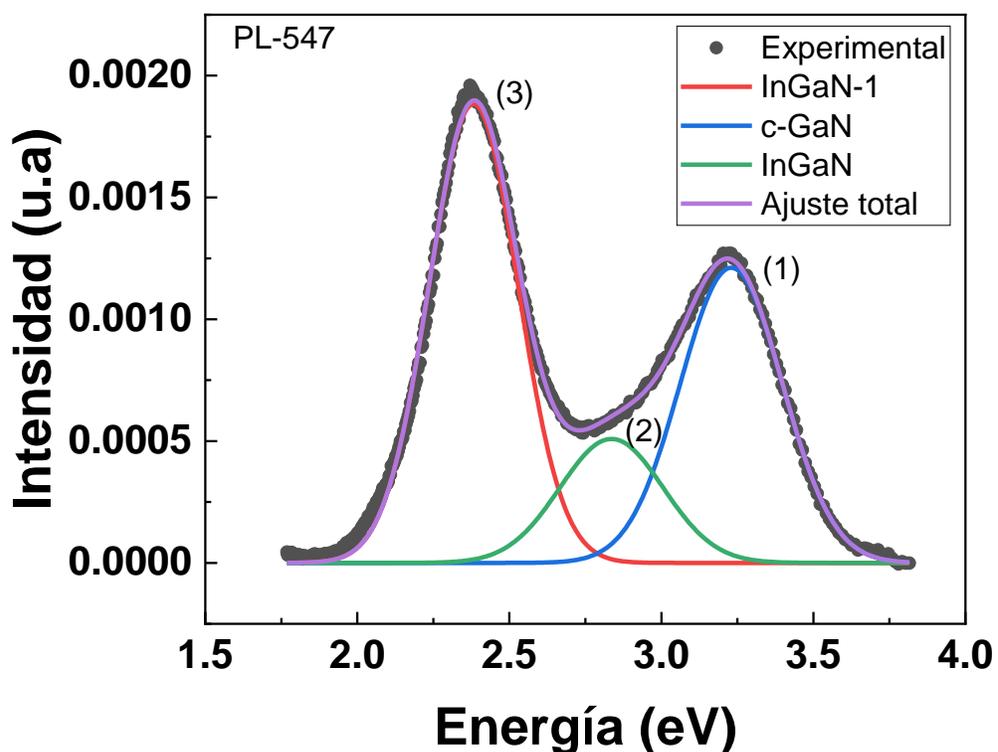


Figura 5-34 Espectro de PL para la muestra m547 en la cual tenemos 2 emisiones de InGaN

Tabla 5-14 Parámetros de ajuste de PL de la muestra 547

La **Figura 5-36** se reporta el espectro de XRD en la zona donde se localizan la señal que en la literatura se asocia con el GaN cúbico, pero en cambio a las muestras anteriores, este pico centrado alrededor de 40° es más simétrico y pequeño, lo cual nos da indicios de que no hay InGaN en fase cúbica, en general se señalan los picos los cuales van a ser analizados empezando de derecha a izquierda de la medición de XRD, en la región cercana a $2\theta = 40^\circ$ podemos ver la difracción atribuida al GaN cúbico, posteriormente tenemos la difracción correspondiente al InN cúbico la cual se encuentra cercana a $2\theta = 36^\circ$ aunque de nuevo, como sucedió para la muestra 546, esta difracción de InN cúbico es del orden del ruido, por lo que no la tomaremos de referencia, siguiendo a la gráfica tenemos la difracción correspondiente a GaN hexagonal la cual es alrededor de $2\theta = 34.5^\circ$, y cercano a esta región alrededor de $2\theta = 34^\circ$ notamos una difracción la cual no había aparecido en las muestras anteriores la _____ cual atribuimos a PL _____ InGaN hexagonal, no _____ solo eso, notamos que E (eV) 3.229 2.836 2.382 hay 2 difracciones Ancho (FWM) 0.395 0.400 0.344 del mismo a posible Área (meV) 5.10E-4 2.16E-4 6.90E-4 distintas concentraciones, esto indica que tenemos una separación de fase, lo cual explicaría el por

qué tenemos dos distintas posibles emisiones de InGaN en el espectro de PL, en este caso, complicaría los resultados de fotorreflectancia, ya que el hecho de tener la separación de fase causa una discontinuidad en la función dieléctrica, por lo que hace que las mediciones o valores ópticos que podremos obtener como son el índice de refracción para el InGaN en esta muestra no sea posible calcularlo con precisión. por último, tenemos la difracción del sustrato de GaAs el cual está en una región de $2\theta = 31.6^\circ$.

A continuación, se mostrarán los ajustes de cada uno de los picos que nos ayudan a identificar el InGaN, para al reportar una tabla de contenido con los valores más importantes de cada ajuste.

