

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSI

# FACULTAD DE CIENCIAS

# SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ALEACIONES DE a-Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x</sub>:H(Er)

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

# **MAESTRO EN**

**CIENCIAS APLICADAS** 

PRESENTA:

GERARDO HERNÁNDEZ SOSA

**ASESORES DE TESIS:** 

DR. ANGEL GABRIEL RODRIGUEZ VAZQUEZ DR. MIGUEL ANGEL VIDAL BORBOLLA

SAN LUIS POTOSI, S. L. P. JUNIO 2005



INSTITUTO DE INVESTIGACION EN COMUNICACION OFTICA EX LIBIOS FHELIOTECA

# TES140

7,12, 1-14<u>5</u>

•



# UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSI

# FACULTAD DE CIENCIAS



Ing. Gerardo Hernández Sosa

SINODALES:

Dr. Ángel Gabriel Rodríguez Vázquez (Asesor)

Dr. Miguel Ángel Vidal Borbolla (Asesor)

Dr. Francisco Javier De Anda Salazar

Dr. Hugo Ricardo Navarro Contreras

SAN LUIS POTOSI, S.L.P. JUNIO 2005

Lo importante es no dejar de hacerse preguntas.

A. Einstein

A mis Padres y hermanita Gaby.

A mi abuelita Leonor

A la memoria de mis abuelitos:

José Guadalupe Sosa,

Laureano Hernández,

y mi muy extrañada abuelita Margarita.

#### Agradecimientos

Agradezco a mis padres la formación, educación, el ejemplo que me han dado y por el apoyo que se siempre recibiré incondicionalmente. Estoy muy orgulloso de que sean mis padres.

Agradezco a mis asesores Dr. Ángel Gabriel Rodríguez y Dr. Miguel Ángel Vidal por su paciencia y ayuda para realizar este trabajo y las horas en los salones de clase en la facultad de ciencias, pero principalmente por su amistad. También les agradezco el haberme enseñado con su ejemplo como investigadores. Lo que les he aprendido me servirá para mi formación como investigador. Agradezco al Dr. Hugo Navarro por su interés y comentarios sobre mi trabajo, además por haber sido mi profesor en ingeniería física. Mi admiración y respeto para ustedes tres.

Muchas gracias por los buenos ratos a mis compañeros de maestría Macrina Calixto y mi buen amigo Víctor Hugo Compean. A Irving Paúl Vargas por su ayuda en los laboratorios de PL y rayos x.

A mis amigos Aldo López, Paco Moncada y Rafique Ahmed, que aunque los frecuento menos se que siempre tengo su apoyo y amistad.

Y muchísimas gracias a mi mejor amiga Andrea Navarro por que caminando codo a codo somos mucho más que dos.

También agradezco a CONACYT por la beca que me brindó para la realización de mis estudios de maestría.

Gerardo Hernández Sosa, Agradecido.

## INDICE

Resumen		1
Capítulo 1.	Introducción	3
	1.1. Objetivo	3
	1.2. Introducción	3
Capítulo 2.	Sistemas de Crecimiento y	
	Caracterización	6
	2.1. Sistema de Erosión	
	Catódica	6
	2.2. Espectroscopia Raman	8
	<b>2.3.</b> Transmisión Óptica	9
	2.4. Fotoluminiscencia	9
Capítulo 3.	Discusión y resultados	13
	<b>3.1.</b> Crecimiento de a-Si	13
	<b>3.2.</b> Crecimiento de a-Ge	17
	<b>3.3</b> Aleaciones a-Si <sub>*</sub> Ge <sub>**</sub> :H (Er)	19
	3.3.1 Caracterización de las aleaciones	20
	a-Si <sub>2</sub> Ge <sub>14</sub> :H (Er) como fueror depositadas.	
	- Transmisión Óptica y anchos de banda	20
	- Espectroscopia Raman	24
	<b>3.3.2</b> Caracterización de las aleaciones	
	a-Si*Ge**:H(Er) después de los tratamientos térmicos.	28
	- Transmisión Óptica y Anchos de Banda	28
	- Espectroscopia Raman	32
	- Fotoluminiscencia.	34
Capítulo 4.	Conclusiones	39
Apéndice A		41
Apéndice B		44
Referencias		46

#### Resumen

En este trabajo se presentan las condiciones adecuadas para obtener un material amorfo en aleaciones de Si y Ge hidrogenadas e impurificadas con Er mediante la técnica de RF-Sputtering. Los crecimientos se llevaron acabo a 250 °C sobre vidrio corning. Las concentraciones que se utilizaron fueron SionGeora, SionGeora y SionGeora y se vario el porcentaje de hidrógeno en la atmósfera de crecimiento desde 0 hasta 10.4%. Las películas se sometieron a dos tratamientos de recocido durante dos sesiones de 30 minutos a 300 °C. Además, se caracterizaron por transmisión óptica, fotoluminiscencia y espectroscopía Raman, antes y después de cada tratamiento térmico.

Para cada concentración se estudia el efecto de la hidrogenación, así como de la incorporación de Er en el comportamiento del ancho de banda prohibido de las aleaciones. Así mismo se estudia la posición y FHWM del pico del fonón TO de Ge en función de la hidrogenación y los tratamientos de recocido. Los resultados arrojados por estas dos técnicas dan pruebas de que el contenido de Er en las películas es excesivo, por lo que no se obtuvo luminiscencia del Er en su línea de emisión más importante de 1.54 micrómetros sin embargo, se encontraron indicios de la luminiscencia de su tercer nivel excitado.

# Capítulo 1: Objetivo e Introducción.

#### 1. Objetivo e Introducción.

#### 1.1. Objetivo del Trabajo.

Determinar las condiciones óptimas para el crecimiento de a-Si-Ge--:H(Er) por erosión catódica, utilizando como técnicas de caracterización la espectroscopia Raman y transmisión óptica.

#### 1.2 Introducción.

Los semiconductores amorfos han sido objeto de estudio desde hace ya varios años [1]. Sin dudar, uno de los más estudiados ha sido el silicio amorfo hidrogenado como base para dispositivos opto-electrónicos (ejemplo: celdas solares), así como sus aleaciones con diferentes materiales como Ge o C [2-4].

Es sabido que el Er introducido en una matriz sólida y bajo las condiciones adecuadas produce luminiscencia con longitud de onda de 1.54 micras. la cual coincide con el mínimo de absorción de las fibras ópticas utilizadas en la comunicación óptica actual [5,6]. El Er ya ha sido incorporado exitosamente en dispositivos a base de GaAs [7]. Sin embargo, la gran mayoría de la electrónica se fabrica con silicio, por esta razón sería muy deseable incorporarlo a dispositivos a base de éste y obtener uno que emitiera de manera intensa en 1.54 micras. Además de que una característica deseable para algunas aplicaciones en comunicación óptica es un dispositivo con alta velocidad de respuesta, característica que cumplen las aleaciones de Si<sub>1</sub>, Ge, pero que es limitada en el silicio amorfo [8].

