



"El saber de mis hijos  
hará mi grandeza"

**UNIVERSIDAD DE SONORA**

División De Ciencias Exactas Y Naturales

Departamento De Investigación En Física

**Síntesis y Estudio de Aleaciones de  $Al_xGa_{1-x}N$  por el método de  
reacción directa para Aplicaciones en Dispositivos  
Optoelectrónicos**

Tesis para Obtener el Grado de Maestro en Ciencias (Física)

**Presenta**

Sael Beltran Torres

**Director de Tesis**

Rafael García Gutiérrez

Hermsillo, Sonora, México. Noviembre Del 2022

# Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos  
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess



## **Agradecimientos**

Agradezco infinitamente a mi familia, en especial a mis padres, ya que sin su amor y sin su apoyo incondicional esto no fuera posible.

Al Dr. Rafael García Gutiérrez, director de tesis y mentor, por guiarme en mi formación como investigador y por su confianza en llevar a cabo este trabajo.

Al comité tutorial, Dr. Guillermo Arreaga García y Dr. José Manuel Cortez Valadez, por formar parte de la evaluación de mis seminarios de investigación semestre tras semestre.

Al Dr. Oscar Edel Contreras López, por ayudarme con la caracterización del material en las instalaciones del CNyN-UNAM.

A los miembros del jurado: Dr. Román Castro Rodríguez, Dr. Dainet Berman Mendoza, Dr. Mario Flores Acosta, por formar parte del proceso de evaluación de mi examen de grado, además de brindar las observaciones precisas para corregir mi Tesis de Maestría.

Al Dr. Raúl Aceves Torres, coordinador del Posgrado en Ciencias (Física), por su ayuda con todos los procesos relacionados al CONACYT y al DIFUS.

A todos los maestros que alguna vez tuve en la Maestría en Ciencias (Física) del Departamento de Investigación en Física de la Universidad de Sonora.

Al CONACYT, por otorgarme una beca de posgrado para cursar la maestría.



## Contenido

<b>1. INTRODUCCIÓN</b> .....	1
<b>1.1. RESUMEN</b> .....	1
<b>1.2. ABSTRACT</b> .....	2
<b>1.3. OBJETIVO GENERAL</b> .....	4
<b>1.4. OBJETIVOS PARTICULARES</b> .....	4
<b>2. NITRUROS</b> .....	5
<b>2.1 HISTORIA, DEFINICIÓN E IMPORTANCIA.</b> .....	5
<b>2.2 TIPOS DE NITRUROS</b> .....	5
<b>2.3 CARACTERÍSTICAS DE LOS NITRUROS</b> .....	6
<b>2.4 MÉTODOS DE FABRICACIÓN</b> .....	7
<b>2.5 NITRURO DE ALUMINIO</b> .....	7
<b>2.6 NITRURO DE GALIO</b> .....	7
<b>2.7 APLICACIONES</b> .....	8
<b>3. MÉTODO DE SÍNTESIS Y TÉCNICAS DE CARACTERIZACIÓN</b> .....	9
<b>3.1 SÍNTESIS DE AlN</b> .....	9
<b>3.2 SÍNTESIS DE GaN</b> .....	10
<b>3.3 SÍNTESIS DE <math>Al_xGa_{1-x}N</math></b> .....	11
<b>3.4 DIFRACCIÓN DE RAYOS-X (XRD)</b> .....	15
<b>3.5 MICROSCOPIA ELECTRÓNICA DE BARRIDO (SEM)</b> .....	16
<b>3.6 ESPECTROSCOPIA DE DISPERSIÓN DE ENERGÍA (EDS)</b> .....	18
<b>3.7 CATODOLUMINISCENCIA (CL)</b> .....	20
<b>3.8 CATODOLUMINISCENCIA INTRÍNSECA</b> .....	22
<b>3.9 CATODOLUMINISCENCIA EXTRÍNSECA</b> .....	24
<b>3.10 ESPECTROSCOPIA UV-VIS DE REFLECTANCIA DIFUSA</b> .....	25
<b>3.11 MÉTODO DE KUBELKA-MUNK</b> .....	29
<b>4. RESULTADOS Y DISCUSIONES</b> .....	31
<b>4.1 MÉTODO DE PREPARACIÓN</b> .....	31
<b>4.2 DIFRACCIÓN DE RAYOS X (XRD)</b> .....	31
<b>4.3 SCANNING ELECTRON MICROSCOPE (SEM)</b> .....	39
<b>4.4 ESPECTROSCOPIA DE DISPERSIÓN DE ENERGÍA (EDS)</b> .....	47
<b>4.5 CATODOLUMINISCENCIA (CL)</b> .....	51
<b>4.6 ESPECTROSCOPIA UV-VIS DE REFLECTANCIA DIFUSA</b> .....	55

5. CONCLUSIONES .....	60
6. REFERENCIAS .....	63
7. APÉNDICE .....	69

# 1. INTRODUCCIÓN

## 1.1. RESUMEN

El nitruro de galio aluminio (AlGaN) es un material semiconductor del Grupo III – V que corresponde a los nitruros. Es cualquier aleación de nitruro de aluminio y nitruro de galio. La banda prohibida de  $Al_xGa_{1-x}N$  se puede adaptar de 3.4 eV ( $x=0$ , GaN) a 6.2 eV ( $x=1$ , AlN).<sup>[1][2]</sup> Este material ha sido objeto de interés en las últimas décadas debido a sus aplicaciones, tales como: fabricación de diodos emisores de luz que operan en la región azul a ultravioleta, láseres semiconductores azules, detectores de radiación UV y transistores de alta movilidad de electrones.<sup>[3][4]</sup>

Actualmente ya se tiene bien documentada la creación de diodos emisores de luz azul, los cuales se fabrican con GaN y otras aleaciones y materiales. La importancia de este material (AlGaN) es que puede ser utilizado para la creación de diodos emisores de luz ultravioleta.<sup>[5][6]</sup>

En la literatura científica existen registros de síntesis de AlGaN; por ejemplo, AlGaN depositado en películas delgadas mediante el método ALD<sup>[7]</sup>, AlGaN en forma de nanoflores por el método MOCVD<sup>[8]</sup>, nanoestructuras de AlGaN utilizando el método sol-gel con etileno<sup>[9]</sup>, nanotubos de AlGaN por MBE<sup>[10]</sup>, etc. Sin embargo, existe muy poca o casi nula literatura acerca de la creación de AlGaN en polvo (bulk, freestanding) mediante una reacción directa entre AlGa y gas  $NH_3$ , tal como se hace en la creación de AlN y GaN.

Este método, a comparación de los antes mencionados, es relativamente más barato, ya que no requiere de equipo sofisticado más allá de un horno tubular de cuarzo (reactor CVD), bomba de vacío, y los precursores a utilizar; además no requiere el uso de organometales, los cuales son costosos. Otra característica de este método es el tiempo de síntesis, el cual sería en promedio de 2 horas.

En este trabajo se sintetizó AlGaN en diferentes concentraciones. Se obtuvo el material creando una aleación de Aluminio y Galio (AlGa), que reaccionó directamente con



amoníaco en un reactor CVD a altas temperaturas, durante un tiempo determinado. Se estudiaron las propiedades estructurales, compositivas, morfológicas, ópticas y optoelectrónicas del material mediante técnicas de caracterización como XRD, SEM, EDS, UV-VIS y CL.

Se realizaron los estudios y se encontró que el  $Al_xGa_{1-x}N$  tiene una estructura cristalina hexagonal (HCP). Los estudios de composición química muestran resultados consistentes cuando se modificó la cantidad de Aluminio y Galio. Los estudios de catodoluminiscencia mostraron que los materiales tienen una banda prohibida entre 3.02 eV y 3.35 eV.

## 1.2. ABSTRACT

Aluminum gallium nitride (AlGaN) is a Group III semiconductor material – Nitrides. It is any alloy of aluminum nitride and gallium nitride. The band gap of  $Al_xGa_{1-x}N$  can be adapted from 3.4 eV ( $x=0$ , GaN) to 6.2 eV ( $x=1$ , AlN). <sup>[1][2]</sup> This material has been the object of interest in recent decades due to its applications, such as: manufacturing of light-emitting diodes that operate in the blue to ultraviolet region, blue semiconductor lasers, UV radiation detectors and high electron mobility transistors. <sup>[3][4]</sup>

Currently, the creation of blue light-emitting diodes, which are manufactured with GaN and other alloys and materials, is well documented. The importance of this material (AlGaN) is that it can be used to create ultraviolet light-emitting diodes. <sup>[5][6]</sup>

In the scientific literature there are records of AlGaN synthesis; for example, AlGaN deposited in thin films by the ALD method <sup>[7]</sup>, AlGaN in the form of nanoflowers by the MOCVD method <sup>[8]</sup>, AlGaN nanoparticles using the ethylene sol-gel method <sup>[9]</sup>, AlGaN nanotubes by MBE <sup>[10]</sup>, etc. However, there is very little or no literature on the creation of AlGaN powder (bulk, freestanding) by a direct reaction between AlGa and NH<sub>3</sub> gas, as is done in the creation of AlN and GaN.

This method, compared to those mentioned above, is relatively cheaper, since it does not require sophisticated equipment beyond a quartz tube furnace (CVD reactor), a vacuum pump, and the precursors to be used; it also does not require the use of organometals, which are expensive. Another characteristic of this method is the synthesis time, which would be an average of 2 hours.

In this work, AlGa<sub>x</sub>N was synthesized in different concentrations. We obtained the material by creating an alloy of Aluminum and Gallium (AlGa), which reacted directly with ammonia in a CVD reactor at high temperatures, for a certain time. The structural, compositional, morphological, optical and optoelectronic properties of the material were studied using characterization techniques such as XRD, SEM, EDS, UV-VIS and CL.

The studies were carried out and we found that  $Al_xGa_{1-x}N$  has a hexagonal crystal structure (HCP). Chemical composition studies gave us consistent results when the amount of Aluminum and Gallium was modified. Cathodoluminescence studies showed that the materials have a band gap between 3.02 eV and 3.35 eV.

### 1.3. OBJETIVO GENERAL

Sintetizar y caracterizar AlGaN en polvo mediante los métodos propuestos.

### 1.4. OBJETIVOS PARTICULARES

1. Sintetizar Nitruro de Aluminio (AlN) mediante reacción directa.
2. Sintetizar Nitruro de Galio (GaN) mediante reacción directa.
3. Mezclar Galio y Aluminio para formar  $Al_xGa_{1-x}$ .
4. Tratar al  $Al_xGa_{1-x}$  con una atmosfera de amoníaco ( $HN_3$ ) para obtener  $Al_xGa_{1-x}N$ .
5. Obtención de la morfología del material mediante la técnica SEM.
6. Obtención de la composición química de los polvos mediante la técnica EDS.
7. Obtención de la estructura cristalina mediante la técnica XRD.
8. Obtención del valor de la banda prohibida mediante la técnica CL.
9. Obtención de la intensidad de absorbción y valor de la banda prohibida mediante la técnica UV-VIS de reflectancia difusa y el método de Kubelka-Munk.

## 2. NITRUROS

### 2.1 HISTORIA, DEFINICIÓN E IMPORTANCIA.

El nitruro es cualquiera de una clase de compuestos químicos en los que el nitrógeno se combina con un elemento de electronegatividad similar o inferior, como el boro, el silicio y la mayoría de los metales. Los nitruros contienen el ion nitruro ( $N^{3-}$ ) y, al igual que los carburos, los nitruros se pueden clasificar en tres categorías generales: iónicos, intersticiales y covalentes.

Shuji Nakamura [Seto (Japón), 1954] es un científico japonés, nacionalizado estadounidense. Inventó el primer LED GaN de alto brillo. Galardonado con el Premio Nobel de Física en el año 2014 junto a Isamu Akasaki e Hiroshi Amano por la invención de eficientes diodos de emisión de luz azules (LEDs), que han hecho posibles las fuentes de luz blanca brillantes y de bajo consumo.<sup>[35]</sup>

Shuji Nakamura inventó el LED azul, así como los LED verde y blanco y el diodo láser azul. Sus innovadores inventos tienen numerosas aplicaciones en campos que incluyen la comunicación y la información, la energía y el medio ambiente, y el cuidado de la salud y las ciencias de la vida.

Durante décadas, el LED azul brillante había eludido a los investigadores y su ausencia detuvo muchas tecnologías de visualización. Las innovaciones de Nakamura permitieron por primera vez el espectro completo de colores en los LED. Con una gama completa de colores, los LED se convirtieron en componentes esenciales de las pantallas planas y las vallas publicitarias de video. Los LED azules se utilizan para la visión artificial y los LED de color verde más brillante también han demostrado ser más fiables y eficientes en los semáforos.

Usando su trabajo en LED azules, Nakamura también inventó el láser azul que ha resultado en un aumento de cinco a diez veces en la capacidad de almacenamiento y la creación de nuevos estándares de la industria, como Blu-ray.

### 2.2 TIPOS DE NITRUROS

Los nitruros se pueden clasificar según su carácter de enlace. Se pueden distinguir cuatro grupos principales<sup>[36]</sup>:

- Los nitruros iónicos o salinos de los metales alcalinos, alcalinotérreos y de los metales pertenecientes al grupo 3 de la tabla periódica. Estos nitruros reaccionan con iones de hidrógeno para formar iones de amonio.
- Los nitruros covalentes se forman con elementos de los grupos 13 a 15 (p. ej., BN, Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>). Estos compuestos suelen ser muy duros; son no conductores o semiconductores.
- Los nitruros de metales de transición se clasifican como nitruros intersticiales; el carácter de unión es principalmente metálico.
- Los nitruros formadores de moléculas de los elementos del grupo principal 15 - 17 son a menudo volátiles y tienen puntos de fusión bajos. Pueden ser explosivos y descomponerse fácilmente.

### 2.3 CARACTERÍSTICAS DE LOS NITRUROS

Hay tres estructuras cristalinas comunes compartidas por los nitruros del grupo III: las estructuras de wurtzita, zincblenda y sal de roca. En condiciones ambientales, la estructura termodinámicamente estable es wurtzita para AlN, GaN e InN a granel. La estructura de blenda de zinc para GaN e InN se ha estabilizado mediante el crecimiento epitaxial de películas delgadas en planos cristalinos de sustratos cúbicos como Si, MgO y GaAs.

Los valores de banda prohibida son 1.9 eV para InN, 3.4 eV para GaN y 6.2 eV para AlN. Debido a sus anchos espacios de banda y su fuerte fuerza de unión, se pueden usar para dispositivos emisores de luz violeta, azul y verde y para transistores de alta temperatura. InN y AlN se pueden alear con GaN. Esto permite modular los intervalos de banda y las longitudes de onda de emisión. Usando AlGaIn o GaN como capas de barrera y revestimiento y GaN o InGaIn como capas activas, se pueden fabricar pozos cuánticos y superredes. Esto es importante porque la tecnología de heteroestructura utilizada en la fabricación de superredes es esencial para la fabricación de dispositivos modernos.

Un ejemplo de características de los nitruros compete al nitruro de aluminio. AlN exhibe muchas propiedades mecánicas y electrónicas útiles. Por ejemplo, la dureza, la alta conductividad térmica, la resistencia a las altas temperaturas y los productos químicos cáusticos combinados con, en forma no cristalina, una coincidencia térmica razonable con el Si y el GaAs, hacen del AlN un material atractivo para aplicaciones de embalaje electrónico. La amplia banda prohibida también es la razón por la que AlN se promociona como un material aislante en aplicaciones de dispositivos semiconductores.

## 2.4 MÉTODOS DE FABRICACIÓN

Las reacciones químicas más utilizadas para preparar nitruros incluyen <sup>[36]</sup>:

La nitruración de metales (en forma de polvo o compactos) o hidruros metálicos con nitrógeno molecular o atómico (activado) o en una corriente de amoníaco, posiblemente en presencia de un metal líquido (técnica de metales auxiliares) o a alta presión.

La reacción de cloruros o compuestos organometálicos con una mezcla nitrógeno-hidrógeno o amoníaco.

La reacción de óxidos metálicos con carbono, combinada con nitruración simultánea en presencia de nitrógeno o amoníaco en presencia de un agente reductor como el carbono.

La reacción de átomos metálicos, iones metálicos o *clusters* atómicos con átomos de nitrógeno o iones de nitrógeno en la fase gaseosa.

## 2.5 NITRURO DE ALUMINIO

El nitruro de aluminio, único compuesto conocido en el sistema Al-N, cristaliza con una estructura tipo wurtzita; no es tóxico. En forma de polvo, el nitruro de aluminio es de color gris pálido. A presión atmosférica, se evapora rápidamente por encima de 2000 K.

El nitruro de aluminio tiene una combinación favorable de propiedades físicas que lo hacen particularmente adecuado para dispositivos electrónicos: conductividad térmica inusualmente alta combinada con una alta resistencia eléctrica y un coeficiente de expansión térmica similar al del silicio.

Debido a la continua miniaturización de los componentes electrónicos, se necesitan disipadores de calor de nitruro de aluminio eficientes como sustratos para la disipación de calor; las cerámicas de óxido de aluminio convencionales ya no pueden cumplir los requisitos. Además, las capacidades de los chips aumentan continuamente, lo que requiere la elección adecuada de materiales con coeficientes de expansión térmica que se correspondan estrechamente con los del silicio.

## 2.6 NITRURO DE GALIO

El nitruro de galio cristaliza en estructura tipo wurtzita (también se ha descrito una modificación cúbica) y en su forma compacta es incoloro; sin embargo, puede asumir tonos de naranja a amarillo dependiendo de las impurezas o agentes dopantes (p. ej., Mg, Zn). El

nitruro de galio es casi completamente estable a los ácidos, pero se disuelve en soluciones alcalinas calientes.

El nitruro de galio es un semiconductor con una banda prohibida de 3.48 eV a 4.2 K. Sin embargo, sus propiedades electrónicas, como la concentración de portadores y la resistencia eléctrica, dependen en gran medida del método de preparación. El nitruro de galio se ha utilizado comercialmente como diodo emisor de luz (LED) solo desde 1985, aunque su idoneidad para este propósito se descubrió a principios de la década de 1970. Los LED de nitruro de galio se utilizan en medicina; emiten luz azul, que se utiliza para inducir la fluorescencia en los pigmentos sanguíneos con fines analíticos.

## 2.7 APLICACIONES

Hay muchos usos del nitruro, pero principalmente se utilizan como aislantes. Uno de los lubricantes a altas temperaturas es el nitruro de boro hexagonal que es extremadamente duro. La naturaleza lubricante se debe a su estructura en capas. Es similar al disulfuro de molibdeno. Los nitruros también se utilizan para cortar materiales y recubrimientos duros. Por ejemplo, se utilizan nitruro de titanio y nitruro de silicio para lo mismo. Esto se debe a que, al igual que los carburos, el nitruro tiene una alta energía de red y, por lo tanto, generalmente son sustancias refractarias. Los iones N<sup>3-</sup> tienen una fuerte atracción con los cationes metálicos. Debido a los grandes espacios de banda, el nitruro se comporta como aislantes. La luz azul emitida por las luces LED se debe a la excesiva banda prohibida en el nitruro de galio. Algunos nitruros, como el nitruro de litio, también se utilizan para almacenar hidrógeno, ya que pueden absorber óxidos metálicos similares al hidrógeno.

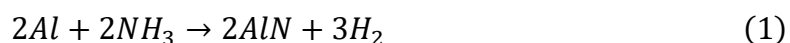
Ciertos nitruros metálicos son inestables y la mayoría reacciona con agua para formar amoníaco y el óxido o hidróxido del metal; pero los nitruros de boro, vanadio, silicio, titanio y tantalio son muy refractarios, resistentes al ataque químico y duros, y por lo tanto son útiles como abrasivos y en la fabricación de crisoles.

### 3. MÉTODO DE SÍNTESIS Y TÉCNICAS DE CARACTERIZACIÓN

#### 3.1 SÍNTESIS DE AlN

Para sintetizar el nitruro de aluminio, se utilizó el método de reacción directa entre aluminio y atmósfera de amoníaco (NH<sub>3</sub>).

La ecuación química de la reacción es la siguiente:



Para iniciar el proceso, se deposita aluminio en polvo en un crisol, como se muestra en la Figura 2. Posteriormente se introduce el crisol adentro del horno tubular de cuarzo, que se encuentra montado en un reactor CVD (horno) como el que se muestra en la Figura 1.

Una vez hecho esto, se cierra el tubo y el horno, y se hace un vacío de 1 hora a .001 Torr.

Se termina el vacío y empieza el tratamiento atmosférico del material con gas amoníaco a una temperatura de 1075°C, con una tasa de flujo volumétrico de 300 sccm (standard cubic centimeters per minute), durante 2 horas. Por último, se pulverizó el material en un mortero.



Figura 1. Horno tubular de 3 zonas.





Figura 2. Crisol con aluminio en polvo.

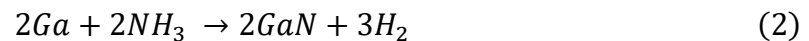


Figura 3. Crisol con nitruro de aluminio.

### 3.2 SÍNTESIS DE GaN

Para sintetizar el nitruro de galio, se utilizó el método de reacción directa entre galio y atmósfera de amoníaco ( $\text{NH}_3$ ).

La ecuación química de la reacción es la siguiente:



Inicialmente, se deposita galio líquido en un crisol. Posteriormente se introduce el crisol adentro del horno tubular de cuarzo, que se encuentra montado en un reactor CVD (horno).

Una vez hecho esto, se cierra el tubo y el horno, y se hace un vacío de 1 hora a .001 Torr.