Para la **Figura 5-36** podemos apreciar la región correspondiente a la difracción de c-GaN centrado en $2\theta = 39.97^\circ$, Como se menciona anteriormente, solo se requirió de un pico para ajustar esta región por lo cual, carece de difracción de InGaN en fase cubica

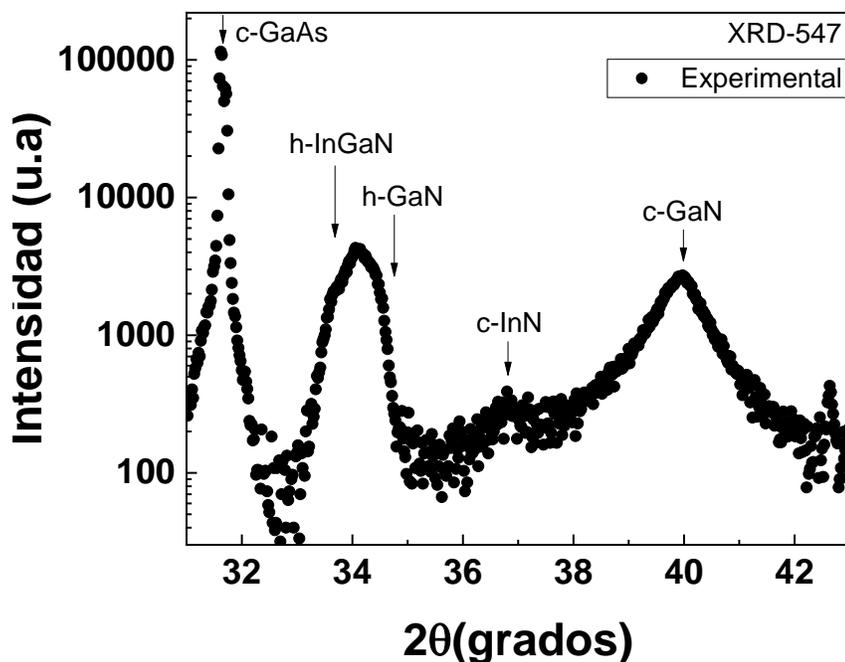


Figura 5-35 XRD para la muestra m547 en toda la región de interés, señalando las regiones en las que nos enfocaremos.

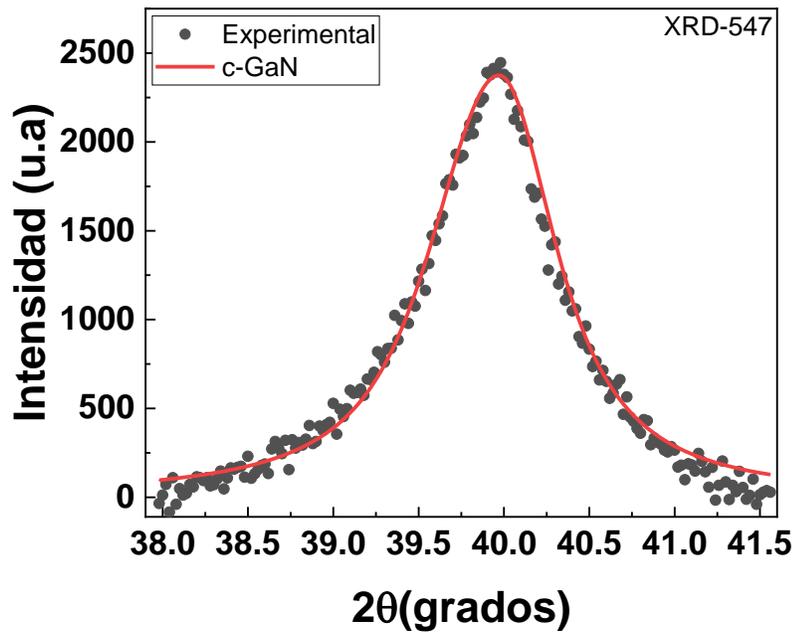


Figura 5-36 XRD para la muestra m547 enfocado en la región de c-GaN (002).

Los resultados para la región cercana a 40° se muestran en la **Tabla 5-15**. Un análisis similar se realiza para el caso del pico localizado en 36° que en la literatura se asocia al InN en fase cúbica, además se encuentra inclusiones de GaN hexagonal con un pico localizado en 34.5° el cual corresponde a esta fase del GaN y seguidos las difracciones de InGaN en fase

hexagonal. Así mismo el último pico prominente es que identifica el sustrato que es GaAs el cual

XRD	2θ(grados)	FWHM (grados)	Área
c-InN	36.95 ± 0.04	1.056 ± 0.30	201.1 ± 109.5
h-GaN	34.41 ± 0.02	0.283 ± 0.02	763.7 ± 204.2
h-InGaN	34.09 ± 0.01	0.325 ± 0.04	1509.2 ± 327.3
h-InGaN-1	33.70 ± 0.03	0.356 ± 0.04	800.7 ± 185.4
GaAs	31.62 ± 3.3E-4	0.052 ± 6.6E-4	7735.3 ± 92.3
GaAs-1	31.70 ± 6.9E-4	0.053 ± 0.0017	4054 ± 92.9

nuevo se localiza en 31.6°. Los parámetros de los ajustes se reportan en la

FWHM (grados)	0.440
Área	3094.1

Tabla 5-16.

Tabla 5-15 Ajuste de XRD de la muestra, donde se nota que está presente la fase cubica del GaN pero no hay evidencia de InGaN en fase cubica.

