Universidad Nacional Mayor de San Marcos
Universidad del Perú. Decana de América
Facultad de Ciencias Físicas
Escuela Profesional de Física

Caracterización óptica y estructural de películas de ZnSe crecidas por epitaxia de haces moleculares sobre sustratos de GaAs con y sin capa colchón

TESIS

Para optar el Título Profesional de Licenciado en Física

AUTOR

Saul Javier LUYO ALVARADO

ASESORES

Juan Carlos GONZÁLEZ GONZÁLEZ

Dr. Percy Arturo PAZ RETUERTO

Lima, Perú

2025



Reconocimiento - No Comercial - Compartir Igual - Sin restricciones adicionales

https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/

Usted puede distribuir, remezclar, retocar, y crear a partir del documento original de modo no comercial, siempre y cuando se dé crédito al autor del documento y se licencien las nuevas creaciones bajo las mismas condiciones. No se permite aplicar términos legales o medidas tecnológicas que restrinjan legalmente a otros a hacer cualquier cosa que permita esta licencia.

Referencia bibliográfica

Luyo, S. (2025). *Caracterización óptica y estructural de películas de ZnSe crecidas por epitaxia de haces moleculares sobre sustratos de GaAs con y sin capa colchón*. [Tesis de pregrado, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Ciencias Físicas, Escuela Profesional de Física]. Repositorio institucional Cybertesis UNMSM.

Metadatos Complementarios

Datos de Autor	
Nombres y Apellidos	Saul Javier Luyo Alvarado
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	07443511
URL de ORCID	https://orcid.org/0009-0000-4519-3473
Datos del Asesor	
Nombres y Apellidos	Juan Carlos González González
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	00489197
URL de ORCID	https://orcid.org/0000-0002-9375-1430
Datos de Co Asesor	
Nombres y Apellidos	Percy Arturo Paz Retuerto
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	07175524
URL de ORCID	https://orcid.org/0000-0002-0785-8937
Datos del Jurado	
Presidente del Jurado	
Nombres y Apellidos	Jesús Félix Sánchez Ortiz
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	06445870
Miembro del Jurado 1	
Nombres y Apellidos	Moisés Humberto García Santiváñez
Tipo de documento de identidad	DNI

Número de documento de identidad	09426075
Miembro del Jurado 2	
Nombres y Apellidos	Gilberto Yactayo Yactayo
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	25634789

Datos de Investigación	
Línea de investigación	Capas delgadas semiconductoras
Grupo de investigación	Materiales Funcionales
Agencias de financiamiento	
Ubicación geográfica de la investigación	El Cinvestav (Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN) Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, Col. San Pedro Zacatenco, Gustavo A. Madero, 07360, Ciudad de México Latitud: 19.5042 N Longitud: -99.1466 O Laboratorio de Cerámicos y Nanomateriales. Instituto de Investigación de Física – UNMSM. Lima 15081, Perú Latitud: -12.059111 Longitud: -77.081283
Año o rango de años en que se realizó la investigación	2024 – 2025
URL de disciplinas OCDE	Física de la materia condensada https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.03.02 Recubrimiento, Películas https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#2.05.03

Universidad Nacional Mayor de San Marcos
Universidad del Perú. Decana de América
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA

ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE LICENCIADO EN FÍSICA

Siendo las 11:00 horas del Viernes 12 de diciembre de 2025, en el Salón de Grados de la Facultad de Ciencias Físicas (Auditorio 109), bajo la Presidencia del Dr. Jesús Félix Sánchez Ortiz (Presidente), Mg. Moisés Humberto García Santiváñez (Miembro), Mg. Gilberto Yactayo Yactayo (Miembro), Dr. Juan Carlos González González (Asesor) y Lic. Percy Arturo Paz Retuerto (Co-asesor), se dió inicio a la Sesión Pública de Sustentación de la Tesis para optar el Título Profesional de Licenciado en Física (Art. 45.2 de la Ley N° 30220), del bachiller:

SAUL JAVIER LUYO ALVARADO

Dando lectura al Resumen del Expediente, el Presidente del Jurado, invitó a la bachiller **Saul Javier Luyo Alvarado** a realizar una exposición de la Tesis titulada: **"Caracterización óptica y estructural de películas de ZnSe crecidas por epitaxia de haces moleculares sobre sustratos de GaAs con y sin capa colchón"**

Concluida la exposición del candidato y luego de las preguntas de rigor por parte del Jurado, el Presidente, invitó al bachiller y al público a abandonar momentáneamente la Sala de Sesión, para dar paso a la deliberación y calificación por parte del Jurado.

Al término de la deliberación del Jurado el Dr. Jesús Félix Sánchez Ortiz, invitó al candidato y al público a pasar a la Sala de Sesión, para dar lectura al resultado de la deliberación. Ha obtenido la calificación de:

18	Dieciocho	Aprobado con honores
(NÚMERO)	(LETRAS)	(MENCIÓN)

Finalmente, el Presidente del Jurado, propone al consejo de la Facultad que se le declare Licenciado en Física al bachiller **Saul Javier Luyo Alvarado**. Siendo las 12:01 horas, se levanta la sesión.

Dr. Jesús Félix Sánchez Ortiz
Presidente

Mg. Moisés Humberto García Santiváñez
Miembro

Mg. Gilberto Yactayo Yactayo
Miembro

Dr. Juan Carlos González González
Asesor

Lic. Percy Arturo Paz Retuerto
Co-asesor

Universidad Nacional Mayor de San Marcos
Universidad del Perú, Decana de América
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA

CALIFICACIÓN DEL JURADO

Saul Javier Luyo Alvarado

SUSTENTACIÓN DE TESIS

"Caracterización óptica y estructural de películas de ZnSe crecidas por epitaxia de haces moleculares sobre sustratos de GaAs con y sin capa colchón"

JURADO CALIFICADOR	NOTA	FIRMA
Dr. Jesús Félix Sánchez Ortiz PRESIDENTE	17	
Mg. Moisés Humberto García Santiváñez MIEMBRO	19	
Mg. Gilberto Yactayo Yactayo MIEMBRO	17	
Dr. Juan Carlos González González ASESOR	18	
Lic. Percy Arturo Paz Retuerto COASESOR	18	
PROMEDIO FINAL	18	

CONDICIÓN :

HORA : 11:00 horas

FECHA : Viernes 12 de diciembre de 2025

Dirección: Calle Germán Amézaga N.° 375 – Lima **Telefono:** 6197000 - Anexo 3805
Correo: eapfis@unmsm.edu.pe

UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS
Universidad del Perú, Decana de América

Anexo 1

CERTIFICADO DE SIMILITUD

Yo, Juan Carlos González González en mi condición de asesor acreditado mediante el Acuerdo Comité de Gestión Nro 043-EPF-FCF-25 de la tesis, cuyo título es "Caracterización óptica y estructural de películas de ZnSe crecidas por epitaxia de haces moleculares sobre sustratos de GaAs con y sin capa colchón", presentado por el bachiller Saul Javier Luyo Alvarado para optar el título profesional de Licenciado en F ísica, CERTIFICO que se ha cumplido con lo establecido en la Directiva de Originalidad y de Similitud de Trabajos Académicos, de Investigación y Producción Intelectual. Según la revisión, análisis y evaluación mediante la plataforma PIDS, el documento evaluado cuenta con el 06% de similitud, nivel PERMITIDO para continuar con los trámites correspondientes y para su **publicación en el repositorio institucional.**

Se emite el presente certificado en cumplimiento de lo establecido en las normas vigentes, como uno de los requisitos para la obtención del título profesional de Licenciado en Física.

Lima, 20 de marzo de 2026

UNMSM
Firmado digitalmente por GONZALEZ GONZALEZ Juan Carlos FAU 20148092282 hard
Motivo: Soy el autor del documento
Fecha: 20.03.2026 14:09:55 -05:00

Firma del Asesor

Nombres y apellidos del asesor: Juan Carlos González González

DNI: 00489197

* Según corresponda: bachiller, magíster, doctor; título profesional o título de segunda especialidad

La vigencia del presente certificado corresponde a un período de noventa (90) días desde la fecha de su emisión; siempre que no haya observaciones en el texto durante el proceso de revisión por el jurado informante o surja alguna contingencia.

Dedicatoria

Dedico este trabajo en primer lugar a nuestro Señor Jesucristo, a mis padres Miguel Luyo Rivas y Yolanda Alvarado, a mis hermanos Alberto, Walter, Tula, Violeta, Gladys y Miguel Ángel.

Agradecimientos

A Dios, a mis padres y a mis hermanos por su apoyo constante. A mis asesores el Dr. Juan Carlos González González, al Licenciado Percy Paz Retuerto, por todo el inmenso apoyo que me han brindado, a Benjamín Tang , a Elmer Oscanoa por su generosa amistad, aliento, en todo momento y situación, a mi alma mater la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos, muchas gracias.

ÍNDICE

Tabla de contenido

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN ……... 9

1.1 Situacion problemática …….. 9

1.2 Formulación del problema …… 9

1.3 Justificación teórica …… 10

1.4 Justificación práctica …… 10

1.5.1 Objetivo general …… 10

1.5.2 Objetivos específicos …….. 10

CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO …… 12

2.1 Antecedentes de investigación …… 12

2.2 Teoría básica de fotoreflectancia y fotoluminiscencia …….. 12

2.2.1 Modelo físico: Aproximacion de un electrón en un material …… 13

2.2.2 Modelo físico para el análisis de las oscilaciones Franz Keldysch ……... 15

2.2.3 Espectroscopía de fotoluminiscencia …… 16

CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA …… 18

3.1 Tipo y diseño de investigación …… 18

3.2 Hipótesis …… 18

3.3 Unidad de análisis ……... 18

3.4 Procedimiento experimental ……. 19

3.4.1 Espectroscopía de fotoreflectancia …… 19

3.4.2 Espectroscopía de fotoluminiscencia …… 20

3.4.3 Crecimiento epitaxial por haces moleculares de capas ZnSe …… 20

CAPÍTULO 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN …… 23

4.1 Análisis, interpretación y discusión de resultados…… 23

4.2 Pruebas de hipótesis …….. 35

4.3 Presentación de resultados ……..…….. 35

CONCLUSIONES …… 47

RECOMENDACIONES ……... 48

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS …… 49

Marco conceptual o glosario …….. 55

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Características de los dos grupos de muestras **21**

Tabla 2. Magnitudes de las energías de las bandas prohibidas de las capas de ZnSe y del sustrato de GaAs calculados con los modelos de Aspnes y de Franz Keldysh. **26**

Tabla 3. Magnitudes del cociente de picos V/D^0X , Y_0/D^0X , X_0/D^0X de las capas ZnSe **27**

Tabla 4. Resultados de los ajustes de los modelos de Keldysh y Aspnes de las energías de los intervalos prohibidos de ZnSe , GaAs y los campos eléctricos en la interfaz capa intermedia sustrato. **37**

Tabla 5. Magnitudes de la cantidad de fallas de apilamiento/ cm^2 de las capas de ZnSe con película intermedia calculadas con microscopía electrónica de transmisión. **44**

.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Esquema del montaje experimental para la espectroscopía de fotoreflectancia 19

Figura 2. Esquema del montaje experimental para la espectroscopía de fotoluminiscencia. 20

Figura 3. Mediciones de espectroscopía fotoreflectancia de las capas finas de ZnSe sobre sustratos de GaAs a 300 K usando la línea 325 nm del de He-Cd como fuente de excitación 24

Figura 4. Gráficas experimentales de fotoluminiscencia de las capas de ZnSe sobre sustratos de GaAs a la temperatura de 18 K con la línea 325 nm 28

Figura 5. Gráficas experimentales de las capas de ZnSe sobre sustrato de GaAs a la temperatura de 18 K con la línea 325 nm. 29

Figura 6. (a) Comparación de las magnitudes de los picos Yo y V con relación a (D^0, X), en dependencia del grosor de las capas de ZnSe (b) Comparación de la señal en relación con (D^0, X) de las capas de ZnSe. 31

Figura 7. Valores de energía de las señales (Xhh) y (DO, X) en dependencia del grosor de las capas. 32

Figura 8. Microfotografías de la capa de ZnSe 800 Å 34

Figura 9. Microfotografías TEM de la muestra Cl05 ZnSe/GaAs 34

Figura 10. Gráficas experimentales de fotoreflectancia de las capas de ZnSe con capa intermedia, a 300 K ,usando la línea 325 nm. 36

Figura 11. Gráficas experimentales a 18 K, línea 325 nm. de las capas de ZnSe con capa intermedia. 38

Figura 12. Gráficas experimentales de fotoluminiscencia a 18 K, línea 325 nm de las capas de ZnSe con capa intermedia en el intervalo de energía de los picos denominados excitones. 39

Figura 13. Muestras con capa intermedia. Cociente de las magnitudes de los picos Yo, V en relación con la señal (D^0,X) 41

Figura 14. Capas de ZnSe con capa intermedia. Energías de las señales Xhh, D^0, X, en dependencia del grosor de las capas. **42**

Figura 15. Microfotografías de muestra B1, 800 Å **43**

Figura 16. Microfotografías de la muestra B2 1500 Å **43**

Figura 17. a) Muestra A1 sin capa intermedia, b) muestra B1 con capa intermedia. Espectros de difracción de rayos X de alta resolución **46**

RESUMEN

Se ha realizado un estudio de capas de ZnSe, las cuales se crecieron epitaxialmente con espesores entre 800 y 7500 Å sobre sustratos de GaAs (100) en un ambiente de ultra-alto vacío con la técnica de haces moleculares (MBE). Para analizar y medir sus propiedades ópticas se usó las espectroscopías ópticas de fotoreflectancia (PR), fotoluminiscenciamicroscopia (PL) y para estudiar las propiedades estructurales utilizamos las técnicas de difracción de rayos X y también microscopía electrónica de transmisión. Con el propósito de analizar el efecto de la capa intermedia se creció primeramente un grupo de capas de ZnSe sobre sustratos de GaAs. A continuación, se creció un segundo grupo de muestras usando una capa intermedia de GaAs. Las mediciones de fotoluminiscencia se realizaron a una temperatura de 18K. Los resultados indican que las capas del primer grupo de muestras presentan más defectos. Se observó que las intensidades de las señales disminuyen con el aumento del grosor, sin embargo, la disminución es más rápida para las películas crecidas con capa intermedia. En las muestras crecidas sobre el sustrato de GaAs se observó una señal 2.7 eV, la cual corresponde a la difusión del Zn hacia el sustrato de GaAs. Las mediciones de fotorreflectancia se realizaron a la temperatura de 300 K°. Las gráficas experimentales muestran las señales correspondientes a la banda prohibida de energía de las capas de ZnSe y del sustrato GaAs. Debido a campos eléctricos que se producen en la interfaz capa sustrato se obervó oscilaciones Franz Keldysh. En los espectros de fotorreflectancia del primer grupo de muestras se observó una señal a 1.393 eV la cual se atribuye a la difusión de Zn hacia el GaAs.También se ha estudiado el desempeño de las dislocaciones y fallas de apilamiento con la variación del grosor de las capas con microscopía electrónica de transmisión.