Distintos trabajos se han realizado donde se observa ésta transición luminiscente en 1.54 micrómetros al impurificar Si amorfo hidrogenado o SiO: con Er, mostrando en todos los casos una baja atenuación con respecto a la temperatura [9, 10,12]. Usualmente esta impurificación se hace mediante la técnica de implantación de iones. Se ha observado que para optimizar y generar las condiciones adecuadas para la activación de la luminiscencia del ión Er-s se utilizan tratamientos de recocido después de la deposición e impurificación de las películas [10-12]. Esto provoca que el ión de Er se coloque en una posición adecuada con respecto a alguna impureza electronegativa, comúnmente oxigeno, que permiten que la transición entre los niveles atómicos que producen la luminiscencia en 1.54 micrómetros sea más eficiente. Una propuesta para explicar este fenómeno se presenta en la ref. 11.

Actualmente no existen trabajos que hayan logrado la síntesis de estas aleaciones donde el Er sea co-depositado junto con la matriz amorfa, lo que a diferencia de la implantación de iones resultaría en una distribución más uniforme de la impureza y de mayor accesibilidad tecnológica.

En este trabajo se estudia el crecimiento del sistema a-Si-Ge.-H(Er) mediante rfsputtering co-depositando la impureza (Er) con la matriz amorfa con el fin de encontrar las condiciones óptimas para su síntesis. Se estudia el efecto de la hidrogenación en dícha aleación mediante espectroscopias ópticas como transmitancia y Raman, además de fotoluminiscencia. Se estudia también el efecto de dos tratamientos térmicos tanto en el ancho de banda como en la estructura del material.

La tesis se encuentra dividida en cuatro capítulos. En el segundo capítulo se mencionan brevemente las técnicas usadas para la síntesis y caracterización de las películas. En el tercer capítulo se presentan y discuten los resultados obtenidos antes y después de ser recocidas. El contenido del cuarto capítulo muestra las conclusiones obtenidas del trabajo experimental. Y por último, en el apéndice se presentan algunos procedimientos que se usaron para el procesamiento e interpretación de las mediciones obtenidas.

- 4 -

# Capítulo 2: Descripción de Sistemas de Crecimiento y Caracterización.

#### 2. Sistemas de Caracterización y Crecimiento.

#### 2.1 Sistema de Pulverización Catódica con Magnetrón.

El sistema escogido para llevar a cabo este proyecto de tesis, es el sistema de pulverización catódica con magnetrón o sputtering. Ya ha sido demostrado que este tipo de sistemas es idóneo para la síntesis de materiales amotfos debido a que es un sistema que trabaja fuera del equilibrio termodinámico. El utilizar potencias elevadas de pulverización, (más de 100W), ocasiona que el material sintetizado resulte desordenado y con mayor numero de defectos internos, que usando potencias de rf menores o alguna otra técnica más sofisticada. En nuestro caso estas características son muy favorables ya que favorecen la formación de los materiales amorfos.

La técnica de pulverización con magnetrón se basa en el proceso de bombardear un material con partículas de energía adecuada, para ocasionar que las partículas del material bombardeado escapen de su superficie. Este proceso es conocido como Sputtering, donde el blanco (superficie a pulverizar) se coloca como cátodo en un circuito eléctrico para que colisionen partículas cargadas y el subestrato se coloca en el ánodo donde se depositarán las partículas pulverizadas. Las partículas pulverizadoras son comúnmente iones de Argón que son producidos al establecer un plasma, y que serán fácilmente acelerables por un campo eléctrico de o de radio frecuencia (rf), además que prácticamente no reaccionan con el blanco.

En el caso en el que se pulverizan blancos semiconductores se les aplica un voltaje rf y no de para evitar que el plasma se extinga por la acumulación de carga positiva en la superficie del material. Esto sucede debido a que los iones de Argón (Ar·) se neutralizan en la superficie del semiconductor y le quitan electrones cargándolo positivamente y por consecuencia los iones no serán atraídos por el blanco. Debido a la aplicación de un voltaje rf, el blanco cambia su papel de cátodo-ánodo cada medio ciclo y solo se pulveriza material durante el tiempo que funciona como cátodo. Esto se soluciona al conectar una caja de ajuste de impedancias entre el blanco y la fuente rf para que la pulverización se efectúe

- 6 -

durante el mayor tiempo posible ya que la transferencia de potencia hacia el plasma será máxima.

Al añadir magnetos detrás del cátodo se superpone un campo magnético que junto con el potencial de polarización confinaran a los electrones del plasma. Esto produce un aumento en las colisiones de los electrones y las moléculas del gas de pulverización, ocasionando una disminución en la presión de éste. Esta disminución de presión del gas permitirá que las partículas pulverizadas atraviesen el espacio con menos colisiones hasta llegar a depositarse en el subestrato.



Figura 2.1 Diagrama del sistema de pulverización catódica con magnetrón

El diagrama del sistema de pulverización con magnetrón que se utilizó en este trabajo se presenta en la figura 2.1. Consta de una cámara de vacío donde se encuentran tres blancos de 10 cm enfriados con agua para evitar que se sobrecalienten y se estrellen. En los blancos de germanio y silicio se utiliza polarización rf y en el blanco de erbio polarización dc. Tiene también dos entradas para gas una para argón, que se utiliza como gas de pulverización y otra para hidrógeno.

## 2.2 Espectroscopia Raman

La espectroscopia Raman se utiliza como un método para el estudio estructural de los materiales además de ser también sensible a la composición química de estos. Esta espectroscopia se basa en el fenómeno de la dispersión de la luz incidente en un material provocada por su estructura cristalina particular. La dispersión de la luz se separa principalmente en tres casos: Raleigh, Stokes o Anti-Stokes. La dispersión Raleigh es la que se lleva a cabo sin cambio de frecuencia, mientras que en la dispersión Stokes y Anti-Stokes se presenta una interacción entre la luz incidente y los modos vibracionales del material, lo cual resulta en un cambio de frecuencia del haz de salida con respecto al de incidencia.



Figura 2.2 Diagrama de Espectrómetro Raman.

Las mediciones se llevaron a cabo a temperatura ambiente en un espectrómetro triple marca Jobin-Yvon T64000. Se usó como detector un charge coupled device (CCD) multicanal enfriado a 140 K mediante nitrógeno líquido. Como fuente de luz se uso un láser verde de Argón que tiene como línea principal de emisión 514.5 nm. El haz incide normal a la superficie de la muestra, enfocado con un microscopio utilizando una amplificación de 50x y una apertura numérica de 0.9. La calibración de la escala espectral absoluta se logra al tomar como referencia el fonón de un sustrato de Si que se presenta en 521 cm<sup>4</sup>. La potencia del láser es escogida de tal forma que nos asegure que la muestra no sufra ningún tipo de degradación debido al calentamiento. En la figura 2.2 se muestra un diagrama del equipo usado.