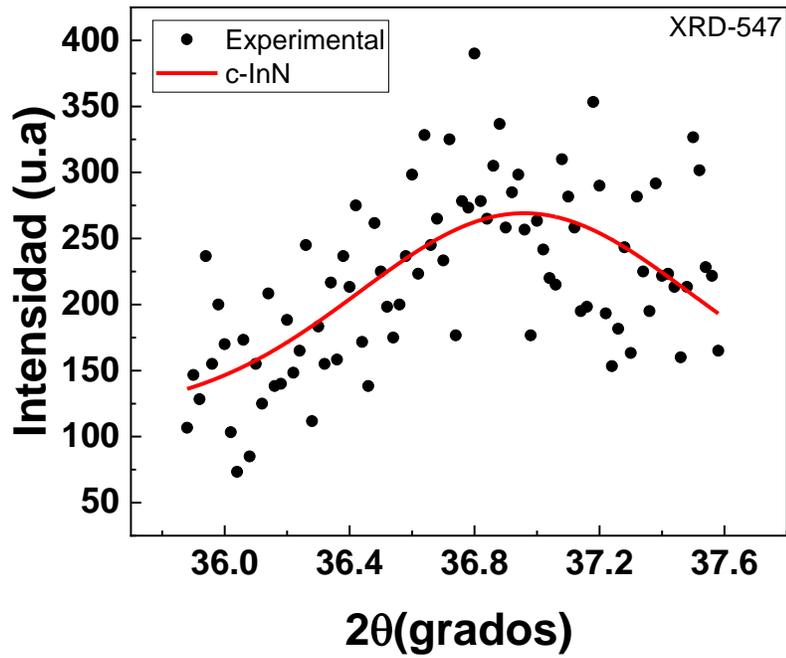


Figura 5-37 XRD para la muestra m547 enfocado en la región de c-InN (002)

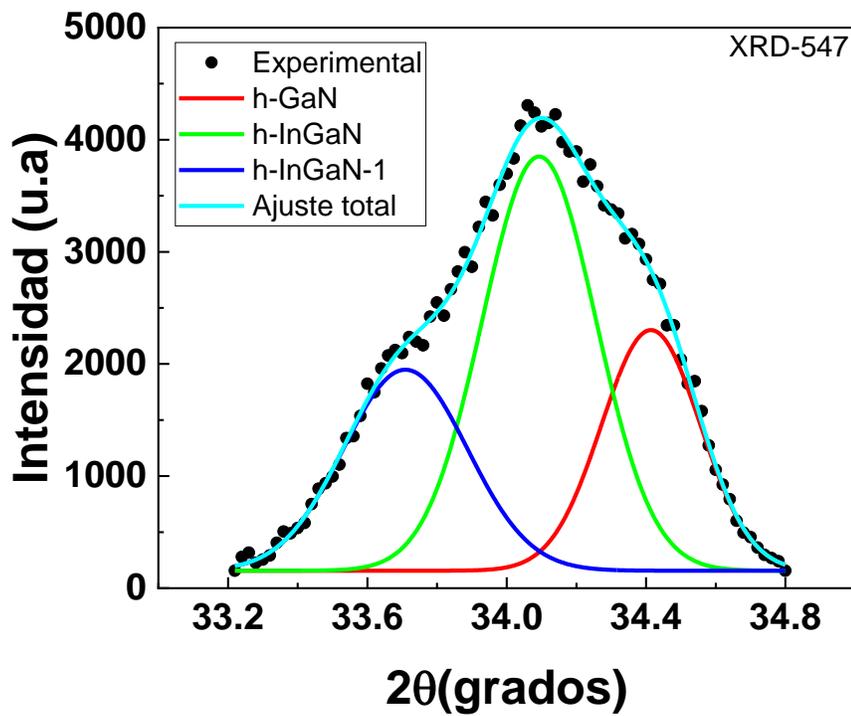


Figura 5-38 XRD para la muestra m547 enfocado en la región de h-GaN (0002)

XRD	$2\theta(\text{grados})$	FWHM (grados)	Área
c-InN	36.95 ± 0.04	1.056 ± 0.30	201.1 ± 109.5
h-GaN	34.41 ± 0.02	0.283 ± 0.02	763.7 ± 204.2
h-InGaN	34.09 ± 0.01	0.325 ± 0.04	1509.2 ± 327.3
h-InGaN-1	33.70 ± 0.03	0.356 ± 0.04	800.7 ± 185.4
GaAs	$31.62 \pm 3.3E-4$	$0.052 \pm 6.6E-4$	7735.3 ± 92.3
GaAs-1	$31.70 \pm 6.5E-4$	0.053 ± 0.001	4054 ± 92.9