Se termina el vacío y empieza el tratamiento atmosférico del material con gas amoníaco a una temperatura de  $1075^\circ\text{C}$ , con una tasa de flujo volumétrico de 300 sccm durante 2 horas. Por último, se pulverizó el material en un mortero.

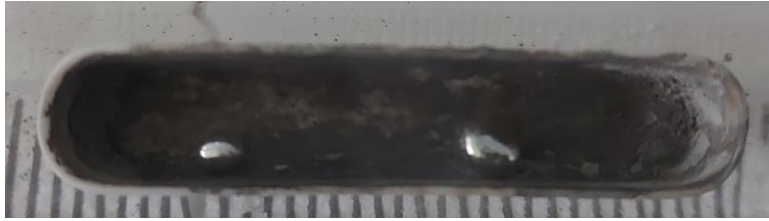


Figura 4. Crisol con galio líquido.

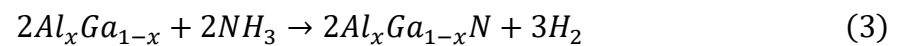


Figura 5. Crisol con nitruro de galio.

### 3.3 SÍNTESIS DE $Al_xGa_{1-x}N$

Para sintetizar nitruro de galio-aluminio, se utilizará el método de reacción directa entre la aleación galio-aluminio (ALGA) y atmósfera de amoníaco.

La ecuación química de la reacción es la siguiente:



Se combina directamente aluminio en polvo y galio líquido en un mortero, lo cual nos dará una aleación sólida, quebradiza y de muchos cúmulos.

Se deposita el galio-aluminio en un crisol. Posteriormente se introduce el crisol adentro del horno tubular de cuarzo, que se encuentra montado en un reactor CVD (horno).

Una vez hecho esto, se cierra el tubo y el horno, y se hace un vacío de 1 hora a .001 Torr.

Se termina el vacío y empieza el tratamiento atmosférico del material con gas amoníaco a una temperatura de 1075°C, con una tasa de flujo volumétrico de 300 sccm, durante 2 horas. Por último, se pulverizó el material en un mortero.



Figura 6. Crisol con la aleación  $Al_{0.1}Ga_{0.9}$ .



Figura 7. Crisol con  $Al_{0.1}Ga_{0.9}N$ .



Figura 8. Crisol con la aleación  $Al_{0.3}Ga_{0.7}$ .



Figura 9. Crisol con  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ .

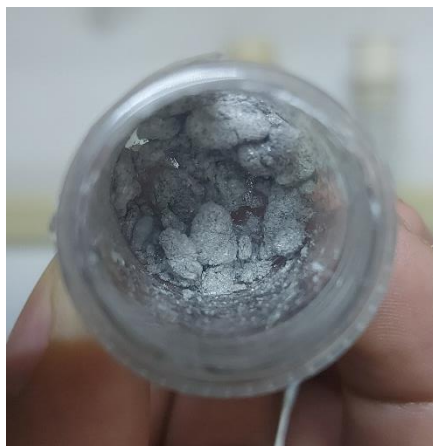


Figura 10. Recipiente con la aleación  $Al_{0.5}Ga_{0.5}$ .



Figura 11. Crisol con  $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$ .



Figura 12. Crisol con la aleación  $Al_{0.7}Ga_{0.3}$ .



Figura 13. Crisol con  $Al_{0.7}Ga_{0.3}N$ .



Figura 14. Crisol con la aleación  $Al_{0.9}Ga_{0.1}$ .



Figura 15. Crisol con  $Al_{0.9}Ga_{0.1}N$ .

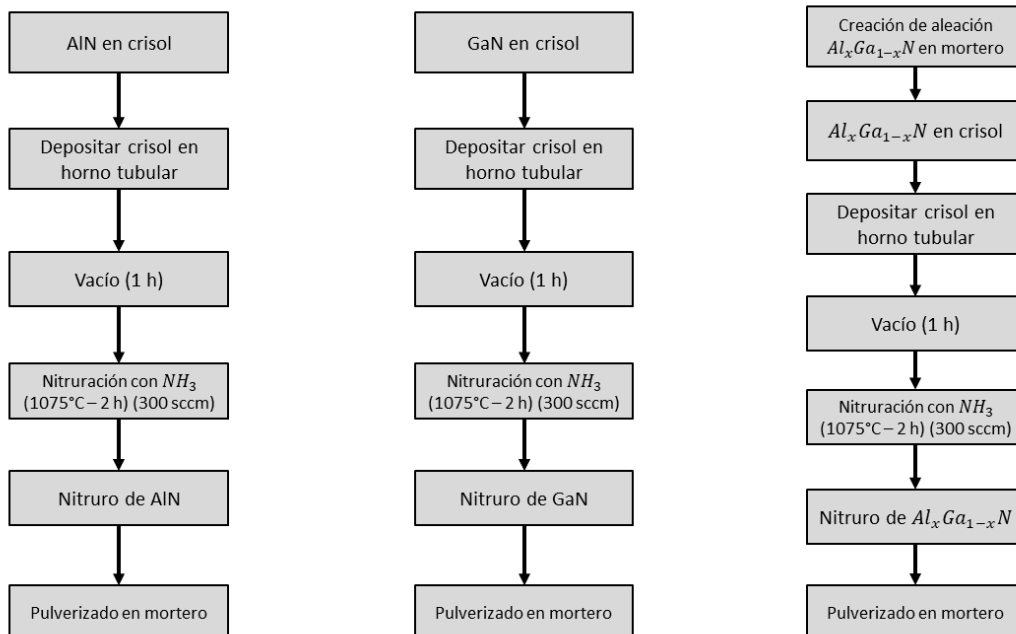


Figura 16. Diagrama de flujo del proceso de síntesis de AlN, GaN y  $Al_xGa_{1-x}N$ .

### 3.4 DIFRACCIÓN DE RAYOS-X (XRD)

La difracción de rayos X (en inglés, X-Ray Diffraction, o XRD) es un fenómeno en el que los planos atómicos en virtud de su espaciamiento uniforme, provocan un patrón de difracción de las ondas presentes en un haz incidente de rayos X. Los planos atómicos del cristal actúan sobre los rayos X exactamente de la misma manera que lo hace una rejilla sobre un haz de luz.

Los cristales son arreglos regulares de átomos, y los rayos X pueden considerarse ondas de radiación electromagnética. Los planos atómicos difractan ondas de rayos X, principalmente a través de los electrones de los átomos. Un arreglo regular de dispersores produce un arreglo regular de ondas esféricas. Aunque estas ondas se anulan entre sí en la mayoría de las direcciones mediante interferencia destructiva, un pequeño número de ondas se suman constructivamente en algunas direcciones específicas, determinadas por la ley de Bragg:

$$n\lambda = 2d\sin\theta \quad (4)$$

donde  $d$  es el espacio entre los planos de difracción,  $\theta$  es el ángulo de incidencia,  $n$  es el orden de difracción, que puede tomar cualquier valor natural y que es igual al número de longitudes de onda en la diferencia de caminos entre rayos difractados por átomos en planos adyacentes y  $\lambda$  es la longitud de onda del haz. Estas direcciones específicas aparecen como picos en el patrón de difracción.

Es decir, para obtener la máxima intensidad de los trenes de ondas difractadas, estos deben permanecer en fase para producir una interferencia constructiva, en la que los puntos correspondientes de una onda (p. ej., sus crestas o valles) llegan a un punto simultáneamente.

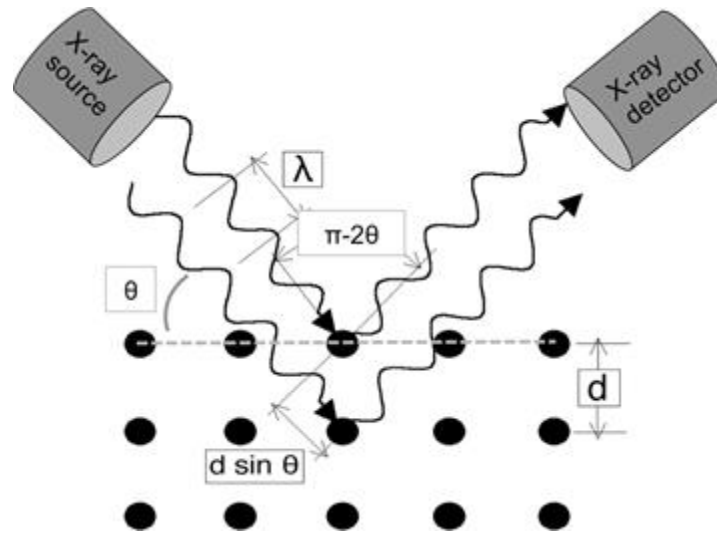


Figura 17. Patrón de Bragg de la Difracción de Rayos X.

Al final obtendremos un espectro de difracción, el cual consiste en una gráfica de intensidades de los haces difractados vs. el ángulo del detector  $2\theta$ . Los espectros de difracción de materiales tanto orgánicos como inorgánicos están almacenados en una base de datos llamada ICDD (por sus siglas en inglés International Center Diffraction Data).

### 3.5 MICROSCOPIA ELECTRÓNICA DE BARRIDO (SEM)

El microscopio electrónico de barrido (SEM) es una herramienta versátil para la obtención de imágenes de alta resolución y la caracterización de materiales. Con esta técnica, un haz de electrones de alta energía (kV) se enfoca en un punto fino sobre un material y se rastrea/escanea a lo largo de líneas paralelas. La Figura 18 presenta un esquema de los componentes básicos de un SEM, que pueden variar según la marca y el modelo del microscopio.

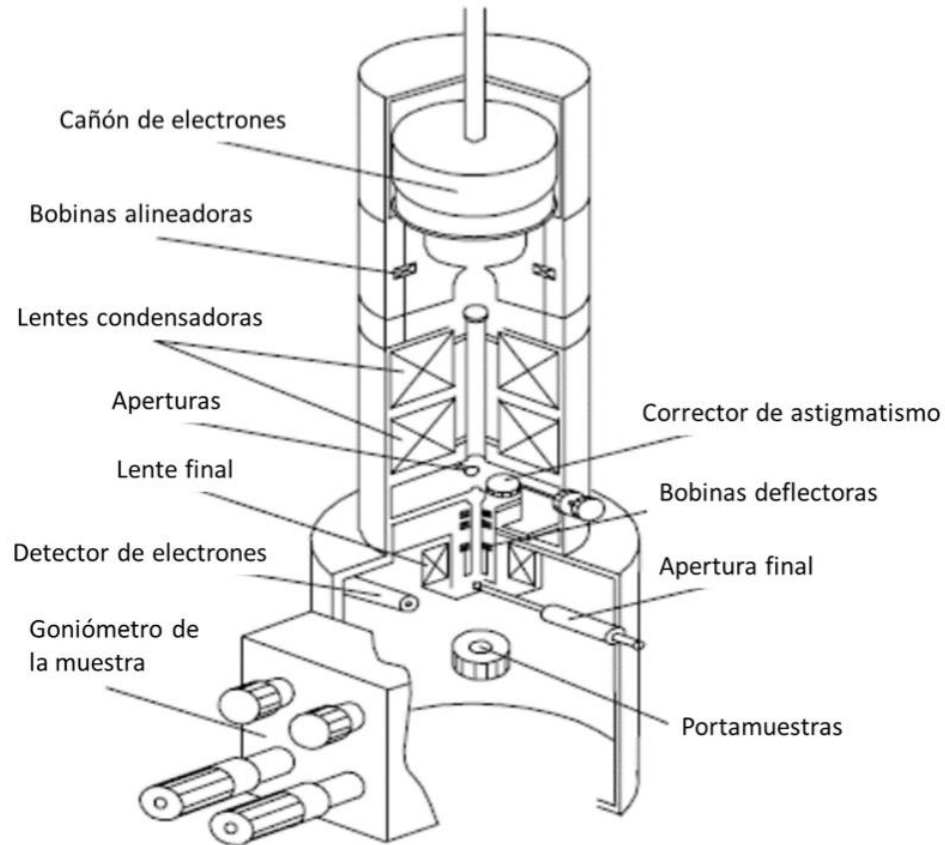


Figura 18. Esquema de los componentes básicos de un microscopio electrónico de barrido (SEM) [11]

La interacción entre el haz de electrones y el material genera múltiples tipos de señales que luego se recopilan y procesan. Estas señales van desde la luz y el calor, hasta varios tipos de electrones, e incluso los rayos X característicos de los elementos que componen el material que se analiza. Es a través de este proceso que podemos utilizar el SEM para obtener una mejor comprensión de los materiales hasta la escala micro y nanoscópica. Al incidir el haz de electrones sobre la muestra, se producen diversos efectos que serán captados y visualizados en función del equipo que utilicemos. En este caso, utilizar SEM se refiere a la técnica de caracterización la cual utiliza un detector de electrones secundarios para obtener información sobre la topografía de los materiales.

Los electrones secundarios se producen cuando un electrón del haz pasa muy cerca del núcleo de un átomo de la muestra, proporcionando la suficiente energía a uno o varios de los electrones interiores para saltar fuera de la muestra. Estos electrones son de muy



baja energía (por debajo de 5eV), por lo que deben encontrarse muy cerca de la superficie para poder escapar. Precisamente por eso proporcionan una valiosa información topográfica de la muestra, y son los utilizados principalmente en microscopía de barrido.

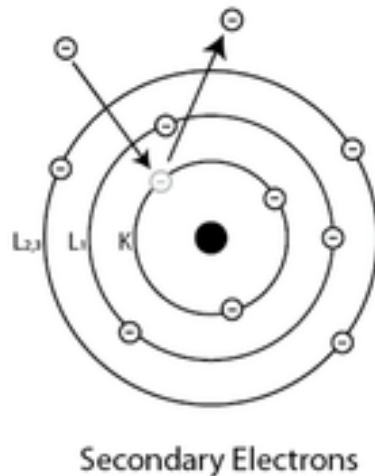


Figura 19. Un electrón del haz choca con un átomo, generando un electrón secundario.

### 3.6 ESPECTROSCOPIA DE DISPERSIÓN DE ENERGÍA (EDS)

La Espectroscopía de Energía Dispersa (energy dispersive spectroscopy, EDS) es un tipo de técnica utilizada para el análisis cualitativo y cuantitativo de los elementos presentes en una muestra, de esta manera puede obtenerse información composicional, eficiente y simultáneamente de la misma área. Este tipo de caracterización regularmente esta interconectado al equipo de caracterización SEM, donde se utiliza la misma fuente de haz de electrones para excitar rayos X de la muestra en estudio. El sistema deberá contar con un detector de rayos X dentro de la cámara de análisis.

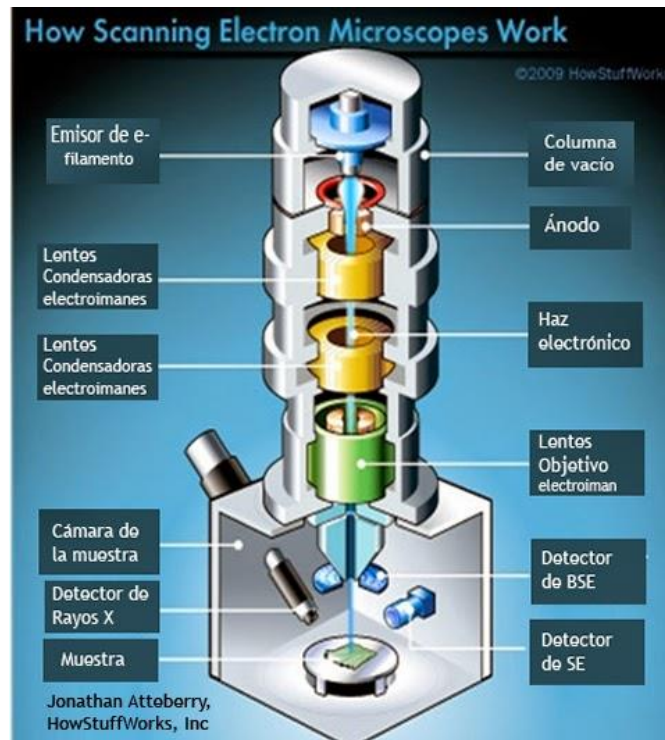


Figura 20. Esquema de un SEM con un detector de Rayos X acoplado.

Recordando a los electrones secundarios; estos electrones “arrancados” del átomo dejan vacantes (vacíos) que se llenan con electrones de capas más externas. Esta transición emite energía en forma de Rayos X con un valor característico, podríamos decir “único”, del elemento (átomo) en el que sucede este salto. Con esta información podremos saber qué elementos forman parte de nuestra muestra.

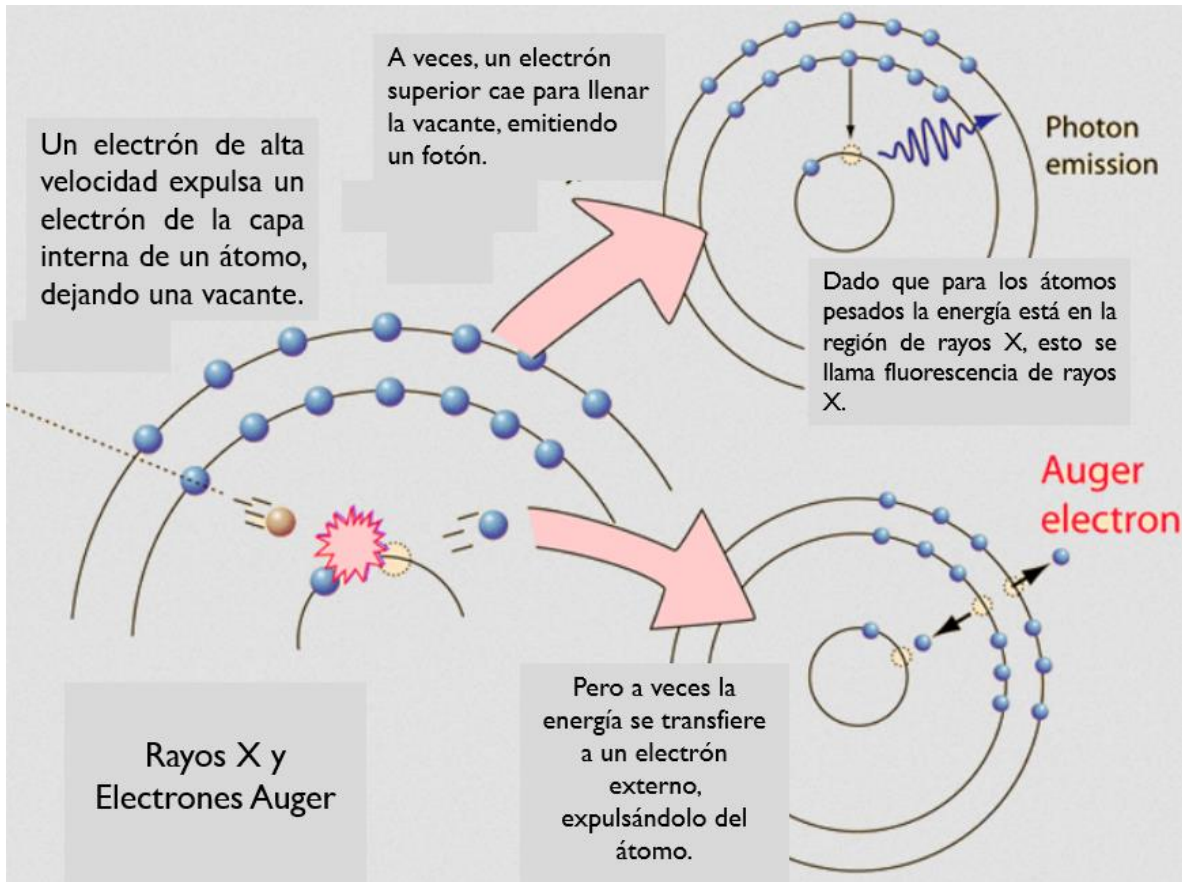


Figura 21. Esquema del fenómeno de generación de Rayos X y electrones Auger.

### 3.7 CATODOLUMINISCENCIA (CL)

Como se ha visto en las dos técnicas anteriores, al incidir un haz de electrones sobre la muestra, se producen diversos fenómenos tales como: Electrones Secundarios, Electrones Retrodispersados, Rayos X, Catodoluminiscencia, entre otros.

La técnica se lleva a cabo en un sistema SEM para incidir un haz de electrones sobre la muestra. El sistema deberá tener conectado un detector de catodoluminiscencia en la cámara de análisis del Microscopio Electrónico de Barrido.