Palabras clave: Capas ZnSe, sustrato GaAs, caracterización óptica, capa colchón epitaxia por haces moleculares.

ABSTRACT

ZnSe layers, with thickness between 800 and 7500 Å were grown GaAs (100) by molecular beam microscopy (MBE), and characterized by photoluminiscence (PL), photoreflectance (FR), transmission electron microscopy (TEM), and high resolution x ray diffraction. A first set of films was prepared with ZnSe directly grown on the GaAs substrate. A second group of samples was then grown using an arsenic capped GaAs buffer layer grown on the GaAs substrate in a separated MBE system. Photoluminescence measurements at 18 K showed that the ZnSe films have more defects for samples grown directly on the GaAs substrate. The behavior of stacking faults and dislocations as a function of film thickness were investigated by TEM, and by variation of the intensity of photoluminiscence signal related to these defects. For both sets of samples the intensity of these signals decreased with increasing layer thickness, but the decrease is steeper for films grown on GaAs buffer layers.

A signal in photoluminiscence spectra at 2.7 eV was observed only for the samples grown on a GaAs substrate, it was associated to the diffusion of Zn into the GaAs substrate. Photoreflectance measurements were performed at 300 K. The experimental spectra show the signals corresponding to the energy band gap of the ZnSe layers and the GaAs substrate. Franz Keldysh oscillations are observed due to electric fields generated at the layer-substrate interface. A 1.393 eV signal is observed in the photoreflectance spectra of the first group of samples, was associated with Zn interdiffused into the GaAs, and is correlated to the photoluminiscence signal observed at 2.7 eV for tha same set of samples.

Keywords: Films ZnSe, molecular beam epitaxy, substrate, buffer layers, photoreflectance, photoluminiscence, structural characterization.

CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN

1.1 Situación problemática

En la industria optoelectrónica el material semiconductor de ZnSe tiene muchas aplicaciones en la fabricación de dispositivos optoelectrónicos, debido a sus características físicas [1], como por ejemplo el ancho de banda prohibida 2.7 eV (Eg), que lo hace atractivo para la fabricación de láseres de estado sólido que emiten luz azul con una longitud de onda de 460 nm. Su estructura cristalina es del tipo zinc-blenda, este material pertenece al grupo II-VI de la tabla periódica. El dispositivo optoelectrónico ideal sería aquel cuyas capas de ZnSe se crezcan sobre sustratos del mismo material, sin embargo, es muy difícil conseguirlos por el alto costo económico que implica fabricarlos con excelente calidad cristalina. En la actualidad, diversos grupos de investigación [2] han publicado la fabricación de dispositivos optoelectrónicos usando películas de Znse crecidas sobre sustratos de GaAs. Hoy en día, es factible usar este material semiconductor, como sustrato porque es más económico, se puede conseguir fácilmente y posee una constante de red igual a 5.6534 Å, la cual es muy cercana a la constante de red 5.6676 Å del ZnSe.

1.2 Formulación del problema

Los láseres de estado sólido que se fabrican utilizando películas de ZnSe presentan problemas en el tiempo de vida media y en la eficiencia de la radiación electromagnética que emiten, debido a que durante el funcionamiento se generan una gran cantidad de defectos cristalinos en las interfaces del dispositivo que disminuyen la intensidad de luz emitida [3,4]. Es posible que la causa que produce la generación de esta gran cantidad de defectos sea el proceso de crecimiento de las capas de ZnSe sobre los sustratos de GaAs. En este proceso se tiene que considerar que en la interfaz capa-sustrato ocurren diferentes fenómenos físicos y químicos, por ejemplo, la diferencia en las constantes de las redes cristalinas de estos materiales [5], este desacople es alrededor de 0.27% a 300 K, por la desigualdad en los coeficientes de expansión térmica, que origina esfuerzos térmicos durante el enfriamiento de las muestras, por la difusión [6] del Ga al sustrato, por los contaminantes residuales como el carbono y oxígeno en la cámara de crecimiento y en la superficie del sustrato [7].

1.3 Justificación teórica

Se ha publicado en la literatura [3,4], que los defectos que se originan en la interfaz película-sustrato tienen un gran impacto en el desempeño de los dispositivos optoelectrónicos basados en capas de ZnSe. Este es un campo muy activo en la investigación, pero aún no se conocen los mecanismos que originan la producción de esta gran cantidad de defectos en las interfaces de los dispositivos durante el funcionamiento, por lo que en este trabajo se propone estudiar el proceso de crecimiento de las películas de ZnSe sobre sustratos de GaAs con la técnica de haces moleculares en un ambiente de ultra alto vacío. Por lo explicado anteriormente podemos apreciar la importancia de estudiar la heteroestructura ZnSe/GaAs para lograr la fabricación de dispositivos con un desempeño aceptable para su fabricación.

1.4 Justificación práctica

Una de las características físicas notables del material ZnSe es su ancho de banda prohibida de 2.7 eV [5], lo que permite la elaboración de dispositivos que emiten luz en la región azul del espectro visible. En los procesos de fabricación se puede modular el intervalo de emisión hacia el verde dopándolo las películas con átomos de cadmio [6], y se construyen de esta manera pozos cuánticos con aleaciones ternarias de ZnCdSe. En este sentido es muy interesante estudiar los procesos de crecimiento de las capas de ZnSe sobre sustratos de GaAs por las aplicaciones en la elaboración de dispositivos emisores de luz con longitud de onda más corta, que permiten mayor eficiencia en los procesos de registro de datos.

1.5.1 Objetivo general

Realizar la caracterización óptica y estructural de capas delgadas de ZnSe elaboradas con la técnica de haces moleculares (MBE) sobre sustratos de GaAs (100) con y sin capa intermedia, con las espectroscopías de fotoreflectancia, fotoluminiscencia, y las técnicas de microscopía electrónica de transmisión, y difracción de rayos X de alta resolución.

1.5.2 Objetivos específicos

Se han planteado los siguientes objetivos específicos:

- Estudiar los problemas en la interfaz de este sistema heteroepitaxial ZnSe/GaAs para crecer capas de ZnSe de una alta calidad cristalina.

- Estudiar el comportamiento de las fallas de apilamiento y dislocaciones como función del espesor de las películas, usando microscopia electrónica de transmisión y también la variación de las intensidades de fotoluminiscencia relacionadas con los defectos.

CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

2.1. Antecedentes de investigación

Se ha reportado en la literatura [7] que el crecimiento de capas delgadas cristalinas de ZnSe sobre sustratos de GaAs, es un proceso complicado por la gran cantidad de defectos que pueden surgir en la interfaz, debido a las diferentes propiedades físicas y químicas de estos materiales. Algunas de estas diferencias importantes son las reacciones químicas que se producen en la interfaz capa-sustrato, el desacople de 0.27 % en las constantes de la red, la difusión del galio a la capa delgada del ZnSe, la diferencia en los coeficientes de expansión térmica, en el intervalo de temperatura del crecimiento y posterior enfriamiento de las muestras. Algunos investigadores han sugerido que podría mejorarse la interfaz capa sustrato [1,3,4] introduciendo una capa intermedia de GaAs, la cual es denominada capa colchón haciendo previamente diferentes tratamientos a la superficie del sustrato [8] en la cámara de crecimiento de ultra alto vacío.

2.2. Bases teóricas

2.2 Teoría básica de la fotoreflectancia y fotoluminiscencia

Las espectroscopías ópticas de fotorreflectancia y fotoluminiscencia, se basan en el fenómeno básico de la interacción del campo electromagnético con los electrones del material [8]. La teoría física que describe rigurosamente esta interacción considerando la cuantizacion del campo electromagnetico incidente y la teoría de bandas del material es muy complicada desde el punto de vista matemático. Sin embargo considerando que en este trabajo se utiliza materiales semiconductores con bandas prohibidas de 1.4 y 2.8 eV respectivamente, y como fuente de excitación la radiacion electromagnetica con energías en el intervalo de 1 a 3.8 eV, la respuesta del material a un campo electromagnético incidente $\vec{E}$ (r, t) se puede describir con la función dieléctrica compleja $\varepsilon(\omega)$, que depende solamente de la ω de la radiación y la dependencia con respecto al vector de onda

$\vec{k}$ no se considera debido a que la longitud de onda es mucho mas grande que la dimensión de una celda unitaria.

Describiremos brevemente la teoría básica a través de un modelo físico sencillo, el cual en la literatura se conoce como estimación o aproximación de un electrón.

2.2.1.- Modelo físico: Aproximación o estimación de un electrón en el material semiconductor

En este modelo físico [9] se asume que los electrones del material se desplazan en un potencial efectivo V(r) producido por el potencial periódico de los iones del material sólido más un potencial originado por los demás electrones denominado potencial autoconsistente de Hartree. La reacción del material semiconductor a la radiación electromagnética $\vec{E}$ (r, t) perturbadora se representa con la función dieléctrica compleja $\varepsilon(\omega)$, cuya dependencia con la frecuencia del campo electromagnético incidente se expresa como:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\,\varepsilon_2(\omega) \tag{1}$$

En la ecuación (1) la absorción del material semiconductor está relacionada con la parte imaginaria de la función dieléctrica.

La parte imaginaria de la función dieléctrica usando el modelo de fase aleatoria [9] se expresa por la siguiente ecuación:

$$\varepsilon_2(\omega) = \alpha\omega^{-2} \sum_{v,f} \int 2(2\Pi)^{-3} \left|P_{vf}(k)\right|^2 dS \; \left|\nabla_k \omega_{vf}(k)\right|^{-1} \tag{2}$$

Haciendo un análisis de la expresión anterior se observa que existen singularidades en algunos puntos críticos, denominadas singularidades de Van Hove [10].

Debido a que en el laboratorio se mide la reflectividad de la muestra, es muy interesante estudiar la correlación entre la reflectividad R(ω) y la parte imaginaria $\varepsilon_2(\omega)$ de la función dieléctrica, que esta relacionada con la absorción del material.

La reflectividad compleja cuando la radiación electromagnética incide perpendicularmente es:

$$r = re^{i\theta} = \frac{n-1+ik}{n+1+ik} \quad (3)$$

En la ecuación anterior θ representa el ángulo de fase, n es el índice de refracción del material y k es el coeficiente de extinción del sólido, se asume que el medio que rodea es el aire cuyo índice de refracción es igual a uno.

De la óptica básica se conoce que:

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

$$\varepsilon_2 = 2nk \quad (5)$$

2.2.2.- Espectroscopía de fotoreflectancia.

Cuando incide radiación electromagnética sobre un material, el campo eléctrico de la onda incidente genera cambios en la reflectancia ΔR de la muestra. A continuación, se analiza la cantidad $\frac{\Delta R}{R}$

ya que, desde el punto de vista experimental es más accesible efectuar mediciones de esta magnitud denominada reflectancia, la cual se describe a través de la siguiente expresión:

$$\frac{\Delta I}{I} = \frac{\Delta R}{R} \quad (6)$$

Recordando las ecuaciónes de Fresnel para incidencia perpendicular de radiación electromagnética:

$$\text{Reflectancia} = R = \left(\frac{n-n_a}{n+n_a}\right)^2 \quad (7)$$

$$\text{Índice de refracción del material} = n^2 = \varepsilon$$

$$n_a^2 = \varepsilon_a \quad (8)$$

En la expresión anterior n_a es el índice de refracción real del medio que rodea a la muestra. Continuando con las operaciones se tiene que:

$$\frac{\Delta R}{R} = Re\left[\frac{2n_2}{n(\varepsilon - \varepsilon_a)}\Delta\epsilon\right] \quad (9)$$
$$= Re[(\propto -i\beta)\Delta\varepsilon]$$
$$= \alpha\Delta\varepsilon_1 + \beta\Delta\varepsilon_2$$

El cambio generado en la función dieléctrica es: $\Delta\varepsilon = \alpha\Delta\varepsilon_1 + \beta\varepsilon_2$, $\alpha\ y\ \beta$ son constantes conocidas en la literatura como los coeficientes de Seraphin [8].
En las referencias [9,10] a través de un modelo parabólico simple se obtiene una expresión matemática importante para realizar el análisis y la interpretación de las gráficas experimentales de fotorreflectancia que se describen con la ecuación:

$$\varepsilon(E,\Gamma) = A\Gamma^{-n}\, e^{i\theta}(E - E_g + i\Gamma)^n \quad (10)$$

$$= A\Gamma^{-n}\big(E - E_g + i\Gamma\big)^n (coseno(i\theta) + iseno(i\theta))$$

La ecuación anterior (10) es muy útil para estudiar la forma de la señal de la función dieléctrica, se usa en el ajuste de los espectros de fotoreflectancia. En esta ecuación se puede distinguir : La amplitud A, la fase θ, la energía E de la onda electromagnética incidente, el ancho de banda prohibido E_g, el parámetro de ensanchamiento Γ, n es el exponente asociado a la dimensión efectiva del punto crítico en la primera zona de Brillouin

2.2.3.- Modelo físico para el análisis de las oscilaciones Franz-Keldysh.