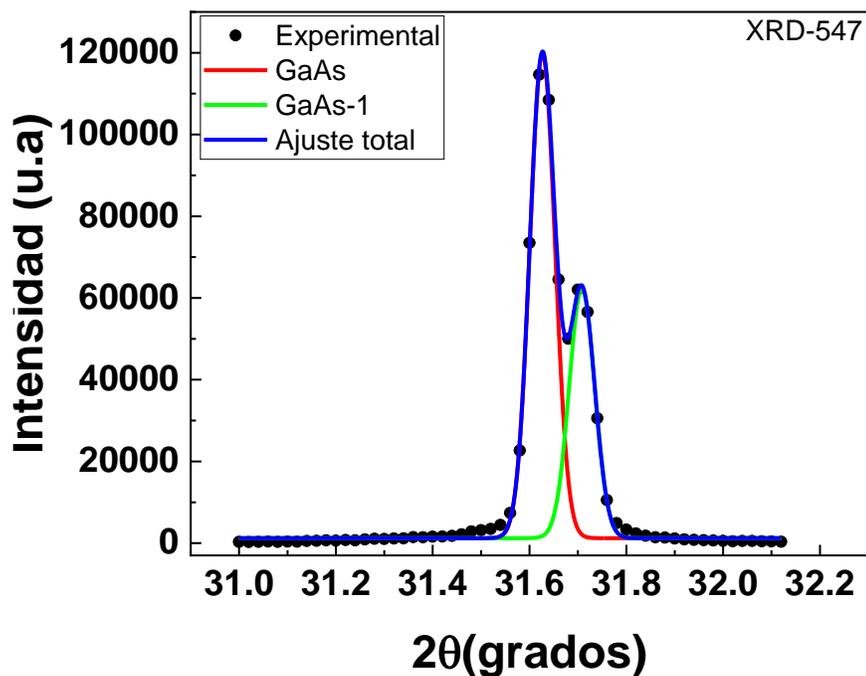


Figura 5-39 XRD para la muestra m547 enfocado en la región de GaAs (002) .

Tabla 5-16 Parámetros de los picos de XRD que identifican las fases de la película y del sustrato

En la **Figura 5-38** se detallan los ajustes obtenidos en la región correspondiente a h-GaN y h-InGaN, de tal forma que tenemos las 2 concentraciones de indio que se sospechaba, con esto concluimos que en definitiva tenemos una separación de fase, un detalle a marcar, es que, en este caso, la difracción de h-InGaN es más intensa que la difracción de h-GaN.

De las posiciones del InN y el GaN hexagonal (se tomó de referencia valores en la literatura y el valor obtenido en la muestra 545 del InN hexagonal) así como del InGaN se estiman los valores de sus constantes de red, así finalmente los valores de las constantes de red del InGaN se estima unos valores de 11.62% y 21.5% para las concentraciones de In en la película.

Tabla 5-17 Constantes de red cubica obtenidas del espectro de XRD, así como estimación de las concentraciones del InGaN por Ley de Vegard.

M547-XRD	a_{h-GaN} (nm)	a_{h-InN} (nm)	$a_{h-InGaN}$ (nm)	X (concentración %)
	0.318	0.354	0.325	21.5
	0.318	0.354	0.321	11.62

Tabla 5-18 Estimación de las concentraciones de In para la muestra M547 a partir del valor de emisión de PL.

M547-PL	E (eV)	X (concentración %)
----------------	---------------	----------------------------

2.382	22.92
2.836	10.15

De igual manera tenemos que del espectro de PL se tiene las emisiones en 2.836 eV y 2.382 eV que corresponderían a concentraciones de 10.15% y 22.92% tal como se reporta en la **Tabla 5-18**.

Se tiene entonces que para la muestra M547 la cual emite en mayor intensidad en el color verde del espectro 2.382 eV (520 nm) y en menor intensidad en un azul 2.836 eV (437 nm) para unas concentraciones del 21.5-22.92% para el verde y 10.15-11.62% para el azul de InGaN en fase hexagonal, no se obtuvo la fase deseada, pero si la emisión en el verde, que era el objetivo de este trabajo.

5.3.7 Muestra m566

Se tiene que esta muestra presenta una luminiscencia que a simple vista luce roja-amarillenta como se muestra en la **Figura 5-40**.

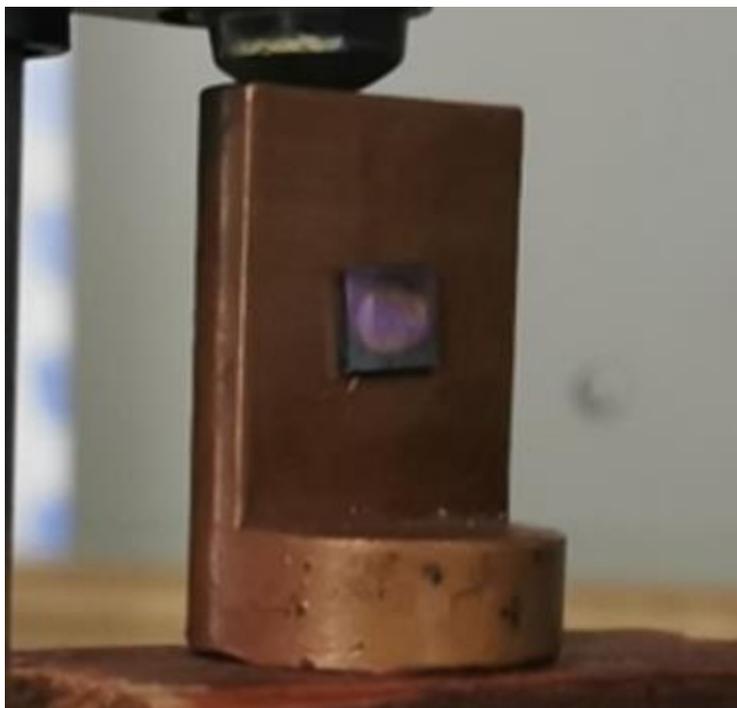


Figura 5-40 Fotoluminiscencia de la muestra M566

Empezamos mostrando el espectro de PL, aquí empleamos primero un mini espectrómetro que tiene un rango de medición de 325nm a 1100 nm y se muestra **Figura 5-41** esta medición tiene un menor resolución espectral que la que reportamos en la **Figura 5-42**, en ambos espectros se observa que emisión más interesante está en el color verde alrededor de 2.24 eV y las emisiones correspondientes a c-GaN y h-GaN, sin embargo, también se presenta una emisión asociada a defectos en el GaN alrededor de 1.8-1.9 eV se suelen ver en GaN rico en Ga en crecimiento de MBE o HVPE.[49]