#### 2.3 Medición de Transmisión Óptica.

Las mediciones de transmitancia se llevaron a cabo en un espectrómetro Cary 5. La finalidad de obtener estas mediciones es para procesarlas y encontrar las constantes ópticas de un material como el índice de refracción, el ancho de banda o incluso su espesor.

Este espectrómetro puede medir en longitudes de onda que van desde el cercano infrarrojo hasta el ultravioleta es decir, de 3300 a 175 nm. Las fuentes de luz son una fuente de filamento incandescente para las longitudes de onda visible e infrarroja y una fuente UV.

Este aparato se sirve de 2 haces de luz para tomar una medición. El primero pasa por la muestra y después al detector y el segundo incide directamente al detector, esto le permite comparar los haces y realizar una normalización más efectiva.

#### 2.4 Fotoluminiscencia.

Al fenómeno de emisión de luz que presenta un material se le llama luminiscencia. Cuando la radiación se produce por consecuencia de la excitación óptica del material, se

- 9 -

denomina fotoluminiscencia. Para analizar este fenómeno se toma en cuenta principalmente la intensidad, la composición espectral, la polarización y coherencia de la luz emitida.

En los semiconductores se producen tres tipos de fotoluminiscencia: monomolecular, metaestable y de recombinación. La monomolecular y la metaestable aparecen cuando la absorción y la emisión se producen dentro del centro de un átomo de impureza. La radiación de recombinación, como su nombre lo dice, se produce por la recombinación de un electrón con un hueco directamente o por un centro de recombinación que actúe como centro emisor.

Estos mecanismos se producen tanto en semiconductores directos o indirectos. La recombinación electrón-hueco se puede dar entre las bandas de conducción y valencia (que es el principal mecanismo de emisión de luz en semiconductores amorfos) o con estados aceptores o donadores. Sin embargo, las transiciones de un estado de mayor energía a otro de menor pueden darse mediante estados intermedios que no necesariamente son radiativos.



Figura 2.3 Arreglo experimental del sistema de fotoluminiscencia.

El arreglo experimental que se utilizó para llevar a cabo las mediciones de fotoluminiscencia se muestra en la figura 2.3. La fuente de excitación es un láser de He-Ne de 632.8 nm y 30 mW de potencia el cual se hace incidir a la muestra mediante un espejo y un lente para enfocar. La radiación emitida por la muestra se recoge con un lente colimador que dirige la luz hacia el lente que enfoca la luz en el monocromador. Este monocromador tiene una longitud focal de 0.5 m y utiliza una rejilla de 600 líneas/mm optimizada a 1.5 micrómetros. A la salida del monocromador se encuentra un detector de germanio enfriado por nitrógeno líquido, el cual convierte la señal óptica en electrónica y la envía al amplificador lock-in. El amplificador lock-in se sintonizó a 200 Hz, frecuencia a la cual se trocea el haz del láser. Para evitar que la luz del láser apareciera en la señal de salida, se utilizaron: un filtro interferencial de 633 nm a la salida del láser y un filtro long pass de 665 nm o 1000 nm dependiendo de la región a medir.

Capítulo 3: Discusión y Resultados.

#### 3. Resultados y Discusión.

#### 3.1 Crecimiento de a-Si

Como primera etapa se optó por sintetizar películas de silicio y germanio amorfo por separado, con la finalidad de encontrar sus condiciones óptimas de crecimiento sobre vidrio corning y sentar las bases para la obtención de su aleación. Para caracterizar las películas estructuralmente se uso espectroscopia Raman y para la caracterización óptica transmitancia, con la que se determinó el ancho de banda y el espesor de la película crecida. El procedimiento general de preparado de las películas es el siguiente: se introduce a la cámara un flujo de argón de 45 sccm y el flujo deseado de hidrógeno, manteniendo una presión de crecimiento constante de 2x10<sup>2</sup> mbar, después se calienta el sustrato de aproximadamente 1 cm<sup>2</sup> a la temperatura de crecimiento, éste se limpia previamente utilizando un tratamiento de tres baños ultrasónicos de 5 minutos en acetona, metanol y agua desionizada. Se espera 10 minutos a que se estabilice y se enciende el plasma para empezar a depositar los materiales.



Gráfica 3.1 Espectro Raman para dos temperaturas de crecimiento distintas.

Primero se hicieron un par de crecimientos de silicio a 250°C y 300°C y su espectro Raman se presenta en la grafica 3.1. Se puede observar que para la muestra crecida a 250 °C aparece el fonón transversal óptico (TO) en 480 cm<sup>4</sup> y el transversal acústico (TA) en 300 cm<sup>4</sup> [13].Para la muestra a 300°C se observa que el TO se recorrió hacia la derecha lo que nos indica que no es amorfo sino policristalino ya que el fonón TO del silicio cristalino se encuentra en 521 cm<sup>4</sup>, además que el fonón TA no se alcanza a distinguir.

Tomando la temperatura de 250 °C como adecuada para la síntesis de silicio amorfo se procedió a crecer muestras a diferentes potencias y variando el flujo de hidrógeno. En la gráfica 3.2 se muestran los espectros Raman de la serie de películas obtenidas a 250 watts. Se puede observar que, sin importar la cantidad de hidrógeno, el fonón TO permanece en la misma posición y en algunas muestras se alcanza a distinguir el fonón LA (300 cm<sup>-</sup>) estas características nos demuestran que las películas son amorfas. En al tabla 3.1 se muestran los valores de los fonones de Si y Ge para su fase amorfa y cristalina.



Gráfica 3.2. Espectro Raman de la serie a 250 watts

Elemento	Amorto	Cristalino
Si	480 cm <sup>2</sup>	521 cm
Ge	270 cm <sup>-1</sup>	301 cm <sup>1</sup>

Tabla 3.1. Fonones TO para Ge y Si.

Un aspecto a notar en esta gráfica es que la intensidad del espectro aumenta al subir el flujo de hidrógeno. Esto se debe a que se presenta dispersión Raleigh (sin cambio de frecuencia) que se atenúa menos cuando el ancho de banda del material aumenta al incrementar el hidrógeno.

A continuación se muestra un espectro de transmitancia típico que se presentó en las mediciones de estas películas. En éste se observa la región de interferencia y la región de fuerte absorción, las cuales, utilizando la metodología de Swanepoel nos permiten obtener el ancho de banda, el espesor y el índice de refracción de las muestras [14]. Un resumen de esta metodología se presenta en el apéndice A.



Gráfica 3.3. Espectro de transmitancia

El ancho de banda obtenido para películas de a-Si a dos diferentes potencias se presenta en la gráfica 3.4. A una misma potencia, el ancho de banda aumenta al incrementar el hidrógeno, esto se debe a que el hidrógeno ocupa los enlaces sueltos que se presentan en los materiales amorfos y por lo tanto disminuye el número de estados dentro de la brecha prohibida. Así, al incluir más hidrógeno en la atmósfera de crecimiento más enlaces sueltos del material son ocupados y el ancho de banda aumenta. Se observa que para 250 watts los anchos de banda fueron menores que los de las películas crecidas a 200 watts para un mismo flujo de hidrógeno, debido a que los átomos del material pulverizado alcanzan el sustrato con mayor energía, lo que induce más enlaces sueltos.