Las oscilaciones Franz Keldysh constituyen un fenómeno cuántico, que implica el efecto túnel a través de la banda prohibida de energía del semiconductor, éstas se prolongan hacia energías mayores que el intervalo de energía prohibido, el periodo de las oscilaciones aumenta conforme crece el campo eléctrico en la interfaz capa sustrato debido a la interacción del campo eléctrico de la radiación electromagnética incidente con los electrones, estos son acelerados en la estructura cristalina, generando variaciones en las bandas de energía del material semiconductor. En la aproximación dipolar el operador Hamiltoniano se expresa a través de un potencial producido por un campo eléctrico homogéneo $eE.x$ y usando

el modelo físico [12] de la aproximación de un electrón la ecuación de Schrodinger estacionaria se expresa a través de la siguiente ecuación:

$$H\psi_i = (H_0 - eE.x)\psi_i = W_i\psi_i \tag{11}$$

El material sin perturbación tiene un hamiltoniano igual a:

$$H_o = \left(\frac{p^2}{2m_e}\right) + V(r) \tag{12}$$

En la referencia [13] con el modelo físico estacionario se deduce la siguiente ecuación:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + eE_z + W_i\right]\phi_i(r) = 0 \tag{13}$$

La solución de la ecuación anterior es una multiplicación de funciones de onda, en la dirección z son las funciones de Airy, en las direcciones x e y, son ondas planas.

$$\phi_i(r) = \left[\frac{1}{2\pi} exp(ik_x x) exp\left(ik_y y\right)\right]\left[\frac{\sqrt{eE}}{\hbar\theta} Ai\left(\frac{-E_z}{\hbar\theta}\right)\right] \tag{14}$$

En las oscilaciones Franz-Keldysh se define una energía característica $\hbar\theta$ que se puede calcular a través de la expresión:

$$(\hbar\theta)^3 = \frac{e^2E^2\hbar^2}{2\mu} \tag{15}$$

2.2.4. Espectroscopía de Fotoluminiscencia.

La espectroscopía de fotoluminiscencia es una herramienta esencial para estudiar procesos ópticos en materiales semiconductores. Se hace incidir el haz electromagnético de un láser sobre el material, con una energía del fotón más grande que la energía de la banda prohibida, se generan pares electrón-hueco, estos pueden recombinarse a través de varios procesos, y el material emite radiación electromagnética. En las referencias [14,15,16] se utiliza un modelo semiclásico que utiliza los coeficientes de Einstein, la ley de Planck y la ley de conservación de la energía para deducir una expresión matemática que relaciona

la probabilidad de emisión con el coeficiente de absorción para semiconductores no dopados:

$$R_{vc}(\gamma) = \frac{\alpha(\gamma) 8 {\eta_t}^2 \gamma^2}{c^2 \left[exp\left(\frac{h\gamma}{k_B T}\right) - 1 \right]} \quad (16)$$

En la ecuación anterior se tiene que: $\alpha(\gamma)$ es el coeficiente de absorción, γ es la frecuencia, E_g es la energía de la banda prohibida, η_t es el índice de refracción del medio.

Finalmente, este modelo propone para la forma de la señal de radiación emitida la siguiente ecuación:

$$I_{FL}(\hbar\omega)\alpha \left\{ \left(\hbar\omega - E_g\right)^{\frac{1}{2}} exp\left[-\frac{\left(\hbar\omega - E_g\right)}{k_\beta T} \right];\ \hbar\omega > E_g \right\} \quad (17)$$

En la ecuación anterior, la energía del fotón emitido es $\hbar\omega$, E_g es la energía de la banda prohibida, la expresion $\hbar\omega > E_g$ significa que la energía del fotón incidente es mayor que la energía de la banda prohibida del material semiconductor.

CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA

3.1 Tipo y diseño de investigación

Es un trabajo de estudio, de análisis de tipo experimental. En una primera etapa se elaboraron las muestras con la técnica de crecimiento epitaxial por haces moleculares en un ambiente de ultra alto vacío, es decir la presión en la cámara de crecimiento es de 10^{-10} a 10^{-11} torr. A continuación, se realizaron las caracterizaciones ópticas y estructurales con las espectroscopías de fotoreflectancia, fotoluminiscencia, microscopía electrónica de transmisión y difracción de rayos X de alta resolución. Debido a no contar con todos los equipos necesarios, para la caracterización estructural de las muestras, se tuvo que gestionar colaboraciones con otros grupos de investigación de otras universidades que si lo tenían.

3.2 Hipótesis

Se plantea la hipótesis de que se mejoran las estructuras cristalinas de las capas delgadas del ZnSe con el crecimiento de una capa intermedia de GaAs sobre el sustrato.

3.3 Unidad de análisis

En este trabajo, en la primera parte se creció por la técnica de epitaxia de haces moleculares la cantidad de 4 muestras de capas de ZnSe directamente sobre el sustrato de GaAs. En la segunda parte se depositaron películas de ZnSe sobre capas colchón de GaAs, las cuales se crecieron sobre los sustratos de GaAs, con la misma técnica de crecimiento.

3.4 Técnicas usadas

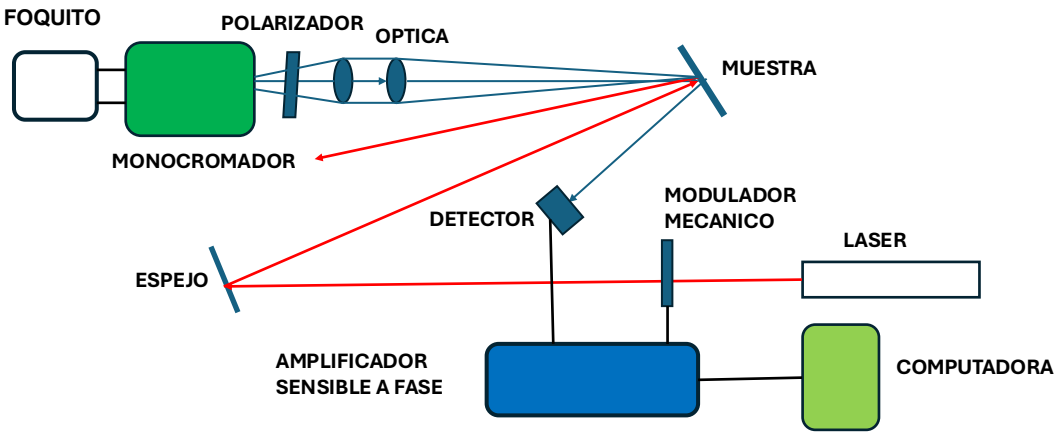
Para la caracterización óptica se utilizaron las técnicas de fotoreflectancia y fotoluminiscencia y para el estudio estructural usamos la técnicas de difracción de rayos X de alta resolución y microscopía electrónica de transmisión.

3.5 Procedimiento experimental

3.5.1.- Espectroscopía de fotoreflectancia.

Para las mediciones de fotoreflectancia, se realizó un montaje experimental versátil de los componentes sobre una mesa óptica como se indica en la Figura 1. Se utilizó como fuente de luz un foquito halógeno con una potencia de 250 W, la emisión de luz es dispersada por una red de difracción de un monocromador con distancia focal de 27.5 cm, en el camino del haz de luz que sale a través de una rendija rectangular se coloca un polarizador lineal con un sistema óptico para formar una imagen real sobre el material, teniendo cuidado que la incidencia sea aproximadamente perpendicular a la superficie de la muestra.

Figura1 **Esquema del montaje experimental para la espectroscopía de fotoreflectancia**



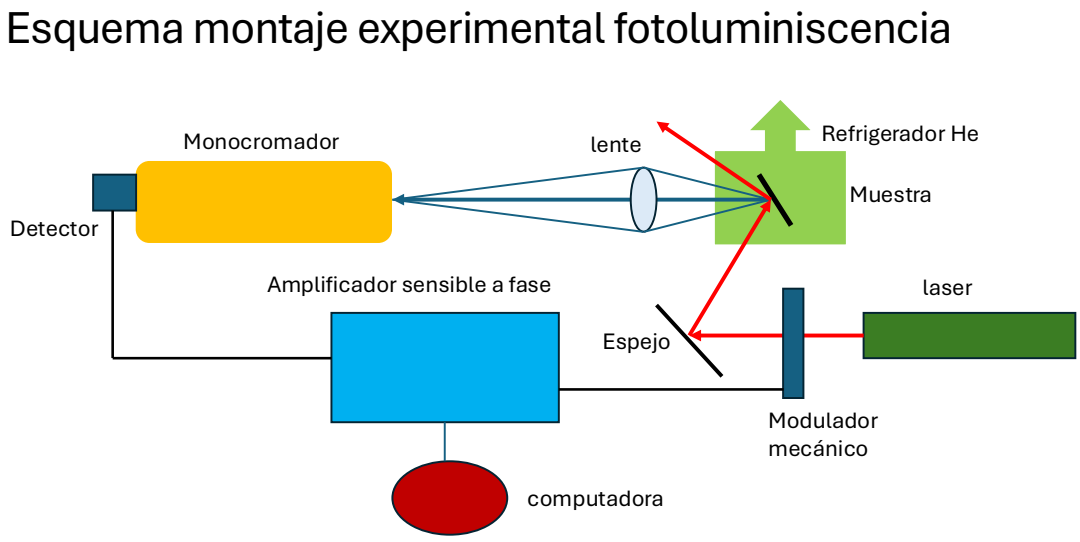
Para producir las variaciones de reflectividad se hace incidir simultáneamente en la misma región, con otro ángulo, la luz de un láser. Debido a que los cambios de reflectividad son muy pequeños, se utiliza un amplificador sensible a cambios de fase, el cual trabaja con dos señales una que proviene de la luz del láser que pasa por un modulador mecánico con una frecuencia de 155 Hz y la otra señal que viene de un detector de silicio que puede detectar en el rango de 300 a 1200 nm. Se usa una computadora con un programa para dirigir el movimiento de la red de difracción del

monocromador y procesar las señales del detector. Para las mediciones se usa los láseres de He-Ne (632.8 nm.), He-Cd (325 nm). Las mediciones se realizaron a una temperatura de 300 K

3.5.2.- Espectroscopía de Fotoluminiscencia

El montaje experimental para la espectroscopía de fotoluminiscencia es parecido al de fotoreflectancia, se describe en la Figura 2. La diferencia está en que ahora es necesario utilizar un refrigerador de Helio líquido para bajar la temperatura de la muestra a 18 K. La luz emitida por el sólido es captada por una lente y enfocada hacia un monocromador con una distancia focal de 48 cm. Se utiliza un tubo fotomultiplicador para su detección. Para perturbar a las muestras se usan los láseres de He-Ne (632.8nm) y He-Cd (325nm). En la siguiente figura se muestra un esquema del montaje experimental realizado para la espectroscopía de fotoluminiscencia.

Figura 2. **Esquema del montaje experimental para la espectroscopía de fotoluminiscencia.**



3.5.3.- Elaboración de las capas finas de ZnSe sobre el sustrato de GaAs y capa intermedia de GaAs

Para la elaboración de las muestras se realizó el siguiente procedimiento:

La primera etapa fue crecer capas finas de ZnSe sobre el sustrato de GaAs sin capa intermedia. Para esto es necesario primeramente hacer una limpieza de la superficie del sustrato usando una solución de H_2SO_4:H_2O_2:H_2O a una temperatura de 60° C,

luego se somete a un flujo de agua desionizada aproximadamente durante 15 minutos, a continuación para secarlas se exponen a un flujo de nitrógeno molecular. Después se colocan en el sistema RIBER 32 P MBE de crecimiento por haces moleculares. Los sustratos se llevan a una temperatura de 250° C por un lapso 10 minutos a una presión de 10^{-10} Torr con el fin de que salgan los gases. A continuación, se trasladan a la cámara de crecimiento donde se evaporan los óxidos a una temperatura de 550° C con una presión de 10^{-11} Torr. Para verificar este proceso se realiza un análisis con difracción de electrones de alta energía y siguiendo con el procedimiento es necesario bajar la temperatura a 325° C. para crecer las capas delgadas de ZnSe.

Tabla 1. **Características de los dos grupos de muestras.**

Nombre de la Muestra	Grosor capa ZnSe	Grosor capa intermedia GaAs
A1	800 Å	Sin capa colchón-
A2	1600 Å	Sin capa colchón -
A3	2800 Å	Sin capa colchón -
A4	6100 Å	Sin capa colchón -
B1	800 Å	5000 Å
B2	1500 Å	5000 Å
B3	3500 Å	5000 Å
B4	7500 Å	5000 Å

La segunda etapa fue elaborar el grupo de las capas finas de ZnSe utilizando una capa intermedia de GaAs. El proceso de limpieza de la superficie del sustrato es similar al procedimiento anterior, para evitar la contaminación por la diferencia en las propiedades químicas se realizó el crecimiento homoepitaxial en otro sistema de

haces moleculares para el sistema capa colchón de GaAs sobre sustratos de GaAs. La capa intermedia se creció a una temperatura de 600° C con un espesor de 5000 Å. Para poder realizar el traslado de estas muestras al otro sistema de haces moleculares 32P MBE, se protegen con una película superior de arsénico. Para los dos grupos de capas finas de ZnSe los parámetros de crecimiento fueron iguales. La tasa de crecimiento fue de 1 μm/h, la relación de presión de flujo de Zn/Se fue aproximadamente de 1/3, durante el proceso de crecimiento se analizan las superficies de las capas con difracción de electrones de alta energía. Con el propósito de realizar la caracterización estructural de las capas delgadas de ZnSe se utilizó un difractómetro Phillips, cuyo haz de rayos X tiene una divergencia de 12 segundos de arco. También se hicieron estudios con microscopía electrónica de transmisión en la vista de sección transversal y en la vista frontal.

CAPÍTULO 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1. Análisis, interpretación y discusión de resultados

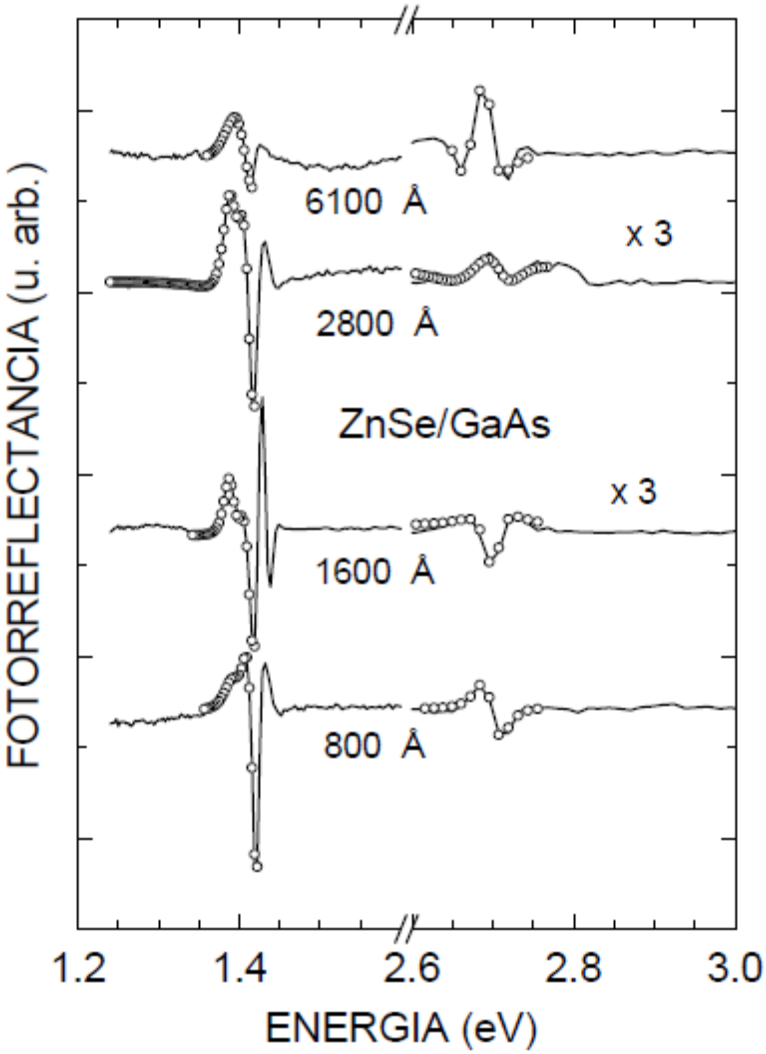
4.1 Sistema capas de ZnSe sobre sustratos de GaAs (100)

a) Espectroscopía de fotoreflectancia.