PL	E (eV)	Ancho (FWM)	Área (meV)
----	--------	-------------	------------

Tabla 5-19 Parámetros de ajuste de PL de muestra M566.

(1) h-GaN	3.393 ± 0.001	0.068 ± 0.002	$5.7E-5 \pm 1.9E-6$
(2) c-GaN	3.197 ± 0.001	0.085 ± 0.003	$5.6E-5 \pm 2.08E-6$
(3) c-InGaN	2.244 ± 0.002	0.254 ± 0.004	$1.6E-4 \pm 3.3E-6$

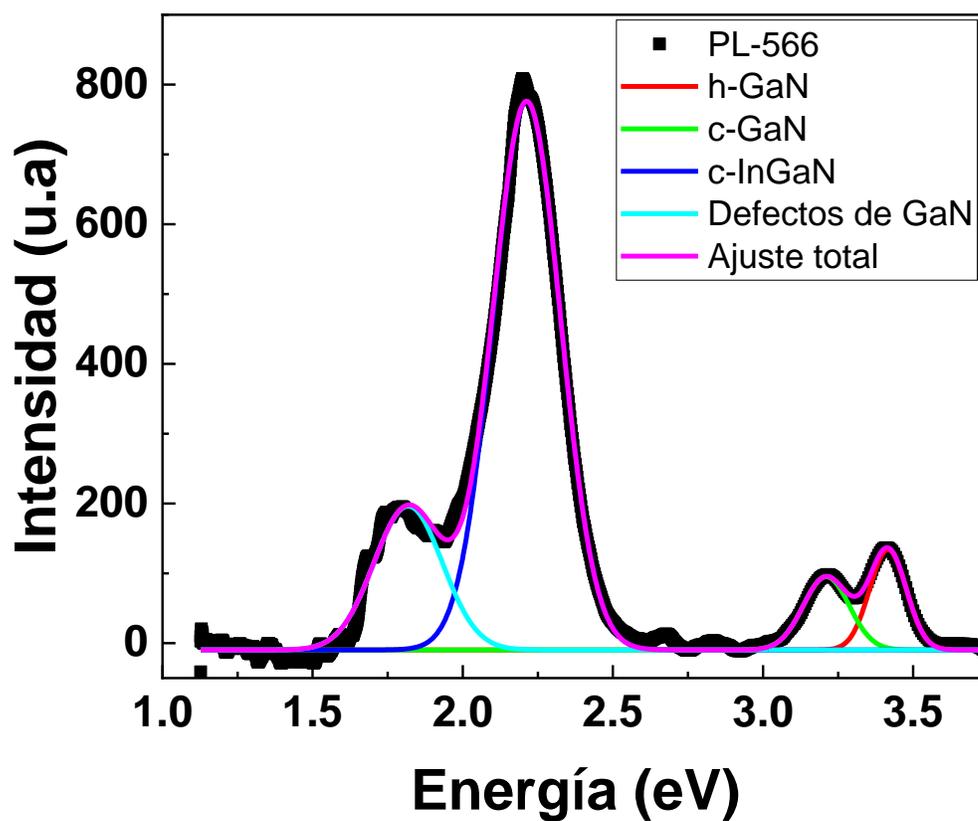


Figura 5-41 PL de la muestra M566 empleando un mini espectrómetro.

La diferencia entre los dos espectros es más que nada que el segundo de mayor resolución se emplea un PMT que tiene un rango de 1280 a 630 nm por lo que la señal roja queda fuera del alcance de este detector.