Los valores de los anchos de banda prohibidos para las películas de a-Si se encontraron desde 1.4 eV a 1.9 eV para las muestras obtenidas a 250 watts y de 1.6 eV a 2.2 eV para las crecidas a 200 watts.



Gráfica 3.4. Anchos de banda de las películas de a-Si.

## 3.2 Crecimiento de a-Ge.

Para la síntesis de germanio amorfo se utilizó también la tempetatura de 250°C. De la misma manera que para el a-Si se sintetizaron películas de a-Ge a diferentes potencias y flujos de hidrógeno con el fin de encontrar su razón de crecimiento. Para corroborar que las películas fueran amorfas se les realizo espectroscopia Raman y los resultados para la serie de 200 watts se muestran en la gráfica 3.5. Se observa claramente un pico en 270 cm<sup>-</sup>, el cual corresponde al del fonón TO para el germanio amorfo (ver tabla 3.1) [15]. Se puede notar también que la posición de este pico no se afecta con la incorporación de hidrógeno.



Gráfica 3.5. Espectros Raman de las muestras de a-Ge 200 watts

Los valores del ancho de banda para estas películas de Ge amorfo se muestran en la siguiente figura. Estos se obtuvieron de al medir la transmisión óptica de la película y analizarla con la metodología de Swanepoel .Se observa también que al disminuir la

potencia en el blanco se aumenta el ancho de banda lo que se atribuye también a la energía con la que alcanzan los átomos el sustrato.



Gráfica 3.6. Anchos de banda de las muestras de a-Ge:[-]

En la gráfica 3.7 se muestran las razones de crecimiento de las películas de a-Si (puncos sólidos) y a-Ge (puntos huecos), las cuales se obtienen al dividir el espesor obtenido por el método de Swanepoel entre el tiempo de crecimiento. Se realizaron dos series de crecimientos extras de a-Ge, a 75 y 50 W, para empatar las razones de crecimiento del silicio. Esto con la finalidad de poder tener más control en las concentraciones al momento de sintetizar una aleación, ya que la razón de crecimiento del Ge era casí tres veces mayor para potencias similares. Con los datos de las razones de crecimiento y los anchos de banda de las películas de a-Si y a-Ge se sentaron las bases para iniciar el crecimiento de aleaciones de estos dos materiales.





## 3.3 Aleaciones a-Si<sub>x</sub>Ge<sub>1x</sub>:H (Er)

Apoyados en los resultados de las razones de crecimiento de la películas de silicio y germanio amorfo se procedió a sintetizar cuatro series de aleaciones en las que se cambió el porcentaje de hidrógeno en la atmósfera de crecimiento de 0 a 10% aproximadamente.

Las concentraciones nominales de silicito y germanio para tres de estas series impurificadas con erbio fueron 0.75-0.25, 0.50-0.50 y 0.250.75 respectivamente para cada material. La cuarta serie se creció también al cincuenta por ciento pero no se impurificó. Los crecimientos se lograron utilizando un par de potencias que nos dieran una tazón de crecimiento muy similar y baja (algunos **Å** por segundo), quedando entonces como

parámetro libre el tiempo de exposición del sustrato en cada blanco. Las razones de los tiempos de exposición que se establecieron fueron 3seg/1seg para las aleaciones 0.75-0.25 y 3seg/3 seg para las de 50%.

La impurificación con Er se realizó a una potencia y tiempo de exposición constante de 20 watts y 0.5 segundos, respectivamente en cada crecimiento. Estos valores fueron escogidos por la mínima potencia a la que encendía el plasma y el mínimo tiempo controlable para obtener la impurificación más baja dejando las demás condiciones de crecimiento fijas, ya que la razón de deposición también se ve afectada por la presión de la cámara y la temperatura del sustrato.

#### 3.3.1 Caracterización de las aleaciones a-Si<sub>x</sub>Ge<sub>1x</sub>:H (Er) como fueron depositadas.

## -Transmitancia y Anchos de Banda.

En la figura 3.8 se muestran los espectros de transmitancia de la serie de muestras con concentración nominal de 50 % y que no contienen Er, se observa fácilmente el efecto de la hidrogenación, de abrir la brecha prohibida quitando estados dentro de ella. Esto se refleja en el hecho de que el material se vuelve más transparente al introducir hidrógeno como lo corroboran las transmitancias.

El mismo efecto se aprecia en la figura 3.9 con la serie de muestras al 50% que contiene erbio. Lo más interesente se presenta en el hecho de que en la región donde se midió, la transmitancia se reduce prácticamente a cero para la muestra de 0% de hidrógeno y después empieza a aumentar conforme se introduce más hidrógeno. Este efecto, que también presentan las otras dos series de muestras (ver figuras 3.10 y 3.11), puede explicarse considerando que la presencia del Er induce una mayor cantidad de enlaces sueltos a la matriz amorfa y también podría ser una prueba de que una cantidad muy grande de Er se está depositando en la aleación, lo que resulta en una película más metálica y con muy poca transmisión.



Gráfica 3.9. Espectros de transmitancia de la serie al 50% con Er.

Todos estos espectros de transmitancia fueron analizados por el procedimiento descrito en el apéndice A, desarrollado por R.Swanepoel para encontrar el ancho de banda prohibido. Los resultados obtenidos de estas cuatro series de muestras se presentan en la figura 3.12. Los anchos de banda de las muestras impurificadas con Er, de 0% de hidrógeno no se pudieron determinar debido a que se encuentran muy en el infrarrojo. Los otros puntos que no se presentan son los de las muestras de 10.4% de hidrógeno, en los que se tenía mucha incertidumbre pues el espectro de transmitancia del vidrio corning se traslapaba con el de la película en la región de fuerte absorción.



Gráfica 3.10. Espectros de transmitancia de la serie a-Si@Geos:H(Er).

Se observa que los anchos de banda obtenidos para la serie de muestras sin erbio (cuadros huecos) van desde 1.15 a 1.65 eV aproximadamente, mientras que para las muestras que contienen Er el rango aumenta desde 1 a 2.5 eV. Otro punto a notar es que los anchos de banda de la serie al 50% son menores que para cualquiera de las series con concentración de 0.25-0.75 sin importar cual es el elemento mayoritario. Una característica muy marcada para las muestras que contienen Er es que después del 4% de hidrógeno presentan un aumento súbito de los anchos de banda. Este salto no se origina debido a un cambio en las condiciones de crecimiento que se utilizaron en cada serie, ya que fueron completadas en su totalidad antes de crecer la siguiente.



Gráfica 3.11. Espectros de transmitancia de la serie a-Si "Ge ":H(Er).