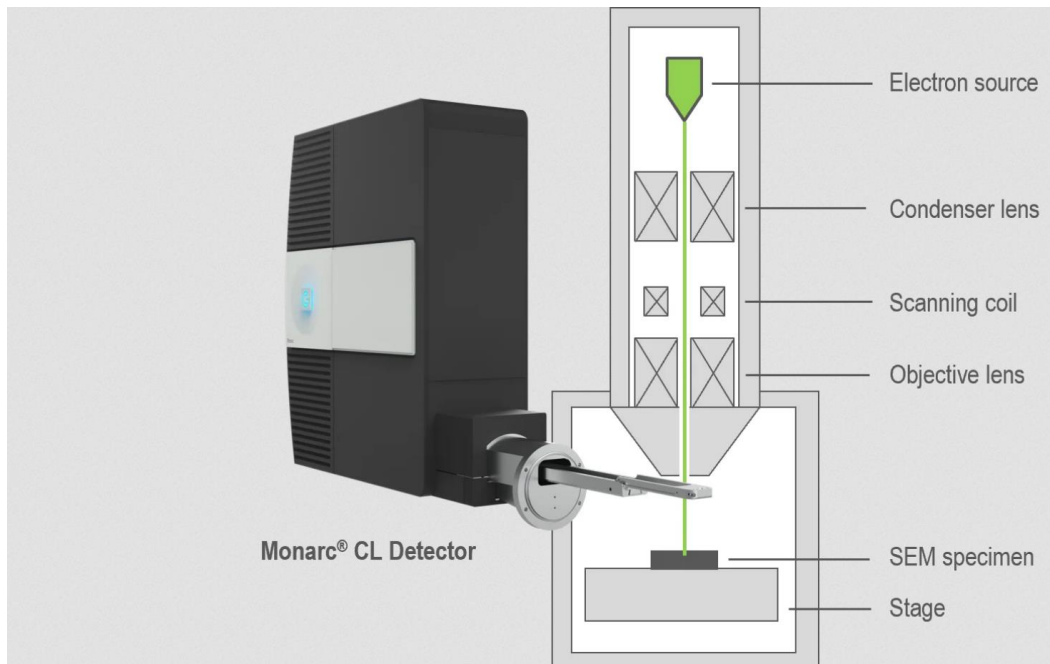


Figura 22. Esquema de un SEM con un detector de CL acoplado.

La catodoluminiscencia es un fenómeno en el cual un material emite luz como resultado de haber sido bombardeado por un haz de electrones. La catodoluminiscencia es un fenómeno óptico (luz visible/casi visible). CL ocurre en semiconductores/aislantes, ya sean hechos por el hombre o naturales. Como se ve en la Figura 23, los electrones en la banda de valencia de estos materiales son excitados y estos suben a la banda de conducción por un breve tiempo; posteriormente estos electrones (que están en la banda de conducción) se recombinan con los huecos que quedan en la banda de valencia. La diferencia de energía se libera como un fotón (luz) con una longitud de onda asociada. A esta diferencia de energía se le conoce como energía de banda prohibida o band gap energy. Este valor de energía es el mínimo que debe suministrársele al material para que este comience a conducir eléctricamente. Los materiales se clasifican en aislantes, semiconductores o conductores, utilizando el valor de la banda prohibida como criterio.

En conclusión, algunos materiales emiten luz visible cuando se les incide con un haz de electrones y a este fenómeno se le llama catodoluminiscencia (CL).

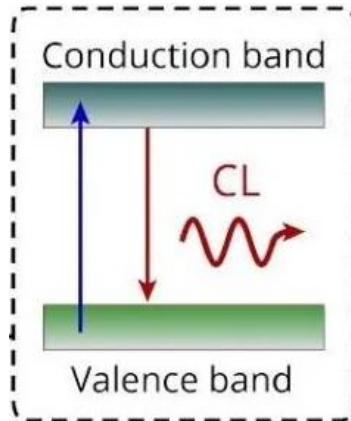


Figura 23. Esquema de la banda de valencia y la banda de conducción.

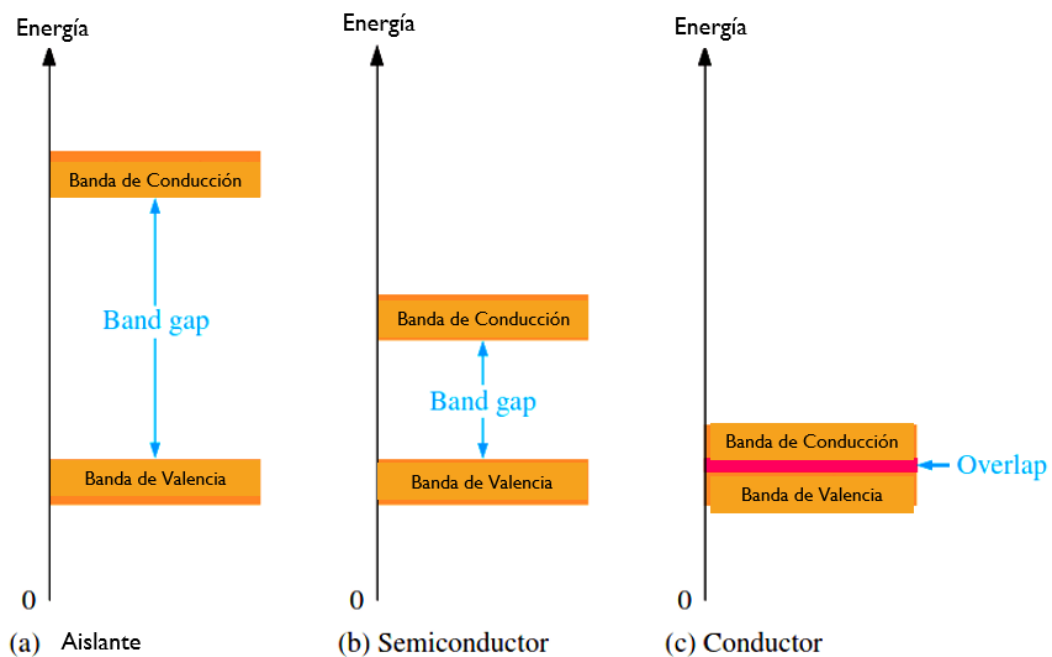


Figura 24. Clasificación de materiales según el valor de su banda prohibida.

### 3.8 CATODOLUMINISCENCIA INTRÍNSECA

Un semiconductor intrínseco es un semiconductor completamente puro sin ninguna especie dopante presente. Por lo tanto, los semiconductores intrínsecos también se conocen como semiconductores puros o semiconductores de tipo i.

Como se ve en la Figura, la dispersión inelástica del haz incidente de electrones excita a un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción, dejando un hueco con carga positiva en la banda de valencia.

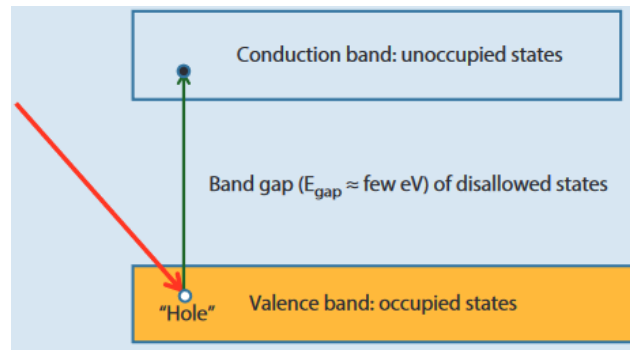


Figura 25. El electrón en la banda de valencia brinca hacia la banda de conducción debido al haz de electrones incidente.

Después de un tiempo, el electrón libre y el hueco se atraen mutuamente y se recombinan, con la energía liberada como un fotón con una energía mínima igual a la energía de banda prohibida.

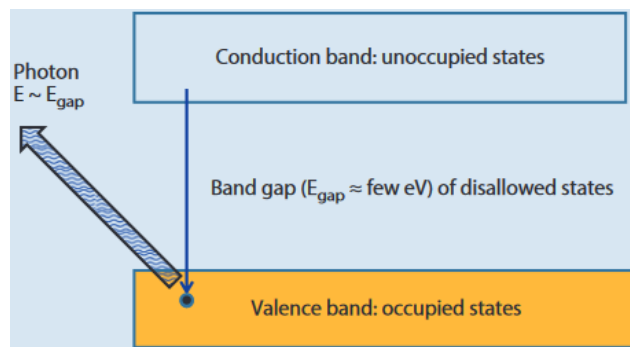


Figura 26. El electrón baja de la banda de conducción a la de valencia, recombinándose con el hueco y así liberando un fotón.

Los semiconductores intrínsecos, (sin impurezas) a pesar de ser puros, pueden presentar defectos. Un defecto común en estos casos es la vacancia de un átomo en la red cristalina. Esto puede generar subniveles dentro de la banda prohibida de un semiconductor.

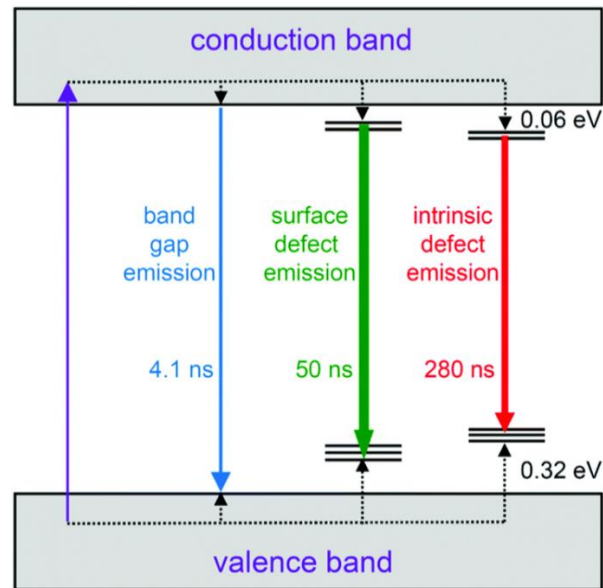


Figura 27. Esquema de los subniveles generados por defectos en un semiconductor.

### 3.9 CATODOLUMINISCENCIA EXTRÍNSECA

Un semiconductor extrínseco, o semiconductor dopado, es un semiconductor, que fue dopado intencionalmente con el fin de modular sus propiedades eléctricas, ópticas y estructurales. A los agentes dopantes también se le conoce como impurezas. La presencia de átomos de impurezas en la red huésped crea niveles de energía estrechos dentro de la brecha de banda. La dispersión inelástica del haz de electrones puede excitar los electrones de la banda de valencia a la banda de conducción, así como a los niveles creados en la banda prohibida debido al dopaje del material. Las transiciones de electrones pueden ocurrir entre los diversos niveles de energía, creando tanto una emisión de CL de banda ancha como una emisión de CL de banda estrecha.

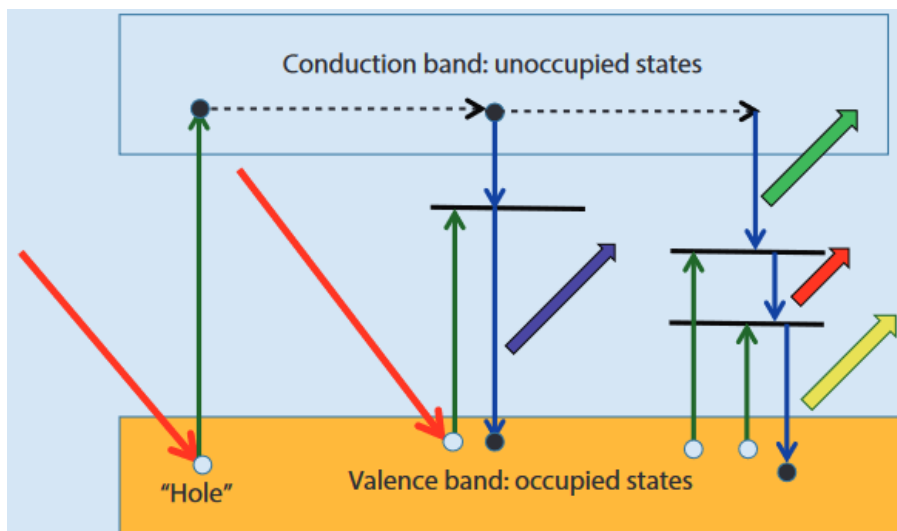


Figura 28. Ciertos átomos de impurezas crean estados de energía permitidos (subniveles) dentro de la banda prohibida. Los estados extrínsecos estrechos en la banda prohibida debido a los átomos de impurezas producen colores nítidamente definidos.

### 3.10 ESPECTROSCOPIA UV-VIS DE REFLECTANCIA DIFUSA

Las propiedades ópticas de los polvos se obtienen mediante la técnica de espectroscopia UV-VIS de reflectancia difusa. El método se basa en que las radiaciones ultravioletas — visibles son absorbidas por los átomos constituyentes del material bajo estudio para llevar a cabo las transiciones electrónicas. Por lo que conociendo las intensidades (número de fotones) y las energías en las que absorbe un determinado material, se puede inferir sobre sus propiedades ópticas.

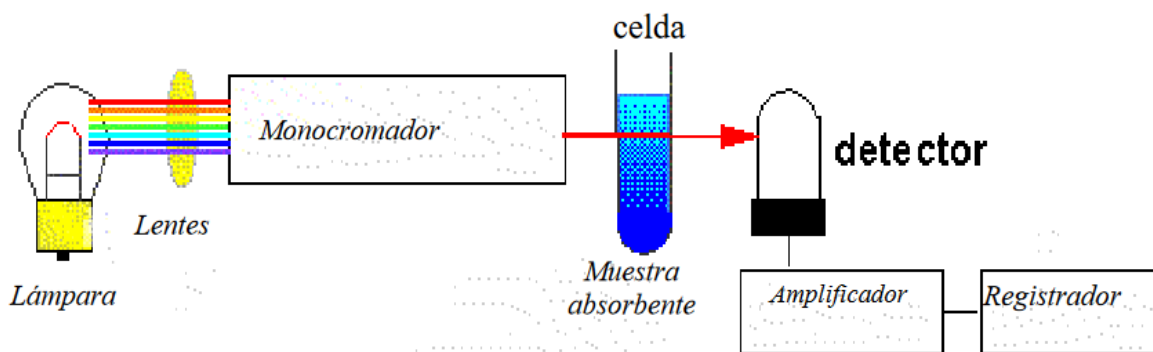


Figura 29. Componentes básicos de un espectrofotómetro. [12]



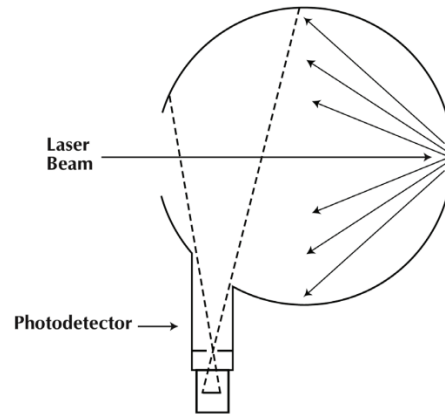


Figura 30. Esfera integradora de Reflectancia Difusa, se acopla al sistema principal UV-VIS.

Un rayo de luz que rebota en una superficie se comporta de una manera muy predecible. El ángulo de incidencia es igual al ángulo de reflexión:  $\theta_i = \theta_r$ . La reflexión de la luz es especular o difusa.

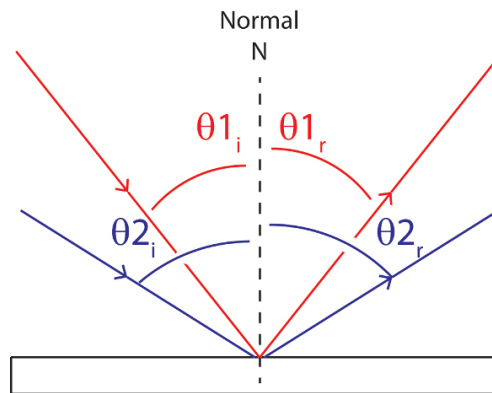


Figura 31. Ley de Snell

La reflexión especular tiene lugar cuando los rayos de luz entrantes paralelos inciden sobre una superficie plana y lisa, esto hará que todos los rayos incidentes se reflejen en la misma dirección. Los ejemplos incluyen un reflejo en un espejo o una imagen en la superficie de un lago tranquilo.

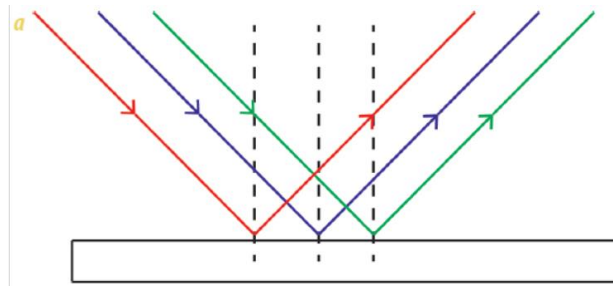


Figura 32. Reflexión especular

La reflexión difusa ocurre cuando una superficie no es lisa. Debido a la rugosidad de la superficie, los rayos se dispersarán en una multitud de direcciones. En la reflexión difusa, la ley de la reflexión sigue siendo válida, pero el ángulo de la superficie cambia de tal manera que los rayos paralelos entrantes inciden sobre los diferentes ángulos de la superficie y por lo tanto los rayos reflejados tendrán diferentes direcciones entre sí. La reflexión difusa se usa más comúnmente para medir polvos. En la mayoría de los casos espectroscópicos, la reflectancia difusa es la medida de interés.

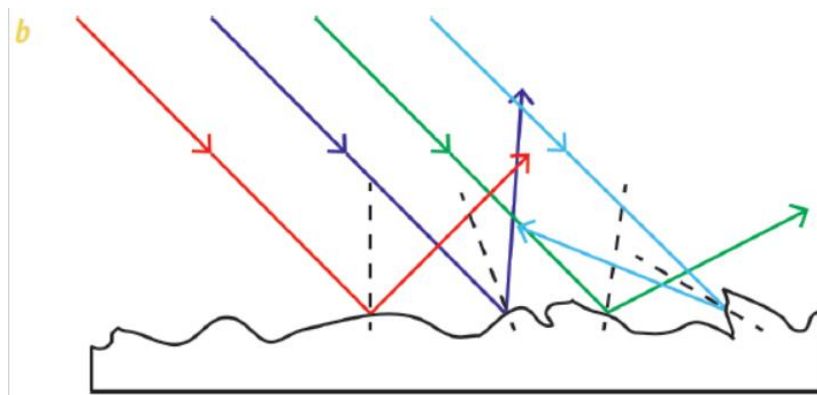


Figura 33. Reflexión difusa

Todos los cuerpos irradian energía en forma de fotones. Cuando estos fotones alcanzan otra superficie, pueden ser absorbidos, reflejados o transmitidos. El comportamiento de una superficie con radiación incidente se describe mediante las siguientes magnitudes:

- la absorbancia ( $A$ ) es la cantidad de la radiación incidente absorbida
- reflectancia ( $R$ ) es la cantidad de la radiación incidente reflejada

- la transmitancia (T) es la cantidad de radiación incidente transmitida.

La ley de conservación de la energía de Kirchhoff indica que:

$$A + R + T = 1 \quad (5)$$

Para objetos opacos, la transmisividad es  $T = 0$  y por lo tanto  $A + R = 1$ . Un cuerpo negro tiene una absorptividad  $A = 1$  y absorbe toda la radiación que incide sobre él. Su reflectividad es  $R = 0$ .

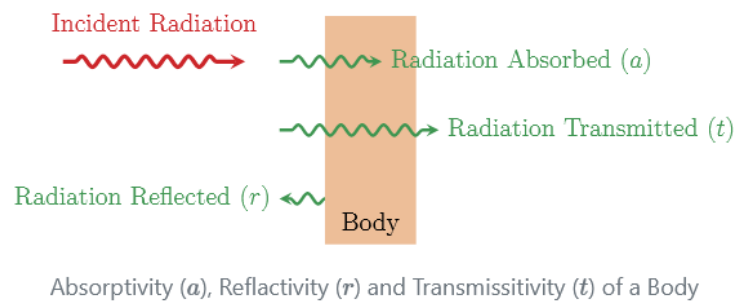


Figura 34. Interacción luz-materia en donde suceden los fenómenos de absorbanca, transmitancia y reflectancia.

La Ley de Beer-Lambert indica que la **transmitancia T** está dada por:

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (6)$$

donde  $I_0$  es la intensidad de la luz que incide sobre la muestra, e  $I$  es la intensidad de la luz que ha atravesado la muestra, que, en el caso de este trabajo, es cero.

La **absorbancia A** está dada por:

$$A = -\log(T) = -\log\left(\frac{I}{I_0}\right) \quad (7)$$

De tal manera que en un espectroscopio UV-VIS de transmitancia, podemos obtener la absorbancia utilizando las ecuaciones de Beer-Lambert, y después utilizando la relación:  $A + R + T = 1$ , podemos obtener la reflectancia.

Para nuestro caso se utilizó un espectroscopio UV-VIS de reflectancia, donde no hubo transmitancia de luz debido a la opacidad de los polvos ( $T=0$ ). Entonces si deseamos obtener la absorbancia usaremos la relación:  $A + R = 1$ .

### 3.11 MÉTODO DE KUBELKA-MUNK

Además de poder obtener el valor del ancho de la banda prohibida por medio de la técnica de catodoluminiscencia (CL), también es posible obtener este valor utilizando los resultados de reflectancia de la espectroscopia UV-VIS mediante el método de Kubelka-Munk-Tauc.

La función de Kubelka-Munk se define como:

$$F(R_{\infty}) = \frac{k}{s} = \frac{(1 - R_{\infty})^2}{2R_{\infty}} \quad (8)$$

donde  $k$  es el coeficiente de absorción y  $s$  es el coeficiente de dispersión, ambos en  $m^{-1}$ ,  $R_{\infty}$  es la reflectancia porcentual y el subíndice  $\infty$  denota que la muestra tiene grosor suficiente para esconder el soporte que la detiene.