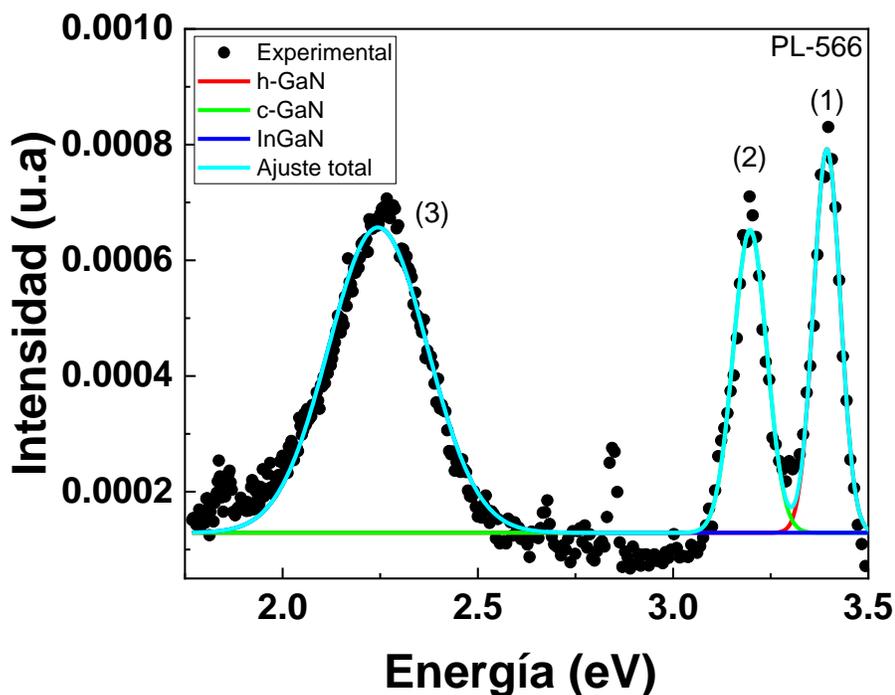


Figura 5-42 Espectro de PL para la muestra m546 ajustado a 3 picos señalados en la misma.

La principal sospecha de esta muestra es que la emisión cercana a 2.2 eV es la emisión de InGaN como se muestra en la **Tabla 5-20**.

Tabla 5-20 Concentración de Indio estimada de la emisión de PL

M566-PL	E (eV)	X (concentración %)
	2.244	27.07

Desafortunadamente, para esta muestra, no contamos con una medición de XRD, por lo cual no tenemos un margen de error para la concentración, por lo que concluimos que se tiene una posible emisión en 2.244 eV (552 nm) para una concentración de 27.07% de InGaN en fase cúbica, aclarando, que, para esta muestra, a simple vista, la emisión de los defectos predomina sobre el color de emisión de InGaN.

5.3.8 Luminiscencia, concentración y condiciones de crecimiento

Al relacionar las condiciones de crecimiento con el band gap y las concentraciones que se obtuvieron, estos valores lo reportamos en la siguiente tabla, lo valores son las estimaciones experimentales de la concentración obtenida de XRD, esto es mediante el cálculo de la constante de red del InGaN y usando Ley de Vegard para obtener el valor de la concentración a partir de la constante de red calculada. En el caso de la Energía del gap es la emisión de PL, esto lo podemos obtener del hecho de que se reporta que para temperatura ambiente la emisión es dominada por la excitónica, lo comprobamos al comparar la emisión de la muestra 540 la cual es únicamente GaN que es de 3.236 y 3.400 para la fase cúbica y hexagonal respectivamente, los cuales corresponde a los reportados en la literatura [50].

Tabla 5-21 Comparación de los valores de concentración y emisión de las muestras con respecto a sus condiciones de crecimiento. *valor que corresponden a h-InGaN

Muestra	T _{sus} [C]	T _{in} [C]	In (XRD)	E _g (PL)
545	630	560	25.5	2.295
546	620	560	13.86	2.697
547	640	560	21.5*	2.382*
566	660	575	---	2.244

Tenemos que la condiciones son apropiadas para el crecimiento de InGaN con emisión en la región verde del espectro. Se tiene que se incrementa las concentraciones In al aumentar la temperatura de la celda de In como se espera. Y que la temperatura del sustrato también juega un papel importante para la incorporación de In de manera uniforme en el sustrato. Se tiene también que para concentraciones que rondan el 25% de In si no se tiene una temperatura adecuada del sustrato se puede llegar a la formación de clusters de In lo cual baja la concentración en el film que es lo que creemos es el causante de una menor incorporación de In en la película 546, si aumentamos la temperatura de la misma se induce una fase hexagonal como en la 547.

Al final tenemos que se consiguió con éxito el crecer películas de InGaN para la emisión en la región verde del espectro electromagnético

6 CONCLUSIONES

Se obtuvieron películas de InGaN sobre sustratos de GaAs con concentraciones de 21 a 27% cuya emisión está en la región Azul – verde, cuyas emisiones se encontraron a partir de las técnicas de PR, PL, XRD y R. Se tiene los parámetros de crecimiento y con esto se abre la posibilidad de utilizar este material en fase cúbica para aplicaciones optoelectrónicas en este rango de longitudes de onda.

Notamos en las muestras m545, m546 y m566 la presencia de emisión de defectos no deseados, para posibles futuras muestras quizás un pequeño dopaje de las mismas reduzca esta emisión de defectos y ayude a obtener una emisión más definida en el espectro deseado.

Encontramos que, en algunos casos, la reflectancia de la muestra puede cambiar por completo el espectro de fotoluminiscencia, y puede sumar emisiones que no son reales, como en el caso de la muestra m546, en la cual encontramos el patrón de interferencia y aproximamos un espectro “real” de la misma para la emisión de fotoluminiscencia.

En el caso de la muestra m547, tenemos que buscar a detalles para estudios posteriores, que condiciones de crecimiento causaron la presencia del InGaN hexagonal, ya que dicha muestra también presenta separación de fase sería interesante ver que condición es la causa de la misma, aun, cuando no se obtuvo la fase deseada, la muestra m547 muestra una clara emisión en la región verde.

Los resultados obtenidos nos permiten concluir que el objetivo de la tesis se cumplió de manera exitosa. Se deberán realizar algunas mediciones complementarias que nos ayudaran a sustentar los datos que se obtuvieron y que permitirán continuar la investigación en este tipo de materiales que son tan promisorios para dispositivos optoelectrónicos.