Se conoce que la interrupción en las bandas de valencia y conducción, la rugosidad, se generan por los parámetros de crecimiento de las capas finas de ZnSe sobre el sustrato de GaAs. Los procesos de formación de la interfaz producen campos eléctricos internos. Realizando un análisis de las mediciones de fotorreflectancia realizadas a 300 K se puede evaluar estos campos y calcular las energías de la banda prohibida de los dos materiales semiconductores.

La Figura 3 muestra los graficas experimentales de las capas finas de ZnSe sobre sustratos de GaAs. Como en este trabajo el interés es estudiar las capas de ZnSe, se decidió utilizar la línea 3250 Å del láser de He-Cd como fuente de excitación. La energía de esta línea es 3.82 eV lo que produce una fuerte absorción cerca de la superficie del ZnSe debido a la profundidad de penetración para esta energía que es alrededor de 400 Å. Como un resultado natural se espera que la intensidad del ZnSe sea más importante en el espectro de fotoreflectancia. Sin embargo, se observa que la respuesta del GaAs (1.415 eV) es casi siempre de un orden de magnitud más intensa que la señal de fotoreflectancia del ZnSe para las muestras con espesores menores que 3000 Å. Para la película de 6000 Å la señal de FR del ZnSe es comparable con la del GaAs. Estas características indican la existencia de campos eléctricos internos los cuales aceleran las cargas originadas en la superficie del ZnSe, muchas de ellas llegan al sustrato.

Figura 3. **Gráficas experimentales de fotoreflectancia de las capas finas de ZnSe sobre sustratos de GaAs a 300 K usando la línea 325 nm del de He-Cd como fuente de excitación. Los círculos corresponden a los ajustes realizado con los modelos de Aspnes (ZnSe) y Franz Keldysch (GaAs).**



En la Figura 3 se observa a energías mayores que 1.415 eV las oscilaciones Franz Keldysh amortiguadas, producidas por los campos eléctricos internos en las heteroestructuras de los semiconductores. Confirmando de esta manera la interpretación anterior sobre el origen de los valores relativos de las respuestas de GaAs y ZnSe en los espectros de fotoreflectancia. Una observación interesante es la medición de una señal ubicada a una energía menor que 1.415 el intervalo de energía prohibida del GaAs.

Se ha realizado un ajuste de los espectros experimentales utilizando la teoría de la tercera derivada de Aspnes [17] para punto crítico de la primera zona de Brillouin. Con este modelo físico se calcula el intervalo de energía prohibido de las capas finas de ZnSe, estos valores se muestran en la Tabla 2. Para efectuar la aproximación se utilizaron dos señales $Eo\iota$ para todas las muestras, excepto para las películas más delgadas, para obtener un buen acuerdo con el espectro experimental. Para las capas de ZnSe en las cuales se utilizaron dos señales, tenemos que estas se ubican a una energía de 2.7 eV y de 2,67 eV respectivamente. En este trabajo se plantea que el mecanismo físico de estas dos señales se debe a que conforme aumenta el espesor de las capas los procesos de relajación que ocurren no son uniformes a través de toda la película. Entonces surgen dos regiones en las capas, una región deformada muy cerca a la interfaz película- sustrato y otra región alejada parcialmente relajada.

En la referencia [18] se desarrolla un modelo físico asintótico de Franz Keldys. Usando este modelo se calcula el intervalo de energía prohibida del GaAs, para las muestras y estos valores y las magnitudes de los campos eléctricos internos calculado se expresan la tabla 2. Los valores obtenidos muestran buen acuerdo, con los valores reportados en la literatura, corroborando que nuestra aproximación es correcta. Los valores de los campos eléctricos están alrededor de 106 V/m. Es importante recalcar que la magnitud del campo eléctrico calculado es un promedio de los campos eléctricos que actúan sobre el sustrato de GaAs, los cuales tienen contribuciones de la discontinuidad de las bandas, así como también de estados en la interfaz, así como también los estados superficiales de las capas de ZnSe. Una observación muy interesante es el amortiguamiento grande de las oscilaciones Franz Keldysh, para estas muestras que se prepararon sobre sustratos de GaAs. Consideramos que una posible presencia de una capa de agotamiento alrededor de las dislocaciones de desajuste [19] así como también el desorden que se produce en la interfaz para estas muestras son factores podrían producir campos eléctricos no homogéneos los cuales hacen que las oscilaciones Franz Keldysh tengan un mayor amortiguamiento.

Tabla 2. **Magnitudes de las energías de las bandas prohibidas de las capas de ZnSe y del sustrato de GaAs calculados con los modelos de Aspnes y de Franz Keldysh.**

		Modelo Asintótico FK	Modelo Asintótico FK	Modelo de Aspnes	Modelo de Aspnes	Modelo Aspnes	Modelo de Aspnes.
Nombre de la muestra	grosor de la capa ZnSe	E_o^{GaAs}	F_{int}^{GaAs}	E_o^{ZnSe}	$E_o^{´ZnSe}$	E_o^{GaAs}	E_i
A1	800 Å	1.413 eV	8.5 X10^6 eV		2.695 eV	1.418 eV	1.394 eV
A2	1600 Å	1.418 eV	3.5 X10^6 eV		2.700 eV	1.415 eV	1.390 eV
A3	4100 Å	1.416 eV	6.5 X10^6 eV	2.675 eV	2.709 eV	1.412 eV	1.390 eV
A4	6100 Å			2.672 eV	2.694 eV	1.410 eV	1.393 eV

Se realizó un análisis de los espectros de fotoreflectancia con el modelo de Aspnes para calcular la energía de la señal observada a 1.39 eV. Se eligió la región de 1.3 a 1.43 eV del espectro y se realizó el ajuste con dos líneas, una a energías menores que la banda prohibida y la otra a energías mayores. Se observa que para las cuatro muestras el ajuste es bueno y los valores se indican en la tabla 2. Se propuso la hipótesis que esta señal tiene el mismo origen para todas las muestras, el valor promedio es 22 ± 5 meV mas abajo que el valor de la banda prohibida del GaAs. Investigando en la literatura [19] hallamos que el valor de energía más cercano corresponde a impurezas de Zn en GaAs. Entonces se considera que su origen puede estar relacionado con la difusión del zinc de la película del ZnSe hacia el sustrato del GaAs [20]. Esto concuerda con la presencia de una línea situada alrededor de 2.7 eV en los espectros de fotoluminiscencia denominada Xo, la cual está presente únicamente para estas capas finas ZnSe depositadas sobre los substratos de GaAs. En la referencia [21] se explica que esta señal podría ser generada por defectos en la

región del sustrato cercana a la interfaz de la muestra. Es importante observar que los valores obtenidos con los modelos de la tercera derivada de Apnes y de Franz Keldysh son muy parecidos, esto corrobora que el análisis realizado es correcto.

b) Espectroscopía de Fotoluminiscencia

Los espectros de las mediciones de espectroscopía de fotoluminiscencia se muestran en las Figura 4 y Figura 5, respectivamente. Con el propósito de analizar las diferentes señales, se hicieron dos barridos en dos intervalos diferentes de energías, un intervalo de 1.5 a 3 eV con un barrido de 20 Å, y otro intervalo de 2.5 a 3 eV con un barrido mas fino de 1 Å. Se observa que las señales más intensas corresponden a las capas de ZnSe, porque para la energía de excitación 325 nm. la longitud de penetración es de 400 Å y en el sustrato es alrededor de 100 Å [22]. Los picos y bandas que se observan ya se han publicado por otros grupos de investigación [22, 23, 24] y se indican en el Tabla 3.

Tabla 3. **Magnitudes del cociente de picos V/D^0X , Y_0/D^0X , X_0/D^0X de las capas ZnSe**

Capas ZnSE sobre sustratos GaAs	Grosor	Cociente de los picos V/D^0X	Cociente de los picos Y_0/D^0X	Cociente de los picos X_0/D^0X
A1	800 Å	22		26.5
A2	1600 Å	10.2	0.76	3.32
A3	2800 Å	4.58	1.26	0.59
A4	6100 Å	2.91	0.077	0.15

La señal ancha ubicada a 2 eV en los espectros de fotoluminiscencia, se conoce en la literatura como la banda SA y esta relacionada con vacancias de atomos de Zinc (vZn) [23,24,25,]. También se observa una señal con una energía de 2.3 eV denominada banda V la cual se atribuye a contaminación por cobre, [27,29] en nuestro sistema de crecimiento de las muestras no tenemos evidencia que ocurra esta contaminación.

Figura 4 **Gráficas experimentales de fotoluminiscencia de las capas de ZnSe sobre sustratos de GaAs a la temperatura de 18 K con la línea 325 nm.**

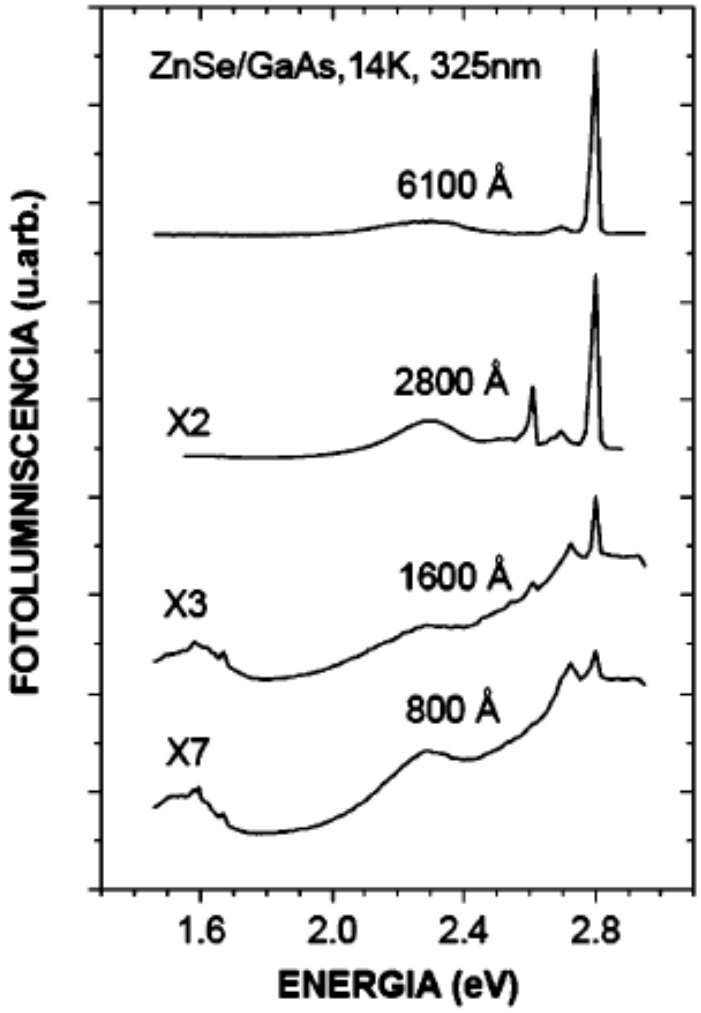
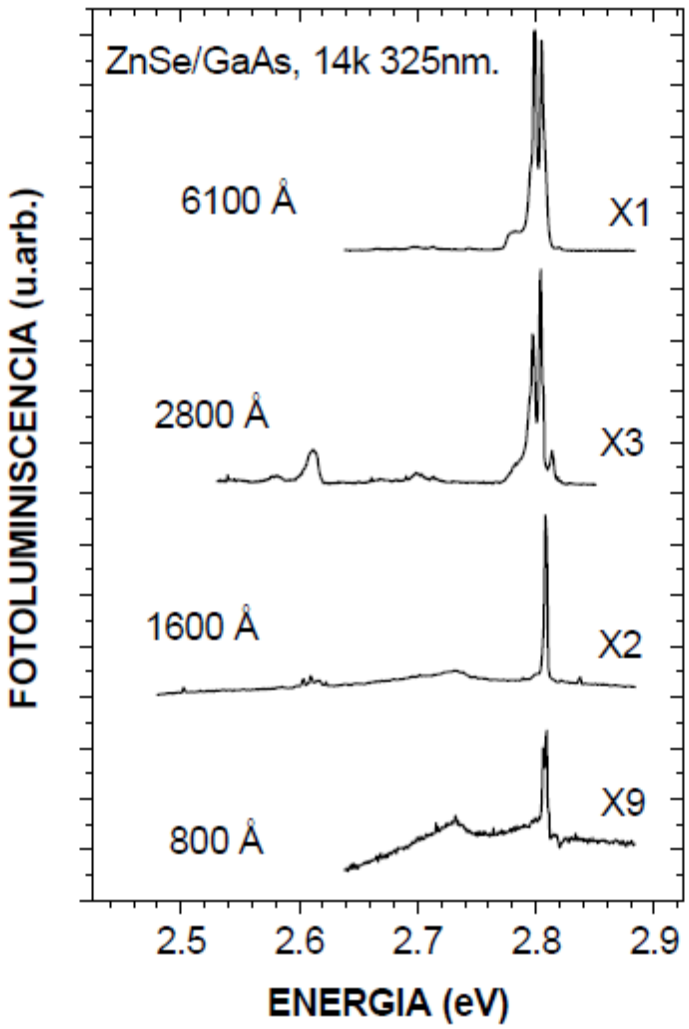


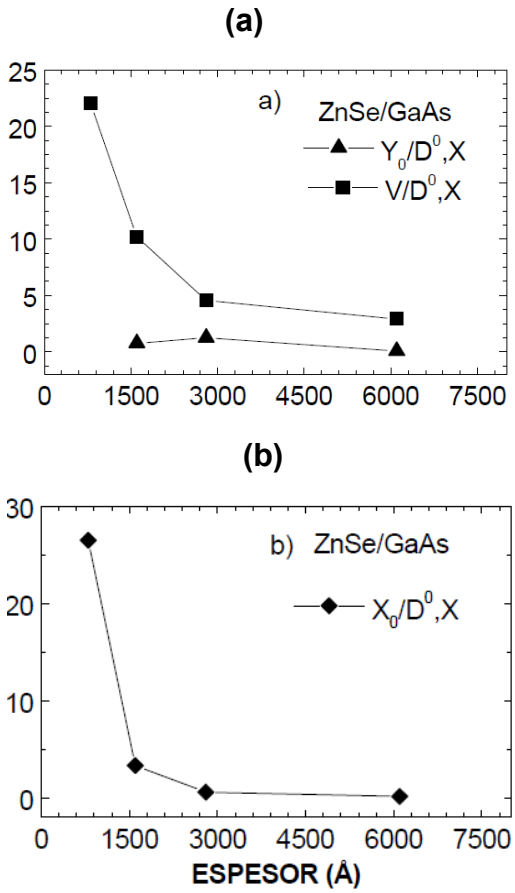
Figura 5. **Gráficas experimentales de las capas de ZnSe sobre sustrato de GaAs a la temperatura de 18 K con la línea 325 nm.**