La ecuación de Tauc se define como:

$$(\alpha h\nu)^y = A(h\nu - E_g) \quad (9)$$

Donde  $\alpha$  es el coeficiente de absorción,  $h$  es la cte de Planck,  $\nu$  es la frecuencia del fotón,  $A$  es una cte de proporcionalidad,  $E_g$  es la banda prohibida,  $\gamma$  denota la naturaleza de la transición electrónica del band gap:

$\gamma = 2$ , para banda prohibida directa

$\gamma = 1/2$ , para banda prohibida indirecta

Ahora, la ecuación de Tauc se puede expresar en términos de la función de Kubelka-Munk de la siguiente manera <sup>[34]</sup>:

$$[F(R_\infty)h\nu]^\gamma = A(h\nu - E_g) \quad (10)$$

Una vez obtenida la reflectancia  $R$  experimentalmente se empieza el siguiente procedimiento:

- Calcular  $k$  y  $s$ .
- Calcular la función de Kubelka-Munk  $F(R_\infty)$
- Calcular la ecuación de Kubelka-Munk-Tauc  $[F(R_\infty)h\nu]^2$  y asignarla al Eje Y
- Calcular la energía del fotón  $E = \frac{1240}{\lambda(nm)}$  y asignarla al Eje X
- Graficar  $[F(R_\infty)h\nu]^2$  vs  $E$
- Identificar la sección de la curva donde empieza a cambiar de dirección y extrapolar una línea recta hasta el eje X.
- El valor donde la línea recta toque al eje X es el valor del band gap.

## 4. RESULTADOS Y DISCUSIONES

A continuación, se presentan los resultados obtenidos de las técnicas XRD, SEM, EDS, CL y UV-VIS DR.

### 4.1 MÉTODO DE PREPARACIÓN

Si bien en todos los casos el material fue nitrurado. Se observa en los polvos de nitruro de galio aluminio donde  $x=0.1 - 0.9$ , que el material se separó mayormente en sus dos fases de GaN y AlN. Esto es clave y se ve reflejado en los resultados de caracterización. Esto se pudo haber evitado utilizando un agitador magnético para preparar la aleación de AlGa de una manera más homogénea, en vez de realizarlo manualmente en un mortero. Además, debido a la curva de temperatura del horno, la cual es gradual, ambas fases tienen tiempo suficiente para separarse. Una alternativa a esto es realizar una síntesis en estado de no-equilibrio térmico. Es decir, calentar el horno hasta los  $1075^{\circ}\text{C}$  y después depositar el crisol desde una zona de temperatura ambiente hacia la zona caliente del horno. Para esto, se necesitaría fabricar y adecuar un sistema de manipulación externo que se acople al horno tubular de cuarzo, que permita el rápido movimiento del crisol de una zona templada a una zona de alta temperatura.

### 4.2 DIFRACCIÓN DE RAYOS X (XRD)

El estudio de Difracción de Rayos X de los polvos se realizó con el sistema Malvern PANalytical Aeris, en las instalaciones del CNyN-UNAM.



Figura 35. Malvern PANalytical Aeris.

El material presenta una estructura cristalina hexagonal. El patrón de difracción del material obtenido se comparó con el patrón de la base de datos PDF#76-0703 para el GaN y AlGaN con concentración X=0.1-0.9, y para el AlN se comparó con el patrón de la base de datos PDF#00-066-0534.

En el caso del GaN, el patrón de difracción experimental fue prácticamente igual al del PDF#76-0703 en cuanto a índices de Miller y ángulo 2Theta se refiere.

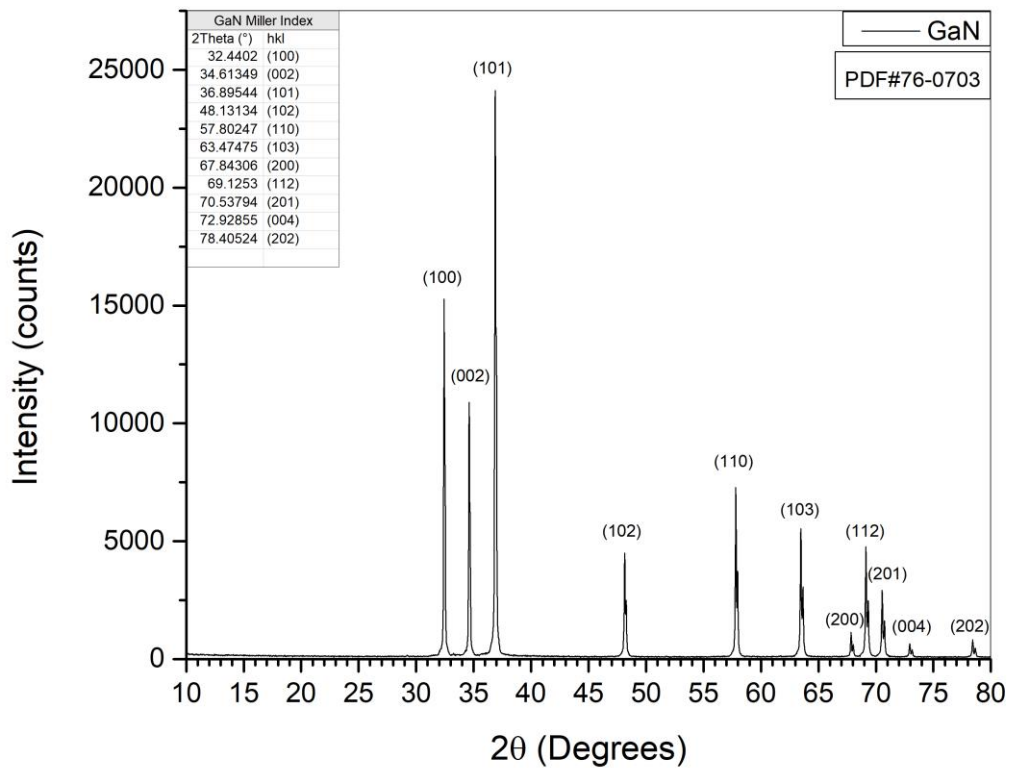


Figura 36. Espectro XRD del GaN.

Debido a la separación de fases, se verán dos espectros XRD dentro de una misma gráfica, los cuales corresponden a el patrón de difracción tanto del GaN como el AlN. Debido a esto, se incluyen dentro de las siguientes gráficas los índices de Miller del ICCD del GaN y el AlN en la esquina superior izquierda, y en la esquina superior derecha se incluyen los índices de Miller obtenidos experimentalmente con el fin de poder compararlos. Se estipula que existe muy poca cantidad de fase AlGaN dentro de los polvos obtenidos.

Particularmente, para el  $Al_{0.1}Ga_{0.9}N$ , la cantidad de AlN era muy poca, por lo cual los picos XRD de ese material no eran visibles aún.

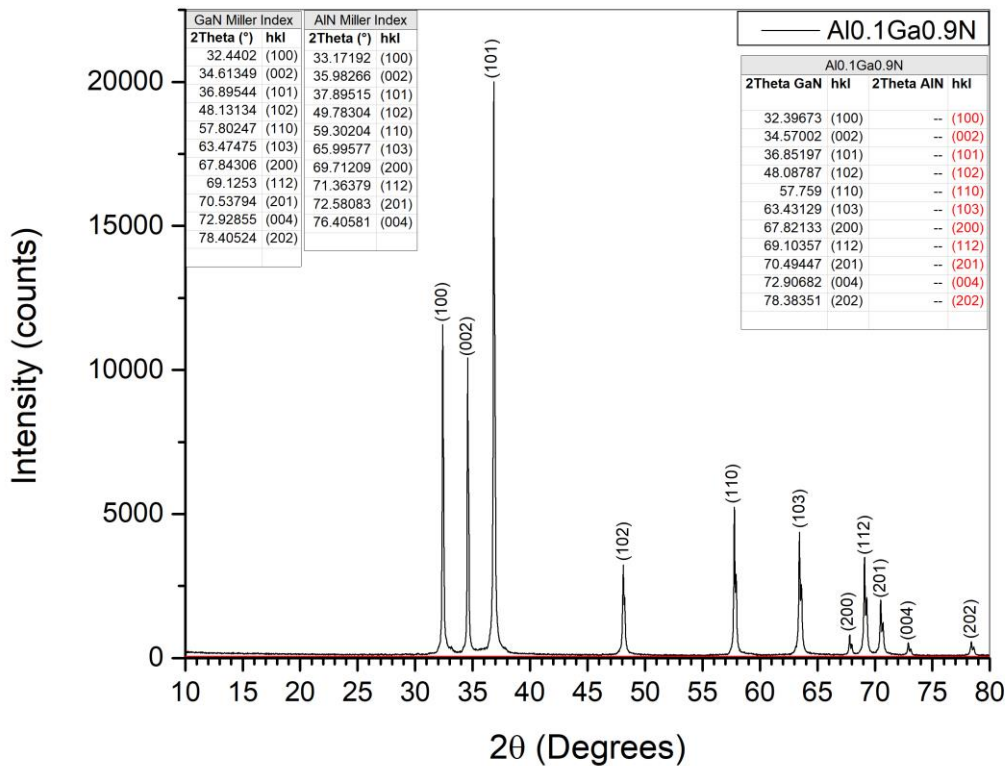


Figura 37. Espectro XRD de  $Al_{0.1}Ga_{0.9}N$ .



A medida que fue aumentando la concentración de aluminio en las muestras, los picos de AlN empezaron a mostrarse en los patrones de difracción. Esto sugiere que la fase AlGaN no fue formada con éxito total, si no que en su lugar se formaron las fases GaN y AlN por separado, y en una cantidad minúscula se formó la aleación de AlGaN.

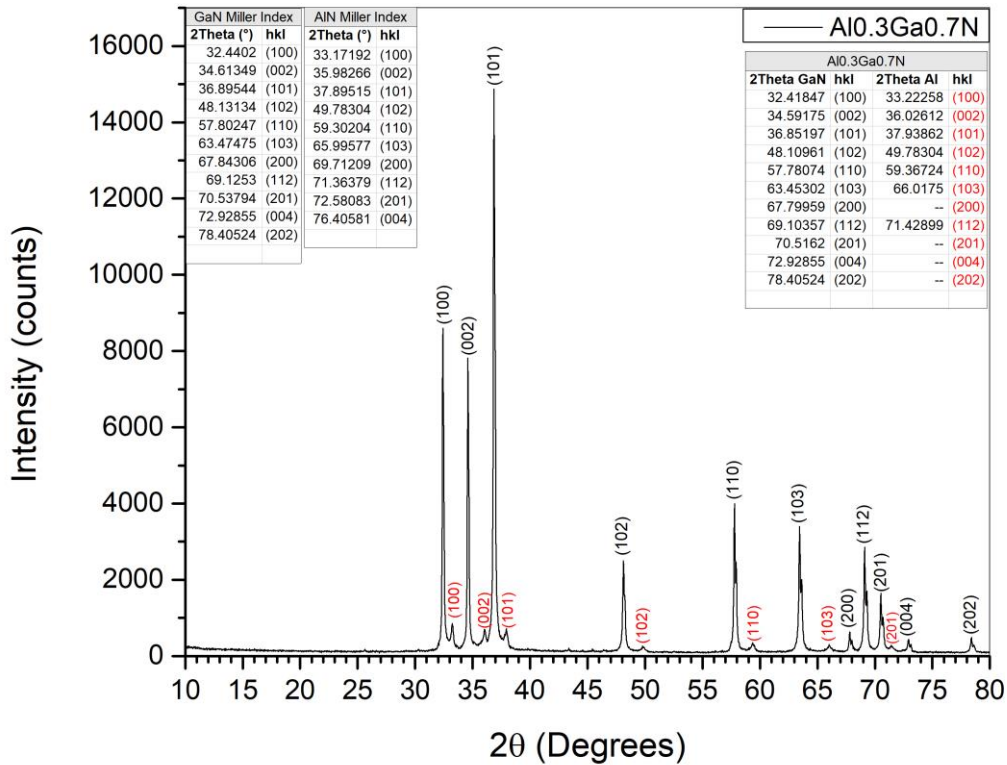


Figura 38. Espectro XRD de  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ .

Como podemos ver en el espectro XRD para el  $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$ , los picos de difracción del GaN van bajando de intensidad y los picos de difracción del AlN aumentan de intensidad. Podemos observar también que aparecen unos picos de difracción que no corresponden ni a la fase GaN ni a la fase AlN. En su lugar se estipula que estos picos podrían ser de la poca cantidad de aleación de AlGaN que se alcanzó a formar, como se comentaba anteriormente.

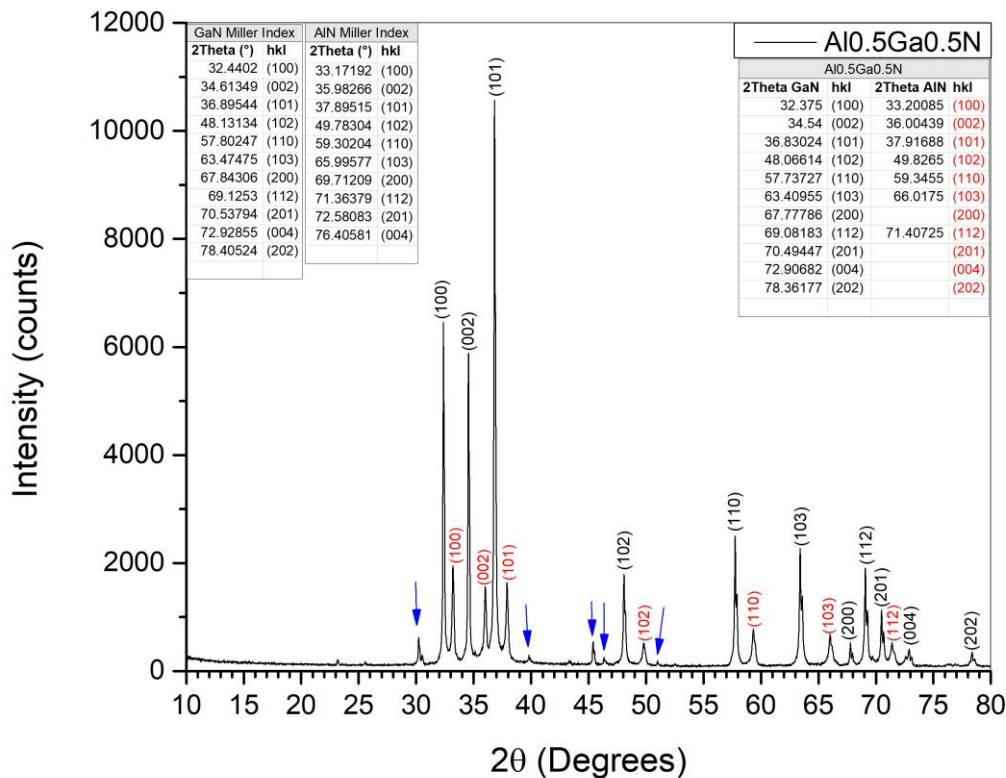


Figura 39. Espectro XRD de  $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$ .

Otra cosa que podemos observar es que no todos los picos de AlN están presentes en todos los patrones de difracción. De hecho, a medida que aumenta la concentración de aluminio empiezan a aparecer más picos característicos de este material, hasta llegar al patrón del puro AlN, donde ahí se presentan todos los picos. En la siguiente Figura del patrón XRD del  $Al_{0.7}Ga_{0.3}N$  se observa cómo aparecen dos picos adicionales que anteriormente no aparecían.

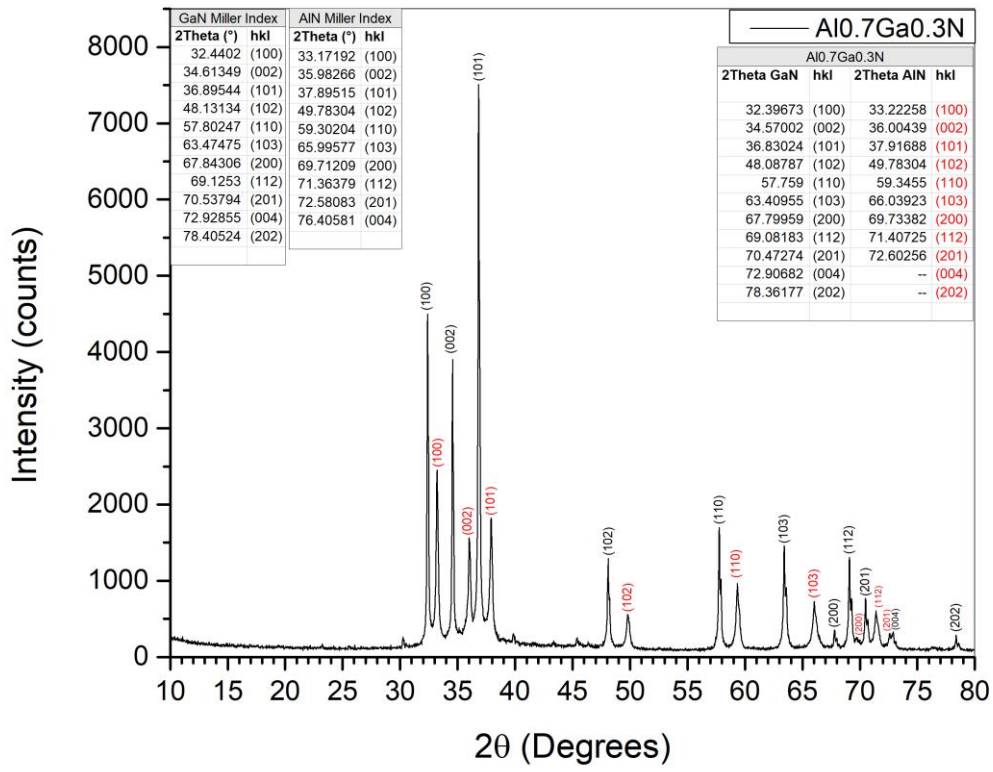


Figura 40. Espectro XRD de  $Al_{0.7}Ga_{0.3}N$ .

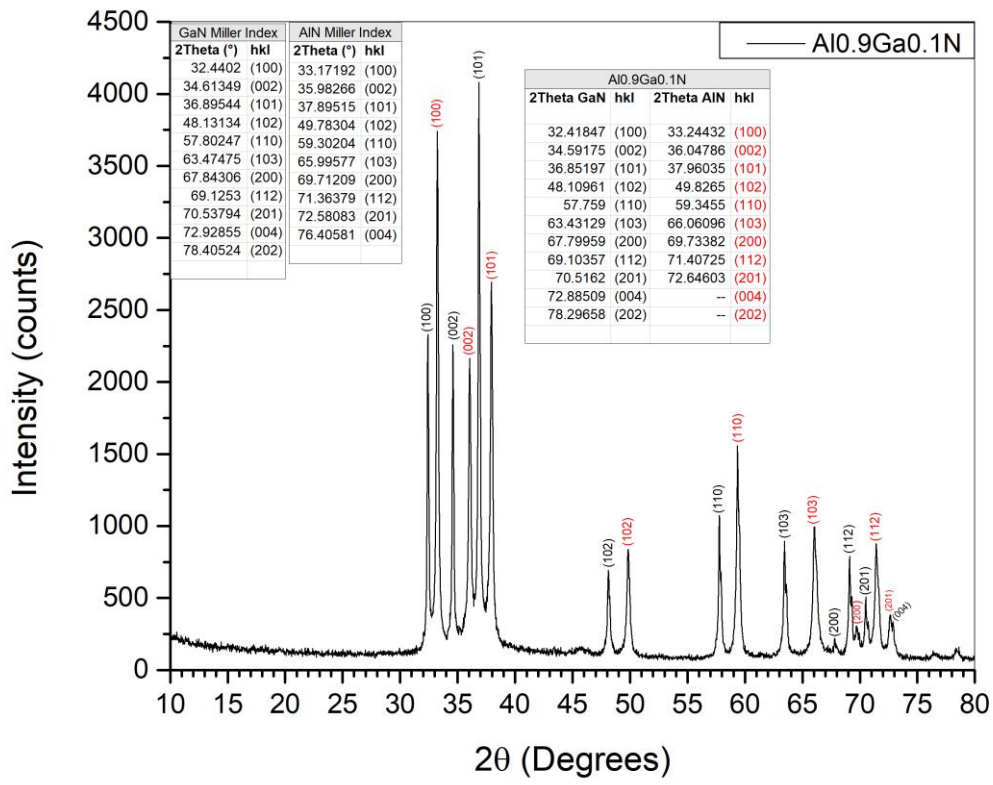


Figura 41. Espectro XRD de  $Al_{0.9}Ga_{0.1}N$ .

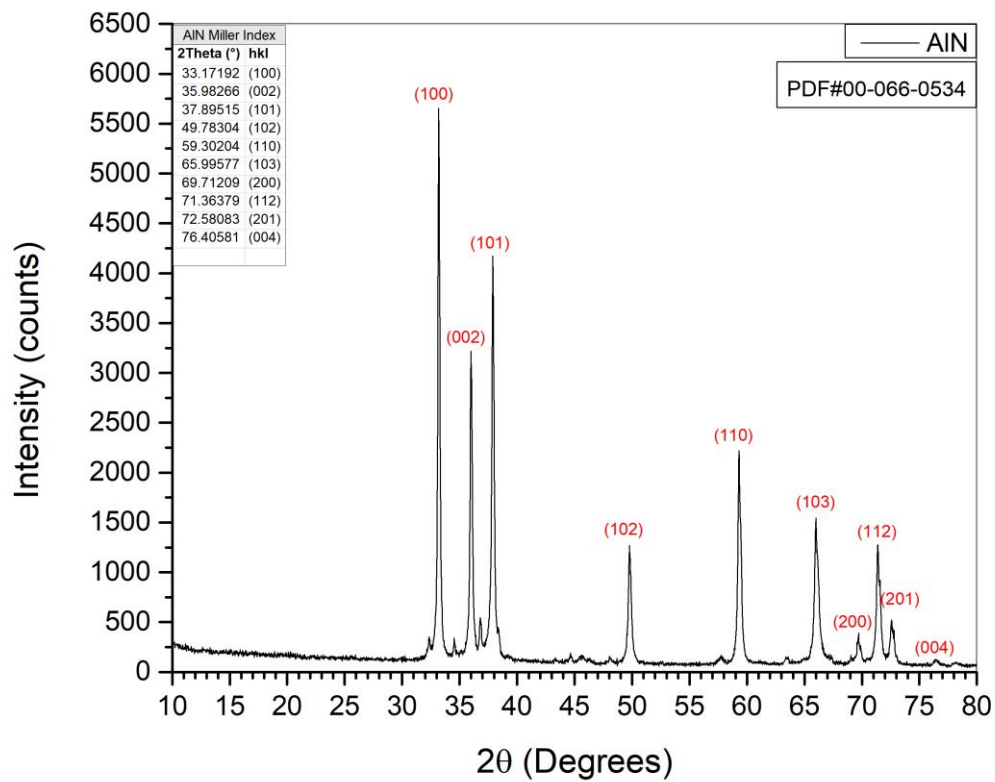


Figura 42. Espectro XRD de AlN.