7 REFERENCIAS

- 1.- Johnson, W. C., Parson, J. B., & Crew, M. C. (2002). Nitrogen compounds of gallium. iii. *The journal of physical chemistry*, 36(10), 2651-2654.
- 2.- Maruska, H. P., & Tietjen, J. J. (1969). The preparation and properties of vapor-deposited single-crystal-line GaN. *Applied Physics Letters*, 15(10), 327-329.
- 3.- J. I. Pankove, E. A. Miller, D. Richman et al. (1971), Electroluminescence in GaN. *Journal of Luminescence* 4(1), 63-66.
- 4.- Amano, H., Sawaki, N., Akasaki, I., & Toyoda, Y. (1986). Metalorganic vapor phase epitaxial growth of a high quality GaN film using an AlN buffer layer. *Applied Physics Letters*, 48(5), 353-355.
- 5.- Nakamura, S. (1991). GaN growth using GaN buffer layer. *Japanese Journal of Applied Physics*, 30(10A), L1705.
- 6.- Glembocki, O. J., & Shanabrook, B. V. (1992). Photoreflectance spectroscopy of microstructures. *Semiconductors and Semimetals*, 36, 221-292.
- 7.- Nakamura, S. (1998). The roles of structural imperfections in InGaN-based blue light-emitting diodes and laser diodes. *Science*, 281(5379), 956-961.
- 8.- Robert L. Boylestad and Louis Nashelsky, (1997) *Electrónica: Teoría de Circuitos*, Sexta edición ed. USA: Pearson education.
- 9.- Kittel, C., McEuen, P., & McEuen, P. (1996). *Introduction to solid state physics* (Vol. 8, pp. 105-130). New York: Wiley.
- 10.- Cardona, M., & Peter, Y. Y. (2005). *Fundamentals of semiconductors* (Vol. 619). Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- 11.- García, V. C., Hinostroza, I. O., Echavarría, A. E., Luna, E. L., Rodríguez, A. G., & Vidal, M. A. (2015). Bulk lattice parameter and band gap of cubic In_xGa_{1-x}N (001) alloys on MgO (100) substrates. *Journal of Crystal Growth*, 418, 120-125.

- 12.-** Suzuki, M., Uenoyama, T., & Yanase, A. (1995). First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN. *Physical Review B*, 52(11), 8132.
- 13.-** As, D. J., Richter, A., & Busch, J. (2000). *Optical and electrical properties of MBE grown cubic GaN/GaAs epilayers doped by Si [Molecular Beam Epitaxy]*. Univ. Paderborn (DE).
- 14.-** Nakamura, S., Senoh, M., Nagahama, S. I., Iwasa, N., Yamada, T., Matsushita, T., ... & Kiyoku, H. (1996). Room-temperature continuous-wave operation of InGaN multi-quantum-well structure laser diodes. *Applied Physics Letters*, 69(26), 4056-4058.
- 15.-** Herman, M. A., & Sitter, H. (1989). Sources of atomic and molecular beams. In *Molecular Beam Epitaxy* (pp. 29-72). Springer, Berlin, Heidelberg.
- 16.-** Pelant, I., & Valenta, J. (2012). *Luminescence spectroscopy of semiconductors*. Oxford University Press.
- 17.-** Pankove, J. I. (1975). *Optical processes in semiconductors*. Courier Corporation.
- 18.-** Bebb, H. B., & Williams, E. W. (1972). Semiconductors and Semimetals. *Academic Press, New York*, 8(181), S8.
- 19.-** Kittel, C. (1976). *Introduction to Solid State Physics*, 5th edn. John Wiley, New York.
- 20.-** Saleh, B. E., & Teich, M. C. (1991). Electromagnetic optics. *Fundamentals of photonics*, 157-191.
- 21.-** Jiménez, F. N., Hernández, C. V., & Jurado, J. F. (2008). La técnica de fotorreflectancia para analizar propiedades ópticas y mecánicas de muestras semiconductoras. *Scientia et technica*, 2(39).
- 22.-** Seraphin, B. O., & Bottka, N. (1966). Band-structure analysis from electro-reflectance studies. *Physical Review*, 145(2), 628.
- 23.-** Rheinhardt Hendrik Sieberhagen, (2002). Optical characterization of semiconductors using photo reflection spectroscopy, Tesis ed.: Faculty of Natural and Agricultural Sciences. University of Pretoria.