Gráfica 3.12. Anchos de banda de las muestras sin recocer.

- Espectroscopia Raman.

Para conster como se encontraban estructuralmente las películas, se procedió a medir su espectro Raman.

En la gráfica 3.13 se presentan los espectros Raman de la serie que no contiene Er. Se observa que solo presentan un pico muy ancho en la posición del fonón TO de germanio, lo que nos indica que el material es amorfo sin importar que cantidad de hidrógeno contenga la muestra. Estas mediciones presentan una dispersión Raleigh muy grande que se hace más evidente cuando el gap de la película aumenta, lo que dificulta ver los picos.



Gráfica 3.13. Espectro Raman de la serie a-Si-Ge--:H.

Para analizar los espectros Raman de las tres series que contienen Er se utilizó una forma de línea basada en la propuesta por P.Parayanthal descrita en el apéndice B [16]. Para utilizar este procedimiento primero hubo que quitar de cada espectro el fondo Raleigh para tener mejores resultados.

Un efecto que se presento al incluir Er en las aleaciones es que tienden a cristalizarse a bajas cantidades de hidrógeno, conforme la concentración de H. aumenta, el fonón TO de Ge baja su energía hasta la de las oscilaciones Ge-Ge para el amorfo. Este fenómeno se aprecia claramente en la grafica 3.14 donde se presentan tres espectros de la serie a SiesGe s:H(Er), las líneas punteadas muestran las posiciones del fonón TO de Ge cuando es un material amorfo o cristalino.



Gráfica 3.14. Espectros Raman de muestras de la serie a SiesGerre H(Er).

En la tabla 3.2 se resumen los resultados de los espectros Raman de todas las series que contienen hidrógeno. La razón por la cual no se presentan los datos de las muestras que no contenían hidrógeno fue que no presentaron ningún pico de corrimiento Raman en el rango que medimos. Además, solo se presentan los resultados de las posiciones hasta el 4.2% de hidrógeno debido a que a partir de ahí es muy difícil separar la señal de la muestra del fondo Raleight, esto se ve reflejado en el hecho de que el error en la determinación del máximo del pico aumenta al incrementar el hidrógeno. Se puede ver de la tabla que para la serie de muestras con 75% de silicio la posición del pico TO prácticamente no cambia mientras que para las otras dos series se puede ver el cambio a partir de 2.59% de H. Esto nos indica que para asegurarnos de obtener una aleación de silicio-germano en su fase amorfa para estas dos concentraciones habría que establecer el porcentaje de hidrógeno en la mezcla con Ar al menos en 3.4%, mientras que para la composición de la serie SienGeos:H(Er) cualquier flujo mayor al 0.88% resultaría en un material amorfo.

% de H, en flujo	Posición del tonón TO de Ge (cm <sup>1</sup> )			Posición del fonón TO de Ge	
total	SimeGens:H(Er)	SinsoGenso:H(Er)	Sies-Georg:H(Er)		
0.88	260+/-2.5	273+/-1	284+/-1		
1.70	260+/-5	273.8+/-4	284+/-2.5		
2.59	258+/-5	263+/-5	271+/-1		
3.43	259+/-6	263+/- 5.5	271+/-3		
4.2		265+/-6			

Tabla 3.2. Posición del fonón TO de Ge para las muestras impurificadas con Er.

% de H₂ en flujo	FWHM del pico del fonón TO de Ge (cm <sup>3</sup> )		
total	Sio == Geo ==: H(Er)	SiosoGe so:H(Er)	Si "Ge "H(Er)
0.88	61+/-2.5	50+/-1	42+/-1
1.70	72+/-5	51+/-4	33+/-1
2.59	94+/-5	55+/-5	61+/-2.5
3.43	88+/-6	69+/-5.5	61+/-1
4.2		60+/-6	_

Tabla 3.3. FWHM del fonón TO de Ge para las muestras impurificadas con Er.

En la tabla 3.3 se muestran los anchos de los picos que se pudieron determinar. Estos muestran un comportamiento general de aumentar al incrementar el hidrógeno lo que nos indica que el material tiene más desorden en su estructura. 3.3.2 Caracterización de las aleaciones a-Si<sub>\*</sub>Ge<sub>1\*</sub>:H(Er) después de los tratamientos térmicos.

Los tratamientos térmicos son un procedimiento comúnmente utilizado para activar u optimizar la luminiscencia del ión Er<sup>e</sup> dentro de una matriz sólida. Estos tratamientos térmicos pueden tener consecuencias en las propiedades ópticas o estructurales del material. En esta sección se presentan los anchos de banda prohibido y los espectros Raman de las muestras sometidas dos tratamientos térmicos.

Los tratamientos térmicos se realizaron en un horno en el que las muestras se introducían dentro de un tubo de cuarzo al que se le hace fluir hidrógeno. La razón de hacer los tratamientos en atmósfera de hidrógeno fue para evitar la oxidación y compensar el hidrógeno que pudieran perder las películas al calentarse. El primer tratamiento constó de recocer las muestras durante 30 minutos a 300+/-5 °C, procedimiento que se repitió para el segundo tratamiento resultando en un recocido acumulativo de una hora.

Se escogió la temperatura de 300 °C debido a ser una de las consideradas óptimas, según la literatura, en películas crecidas a temperaturas alrededor de 250°C como en nuestro caso [10-12]. Además, está lejos de la temperatura a la que comienza a dañarse el vidrio corning (450°C), lo que nos podría destruir la muestra.

#### - Transmitancia y Anchos de Banda.

En la gráfica 3.15 se presenta una comparación de las transmitancias antes y después del primer tratamiento de recocido para la serie de muestras a-Si .-Ge--:H(Er). Se puede observar que después del tratamiento el espectro de transmitancia (líneas en rojo) se corren hacia menores longitudes de onda con respecto de las muestras que no tienen tratamiento térmico. Este efecto también se produce en todas las demás muestras después de recocerlas a excepción de la que no contiene hidrógeno que se quedan igual. En el trabajo de S.B.Aldabergenoba et al. sobre a-Si:H(Er) se reporta un corrimiento hacia el rojo al recocer la

- 28 -

muestra en atmósfera de nitrógeno a 350 °C, atribuido a que se libera hidrógeno que estaba débilmente ligado [11]. En nuestro trabajo se evita esto al recocer en atmósfera de H. pues se compensa cualquier salida de hidrógeno y el cambio en el la transmitancia y ancho de banda seria efecto del tratamiento térmico.



Gráfica 3.15. Transmitancia de la serie a-SiasGew:H(Er) con y sin tratamiento térmico.

En las figuras 3.16 y 3.17 se presentan los anchos de banda de cada una de las series de muestras después del primer y segundo recocido respectivamente, que se obtuvieron utilizando la metodología de Swanepoel. Se puede observar que los anchos de banda siguen el mismo comportamiento que antes del recocido es decir aumentan cuando se incrementa el hidrógeno. Así como también los anchos de banda de las series a-SiesGees:H(Er) y a-SiesGees:H(Er) son mayores que las de 50%.