### 4.3 SCANNING ELECTRON MICROSCOPE (SEM)

A continuación, se presentan los resultados del estudio de SEM de los polvos de AlGa<sub>N</sub>, el cual se realizó con el equipo JEOL JIB-4500.



Figura 43. JEOL JIB-4500.

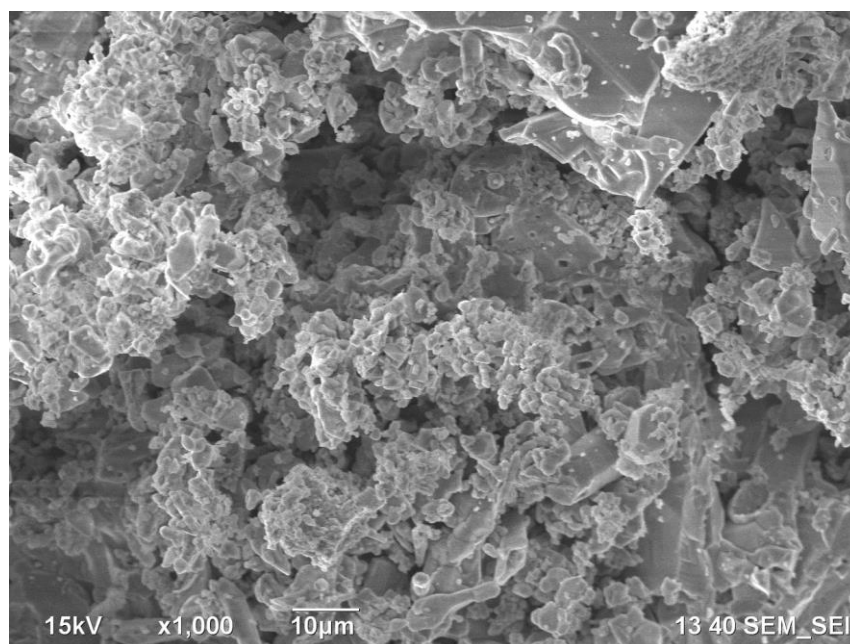


Figura 44. Imagen SEM x1000 del tamaño de grano del GaN.

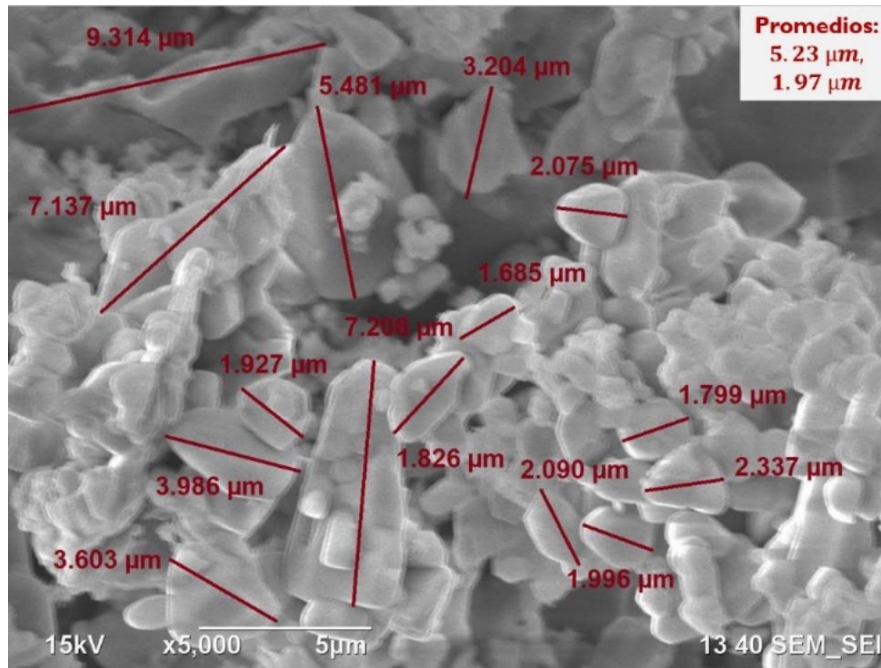


Figura 45. Imagen SEM x5000 del tamaño de grano del GaN. Hay dos tamaños de grano: 5.23  $\mu\text{m}$  y 1.97  $\mu\text{m}$ .

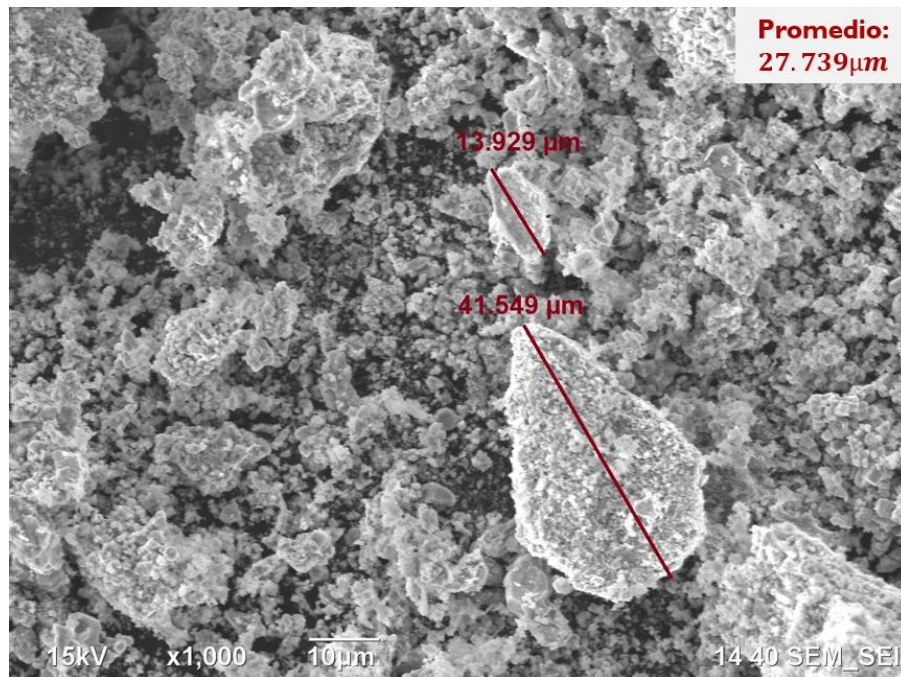


Figura 46. Imagen SEM x1000 del tamaño de grano del  $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ .

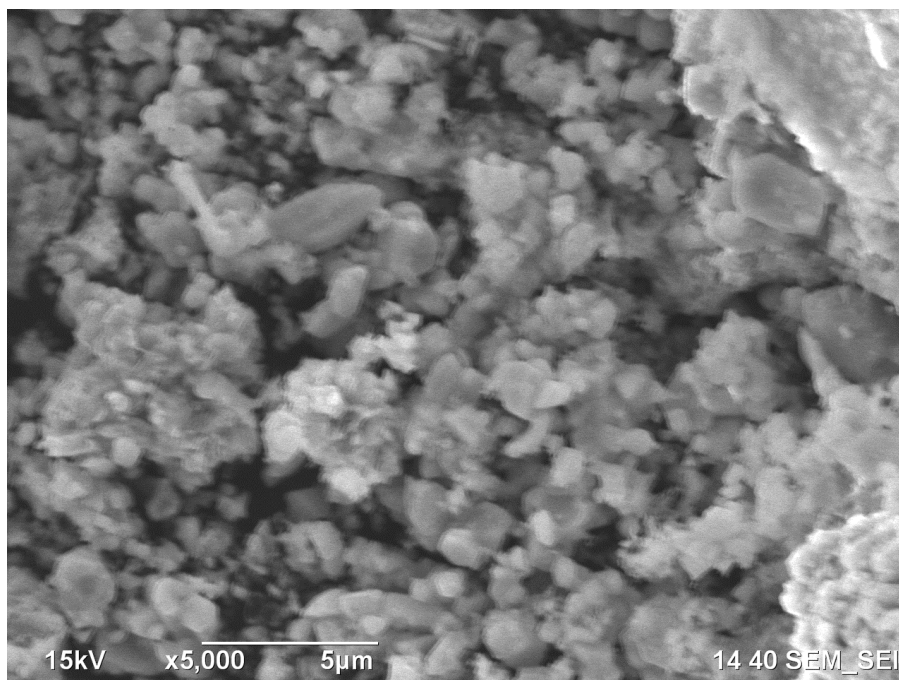


Figura 47. Imagen SEM x5000 del tamaño de grano del  $Al_{0.1}Ga_{0.9}N$ .

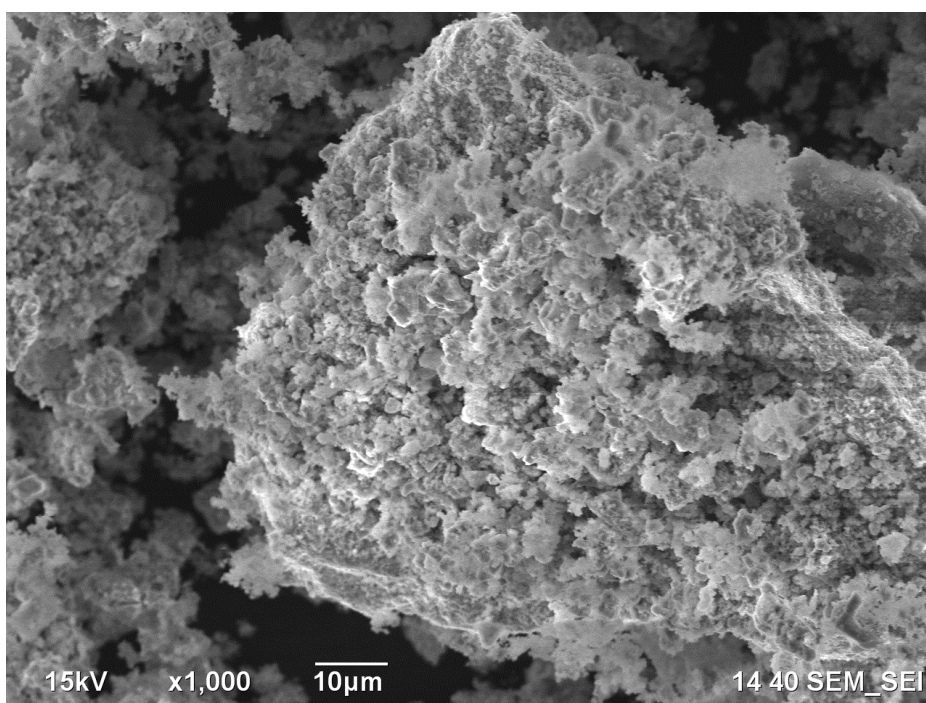


Figura 48. Imagen SEM x1000 del tamaño de grano del  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ .



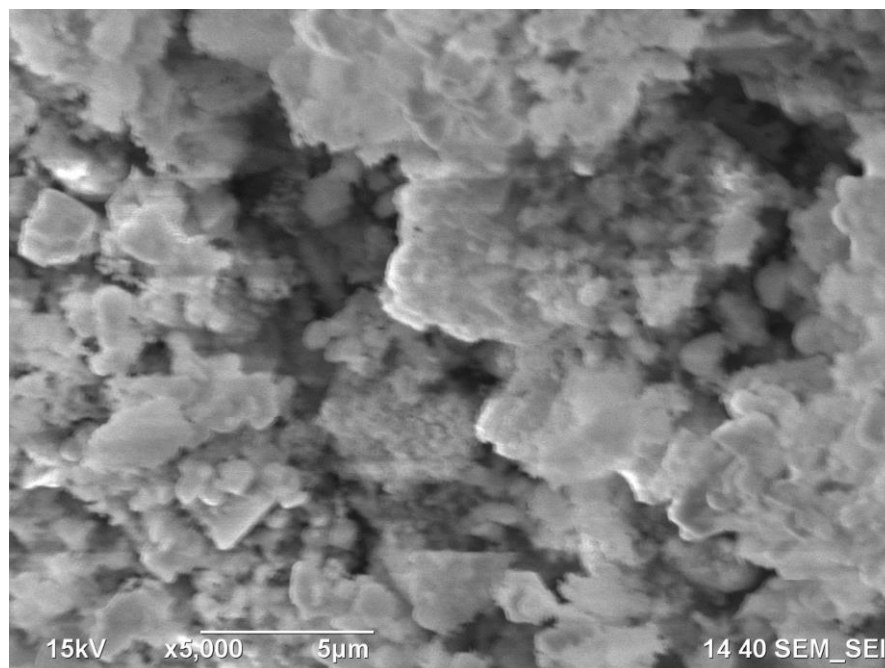


Figura 49. Imagen SEM x5000 del tamaño de grano del  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ .

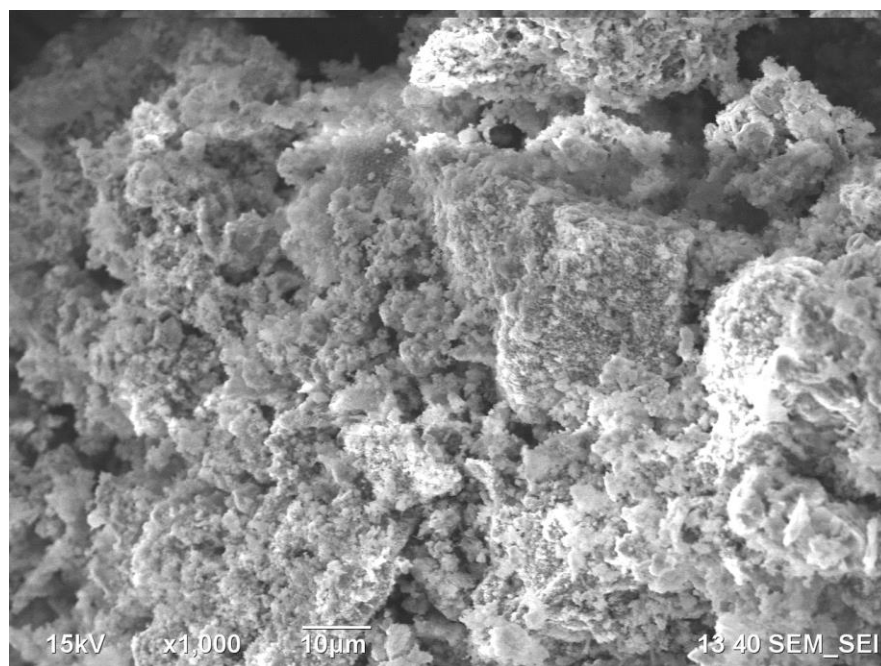


Figura 50. Imagen SEM x1000 del tamaño de grano del  $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$ .

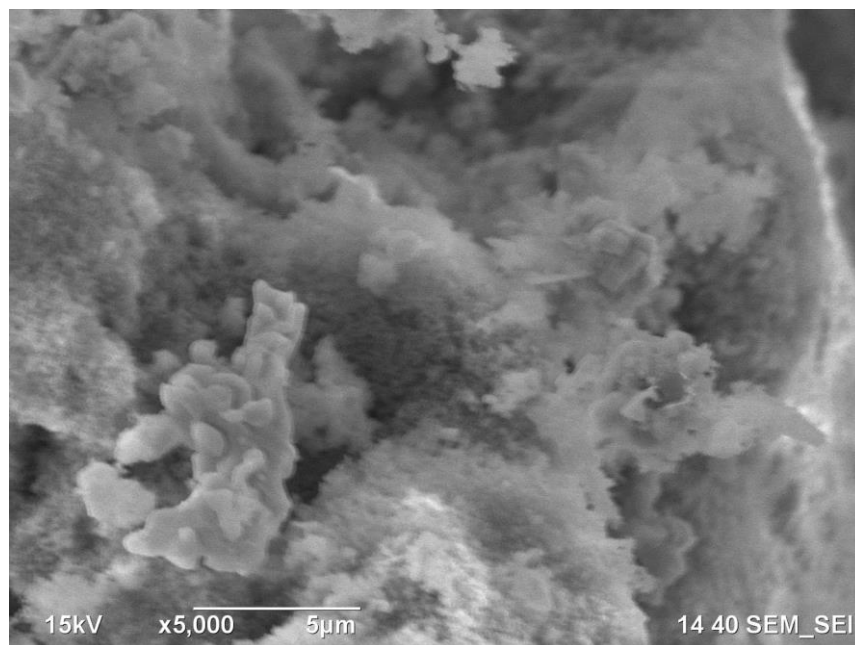


Figura 51. Imagen SEM x5000 del tamaño de grano del  $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$ .

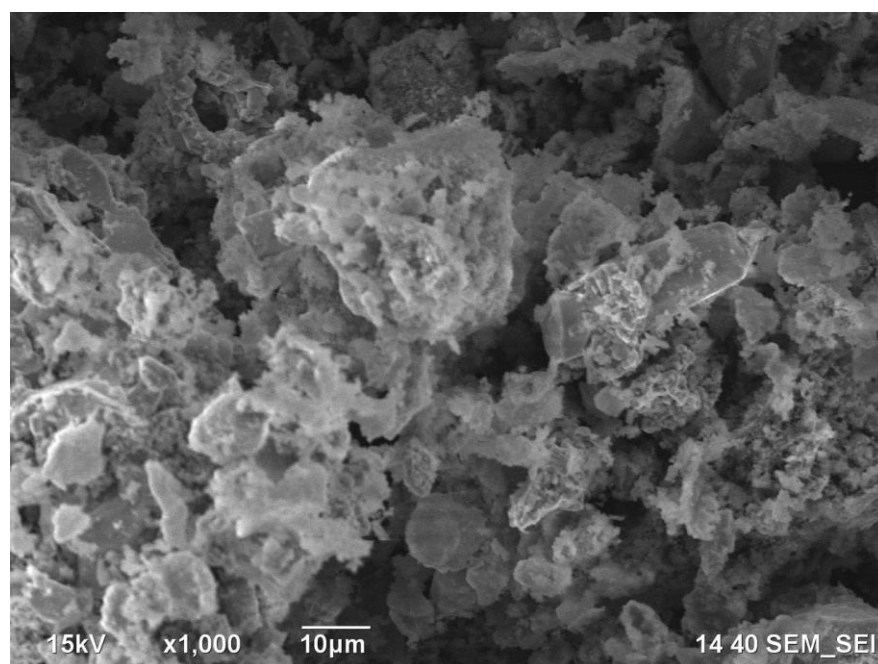


Figura 52. Imagen SEM x1000 del tamaño de grano del  $Al_{0.7}Ga_{0.3}N$ .

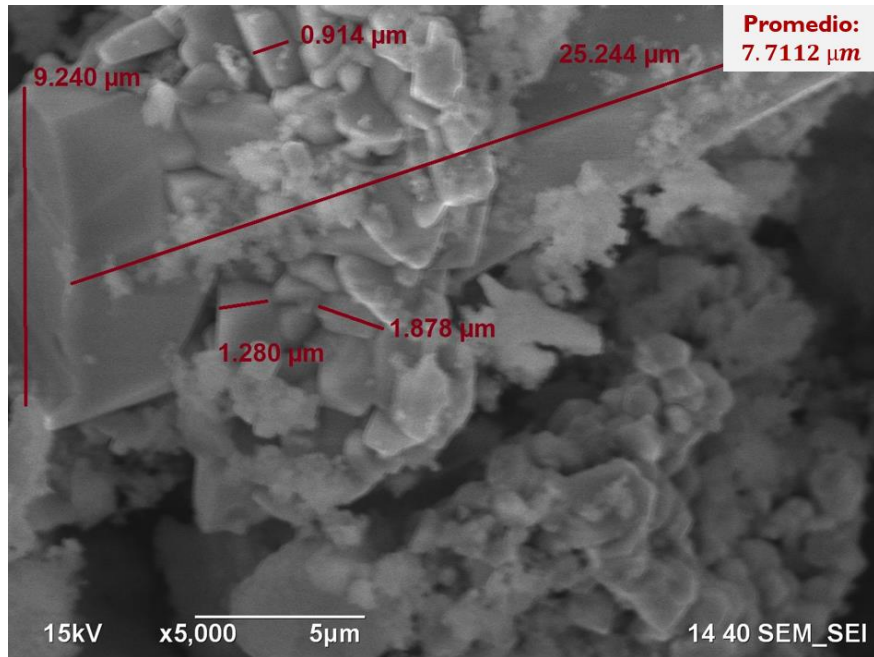


Figura 53. Imagen SEM x5000 del tamaño de grano del  $Al_{0.7}Ga_{0.3}N$ .