Aun no se conocen los mecanismos físicos que producen la banda S, sin embargo, algunos investigadores [26, 27] proponen que esta banda estuviera asociada con transiciones de niveles de energía de átomos donores superficiales y aceptores profundos. El pico denominado Y_o, está asociado con dislocaciones de desajuste [26, 28]. El pico que se conoce como X_o se ha reportado en las referencias [26, 27, 29] que corresponde a transiciones entre niveles de energia de átomos donores y aceptores. Observamos que este pico con una energía de 2.7 eV, está presente en todas las capas de ZnSe depositadas sobre el sustrato de GaAs. Esta característica nos permite sugerir que el mecanismo fisco que lo produce son transiciones entre estados de energía de átomos de galio en sitios de zinc (GaZn) y también de vacancias de zinc

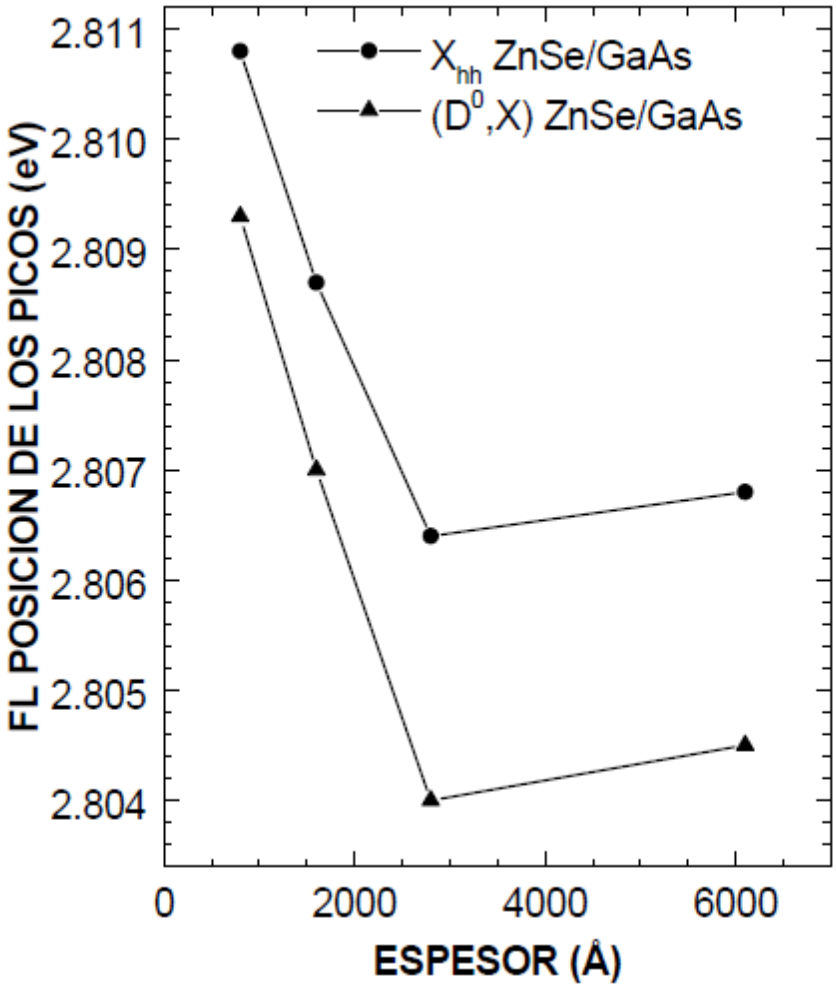
(vZn). La incorporación de átomos de Galio en las capas de ZnSe podría suceder por los procesos de limpieza y preparación del sustrato que genera una superficie rica en galio [7], el Galio puede difundir hacia las capas de ZnSe durante el proceso de crecimiento. La razón del pico X_o comparada con el excitón ligado (X_o/D^0, X), disminuye a medida que el espesor de las capas de ZnSe aumenta. (Figura 6), esta característica podría ocurrir debido a que la densidad de átomos de galio del sustrato que se difundieron para ocupar lugares de átomos de zinc de la película y estas vacancias respectivas de átomos de zinc, es mayor en la interfaz y disminuye conforme aumenta la distancia a la interfaz. Este comportamiento claramente nos demuestra la importancia que tienen los fenómenos que suceden en la interfaz y que afectan el crecimiento de las capas de ZnSe.

Figura 6 **(a) Comparación de las magnitudes de los picos Y_o y V con relación a (D^0, X), en dependencia del grosor de las capas de ZnSe (b) Comparación de la señal en relación con (D^0, X) de las capas de ZnSe.**



Se ha reportado en la literatura [26, 30] que la razón de la intensidad de la banda V respecto al pico denominado excitón ligado a un donor neutro V/D^0 X, nos indica la calidad cristalina de las capas de ZnSe. Estas comparaciones para las diversas muestras se indican en la Tabla 4 y en la Figura 6. Analizando la gráfica se observa que la magnitud de la banda V disminuye a medida que el espesor de la capa aumenta, y es más intensa para las capas de 800 y 2800 Å de espesor, esto es una evidencia que estas muestras capas tienen una gran cantidad de defectos. El pico Y_o se atribuye a dislocaciones de desajuste, lo podemos observar en las capas de 1600 y 2800 Å de grosor, pero no se observan en las películas de 800 y 6000 Å de espesor. De acuerdo con la teoría no deberíamos observar este pico en la capa de 1600 Å, porque el espesor crítico para el ZnSe es aproximadamente 1700 Å, esto se nos indicaría que ya existen dislocaciones de desajuste debido a que el proceso de relajación de los esfuerzos es un proceso gradual que sucede conforme cambia el grosor de las capas de ZnSe.

Figura 7. **Valores de energía de las señales (X_{hh}) y (D^O, X) en dependencia del grosor de las capas.**



En la Figura 5, se observan los espectros de fotoluminiscencia, realizados con un barrido fino para distinguir con mas detalle la estructura variada de excitones, los cuales se conocen en la literatura como excitones asociados a huecos pesados (X_{hh}) , a huecos ligeros (X_{lh}) y también excitones ligados a donores neutros (D^0 X). En la Figura 7 se muestra el intervalo de energías para los picos excitónicos X_{hh} y D^0 X como función del espesor de las capas, se aprecia un desplazamiento hacia menores energías conforme se incrementa el grosor, este comportamiento se atribuye a los procesos de disipación de esfuerzos que aumentan con el espesor de las capas.

c) Análisis estructural realizado con microscopía electrónica de transmisión.

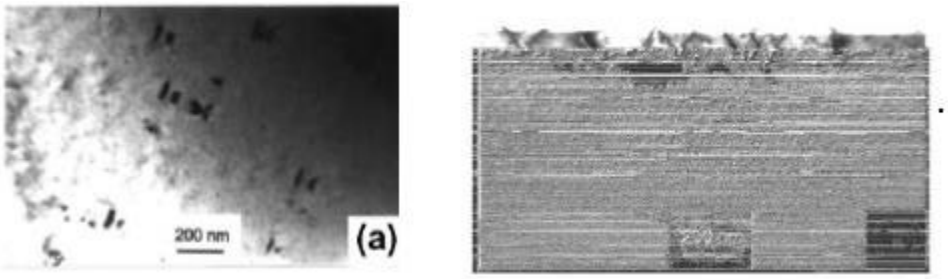
En la Figura 8, se muestran las microfotografías efectuadas con microscopia electrónica de transmisión de la muestra A1 (800 Å) observadas en la modalidad de (a) vista sección horizontal plana y (b) vista sección transversal. La figura 9 muestra las microfotografías de la muestra A3. Se puede observar que entre las dos capas hay notables diferencias en la densidad y estructura de los defectos.

Haciendo un análisis de la vista sección horizontal de la Figura 8 (a) se obtiene que esta capa fina de 800 Å de espesor tiene una alta densidad de fallas de apilamiento aproximadamente 10^9 /cm^2, se ven como manchas negras en la fotografía. Es interesante destacar, que no se observan dislocaciones de desajuste, como se esperaba para una capa de este grosor. Recapitulando, en las gráficas experimentales de fotoluminiscencia se observa el pico Y_o relacionado a dislocaciones, de esta manera se confirma que la ausencia de este tipo de defectos está de acuerdo con la ausencia de esta señal en el espectro de fotoluminiscencia de la capa.

Se continua ahora con el análisis de la sección transversal mostrado en la Figura 8 (b) se pueden observar que las fallas de apilamiento se generan en la interfaz capa sustrato y se propagan hacia la película. Esta observación nos permite sugerir que las fallas de apilamiento en capa se producen por defectos en la superficie del sustrato. Es conocido que el proceso de evaporación de los óxidos del sustrato de GaAs produce defectos superficiales conocidos como hueco. Estos defectos tienen influencia en el crecimiento de las capas de ZnSe originando las fallas de apilamiento. Se ha reportado [31, 32, 33] que la razón de flujos del Zinc y del Selenio en la cámara de crecimiento, juntamente con la estequiometria de la superficie del sustrato, influye notablemente en la agrupación de las fallas de apilamiento.

Figura 8. **Microfotografías de la capa de ZnSe 800 Å**

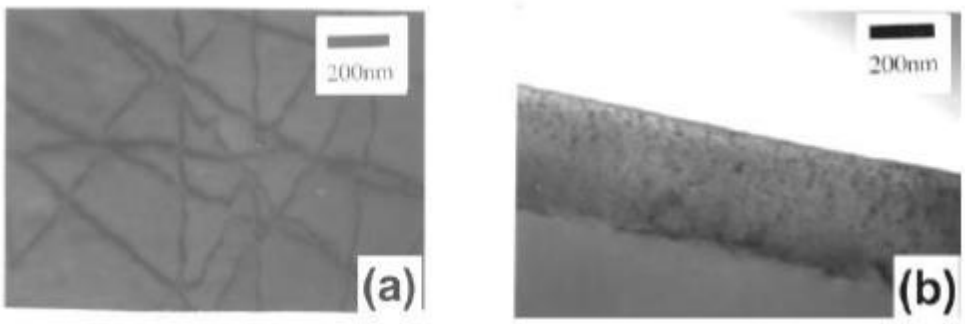
(a) **(b)**



En la Figura 9 se muestran las microfotografías de la muestra A3. En la Figura 9 (a) observamos no se aprecian las manchas asociadas a las fallas de apilamiento. Para esta capa observamos defectos en forma de líneas que forman una malla irregular. De la vista en sección transversal Figura 9 (b) notamos que estos defectos están en una región cercana a la interfaz, por lo que interpretamos que están relacionados con dislocaciones de desajuste. Debido a que el grosor de la capa ZnSe es de 4100 Å, mucho mayor que el espesor crítico, se observan dislocaciones de desajuste para disipar los esfuerzos producidos por el desacople del 0.27 % entre las constantes de las redes capa-sustrato.

Figura 9. **Microfotografías TEM de la muestra Cl05 ZnSe/GaAs**

(a) **(b)**



Con los análisis anteriores podemos concluir que cuando el espesor de la película excede el espesor crítico una malla de dislocaciones de desajuste surge en la interfaz, sin embargo, no se observan fallas de apilamiento. Esto nos podría indicar que hay una relación entre la disminución en la densidad de fallas de apilamiento y la aparición de dislocaciones de desajuste.

4.2. Pruebas de hipótesis

A continuación, se muestran los efectos de introducir una capa intermedia colchón de GaAs en el sistema ZnSe/GaAs, a través del análisis y discusión de los espectros de fotorreflectancia, fotoluminiscencia, microfotografías de microscopía electrónica de transmisión y espectros de rayos X.

4.3. Presentacion de resultados.

Espectroscopía de fotoreflectancia

En la Figura 10 se observa una característica notable, se ven oscilaciones Keldysh a energías mayores que el ancho de banda prohibido del sustrato. Usando el modelo físico asintótico de Franz Keldysh se ha calculado la energía de la banda prohibida del GaAs. Un punto importante que hay que destacar es el hecho observado anteriormente que estas oscilaciones decrecen rápidamente en aquellas muestras que no tienen capa colchón. Los valores respectivos de la banda prohibida y de los campos eléctricos internos se indican en la Tabla 4. Se puede apreciar que las magnitudes de los campos eléctricos internos para las muestras con capa colchón son menores que los correspondientes a las muestras que se depositaron directamente sobre el sustrato sin capa colchón. Los resultados obtenidos nos indican que la interfaz capa colchón sustrato es más homogénea, tambien hay que tomar en cuenta las contribuciones al campo eléctrico interno, debido a la superficie de la capa de ZnSe, y a la interfaz del sustrato con la capa intermedia.

En la Figura 10 no se observa una señal a 1.39 eV, sin embargo, para las muestras sin capa intermedia si se observa esta señal, este es un resultado muy importante, más adelante se ve que también en las gráficas experimentales de fotoluminiscencia no se observa la señal denominada X_o. Estos resultados podrían indicar que las consecuencias de introducir una capa intermedia es generar una interfaz capa intermedia película con mayor homogeneidad y estequiometría.