Gráfica 3.16. Ancho de banda de las películas después del primer tratamiento térmico.

En las siguientes tres tablas se presentan los valores de los anchos de banda de todas las muestras para poder visualizar su evolución con los recocidos. Se observa en todos los casos un aumento después del primer recocido. Al recocer durante media hora mas, es decir, aplicar el segundo tratamiento de recocido, los anchos de banda no tienen un cambio sustancial con respecto a los que se obtuvieron después del primer tratamiento térmico, lo que nos indica que con un solo recocido se alcanzan todos los cambios estructurales que modifican el ancho de banda.



Gráfica 3.17. Anchos de banda de las muestras después del segundo recocido.

Los valores que faltan en las tablas 3.4, 3.5 y 3.6 se deben a que las transmitancias de esas muestras se traslapan con la del vidrio por lo que no es posible obtener un valor confiable del ancho de banda

% de H2 en el flujo	Ancho de banda de la serie a-SiozGeozz:H(Er) (eV)		
total	Sin tratamiento	30 min 300°C	1 hr 300°C
0.88	1.12	1.13	1.12
1.70	1.21	1.25	1.25
2.59	1.29	1.31	1.31
3.43	1.41	1.5	1.51
4.20	1.97	2.01	1.95
5.26	2.16	2.4	2.43
6.25	2.3	-	

Tabla 3.4. Anchos de banda de las muestras de la serie a-SiasGeos:H(Er).

% de H₂ en el flujo	Ancho de banda de la serie a-SiasoGeoso:H(Er) (eV)		
total	Sin tratamiento	30 min 300°C	1 hr 300°C
0.88	1	1.07	1.07
1.70	1.11	1.16	1.15
2.59	1.14	1.19	1.2
3.43	1.2	1.23	1.25
4.20	1.44	1.46	1,46
5.26	1.94	2	2
6.25	2.12	2.3	2.28

Tabla 3.5. Anchos de banda de las muestras de la serie a-Sie®Gees:H(Er).

% de H2 en el flujo	Ancho de banda de la serie a-Sio25Geo75:H(Er) (eV)		
total	Sin tratamiento	30 min 300°C	1 hr 300°C
0.88	1.03	1.04	1.06
1.70	1.13	1.13	1.15
2.59	1.25	1.29	1.25
3.43	1.4	1.4	1.43
4.20	1.88	1.93	1.94
5.26	2.03	2.35	2.36
6.25	2.4	2.5	2.53

Tabla 3.6. Anchos de banda de las muestras de la serie a-Sia25Georg:H(Er).

### -Espectroscopia Raman.

Para estudiar el efecto de los tratamientos térmicos en la estructura de las muestras se les midió su espectro Raman después de cada recocido. De igual forma se analízaron usando lo propuesto en el apéndice B, para encontrar la posición y el FWHM del pico TO de Ge.

En las tablas 3.7 y 3.8 se presentan las posiciones del fonón TO de todas las muestras después de cada tratamiento, las cuales no presentan alguna variación apreciable entre sí. En comparación con las posiciones del pico antes de recocer, que se presentan en la tabla 3.2, la serie que presenta más cambios es la de concentración nominal al 50%. En estas

- 32 -

muestras, el pico del fonón TO de Ge muestra un corrimiento hacia la posición de Ge cristalino (301 cm<sup>3</sup>) lo que nos indica que a esta concentración el tratamiento térmico induce la cristalización del material. Para la serie Si<sup>323</sup>Ge<sup>323</sup>:H(Er) el cambio solo es apreciable a 2.59 y 3.43 %. Para la serie con mayor concentración de Ge el recocido no induce ningún cambio importante en la posición del fonón, ya que estos cambios se encuentran dentro de la incertidumbre de la medición. Hay que recordar que esta última serie era la más susceptible a cambiar de amorfo a policristalino al variar el hidrógeno.

% de H₂ en flujo	Posición del fonón TO de Ge - 30 min 300°C (cm <sup>1</sup> )		
total	Sio73Geo25:H(Er)	Sio 50 Geo 50: H(Er)	Sic 25 Geo 25: H(Er)
0.88	263+/- 5	281+/-1	284+/-1
1.70	263+/- 3.5	281+/-1	284+/-2.5
2.59	271+/-5	281+/-2.5	275+/-3.5
3.43	268+/-3.5	260+/- 4	263+/-4
4.2	_	273+/-6	

Tabla 3.7. Posición del fonón TO después del primer recocido.

% de H: en flujo	Posición del fonón TO de Ge – 1 hr 300°C (cm <sup>1</sup> )		
total	Sio.75Ge0.25:H(Er)	Sio 50 Geo 50: H(Er)	Si 25 Ge6 25: H(Er)
0.88	266+/-2.5	281+/-1	284+/-0.51
1.70	265+/-3.55	284+/-4	284+/-2.5
2.59	268+/-5	277+/-5	281+/-2.5
3.43	276+/- 5	269+/- 5.5	273+/-3.5
4.2		273+/-6	

Tabla 3.8. Posición del fonón TO después del segundo recocido.

Los valores de los anchos medios después de los recocidos se presentan en las tablas 3.9 y 3.10. Se observa que la serie de muestras SimGem:H(Er) presenta los menores valores FWHM lo que nos indica un mayor orden del material. De los valores que presentan las tablas no es fácil encontrar si se sigue algún comportamiento de los anchos con la cantidad de hidrógeno o con los recocidos. Esto puede originarse debido a fluctuaciones en la concentración de una muestra a otra, que aun cuando pertenezcan a misma serie, cada muestra fue preparada por separado.

% de H2 en flujo	FWHM del fonón TO de Ge - 30 min 300°C (cm <sup>3</sup> )		
total	Si0.75Ge0 25:H(Er)	Sio 50Geo 50:H(Er)	Sio 25Geo 75:H(Er)
0.88	54.1+/-5	40.8+/-1	32+/-1
1.70	72+/- 3.5	47./-1	35+/-2.5
2.59	52.7+/- 5	48.5+/-2.5	57+/-3.5
3.43	82.1+/-3.5	49.6+/-4	75+/-4
4.2		74.4+/-6	

Tabla 3.9. FHWM del fonón TO después del primer recocido.

% de H2 en flujo	FWHM del fonón TO de Ge - 30 min 300°C (cm <sup>3</sup> )			
total	Sio 75Geo 25:H(Er)	Sir 50Geo 50:H(Er)	Sio 25 George H(Er)	
0.88	67.3+/- 5	44.7+/-1	39+/-1	
1.70	68.8+/- 3.5	36.5+/-1	31+/-2.5	
2.59	69+/- 5	55.3+/-2.5	42+/-3.5	
3.43	69.6+/-3.5	48.6+/- 4	54+/-4	
4.2	_	62.8+/-6	<u>.</u>	

Tabla 3.10. FHWM del fonón TO después del segundo recocido.