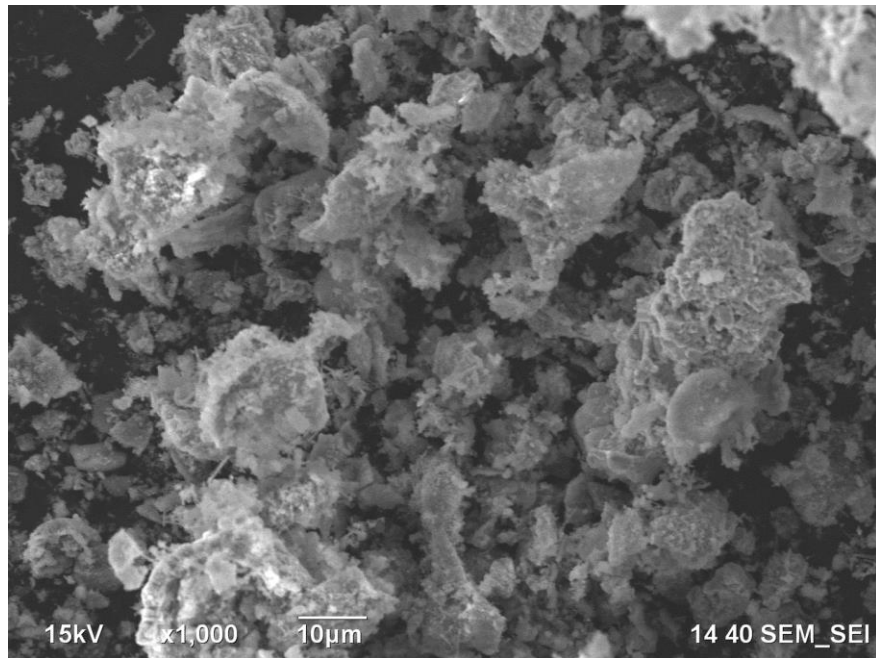


Figura 54. Imagen SEM x1000 del tamaño de grano del  $Al_{0.9}Ga_{0.1}N$ .

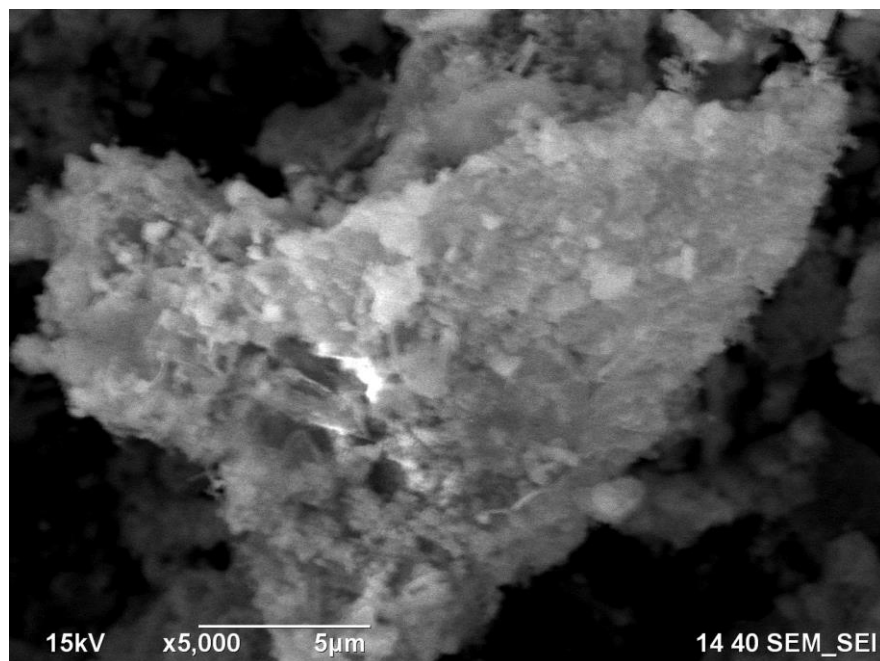


Figura 55. Imagen SEM x5000 del tamaño de grano del  $Al_{0.9}Ga_{0.1}N$ .

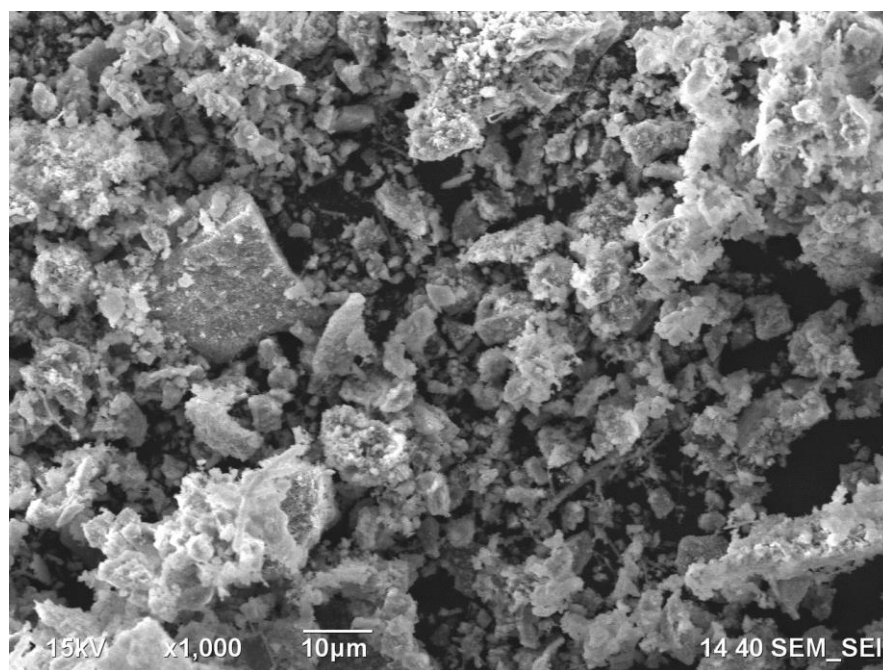


Figura 56. Imagen SEM x1000 del tamaño de grano del AlN.

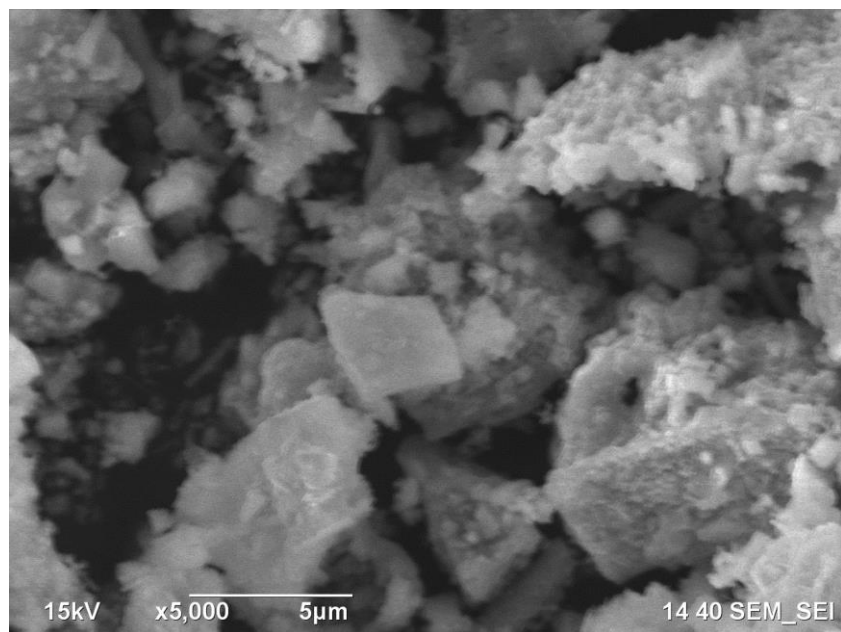


Figura 57. Imagen SEM x5000 del tamaño de grano del *AlN*.

#### 4.4 ESPECTROSCOPIA DE DISPERSIÓN DE ENERGÍA (EDS)

A continuación, se presentan los resultados del estudio de EDS de los polvos de AlGaN, el cual se realizó con el equipo JEOL JIB-4500. Este estudio se realizó para obtener el análisis químico del material. El espectro muestra que efectivamente el material está compuesto de galio y nitrógeno en el caso del GaN. Los resultados muestran que el material está compuesto de aluminio y nitrógeno en el caso del AlN. También muestra que en las diferentes aleaciones de  $Al_xGa_{1-x}N$  la variación del valor de  $x = 0.1 - 0.9$  es congruente con las intensidades de los elementos que se presentan, es decir, la relación estequiométrica se cumple. Además, se observa que existe contaminación de oxígeno, carbono y aluminio en las muestras. Esta contaminación por oxígeno es normal ya que se encuentra en el aire, debido a que no se trabaja en un cuarto limpio, sino en un laboratorio normal. La otra contaminación por aluminio y carbono (en el caso del GaN) se debe a que el crisol con el que se trabajó no era nuevo, aunque se trató de limpiar lo más posible. Lo mismo sucede con la muestra de AlN, la cual está contaminada con galio.

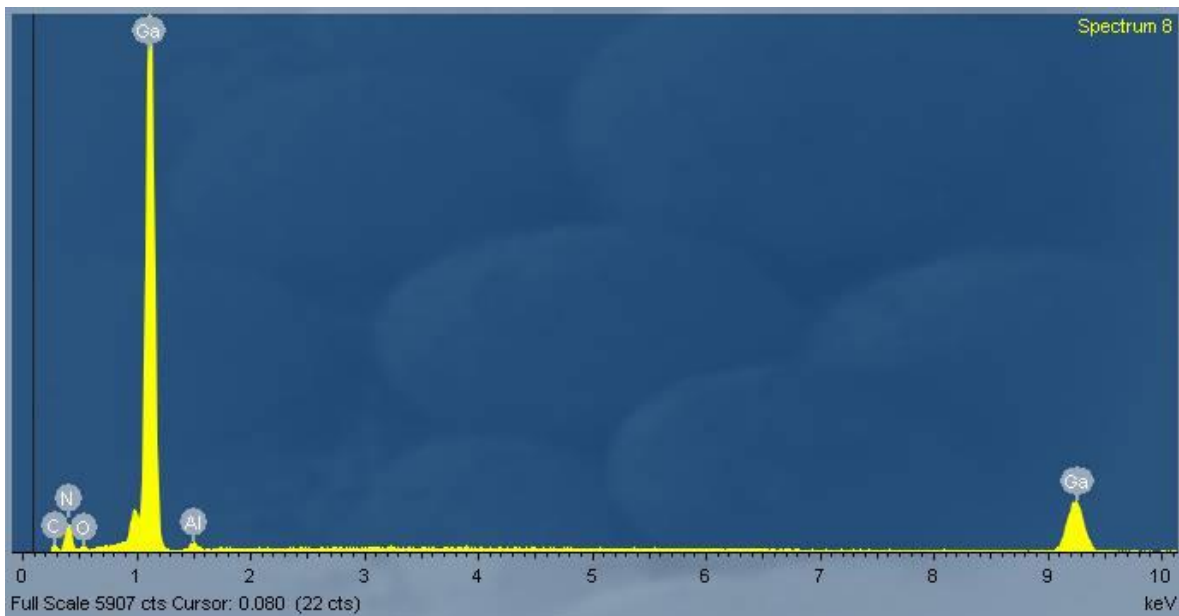
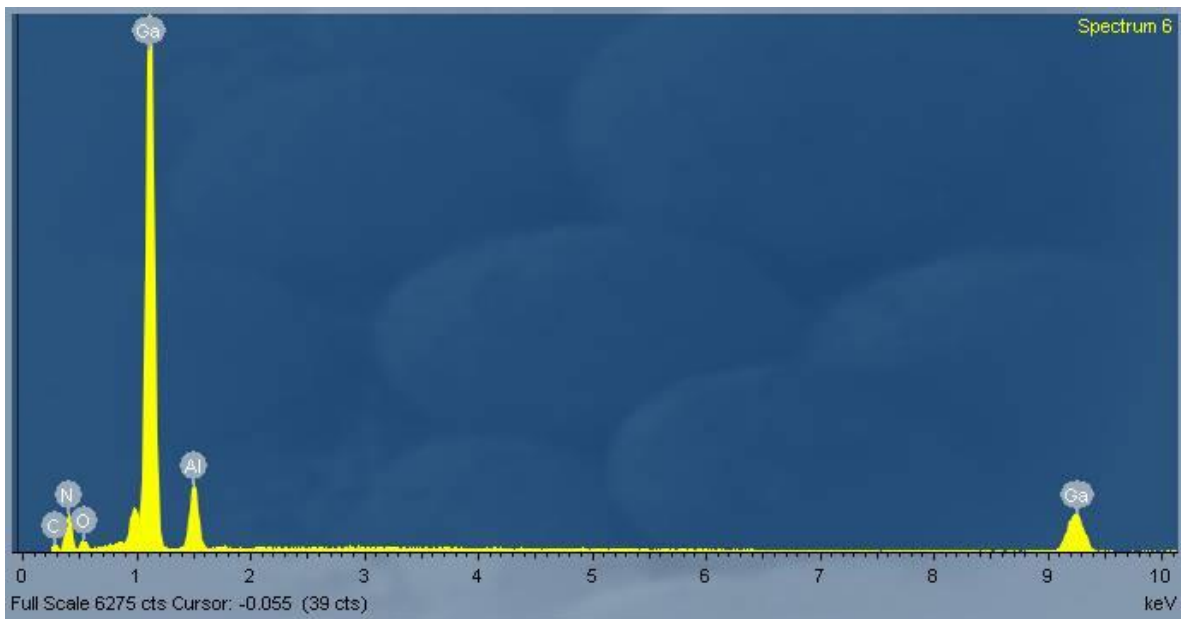
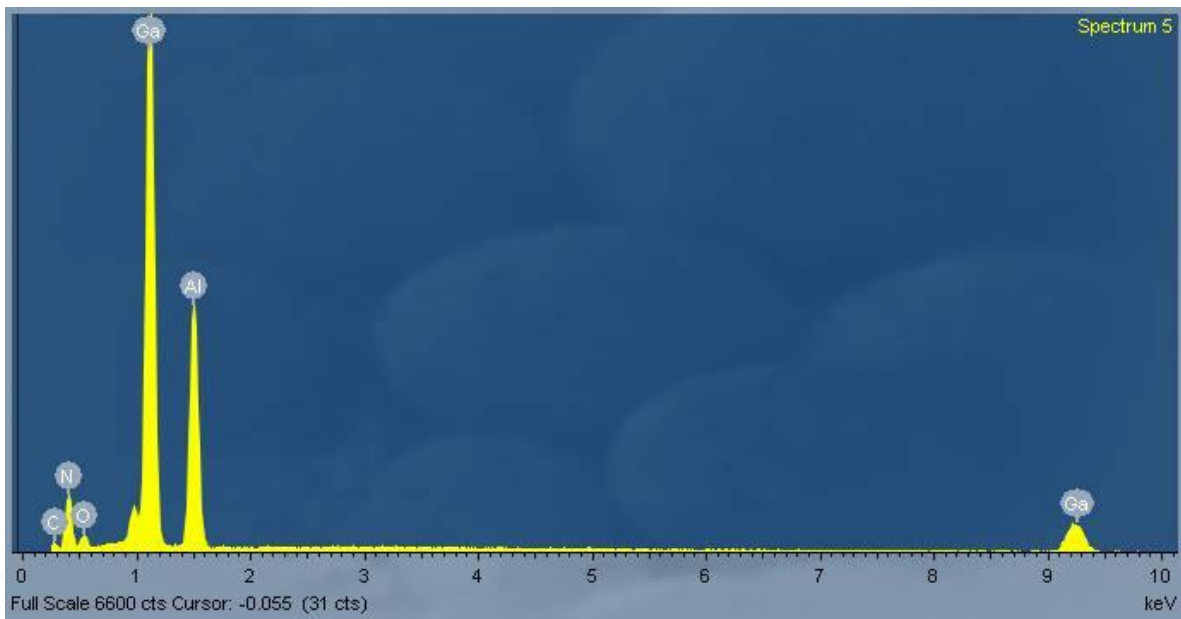
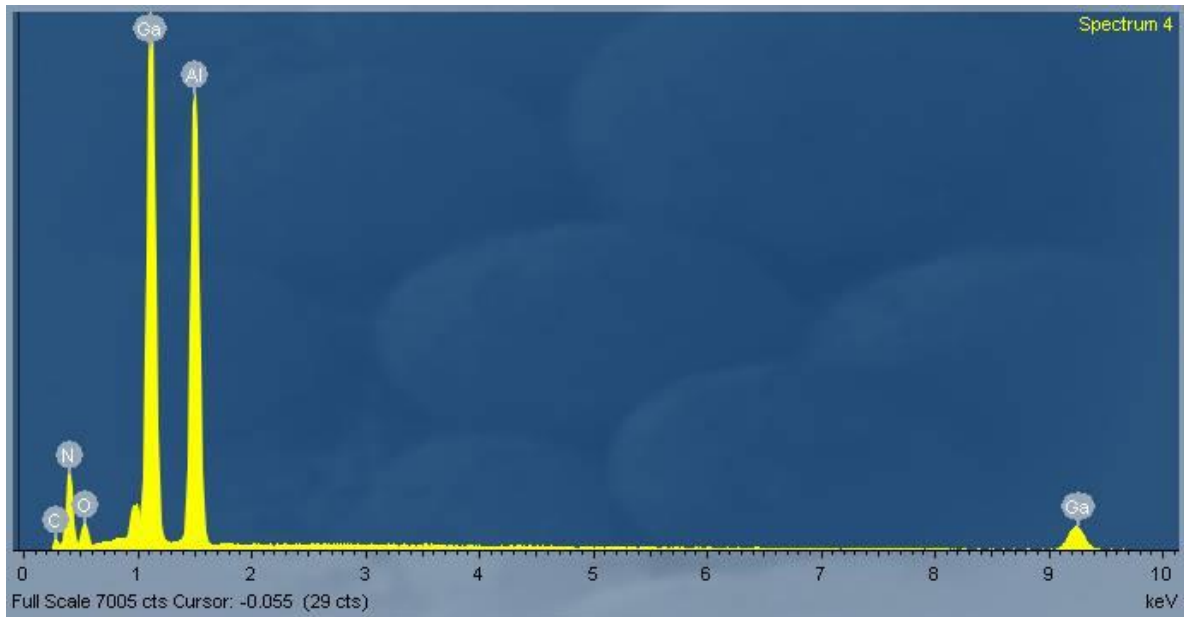
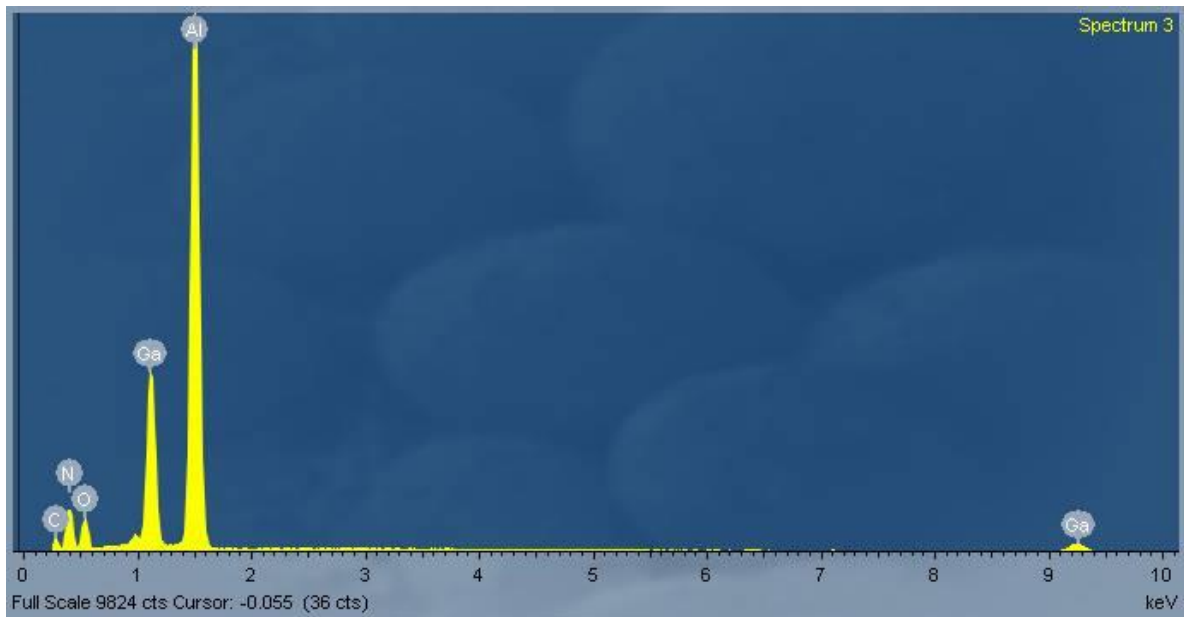
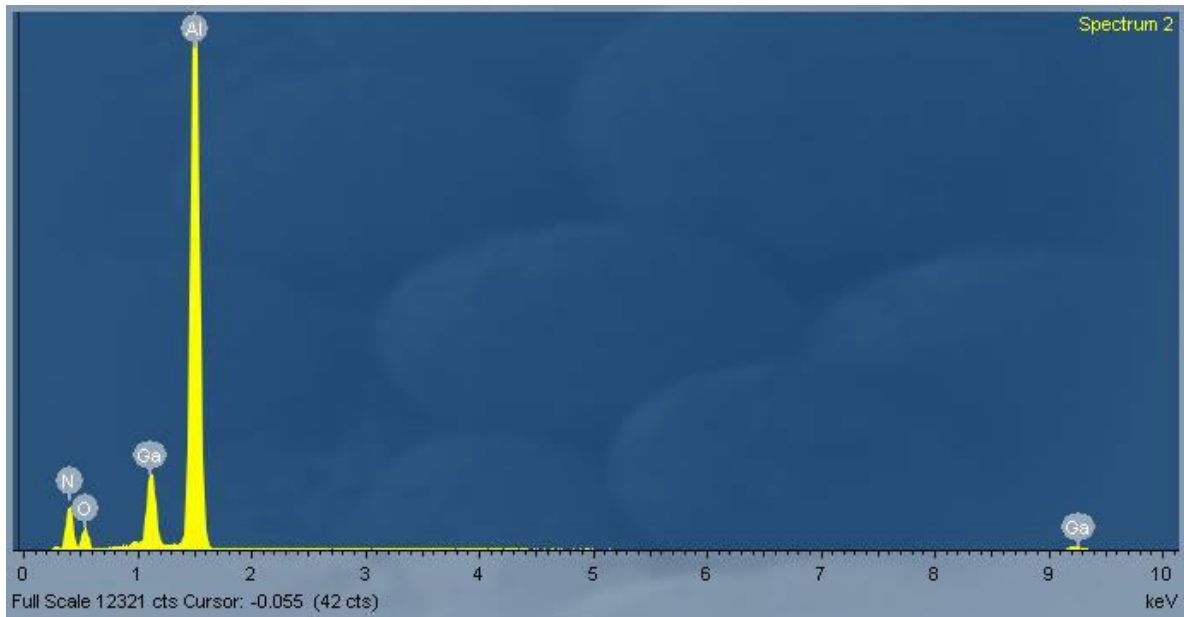
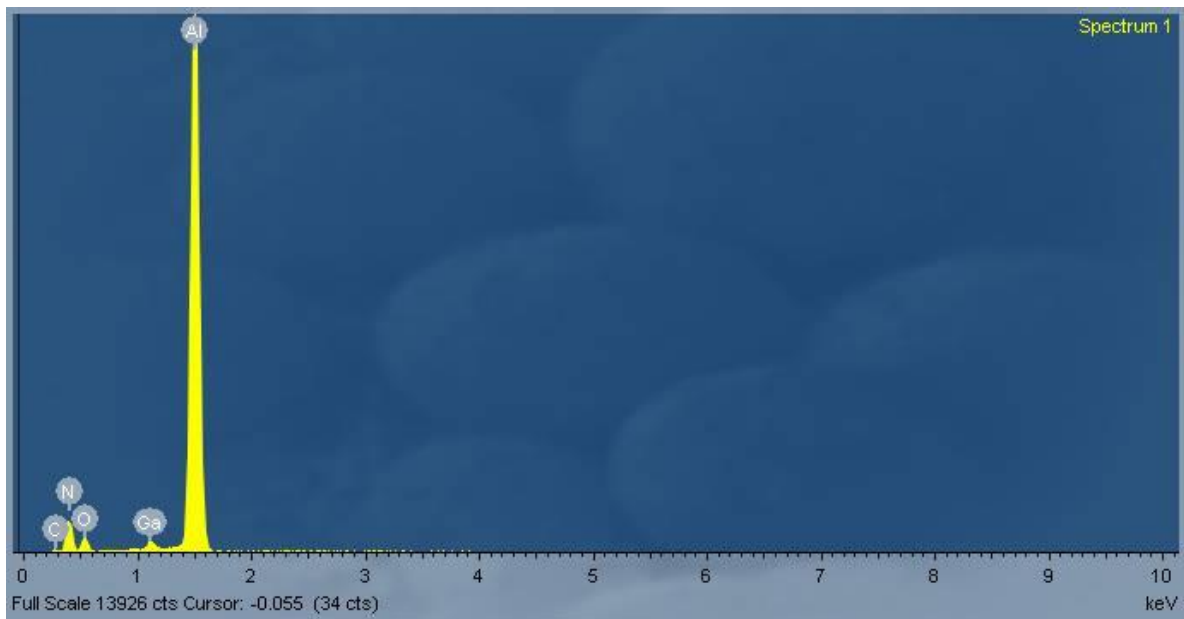