Figura 10. **Gráficas experimentales de fotoreflectancia de las capas de ZnSe con capa intermedia, a 300 K, usando la línea 325 nm.**

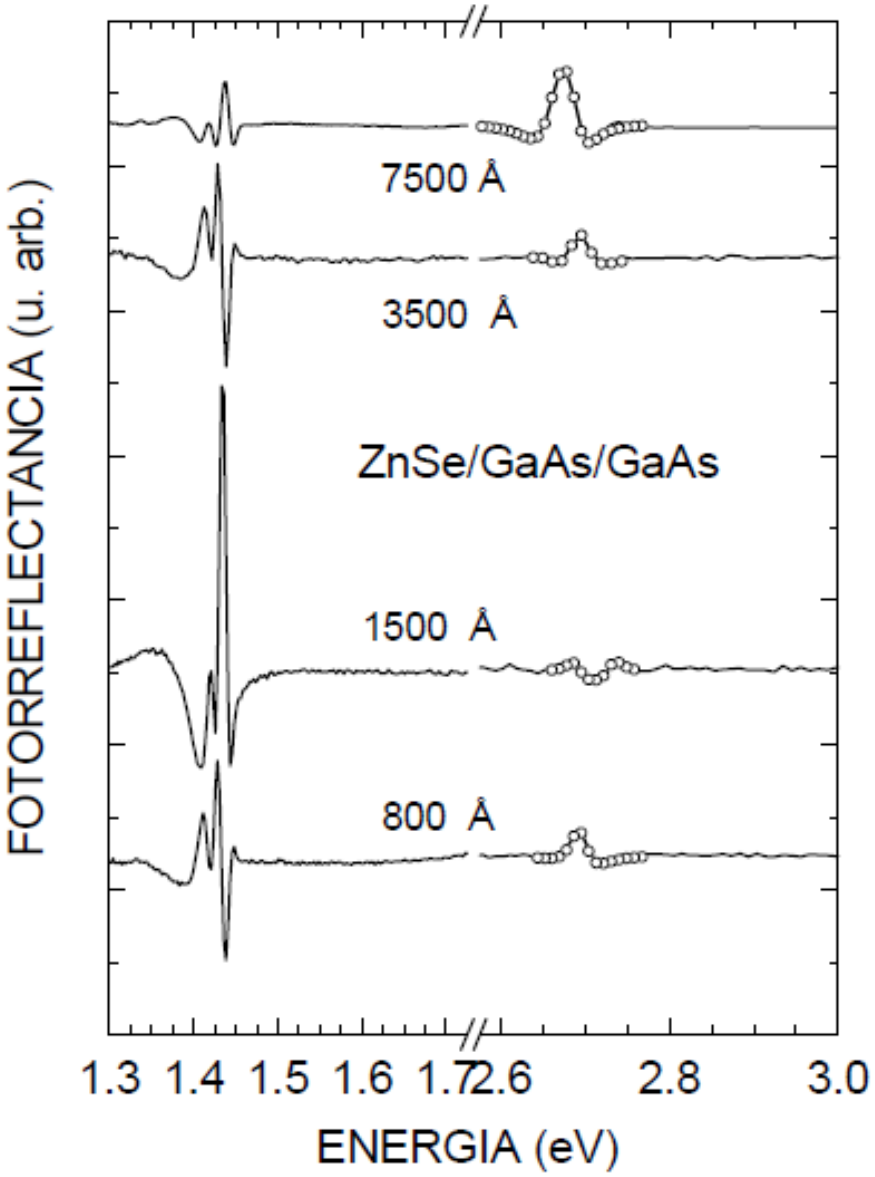


Tabla 4. **Resultados de los ajustes de los modelos de Keldysh y Aspnes de las energías de los intervalos prohibidos de ZnSe , GaAs y los campos eléctricos en la interfaz capa intermedia sustrato.**

		Modelo físico de Keldysh		Modelo físico de Aspnes			
Nombre muestra	Grosor capa ZnSe	E_0^{GaAs}	$F_{int}^{GaAs} x 10^6$	E_0^{ZnSe}	$E_0^{'ZnSe}$	E_0^{GaAs}	E_i^d
B1	800 Å	1.418 eV	3.6 eV	…	2.695 eV	…	…
B2	1200 Å	1.416 eV	2.8 eV	2.692 eV	2.729 eV	…	…
B3	3500 Å	1.418 eV	3.5 eV	2.666 eV	2.697 eV	…	…
B4	7500 Å	1.413 eV	4.6 eV	2.663 eV	2.688 eV	…	…

Fotoluminiscencia.

Las mediciones con espectroscopía de fotoluminiscencia se realización bajo las mismas condiciones físicas anteriores y en los mismos intervalos de energía. Las características de las muestras se indican en la Tabla 4. Se realizó un análisis de los espectros experimentales y se observa que las señales son más intensas para las películas de ZnSe depositadas con capa colchón de GaAs. Si se hace una comparación de los espectros de las figuras 6 (muestras sin capa intermedia) y de la figura 11 (muestras con capa colchón) se observa que existen diferencias significativas, una de ellas es el pico ubicado a 2.7 eV (X_0) observado en todas las películas de ZnSe depositadas directamente sobre el sustrato de GaAs, pero no se ve en aquellas que se depositaron con capa colchón. En las referencias este pico ha sido reportado, que se produce por transiciones relacionadas con un sistema donor-aceptor. Una explicación posible que se sugiere es que este proceso ha disminuido, debido a una superficie con mayor estequiometría de las capas de ZnSe, producido

por la protección que se hizo de la superficie de la capa intermedia con una película de As.

Figura 11. **Gráficas experimentales a 18 K, línea 325 nm. de las capas de ZnSe con capa intermedia**.

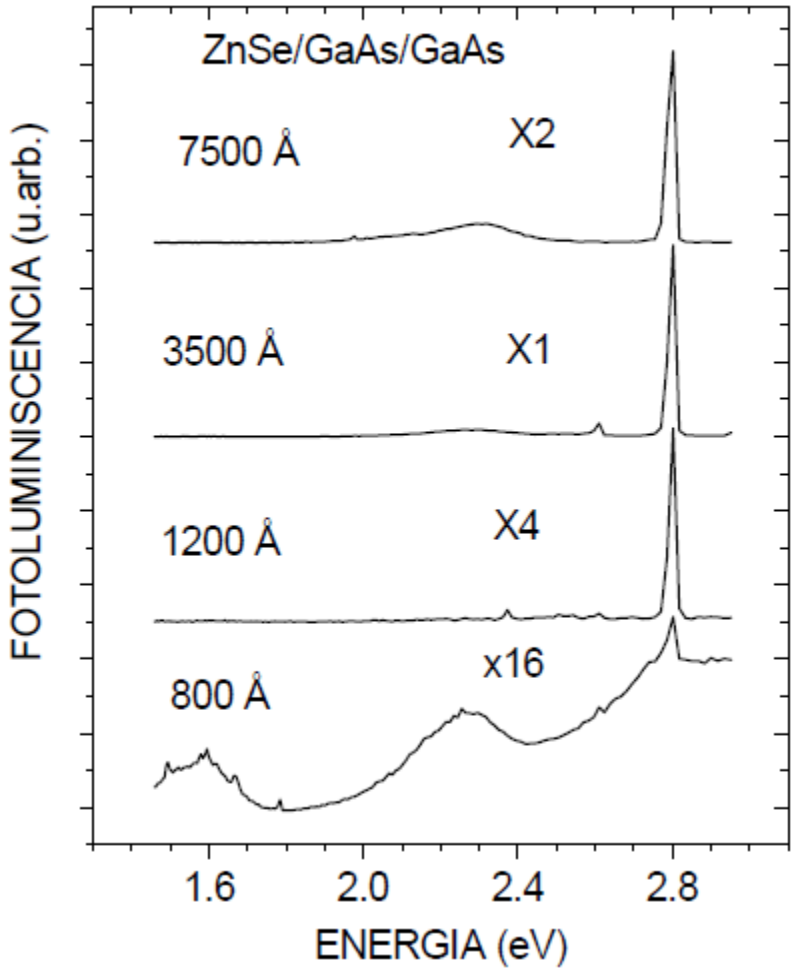
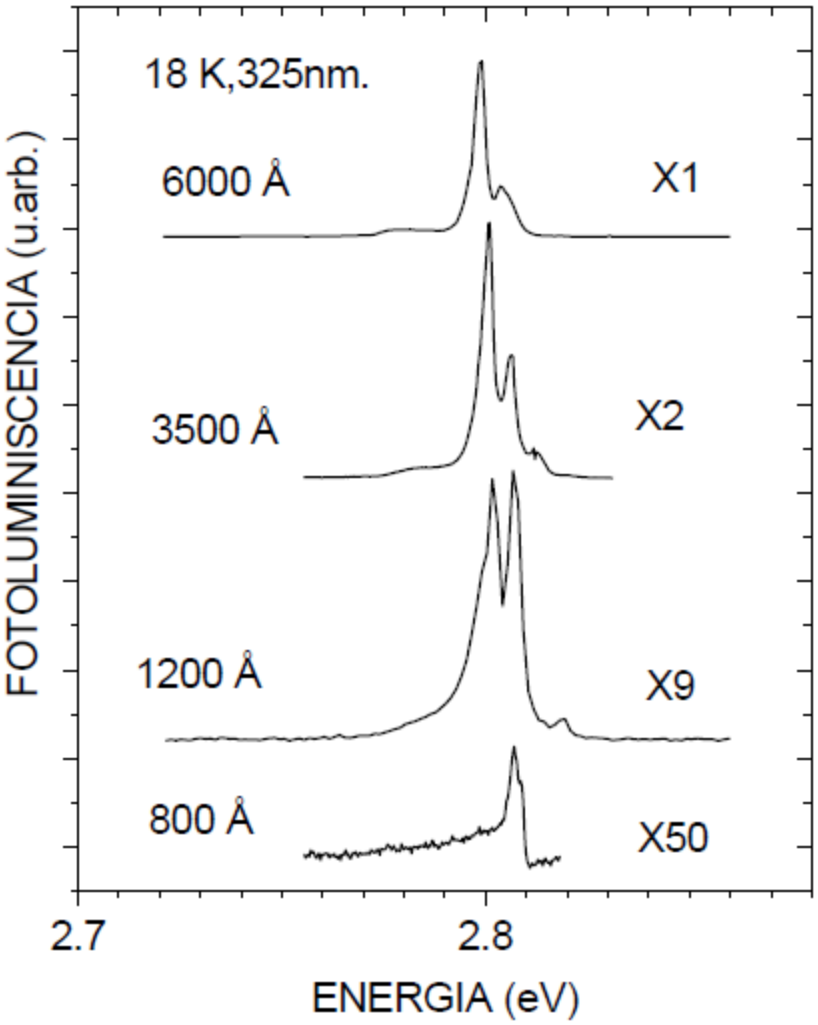


Figura 12. **Gráficas experimentales de fotoluminiscencia a 18 K, línea 325 nm de las capas de ZnSe con capa intermedia en el intervalo de energía de los picos denominados excitones**



En la Figura 13 se observa la razón de las intensidades de las señales Y, y V con respecto a la señal del excitón ligado (D^O, X) en función del grosor de las capas de ZnSe. La magnitud de la banda V decrece con el espesor, se observa que este decremento ocurre más rápido y con valores más pequeños, que los que se obtiene sin capa intermedia, entonces tomando la señal V como un indicador de calidad se puede decir que las películas depositadas con una capa intermedia de GaAs son mejores. En ambos grupos de muestras, en las películas de ZnSe, con un grosor de 800 Å no se observa el pico Y_o debido a que todavía no hay dislocaciones de desajuste. Para el caso de capas con espesores menores que el espesor crítico que

es de aproximadamente 1700 Å, teóricamente la señal Yo no debería verse. Sin embargo esta línea Y_o está presente para las capas de aproximadamente 1500 Å lo cual nos indica que hay dislocaciones de desajuste para este grosor, después esto también es corroborado por las mediciones de microscopia electrónica de transmisión. Las capas que tienen mayor grosor aproximadamente de 7500 Å, presentan una malla de dislocaciones de desajuste cercana a la interfaz. La disminución de la intensidad en la señal Y_o podría originarse debido a que, para espesores mayores, una gran cantidad de portadores fotogenerados se recombinan en la parte superior de la capa y pocos alcanzan la interfaz película capa intermedia. También es importante considerar que para espesores mayores mejora la calidad cristalina de la película produciendo señales más intensas en la región de los picos denominados excitones.
En la Figura 14 se muestra los valores de las energías de las señales asociadas al excitón X_{hh}, y al excitón $D^O X$, en dependencia del grosor de las capas de ZnSe. Realizando el análisis de esta gráfica, se nota que, el comportamiento es similar con respecto a las películas depositadas directamente sobre el sustrato, sin embargo hay una diferencia para la película con espesor de 1500 Å, la energía del excitón ligado disminuye rápidamente en funcion del grosor comparada con la capa de grosor similar sin capa colchón. Esto podría ser una evidencia que el proceso de relajación ya empezó, como se ve con las mediciones de microscopia de transmisión.

Figura 13. **Muestras con capa intermedia. Cociente de las magnitudes de los picos Y_o, V en relación con la señal (D^0,X)**

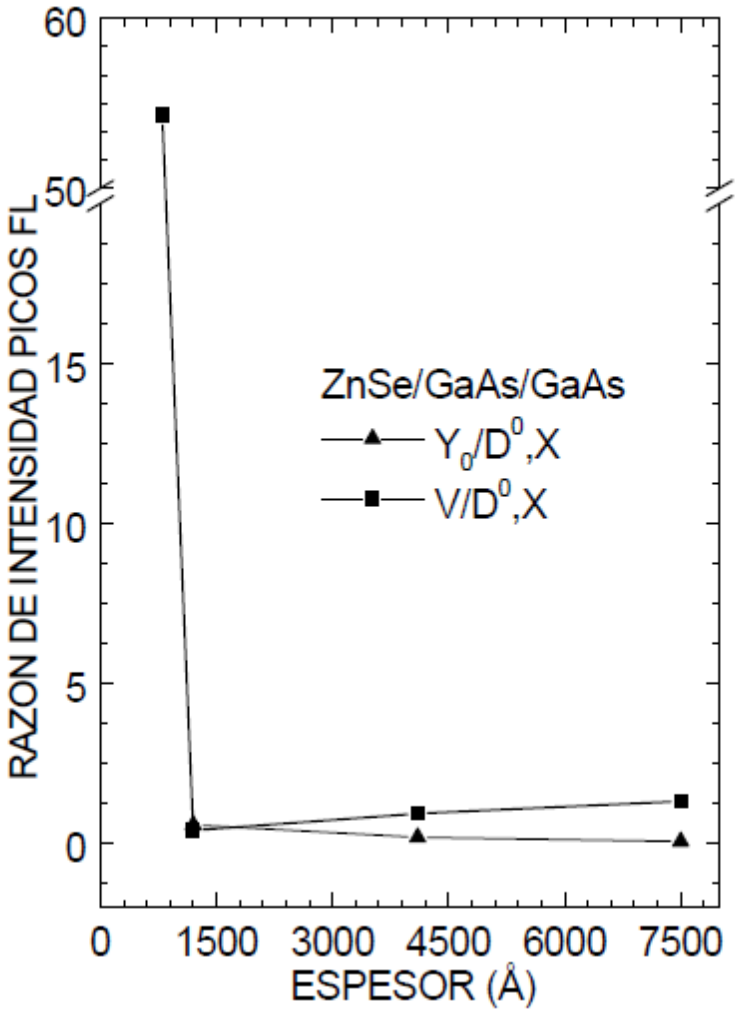
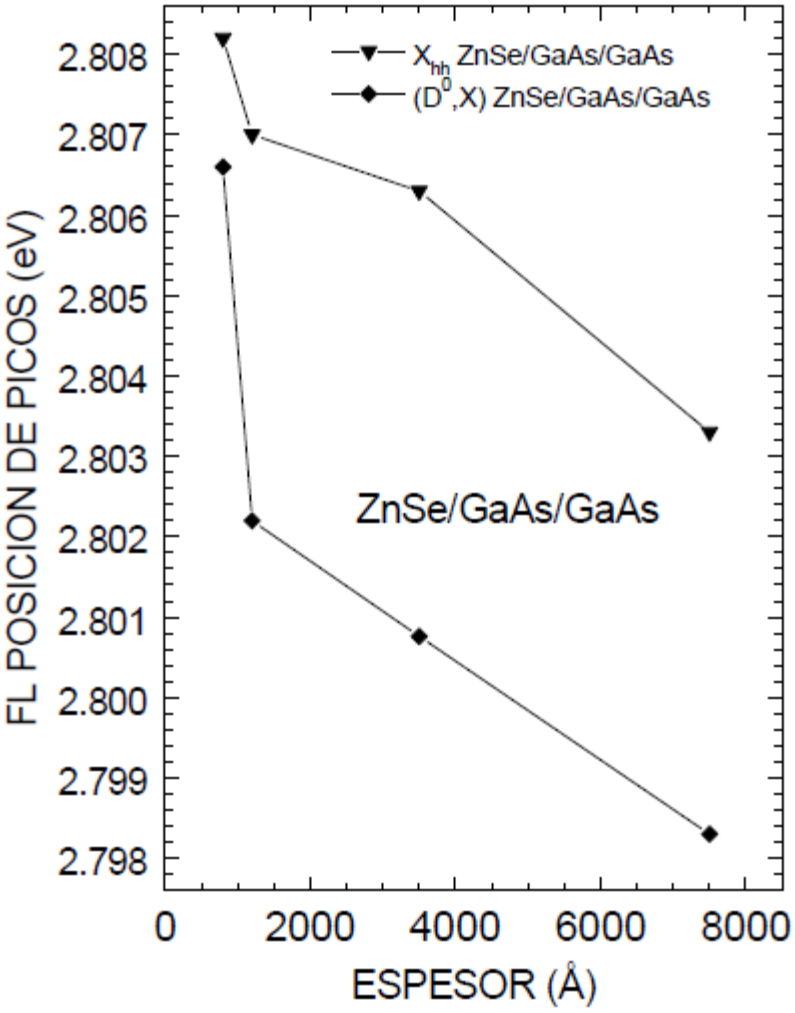