## -Fotoluminiscencia.

Debido a que las principales aplicaciones de estas aleaciones impurificadas con Er están relacionadas con la emisión lumínica, se procedió a medir el espectro de fotoluminiscencia de las muestras en dos regiones: la de la matriz amorfa y la de la emisión en 1.54 micrómetros del ión de Er<sup>3</sup>.

Todas las muestras sintetizadas con porcentajes de hidrógeno entre 4.20% y 6.25% en la atmósfera de crecimiento, presentaron buena luminiscencia en la región de la matriz amorfa (700 a 1300 nm aprox.). La gran extensión en longitud de onda de los espectros de

luminiscencia que obtuvimos es una característica de los materiales amorfos, ya que pueden tener transiciones radiativas entre muchos estados electrónicos.



Gráfica 3.18. Espectro de luminiscencia de la muestra a 4.2% de H. de la serie Sia-Geom:H(Er).

Dos de los espectros de luminiscencia de la matriz amorfa se presentan en las gráficas 3.18 y 3.19. Estos espectros son de dos muestras de diferentes concentraciones nominales y distinto porcentaje de hidrógeno. Fueron tomadas a 15 K y su intensidad disminuyó a cero alrededor de 250 K.

En la grafica 3.18 se presenta un pico en 1.5 eV (825.2 nm), que no aparece en la 3.17. Este pico solo apareció en los espectros de la serie de muestras al 50% y su posición

fue siempre la misma, lo que nos da la idea de que se trata de una impureza. Este pico disminuía su intensidad al decrementar la cantidad de hidrógeno en la muestra además, de desaparecer después de los 50 K.



Gráfica 3.19. Espectro de luminiscencia de la muestra a 6.25% de H2 de la serie Si0%Ge0%:H(Er).

En ninguna muestra fue posible ver la típica transición luminiscente del Er en 0.8 eV (1540 nm) y tampoco tuvimos indicios de la siguiente transición en 1.26 eV (980 nm). El pico que obtuvimos en 1.5 eV muy probablemente este relacionado con el que produce la transición desde el tercer nivel excitado del ión que es de 1.54 eV (800 nm) [11].

En una medición de composición que se realizó por medio de la técnica EDS a la muestra de 3.43% de hidrógeno de la serie  $Si_{1.5}Ce_{1.5}$ :H(Er), se encontró que la película

presentaba mayormente Si en un 58%, Ge en 33% y tenia un porcentaje de Er de 8%. Esta cantidad tan grande de Er debe ser el común en todas las muestras crecidas y es muy probablemente la razón por la cual no se obtuvo luminiscencia en 1540 nm. Pero a su vez pudo haber sido lo que produjo que detectáramos una transición menos probable como la del 1.5 eV.

Consecuentemente será necesario, utilizando el mismo método, reducir la cantidad de Er que se incorpora a las películas. Lo anterior implicará una modificación en el diseño del sistema, puesto que como se recordará el blanco de Er que se utilizo para la síntesis de estas aleaciones se encontraba en la mínima potencia posible para mantener el plasma prendido. Capítulo 4: Conclusiones.

#### 4. Conclusiones.

- En base a las mediciones de espectro Raman y transmisión óptica los porcentajes de hidrógeno en el flujo total de gases (Ar, H<sub>2</sub>) que compone la atmósfera de crecimiento adecuados para obtener un material amorfo son: de 0.88% en adelante para la concentración nominal SianGeas:H y SianGeas:H y a partir de 2.59% para la concentración de SianGeas:H.
- Se observa claramente la influencia de la hidrogenación en el ancho de banda de la aleación, cambiando de 1.12 eV a 2.3 eV para las aleaciones SimGens:H, de 1 eV a 2.12 eV para las de concentración al 50% y de 1.03 eV a 2.4 eV para la SimGens:H. Y después de los tratamientos térmicos cambiaron de 1.13 eV a 2.4 eV, de 1.07 eV a 2.3 eV y de 1.06 eV a 2.5 eV respectivamente para cada concentración nominal.
- Para las aleaciones con concentración nominal de 50% la incorporación del Er influye principalmente en incrementar los anchos de banda de las muestras crecidas de 4.2% de hidrógeno en adelante. Siendo estos cambios de hasta 0.48 eV para las muestras sin recocer y de hasta 0.64 eV después del tratamiento térmico. Este aumento en el ancho de banda en bulto de las muestras es consecuencia de que las concentraciones de Er son tan altas que en realidad este elemento forma una aleación con el Si y el Ge de la matriz amorfa, en vez de solo impurificarla.
- Se obtuvo luminiscencia correspondiente a la matriz amorfa para todas las muestras con mas de 4.2% de hidrógeno en el flujo total. No fue posible encontrar la luminiscencia de 1540 nm del Er debido a un exceso en la cantidad de este material. Sin embargo, se obtuvo una señal en 1.5 eV que muy probablemente está relacionada con la transición desde el tercer nivel excitado del ión Er<sup>3</sup>.

# Apéndices A y B.

## AENDICE A.

## Obtención de Anchos de banda, Espesor e Índice de Refracción.

La expresión matemática de un espectro de transmitancia con franjas de interferencia, que presentan una película delgada sobre un sustrato transparente, es una función compleja de la longitud de onda  $\lambda$ , índice de refracción *s* del sustrato y coeficiente de absorción  $\alpha$ , espesor *d e* índice de refracción *n* de la película, T = T ( $\lambda$ , *s*, *n*, *d*,  $\alpha$ ).

Si el subestrato se considera con un espesor varios órdenes de magnitud mayor que d y coeficiente de absorción cero, es conveniente simplificar la función a T = T(n, x) donde x es la absorbancia  $x = \exp(-\alpha d)$ .

Otra aproximación válida que nos simplifica la función T es el hecho de considerar k = 0 lo cual reduce la expresión a:

$$T = \frac{Ax}{B - Cx\cos\varphi + Dx^2}$$
 (Ec. A.1)

donde

$$A = 16n^{2}s$$

$$B = (n+1)^{3}(n+s^{2})$$

$$C = 2(n^{2}-1)(n^{2}-s^{2})$$

$$D = (n-1)^{3}(n-s)^{2}$$

$$\varphi = 4\pi nd / \lambda$$
(Ec. A.2)

Y los extremos de las franjas de interferencia se pueden escribir como:

$$T_{M} = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^{2}} \qquad T_{m} = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^{2}}$$
(Ec. A.3)

De esta manera si consideramos T<sub>v</sub> y T<sub>n</sub> como funciones continuas de  $\lambda$  y por lo tanto de  $n(\lambda)$  y  $x(\lambda)$  se convertirán en expresiones para las envolventes de los máximos y mínimos del espectro de transmitancia como se muestra en la figura siguiente.



Figura A.1 Espectro típico de transmitancia.