Figura 58. Espectro EDS del GaN.

Figura 59. Espectro EDS del  $Al_{0.1}Ga_{0.9}N$ .Figura 60. Espectro EDS del  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ .

Figura 61. Espectro EDS del  $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$ .Figura 62. Espectro EDS del  $Al_{0.7}Ga_{0.3}N$ .



Figura 63. Espectro EDS del  $Al_{0.9}Ga_{0.1}N$ .Figura 64. Espectro EDS del  $AlN$ .

## 4.5 CATODOLUMINISCENCIA (CL)

A continuación, se presentan los resultados del estudio de CL de los polvos de AlGa<sub>N</sub>, el cual se realizó con el equipo JEOL JIB-4500.

Este método se utilizó para obtener el valor de la banda prohibida del material. Analizando el caso del GaN, el pico máximo de mayor intensidad se encuentra en 371 nm, lo que es equivalente a 3.34 eV. Este resultado se acerca mucho al registrado en la literatura. Deformaciones y defectos en la red pueden ser los responsables de este desplazamiento en el máximo. Los otros dos picos máximos que se encuentran en 369 nm y 422 nm pueden presentarse debido a la contaminación que existe en el material.

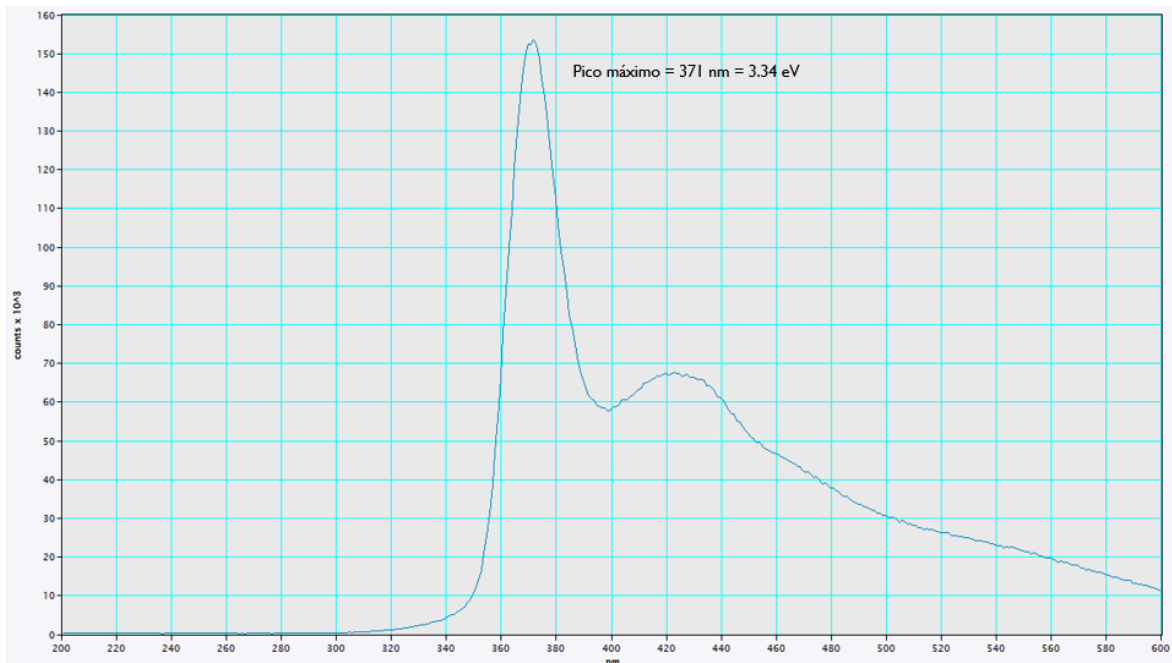


Figura 65. Espectro de catodoluminiscencia del GaN.

Los picos máximos están en 369 nm = 3.36eV, 371 nm = 3.34 eV, y 422 nm = 2.98 eV.

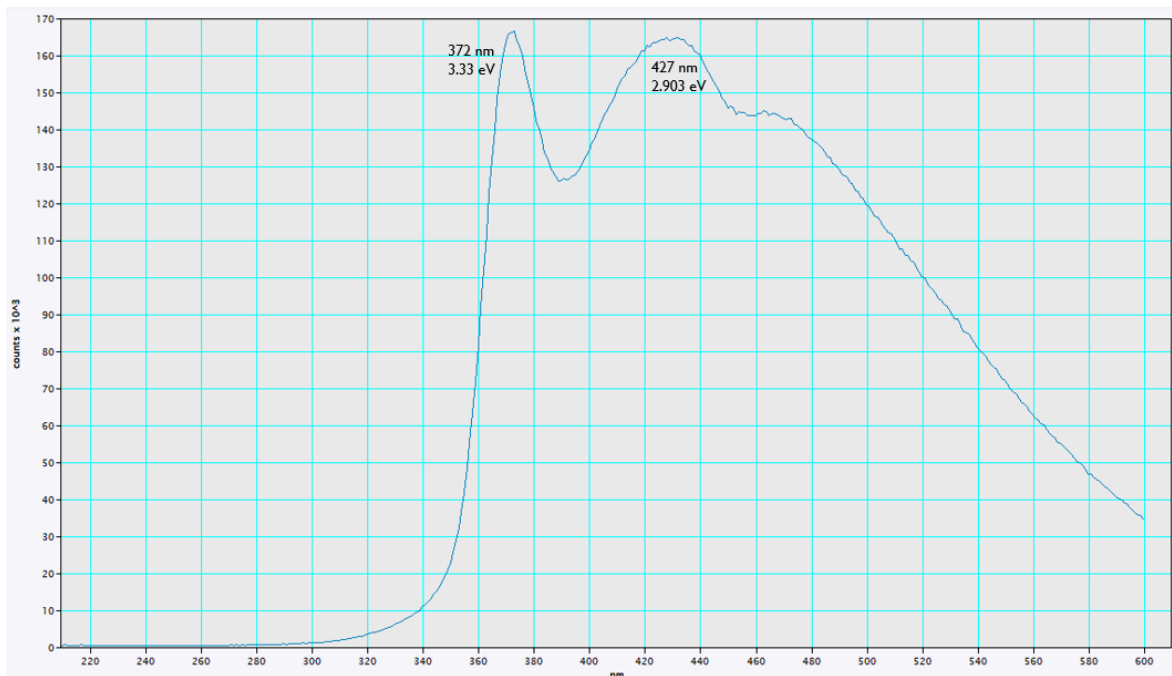


Figura 66. Espectro de catodoluminiscencia del  $Al_{0.1}Ga_{0.9}N$ .

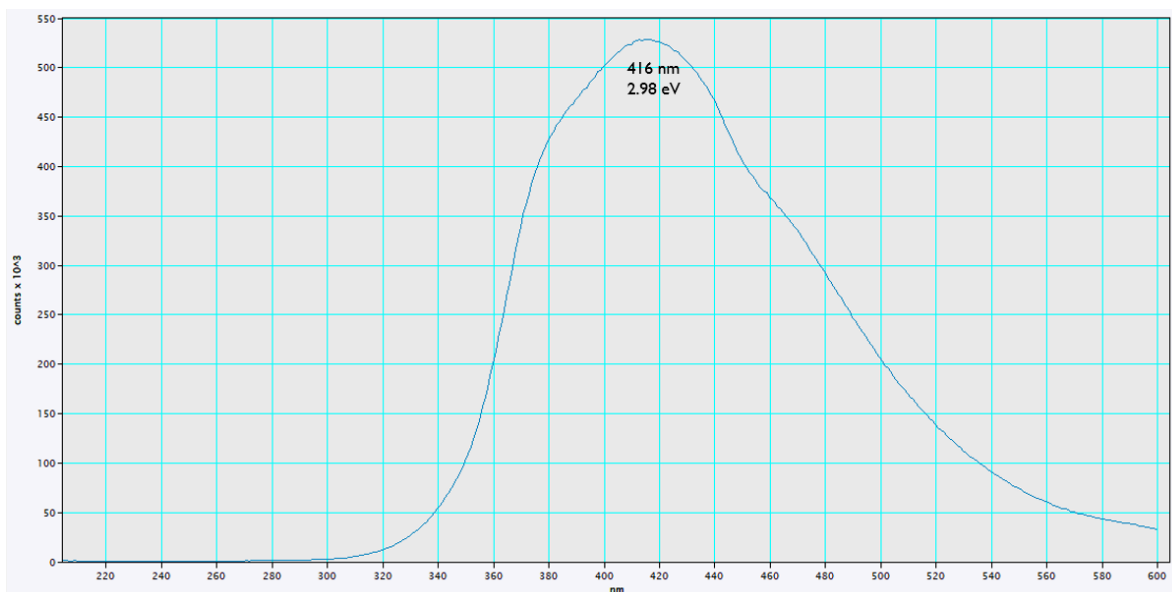


Figura 67. Espectro de catodoluminiscencia del  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ .

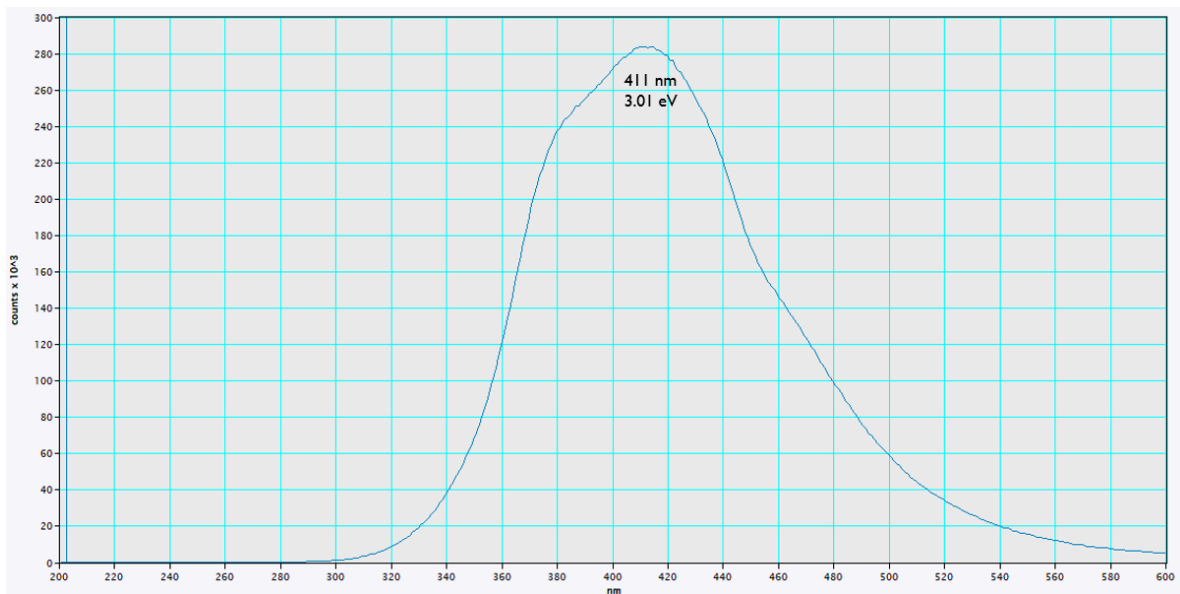


Figura 68. Espectro de catodoluminiscencia del  $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$ .

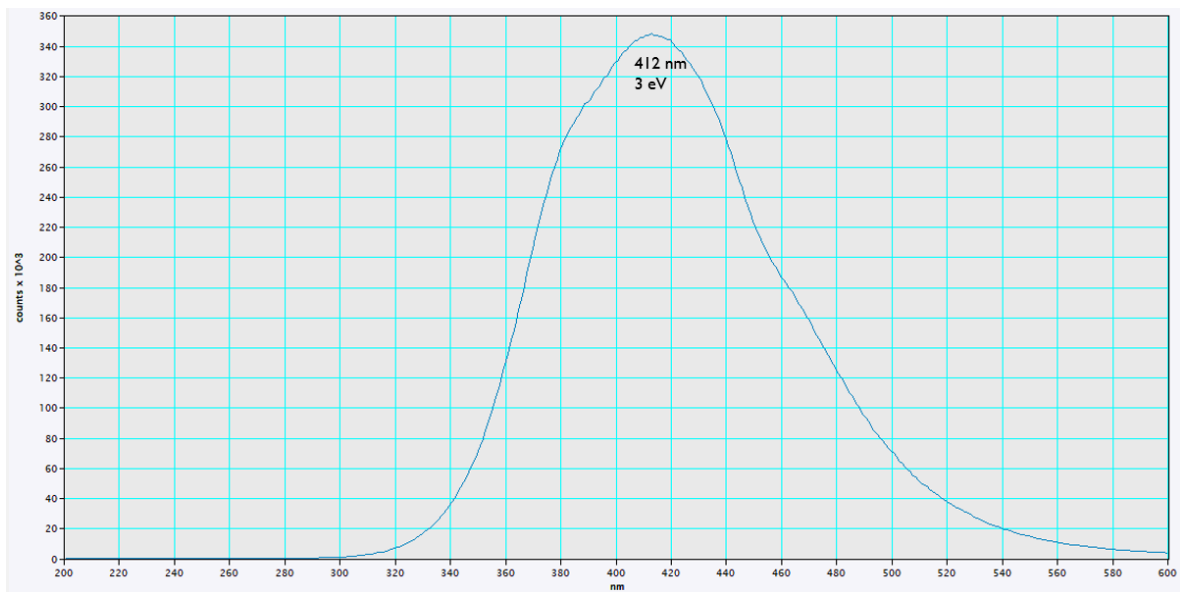


Figura 69. Espectro de catodoluminiscencia del  $Al_{0.7}Ga_{0.3}N$ .

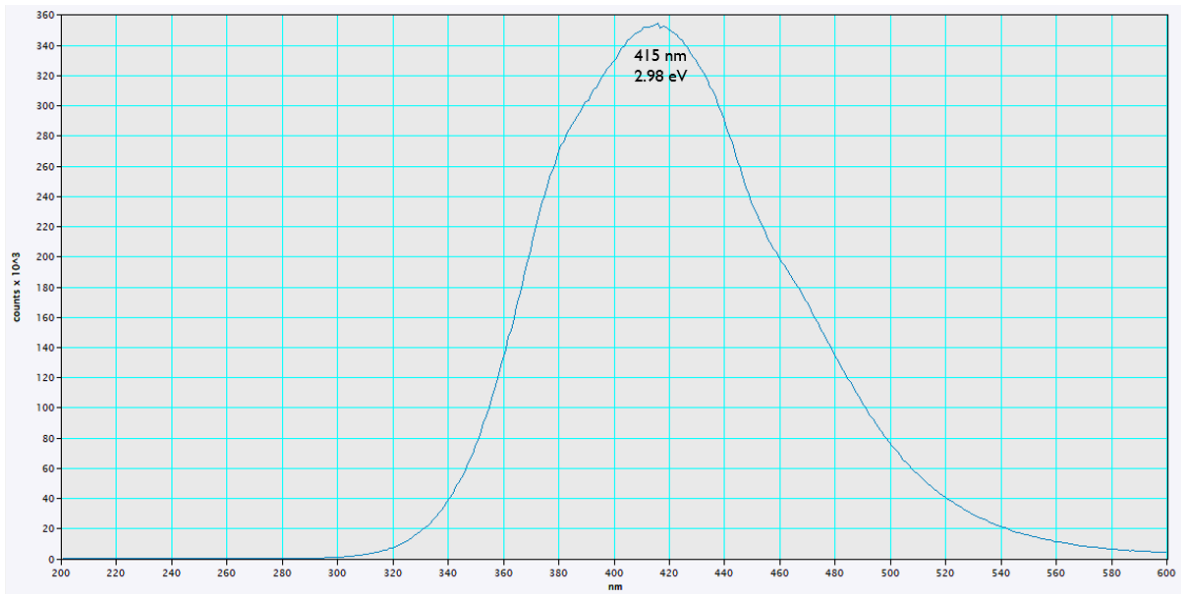


Figura 70. Espectro de catodoluminiscencia del  $Al_{0.9}Ga_{0.1}N$ .

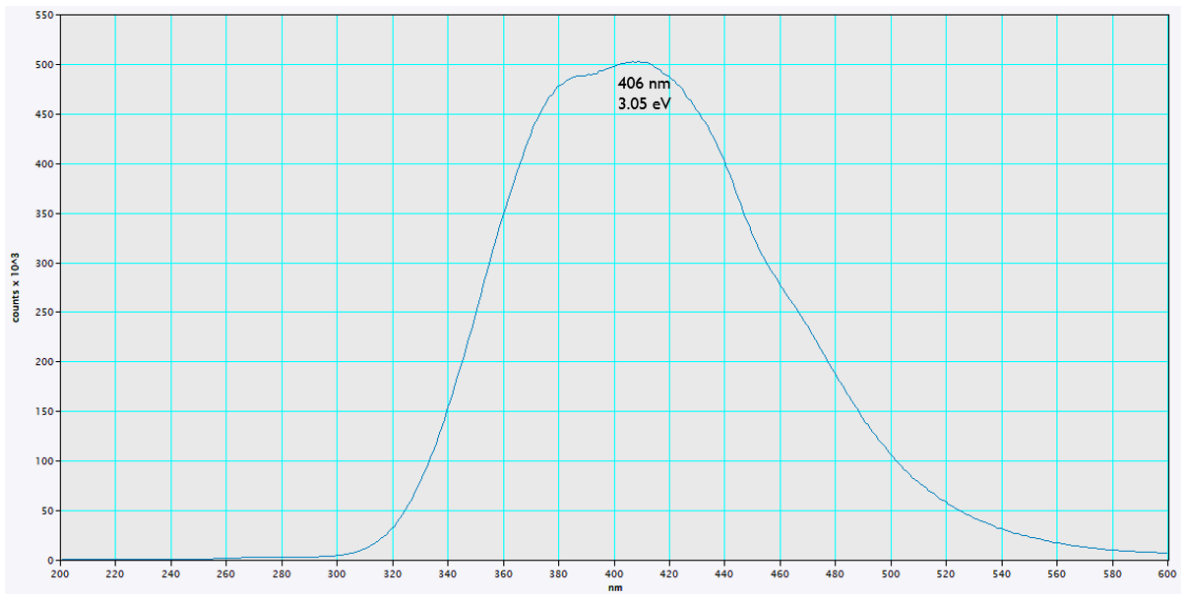


Figura 71. Espectro de catodoluminiscencia del  $AlN$ .