Figura 14. **Capas de ZnSe con capa intermedia. Energías de las señales X_{hh}, D^0, X, en dependencia del grosor de las capas.**



c) Análisis estructural realizado con microscopía electrónica de transmisión.

En la figura 15 y figura 16 se presentan microfotografías de la muestra B1 y B2, respectivamente, observadas en la configuración de (a) vista plana PV, y (b) sección transversal X. En ambas microfotografías de la capa de 800 Å (Figura 15), se aprecia las manchas relacionadas con las fallas de apilamiento con una densidad de $5x10^8/cm^2$. Es notable destacar que no se observan dislocaciones de desajuste.

Figura 15. **Microfotografías de muestra B1, 800 Å**

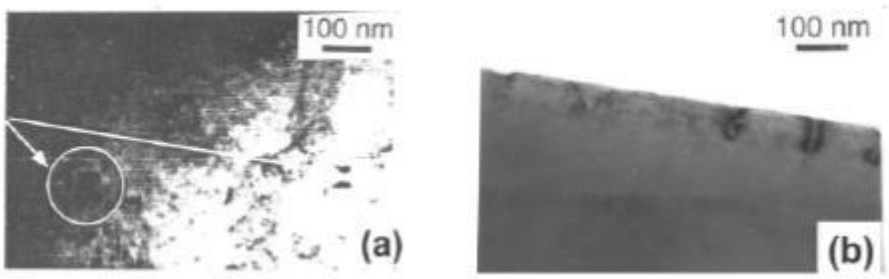
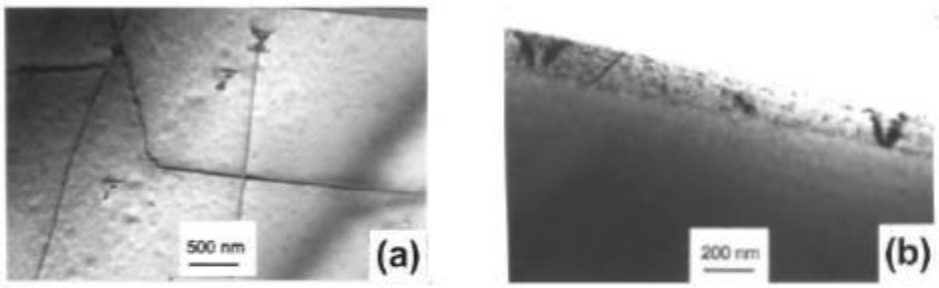


Figura 16. **Microfotografías de la muestra B2 1500 Å**



En la Figura 16 se presentan microfotografías de la muestra B2, capa de 1500 Å de grosor, se observan en la vista PV fallas de apilamiento en la capa de ZnSe. Sin embargo, la densidad de estos defectos disminuye a $1x10^8/cm^2$. En esta microfotografía se observa el surgimiento de defectos en la forma de segmentos de líneas que están relacionados con dislocaciones de desajuste. Este es un resultado interesante que nos indica que el proceso de relajación de los esfuerzos producidos por el desacople en las constantes de las redes se inicia progresivamente antes de alcanzar el grosor de 1700 Å correspondiente al espesor crítico.

Tabla 5. **Magnitudes de la cantidad de fallas de apilamiento/ cm² de las capas de ZnSe con película intermedia calculadas con microscopía electrónica de transmisión**.

Muestra	Grosor capa de ZnSe	Fallas de apilamiento	Dislocaciones de Desajuste
B1	800 Å	$5x10^8/cm^2$	No observadas
B2	1200 Å	$1x10^8/cm^2$	Segmentos
B3	3500 Å	No observadas	Malla irregular

Los resultados anteriores se resumen en el Tabla 5. Realizando un análisis de los resultados se puede deducir que a medida que se incrementa el grosor de las capas, decrece la cantidad de fallas de apilamiento y paralelamente la cantidad de dislocaciones de desajuste se incrementa. Cuando el grosor de las capas de ZnSe superan al espesor critico se producen mallas de dislocaciones de desajuste y las fallas de apilamiento disminuyen notablemente. Esto sugiere que podría haber una relación entre el incremento de las dislocaciones de desajuste y el decremento de las fallas de apilamiento. En la referencia [34] se propone un posible mecanismo para explicar esta correlación a través de interacciones entre dislocaciones parciales Shockley con otras dislocaciones parciales tipo Frank, que delimitan las fallas de apilamiento y generan las dislocaciones denominadas de desajuste. Las reacciones entre las dislocaciones parciales ocurren muy cerca a la interfaz película y sustrato, se decriben por las ecuaciones:

$$\frac{a}{3}\langle 111\rangle + \frac{a}{6}\langle \bar{2}11\rangle \rightarrow \frac{a}{2}\langle 011\rangle \tag{18}$$

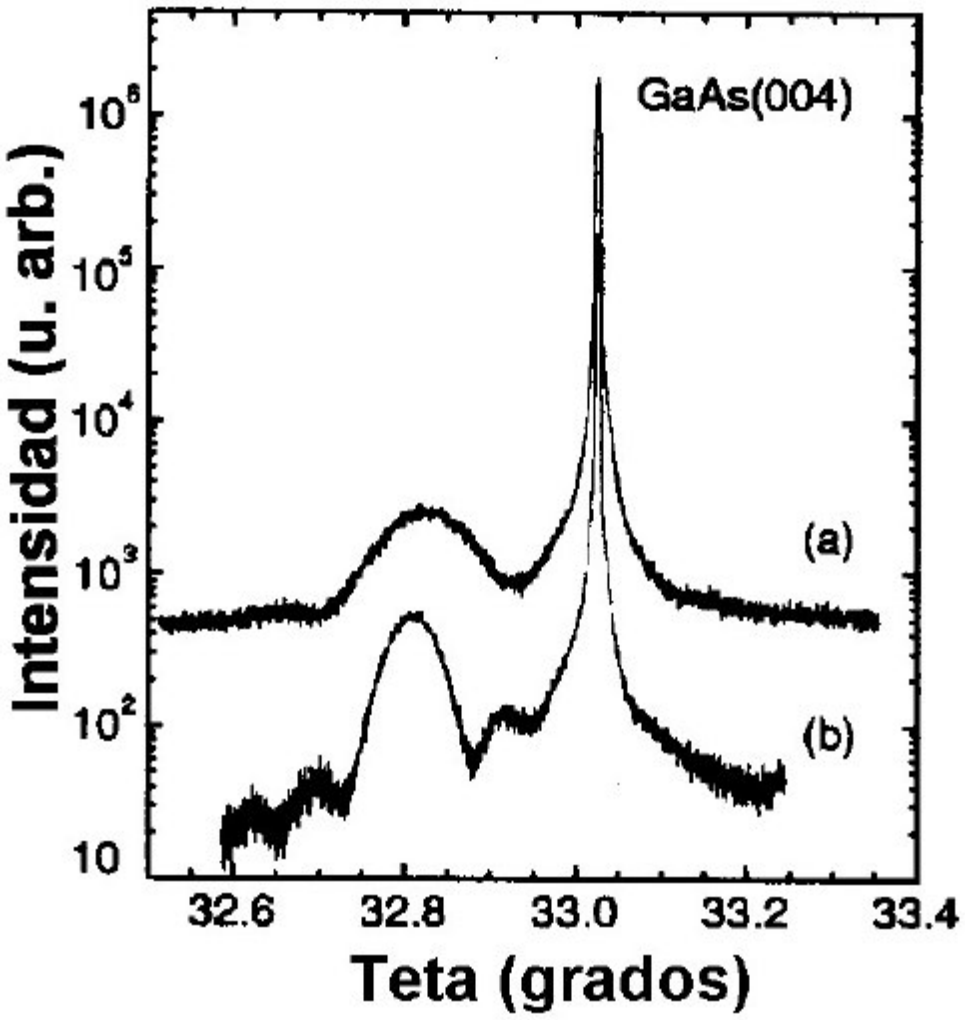
$$\frac{a}{6}\langle 112\rangle + \frac{a}{6}\langle \bar{1}21\rangle \rightarrow \frac{a}{2}\langle 011\rangle \tag{19}$$

Estas interacciones podrían suceder cuando la capa experimenta un aumento en su energía potencial elástica cuando el grosor de las capas aumenta, debido al desacople

que hay entre de las redes. De esta manera la capa sufre tremendos esfuerzos de tal manera que las fallas de apilamiento pueden interaccionar conforme a las ecuaciones (18) y (19). A medida que el grosor de las capas aumenta hasta al espesor crítico, las fallas de apilamientos interaccionan y producen dislocaciones de desajuste. Como consecuencia para grosores mayores que el espesor critico la cantidad de fallas de apilamiento disminuye y se genera una malla de dislocaciones, como se observa en la Figura 16. Se puede observar que esta red de dislocaciones no está constituida por líneas de dislocaciones ortogonales, sino por un arreglo irregular de dislocaciones, el origen de esta forma irregular aún no se conoce. Los resultados experimentales indican que para las capas de ZnSe depositadas sobre capas intermedias de GaAs con espesores menores al espesor crítico, la densidad de fallas de apilamiento decrece en un orden de magnitud comparada con la obtenida para las muestras con espesores similares pero crecidas sin capa intermedia. Esto nos indica que la calidad cristalina es mejor para las capas de ZnSe depositadas sobre capa intermedia de GaAs, como se obsertva también en la Figura 17 a través del espectro de difracción de rayos X de alta resolución.

La Figura 17 muestra espectros de difracción de rayos X de alta resolución de las películas de ZnSe con grosor de 800 Å: a) sin capa intermedia muestra A1, y (b) con capa intermedia muestra B1. En los dos espectros se observa el pico (004) relacionado con las capas de ZnSe alrededor de 32.80°, sin embargo, en (a) la señal es más ancha y menos intensa, debido a una menor calidad estructural de la capa. Pero en (b) se observa oscilaciones pequeños alrededor de la señal, estas se originan por fenómenos de interferencia en capas muy delgadas y son una prueba de que existe una mejor coherencia en la interfaz. Con los resultados obtenidos se puede concluir que se producen mejores capas de ZnSe cuando se depositan sobre capas intermedias de GaAs.

Figura17. **a) Muestra A1 sin capa intermedia, b) muestra B1 con capa intermedia, graficas experimentales difracciones de rayos X.**



CONCLUSIONES

1) En general las películas de ZnSe crecidas con capas colchón presentan mejores propiedades ópticas, señales más intensas y más angostas que las crecidas directamente sobre el sustrato, como se aprecia en los espectros de fotoreflectancia, fotoluminiscencia y también mejores propiedades estructurales que se observan en las microfotografías de microscopía electrónica de transmisión y en el espectro de difracción de rayos X
2) Para las muestras crecidas sin capa intermedia las magnitudes de los campos eléctricos en la interfaz son mayores que para aquellas muestras depositadas con capa intermedia. Se propone que esto sucede porque la interfaz película capa intermedia tiene una mejor estequiometría y homogeneidad.
3) Las capas de ZnSe que se depositaron sobre el sustrato de GaAs sin capa intermedia tienen dos señales diferentes a las películas depositadas con capa intermedia, un pico de fotoluminiscencia ubicado a una energía de 2.7 eV y una señal de fotoreflectancia a 1.39 eV. Se propone que el origen de estas señales podría estar relacionado por las reacciones químicas que se producen en la interfaz capa sustrato, que generan la difusión del Zn hacia el sustrato y la formación de pares GaZn y VZn.
4) Se ha realizado un estudio de los cambios de la cantidad de fallas de apilamiento en dependencia del grosor de las capas. La capa de 800 Å sin capa intermedia tiene una alta densidad de fallas de apilamiento en el orden de 10^9 /cm^2. Usando la capa intermedia esta cantidad disminuye un orden de magnitud
5) Cuando el grosor de las capas se acerca al espesor critico surgen segmentos de dislocaciones de desajuste para la capa de 1500 Å de grosor. El origen de estas dislocaciones podría estar relacionado con las interacciones entre las fallas de apilamiento, debido a la mayor energía potencial elástica de la capa a medida que su espesor se acerca al grosor crítico y que produce un intenso campo de esfuerzos.