Tomando la región donde el coeficiente de absorción no es muy fuerte ( $x \le 1$ ) y restando los recíprocos de las funciones de las envolventes encontramos una ecuación independiente de x.

$$\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T_M} = \frac{2C}{A}$$
 (Ec. A.4)

Sustituyendo la Ec. 2 en la ecuación anterior y resolviendo para n se obtiene:

$$n = \left[ N + (N^2 - s^2)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}}$$
(Ec. A.5)

donde

$$N = 2s \frac{T_M - T_m}{T_m T_M} + \frac{s^2 + 1}{2}$$
(Ec. A.6)

Estas ecuaciones se pueden usar para calcular el índice de refracción  $n(\lambda)$  a partir de T<sub>M</sub> y T<sub>m</sub>, obtenidas del espectro experimental.

Para la obtención del espesor se consideran los valores de los índices de refracción correspondientes  $n_1$  y  $n_2$  correspondientes a las longitudes de onda  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  correspondientes a dos máximos o mínimos adyacentes del espectro experimental. Aplicando la ecuación para franjas de interferencia  $2nd = m\lambda$ , el espesor d esta dado por

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2(\lambda_1 n_2 - \lambda_2 n_1)}$$
(Ec. A.7)

El coeficiente de absorción a se puede calcular a partir de la expresión para la absorbancia  $x = \exp(-\alpha d)$ . Solo falta conocer x a partir de la ecuación 2 quedando:

$$x = \frac{E_M - [E_M^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4)]^{\frac{1}{2}}}{(n-1)^3 (n-s^2)}$$
(Ec. A.8)

donde

$$E_{M} = \frac{8n^{2}s}{T_{M}} + (n^{2} - 1)(n^{2} - s^{2})$$
(Ec. A.9)

Con esta breve explicación se muestra la manera de determinar el índice de refracción, espesor y coeficiente de absorción de una película delgada sobre un sustrato transparente, a partir de las franjas de interferencia de los espectros experimentales de transmitancia, utilizando la metodología propuesta por R. Swanepoel [14].

#### APENDICE B

#### Análisis de los espectros Raman.

Para analizar los picos que presentan los espectros Raman de las muestras, es decir encontrar su ancho medio (FHWM) y su posición, nos basamos en la forma de línea propuesta por el modelo de correlación espacial propuesto por P.Parayanthal et al. [16].

La forma de línea que utilizamos, es una curva Lorentziana atenuada por un exponencial que se expresa de la siguiente manera:

$$I(w) = I_0 + \frac{A}{(w - w_c)^2 + \Gamma_0^2} * \exp(-\frac{w - w_c}{d})$$
 (Ec. B.1)

donde *w* representa la frecuencia, *w*. la posición del pico, *l*. el offset, *A* y *d* constantes.  $\Gamma$  es el ancho medio que es la suma algebraica de  $\Gamma$ . y  $\Gamma$ : como se muestra en la figura, donde la línea roja es el ajuste a una de las mediciones.



Figura B.1 Ajuste de curva de un espectro Raman.

La perdida de simetría translacional en un cristal (ya sea por defectos, impurezas, etc) se manifiesta en la relajación de la regla de selección de dispersión Raman (q=0) resultando en el ensanchamiento y asimetría de la forma de línea del espectro. En otras palabras la longitud de correlación espacial deja de ser infinita (como de un cristal perfecto) y se vuelve finita debido a los defectos inducidos en el cristal.

P.Parayanthal et al. proponen una función de correlación espacial exponencial como representación de la relajación de dicha regla de selección. Mediante este método es posible encontrar por medio del ajuste de la forma de línea la longitud de correlación del material, la cual representa el tamaño promedio de las regiones sin daños o defectos del material, y relacionarla con la asimetría ( $\Gamma_{\circ} / \Gamma_{\circ}$ ). El ajuste de la forma de línea se hace al encontrar el valor de la longitud de correlación L que nos describa el espectro experimental mediante la siguiente expresión, que representa la intensidad Raman I(w) a la frecuencia w.

$$I(w)\alpha \int_{0}^{1} \exp\left(-\frac{q^{2}L^{2}}{4}\right)^{*} \frac{1}{\left[w - w(q)\right]^{2} + \left[\Gamma_{0}\right]^{2}} d^{3}q \qquad (Ec. B.2)$$

Esta integral se realiza en la primera zona de Brillouin estando q en unidades de  $2\pi/a$  siendo a la constante de red del material,  $\Gamma$  representa el FWHM de la forma de línea del material intrínseco y w(q) la relación de dispersión para el fonón del material que se analice. Por simplicidad se asume la región de correlación y la zona de Brillouín corro esféricas.

En nuestro caso existen varias razones por las cuales no fue posible utilízar esta metodología en su totalidad. La primera es que esencialmente el material que querernos estudiar es amorfo y este método fue generado como una manera de cuantificar el desorden en cristales o policristales. No es fácil encontrar una relación de dispersión valida para nuestro material debido a que, además de ser amorfo, las aleaciones SiGe son conocidas por no tener parámetros ópticos o estructurales, que varíen linealmente entre los de los materiales intrínsecos que lo componen.

## Referencias.

[1] M.H. Brodsky, Manuel Cardona and J.J. Cuomo, Phys.Rev B vol.16, 3556, (1977).

[2] Y.P. Chou and S.C. Lee, J. Appl. Phys., vol. 83, 4111, (1998).

[3]M. Stutman, R.A. Street, C.C. Tsai, J.B. Boyce and S.E. Ready Appl.Phys. Lett. **66**, 569 (1989).

- [4] P. Wickboldt et al., J. Appl. Phys. 81(9), 6252, (1997).
- [5] T. Oestereich, C. Swiatowski, I. Broser: Appl. Phys. Lett. 56, 446, (1990).

[6] W. J. Miniscalco: J. Lightwave Technol. 9, 234, (1991).

[7] Koizumi A., Fujiwara Y., Inoue K., Jpn. J. Appl. Phys. 1 42 (4B), 2223, (2003).

[8] Tao K., Zhang Y.L., Mo D., J. Appl. Phys. 94, 3995, (2003).

[9] Janotta A., Schmidt M., Janssen R., Stutzmann M., Phys. Rev. B 68, (2003).

[10] M. Fujii et al., J.Appl. Phys, 84(8), 4525, (1998).

[11] S.B. Aldabergenova et. al., J.Appl. Phys, 90(6), 2773, (2001).

[12] J.H. Shin, R. Serna et. al. Appl. Phys. Lett. 68, 997, (1995).

[13] J.E. Smith, jr., M.H. Brodsky et. al. Phys. Rev. Lett. 26, 642, (1971).

[14] R.Swanepoel J. Phys. E: Sci. Instruí., vol. 16, 1214, (1983).

[15] A.R. Zanatta et. al. I. Appl. Phys., 79, 433, (1996) .

[16] P. Parayanthal and F.H. Pollack, Phys. Rev. Lett., 52(20), 1822, (1984).