- 24.-** Aspnes, D. E. (1972). Direct verification of the third-derivative nature of electroreflectance spectra. *Physical Review Letters*, 28(3), 168.
- 25.-** Gay, J. G., & Klauder Jr, L. T. (1968). Mechanism for the Photoreflectance Effect. *Physical Review*, 172(3), 811.
- 26.-** Nilsson, N. G. (1969). Reflectance modulation in Ge and GaAs by optical carrier injection. *Solid State Communications*, 7(5), 479-481.
- 27.-** Aspnes, D. E. (1970). Dependence of photoreflectance on space charge electric fields in Ge. *Solid State Communications*, 8(4), 267-270.
- 28.-** Cerdeira, F., & Cardona, M. (1969). Photoreflectance and electroreflectance in silicon. *Solid State Communications*, 7(12), 879-882.
- 29.-** Willardson, R. K., Weber, E. R., Beer, A. C., Littler, C. L., & Seiler, D. G. (1992). *The spectroscopy of semiconductors*. Academic Press.
- 30.-** LabVIEW 2017. National Instruments USA (2017).
- 31.-** Kitamura, T., Cho, S. H., Ishida, Y., Ide, T., Shen, X. Q., Nakanishi, H., ... & Okumura, H. (2001). Growth and characterization of cubic InGaN epilayers on 3C-SiC by RF MBE. *Journal of crystal growth*, 227, 471-475.
- 32.-** MATLAB. Natick, Massachusetts USA: MathWorks y Cleve Moler, (2017).
- 33.-** Davydov, V. Y., Klochikhin, A. A., Emtsev, V. V., Kurdyukov, D. A., Ivanov, S. V., Vekshin, V. A., ... & Haller, E. E. (2002). Band gap of hexagonal InN and InGaN alloys. *physica status solidi (b)*, 234(3), 787-795.
- 34.-** Orsal, G., El Gmili, Y., Fressengeas, N., Streque, J., Djerboub, R., Moudakir, T., ... & Salvestrini, J. P. (2014). Bandgap energy bowing parameter of strained and relaxed InGaN layers. *Optical Materials Express*, 4(5), 1030-1041.
- 35.-** Mahajan, S. (2014). Phase separation and atomic ordering in mixed III nitride layers. *Scripta Materialia*, 75, 1-5.

- 36.-**Teles, L. K., Marques, M., Scolfaro, L. M. R., Leite, J. R., & Ferreira, L. G. (2004). Phase separation and ordering in group-III nitride alloys. *Brazilian journal of physics*, *34*, 593-597.
- 37.-** Cho, H. K., Lee, J. Y., Kim, C. S., & Yang, G. M. (2001). Structural and optical investigation of InGaN/GaN multiple quantum well structures with various indium compositions. *Journal of electronic materials*, *30*(10), 1348-1352.
- 38.-** Chen, Y. S., Liao, C. H., Kuo, C. T., Tsiang, R. C. C., & Wang, H. C. (2014). Indium droplet formation in InGaN thin films with single and double heterojunctions prepared by MOCVD. *Nanoscale research letters*, *9*(1), 1-12.
- 39.-** Hartono, H., Chen, P., Chua, S. J., & Fitzgerald, E. A. (2007). Growth of InN and its effect on InGaN epilayer by metalorganic chemical vapor deposition. *Thin Solid Films*, *515*(10), 4408-4411.
- 40.-** Chen, Y. S., Liao, C. H., Kuo, C. T., Tsiang, R. C. C., & Wang, H. C. (2014). Indium droplet formation in InGaN thin films with single and double heterojunctions prepared by MOCVD. *Nanoscale research letters*, *9*(1), 1-12.
- 41.-** Yam, F. K., & Hassan, Z. (2008). InGaN: An overview of the growth kinetics, physical properties and emission mechanisms. *Superlattices and Microstructures*, *43*(1), 1-23.
- 42.-** Levinshtein, M. E., Rumyantsev, S. L., & Shur, M. S. (Eds.). (2001). *Properties of Advanced Semiconductor Materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. John Wiley & Sons.
- 43.-** Menniger, J., Jahn, U., Brandt, O., Yang, H., & Ploog, K. (1996). Optical transitions in cubic GaN investigated by spatially resolved cathodoluminescence. *Applied physics letters*, *69*(6), 836-838.
- 44.-** Reshchikov, M. A., & Morkoç, H. (2005). Luminescence properties of defects in GaN. *Journal of applied physics*, *97*(6), 5-19.
- 45.-** Wang, Y. L., Chen, K. Y., Yang, W. C., Chiu, S. Y., & Cheng, K. Y. (2014). Semiempirical method of suppressing interference effects in photoluminescence spectra of GaN heterostructures. *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena*, *32*(2), 02C107.

- 46.-** Holm, R. T., McKnight, S. W., Palik, E. D., & Lukosz, W. (1982). Interference effects in luminescence studies of thin films. *Applied optics*, 21(14), 2512-2519.
- 47.-** Larsen, J. K., Li, S. Y., Scragg, J. J. S., Ren, Y., Hägglund, C., Heinemann, M. D., ... & Platzer-Björkman, C. (2015). Interference effects in photoluminescence spectra of Cu₂ZnSnS₄ and Cu (In, Ga) Se₂ thin films. *Journal of Applied Physics*, 118(3), 035307.
- 48.-** Reshchikov, M. A., Morkoç, H., Park, S. S., & Lee, K. Y. (2001). Yellow and green luminescence in a freestanding GaN template. *Applied Physics Letters*, 78(20), 3041-3043.
- 49.-** Dingle, R., & Ilegems, M. (1971). Donor-acceptor pair recombination in GaN. *Solid State Communications*, 9(3), 175-180.
- 50.-** Xu, D., Yang, H., Li, J. B., Zhao, D. G., Li, S. F., Zhuang, S. M., ... & Li, G. H. (2000). Optical characterization of high-purity cubic GaN grown on GaAs (001) substrate by metalorganic chemical vapor deposition. *Applied Physics Letters*, 76(21), 3025-3027.