RECOMENDACIONES

- Se recomienda usar la técnica de microscopía de fuerza atómica (AFM) para seguir estudiando las superficies del sustrato y de la capa intermedia en dependencia de los métodos limpieza y tratamiento de la superficie del sustrato y también en función de las variables de los procesos de crecimiento como son la temperatura del sustrato, y la razón de los flujos de Zn/Se.
- Se recomienda utilizar los materiales ternarios de los grupos III-V como AlGaAs , InGaAs, investigando las concentraciones adecuadas de aluminio y de indio, para preparar las capas intermedias, debido a que tienen constantes de redes cristalinas similares, y se podria minimizar la segregación del galio en la pelicula de ZnSe.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. DePuydt, J.M., Haase, M.A., Guha, S., Qiu, J., Cheng, H., Wu, B.J., Höfler, G.E., Meis-Haugen, G., Hagedorn, M.S., Baude, P.F. (1994) Room temperature II–VI lasers with 2.5 mA threshold. Journal of Crystal Growth, 138 (1). 667-676
   https://www.mindat.org/reference.php?id=2816940
   doi:10.1016/0022-0248(94)90889-3
2. Qiu, J., Cheng, H., DePuydt, J.M., Haase, M.A. (1993) Recent developments in the MBE growth of wide bandgap II – VI semiconductors for laser diodes and LEDs. Journal of Crystal Growth, 127 (1). 279-286
   https://www.mindat.org/reference.php?id=2810443
   doi:10.1016/0022-0248(93)90622-4
3. Guha, S., Cheng, H., Haase, M. A., DePuydt, J. M., Qiu, J., Wu, B. J., Hofler, G. E. (1994) 〈100〉 dark line defect in II-VI blue-green light emitters. Applied Physics Letters, 65 (7). 801-803
   https://www.mindat.org/reference.php?id=8511347
   doi:10.1063/1.112234
4. Jos E. Boschker , Uwe Spengler, Peter Ressel , Martin Schmidbauer , Anna Mogilatenko, and Andrea Knigge Stability of ZnSe-Passivated Laser Facets Cleaved in Air and in Ultra-High Vacuum, IEEE Photonics Journal, Vol. 14, No. 3, June 2022
   https://www.researchgate.net/publication/360820632_Stability_of_ZnSe-Passivated Laser Facets cleaved in air and in ultra-high vacuum
   DOI:10.1109/JPHOT.2022.3176675
5. I. Hernandez Calderon, E. Luna, J. Luyo, Melendez Lira, O. de Melo, and Sitter Investigation of the structural properties of MBE grown ZnSe/GaAs heterostructures
   May 1997 Journal of Crystal Growth 175-176:571-576
   https://www.researchgate.net/publication/260827593 Investigation of the structural properties of MBE grown ZnSe/GaAs heterostructures
   DOI:10.1016/S0022-0248(96)01215-8

6. Tran Thi Kim Chi, Bui Thi Thu Hien, Man Hoai Nam, and Pham Nguyen Hai, Structural and Optical Properties of ZnSe Nanoparticles Journal of Nanoscience and Nanotechnology Vol. 21, 2582–2587, 2021.
https://www.researchgate.net/publication/350559130 Structural and Optical Properties of ZnSe Nanoparticles
DOI:10.1166/jnn.2021.19114
7. Akihiro Ohtake, Takashi Hanada, Tetsuji Yasuda, Kenta Arai and Takafumi Yao Structure and composition of the ZnSe(001) surface during atomic-layer epitaxy Phys. Rev. B 60, 8326, 1999.
https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.60.8326
DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.8326
8. D.E. Aspnes and Studna, Schottky-Barrier Electroreflectance: Application to GaAs, Physical Review B 7, 4605 (1973)
https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.7.4605
DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.7.4605
9. M.E. Constantino, H. Navarro, G. Ramírez, M.A. Vidal, A. Lastras, I. Hernández Calderón, O. de Melo, and M. López López, Near band-edge optical properties of GaAs at interfaces of ZnSe/GaAs/GaAs by phase selection in photoreflectance Appl. Surf. Sci. 134, 95 (1998)
https://www.researchgate.net/publication/234870065
DOI:10.1063/1.370747
10. Zongjian Fan, Krishna Yaddanapudi, Ryan Bunk, Subhash Mahajan, Jerry M. Woodall, Interface studies of molecular beam epitaxy (MBE) grown ZnSe–GaAs heterovalent structures, Journal of Applied Physics 127, 245701 (2020)
https://pubs.aip.org/aip/jap/article-abstract/127/24/245701/1078664/Interface-studies-of-molecular-beam-epitaxy-MBE?redirectedFrom=fulltext
https://doi.org/10.1063/5.0008780
11. B.O. Seraphin and N. Bottka, Franz-Keldysh Effect of the Refractive Index in Semiconductors, Phys. Rev. 139, A560, 1965.
https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.139.A560
DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRev.139.A560
12. B.J. Skromme, S.M. Shibli, J.L. De Miguel , and M.C. Tamargo, Photoluminescence characterization of ZnSe doped with Ga by bulk and planar doping techniques in molecular-beam epitaxy, J. Appl. Phys. 65, 3999 (1989)

https://pubs.aip.org/aip/jap/article
abstract/65/10/3999/174951/Photoluminescence-characterization-of-ZnSe-doped?redirectedFrom=fulltext
https://doi.org/10.1063/1.343342

13. L.H. Kuo, K. Kimura, S. Miwa, T. Yasuda, and T. Yao, Dependence of generation and structures of stacking faults on growing surface stoichiometries in ZnSe/GaAs Appl. Phys. Lett. 69, 1408 (1996).
https://pubs.aip.org/aip/apl/article-abstract/69/10/1408/519493/Dependence-of-generation-and-structures-of?redirectedFrom=fulltext
https://doi.org/10.1063/1.117597

14. V.S. Ganesha Kaishna, M.G. Mahesha, Influence of the substrate temperature on the structural, optical, and morphological properties of (1 0 1) oriented ZnSe thin films for window applications in solar cells, Materials Today: Proceedings Vol. 58, Part 2, 623-626, (2022).
https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S2214785321081499?via%3Dihub
https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.12.407

15. Akihuro Ohtake, Schiro Miwa, Li Hsin Kuo, Tetsuji Yosuda, Kozo Kimura, Cheng Jim, Takafumi Yao, Characterization and control of II–VI/III–V heterovalent interfaces,Journal Crystal Growth, Vols. 184-185, 163-172 (1998).
https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022024898803151
https://doi.org/10.1016/S0022-0248(98)80315-1

16. Duy Hoang Nguyen, Sung Hun Kim, Joon Sue Lee, Dong Su Lee, Hong, Seok Lee, Reaction dependent theoretical perspectives of colloidal ZnSe quantum dots, Scientific Reports Vol. 14 Article number 13982 (2024).
https://www.nature.com/articles/s41598-024-64995-5
https://doi.org/10.1038/s41598-024-64995-5

17. S. Myhajlenko, J. L. Batstone, H. J. Hutchinson and J W Steeds, Luminiscence studies of individual dislocations in II-VI (znSe) and III-V (InP) semiconductors, Journal of Physics C: Solid State Physics, Vol. 17, 35,(1984)
https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0022-3719/17/35/017/meta
DOI 10.1088/0022-3719/17/35/01

18. M. Pirzer, B. Sailer, M.Ch. Lux-Steiner, E. Bucher, J.J. Dubowski, S.J. Rolfe

Characterization of ZnSe/GaAs heterojunctions by SIMS and ellipsometry,Physica B: Condensed Matter Vol.185, 580, (1993.)
https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/092145269390299L
https://doi.org/10.1016/0921-4526(93)90299-L

19. Zhong Yuan, Yang Huang, Zhaojin Wang, Jiayun Sun, Chengwei Shan, Yiguo Xu. Dan Wu, AiweiTang, Xiao Wei, Kai Wang, Surface Defects Passivation of ZnSeTe/ZnSe/ZnS Quantum Dots by Iodine Ions for Highly Efficient Blue Light-Emitting Diodes, Advanced optical materials, Vol.12 Issue 35, (2024).
https://advanced.onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.1002/adom.202401884
https://doi.org/10.1002/adom.202401884

20. Yifeng Wu, Kelsy Mirrielees, Douglas Irwing, On Native point defects in ZnSe, Applied Physics Letters, Vol. 120, Issue 23, (2022).
https://pubs.aip.org/aip/apl/article/120/23/232102/2833661/On-native-point-defects-in-ZnSe
https://doi.org/10.1063/5.0092736

21. Sadao Adachi, Tsunemasa, Taguchi, Optical properties of ZnSe, Phys. Rev. B43, 9569,(1991).
https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.43.9569
DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.9569

22. Jianpu Xi, Shicong Liu, Lijuan Deng, Yong Yue, Qiudong Li, Effects of vacancy defects on the electronic structure and optical properties of ZnSe and ZnSe:Cr, Appl.Opt. 64(10), 2623, (2025).
https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/40793408/
DOI: 10.1364/AO.551343

23. Cansu Emir, Adam Tataroglu, Ugur Gokman, and Sema Ocak, Analysis of the structural and optical characteristics of ZnSe thin films as interface layer,J. Mater. Sci: Electron 36: 168 (2025).
https://link.springer.com/article/10.1007/s10854-025-14221-3
https://doi.org/10.1007/s10854-025-14221-3

24. T. Gerhard, D. Albert, W. Faschinger, High resolution X ray diffraction study of degrading ZnSe based laser diodes, Journal of Crystal Growth, Vol. 214-215, 1049, (2000).
https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022024800002724?via%3Dihub
https://doi.org/10.1016/S0022-0248(00)00272-4

25. A. Rosenauer, T. Reisinger, F.Franzen, G. Schultz, B.Hahn, K. Wolf, J. Zweck, W. Gebhardt,

Transmission electron microscopy and reflected high energy electron diffraction investugation of plastic relaxation in doped and undoped ZnSe/GaAs (001) https://pubs.aip.org/aip/jap/article-abstract/79/8/4124/522570/Transmission-electron-microscopy-and-reflected https://doi.org/10.1063/1.361776

26. Y. Chen, X.Liu, E.Weber, E. Bourret, Z. Lilliental, E. Haller, J. Washbum, D.J. Olego, D. Dorman, J. Gaines, N. Tasker, Structures and electronic properties of misfit dislocations in ZnSe/GaAs (001) heterojunctions, Appl. Phys. Lett. 65, 549–551 (1994) https://pubs.aip.org/aip/apl/article-abstract/65/5/549/63931/Structures-and-electronic-properties-of-misfit https://doi.org/10.1063/1.112293
27. S. Heun, J. Paggel, L. Sorba, S. Rubini, A. Franciosi, J. Bonard, J. Ganiere, Interface composition and stacking fault density in II-VI/III-V heterostructures, Appl. Phys. Lett. 70, 237–239 (1997) https://pubs.aip.org/aip/apl/article-abstract/70/2/237/520510/Interface-composition-and-stacking-fault-density https://doi.org/10.1063/1.118338
28. L.H.Kuo, K. Kimura, S. Miwa, T. Yasuda, A. Ohtake, T. Yao, Dependence of defect generation and structure on interface chemistry in ZnSe/GaAs, Applied Surface Science, Vol.117-118, 495-502, (1995). https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0169433297801316 https://doi.org/10.1016/S0169-4332(97)80131-6
29. Yong, Hang Zhang, David Smith, Heterovalent semiconductor structures and devices grown by molecular beam epitaxy, J. Vac. Technol. A39, 030803 (2021). https://pubs.aip.org/avs/jva/article/39/3/030803/1079668/Heterovalent-semiconductor-structures-and-devices https://doi.org/10.1116/6.0000802
30. Narayan Narkhede, V.S. Bakiskar, S.R. Gosavi, Dee Paschiri, and Prakash Ahirrao, Synthesis of ZnSe Thin Films for Advanced Photodetector Applications: Impact of Deposition Time on Structural, Optical and Photoresponse Properties, Asian Journal of Chemistry, Vol. 38, N°1, 133-140, (2025). https://www.researchgate.net/publication/399254741_Synthesis_of_ZnSe_Thin_Films_for_Advanced_Photodetector_Applications_Impact_of_Deposition_Time_on_Structural_Optical_and_Photoresponse_Properties. https://doi.org/10.14233/ajchem.2026.34896

31. Utz Bass, J. Geurts, A. Frey, Surya Mahapatra, Analysis of the depletion layers and conduction band barrier at the n-ZnSe/n-GaAs interface for different growth start procedures, Physica, Status Solidi (c) Current topics in solid state physics 9 (6): 1400-1403 (2012). https://www.researchgate.net/publication/258691953_Analysis_of_the_depletion_layers_and_conduction_band_barrier_at_the_n-ZnSen-GaAs_interface_for_different_growth_start_procedures https://doi.org/10.1002/pssc.201100679?urlappend=%3Futm_source%3Dresearchgate.net%26utm_medium%3Darticle
32. J. Qiu, D.R. Menke, M. Kobayashi, R.L. Gunshor, Q.D. Qian, D. OtsuKa, Heterovalent interfaces: Interfaces microstructures versus electrical properties, Journal of Crystal Growth, Vol. 111, issues 1-4, 747- 751, (1991). https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/002202489191074K https://doi.org/10.1016/0022-0248(91)91074-K
33. Chaomin Zhang, Kirstin Alberi, Christiana Honsberg, Kwangwook Park, ZnSe growth by molecular beam epitaxy without a buffer layer, Applied surface science vol. 549, 149245 (2021). https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0169433221003214 https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.149245
34. Y.M. Yu, S. Nam, Byungsung, K.S. Lee, P.Y. Yu, Jongwon Lee, Y.D. Choi, Strain, effect in ZnSe epilayers grown on GaAs substrates, Journal of Crystal Growth, Vol. 243, issues 3-4, 389-395, (2002). https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022024802015415 https://doi.org/10.1016/S0022-0248(02)01541-5

GLOSARIO

Heteroestructura ZnSe/GaAs : Capas delgadas de ZnSe depositadas sobre sustrato de GaAs.

Heteroestructura ZnSe/GaAs/GaAs : Películas de ZnSe depositadas sobre sustrato de GaAs, con capa colchón de GaAs

MBE: Sistema de crecimiento epitaxial de capas finas por haces moleculares en un ambiente de ultra alto-vacío en el orden de 10^{-11} Torr

Gap: Energía de la banda prohibida de un semiconductor

Espesor critico: Valor umbral del espesor de la película de ZnSe, para iniciar el proceso de disipacion de la energía elástica de deformacion a través de la formación de dislocaciones de desajuste

Fotoreflectancia: Espectroscopía de modulación, la cual mide los cambios de reflectancia del material producido por la energía de fotones de una fuente externa que tienen un valor mayor que la energía de la banda probibida del material.

Fotoluminiscencia: Radiación electromagnética que emite un material, generalmente a baja temperatura, el cual es perturbado por una fuente externa de luz.

Capa colchón: Capa intermedia entre la película y el sustrato, la cual se deposita con la finalidad de mejorar la calidad de la interfaz película-sustrato.

Epitaxia: Tipo de crecimiento ordenado de capas cristalinas que ocurre cuando se deposita sobre sustratos cristalinos.

Oscilaciones Franz Keldysch: Oscilaciones en los espectros de fotoreflectancia que se producen a energías mayores que la banda prohibida del semiconductor, debido a campos eléctricos internos intensos en la interfaz película sustrato.