#### 4.6 ESPECTROSCOPÍA UV-VIS DE REFLECTANCIA DIFUSA

A continuación, se presentan los resultados del estudio de UV-VIS de los polvos de AlGa<sub>N</sub>, el cual se realizó con el equipo Thermo Scientific™ Evolution 201/220 UV-Vis.



Figura 72. Thermo Scientific™ Evolution 201/220 UV-Vis.

Del espectro de reflectancia se observa que el GaN comienza a reflejar luz desde los 375 nm hacia longitudes de onda mayores.

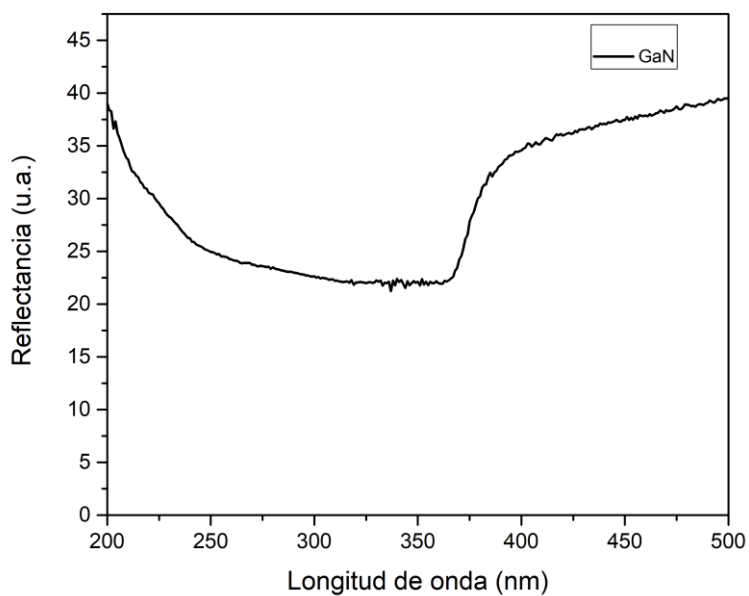


Figura 73. Espectro UV-VIS del GaN.

De la siguiente Figura, se observa que a medida que aumenta la concentración de aluminio en el material, la intensidad de reflectancia es cada vez mayor, sobre todo en la región de 200 a 375 nm. A medida que se añade aluminio al material, este se vuelve más oscuro y por lo tanto más opaco, y entonces reflejará más la luz incidente.

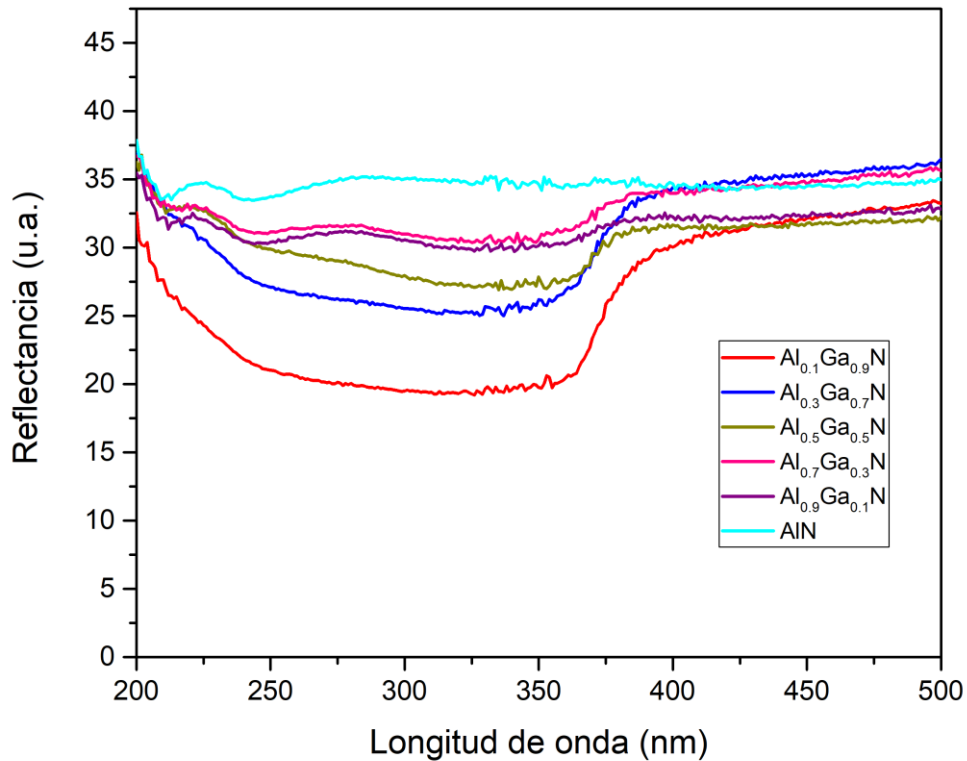


Figura 74. Espectro UV-VIS de todas las demás muestras.

También se obtuvo la banda prohibida de todos los polvos utilizando el método de Kubelka-Munk, aunque este método por naturaleza propia es menos preciso que la técnica de catodoluminiscencia.

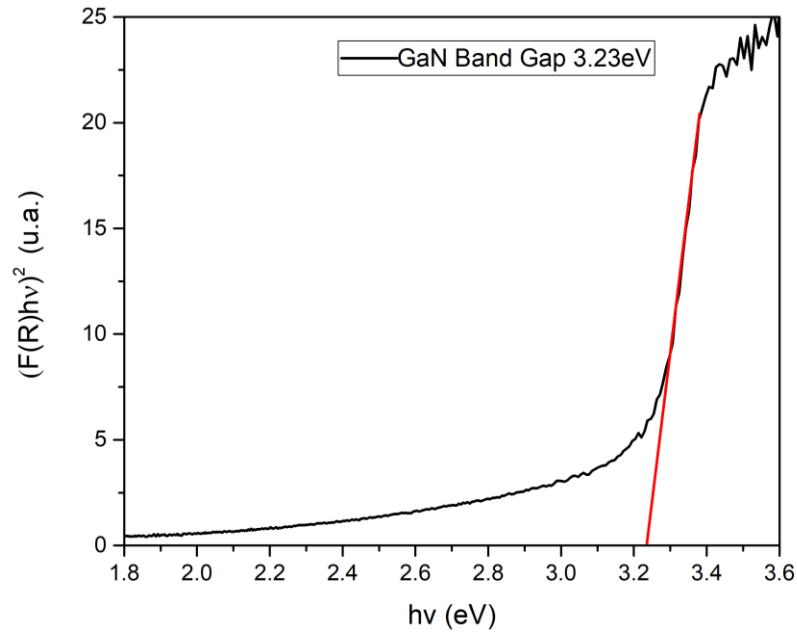


Figura 75. Banda prohibida del GaN obtenida por el método de Kubelka-Munk.

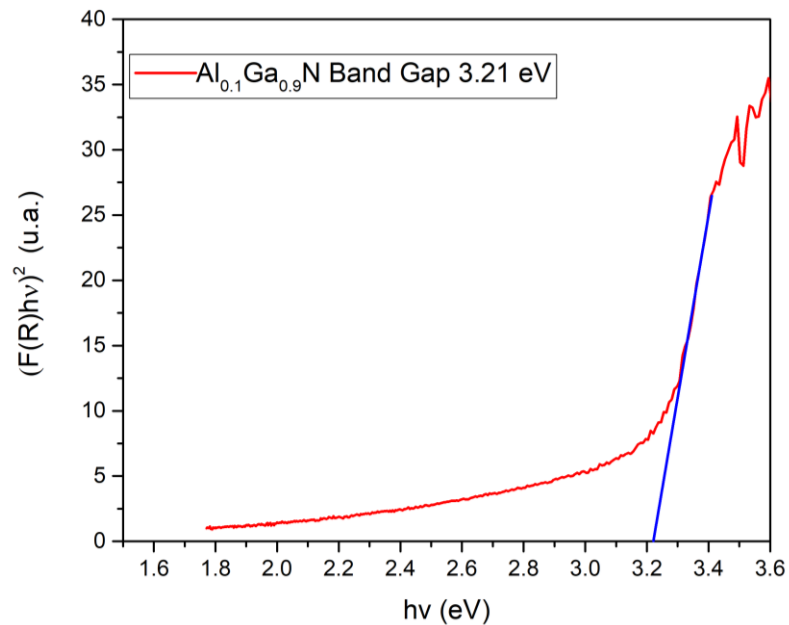


Figura 76. Banda prohibida del  $Al_{0.1}Ga_{0.9}N$  obtenida por el método de Kubelka-Munk.



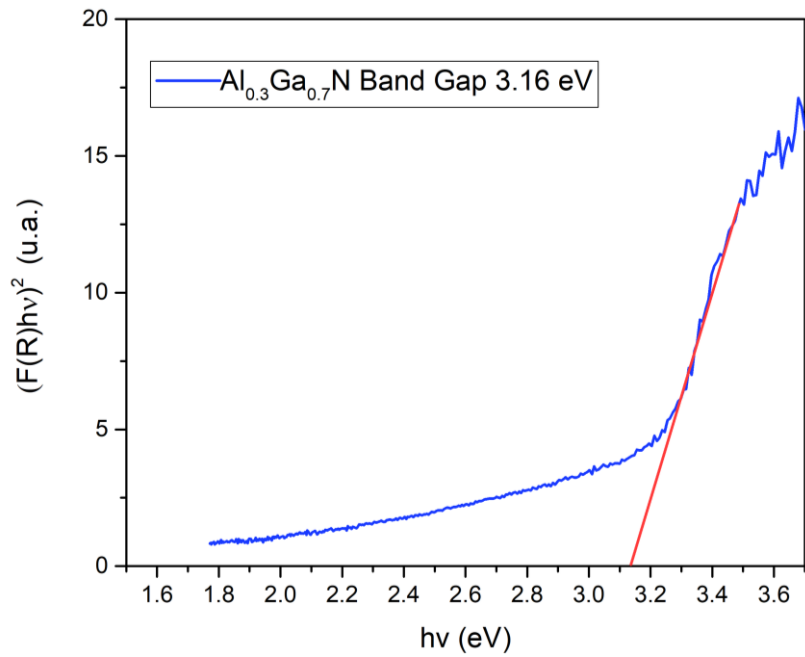


Figura 77. Banda prohibida del  $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$  obtenida por el método de Kubelka-Munk-Tauc.

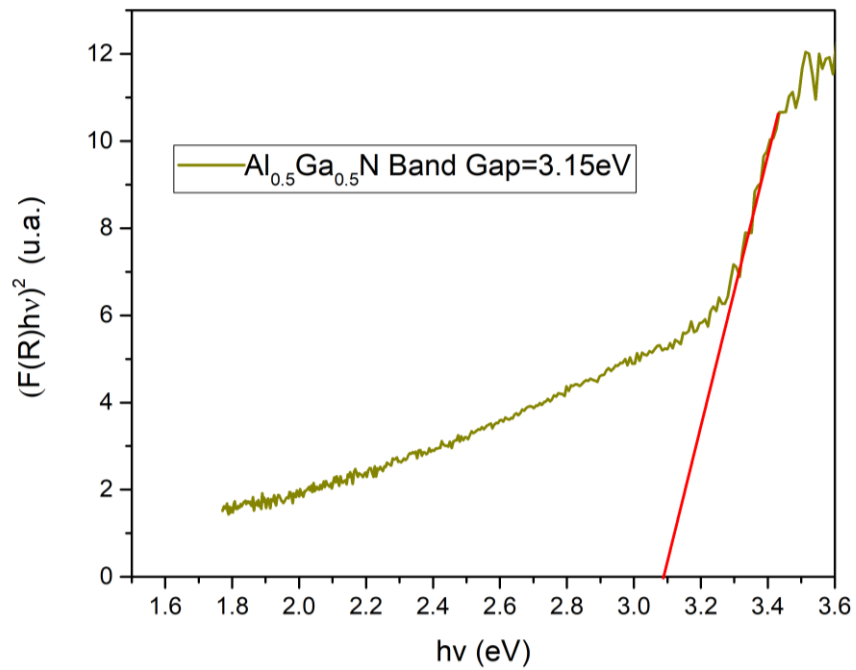


Figura 78. Banda prohibida del  $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$  obtenida por el método de Kubelka-Munk-Tauc.

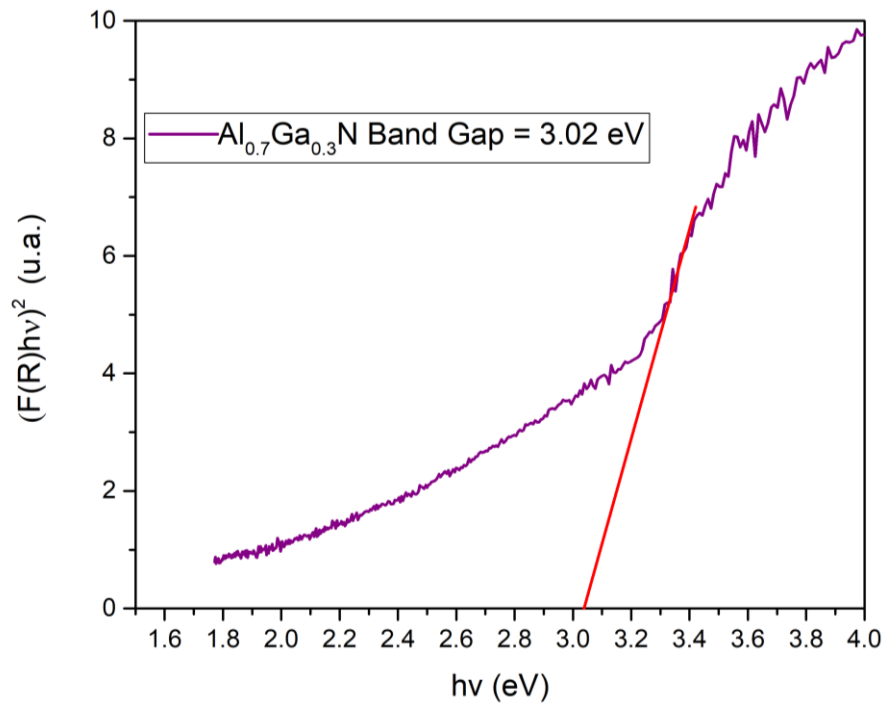


Figura 79. Banda prohibida del  $Al_{0.7}Ga_{0.3}N$  obtenida por el método de Kubelka-Munk-Tauc.

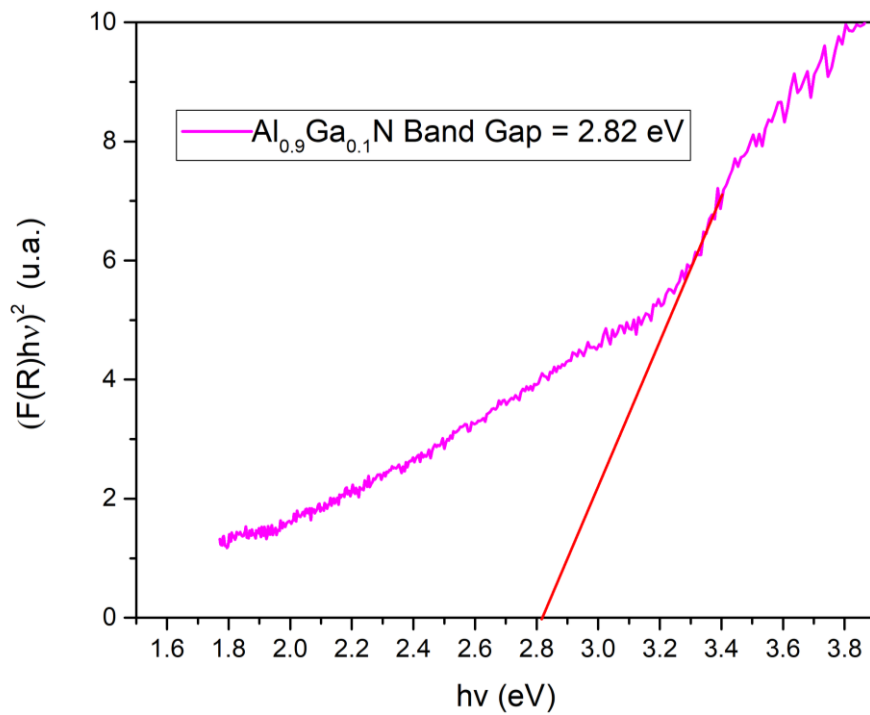


Figura 80. Banda prohibida del  $Al_{0.9}Ga_{0.1}N$  obtenida por el método de Kubelka-Munk-Tauc.

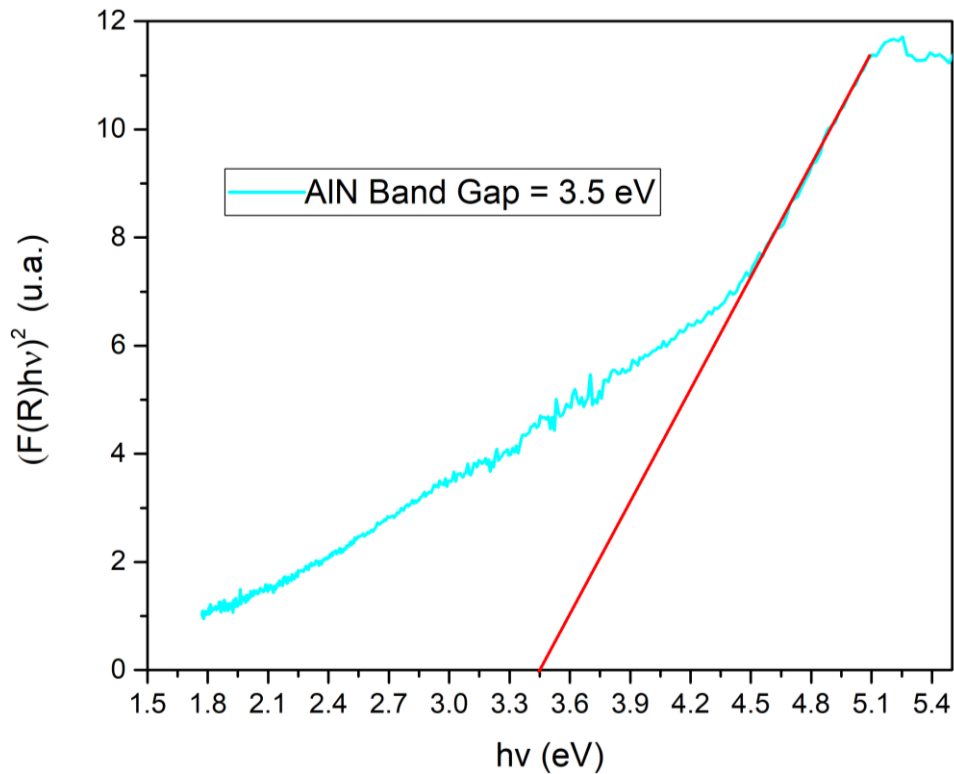


Figura 81. Banda prohibida del *AlN* obtenida por el método de Kubelka-Munk-Tauc.

## 5. CONCLUSIONES

Se elaboraron polvos de GaN exitosamente por el método de reacción directa con amoníaco en un reactor CVD. La elaboración de polvos de AlN por este método también es exitosa, aunque en menor medida, debido a que los resultados de los estudios de CL no son congruentes con los resultados reportados en la literatura. Sin embargo, los resultados de los patrones XRD muestran que efectivamente obtuvimos el material con su estructura cristalina característica. Con respecto al  $Al_xGa_{1-x}N$  ( $x=0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ ) no podemos hablar de una síntesis del todo exitosa, debido a que las fases se separan en GaN y AlN, y este problema es evidente cuando se analizan los estudios de XRD y Catodoluminiscencia.

En primera instancia, si se llegase a formar la aleación AlGaN de manera exitosa, esto quedaría demostrado si observáramos un único patrón de difracción, en vez de

observar dos picos de difracción superpuestos en una gráfica. El otro punto de interés es el de los estudios de catodoluminiscencia. Cuando una aleación  $Al_xGa_{1-x}N$  es sintetizada exitosamente, su band gap debería ser modulable desde 3.4 eV (cuando  $x=0$ , GaN) hasta 6.2 eV ( $x=1$ , AlN), mientras que los resultados de este trabajo muestran que el band gap de todos los materiales  $Al_xGa_{1-x}N$  cuando  $0.1 \leq x \leq 1$  se encuentra cerca de 3 eV.

El espectro de difracción de rayos X confirma que los polvos sintetizados son nitruros con una estructura cristalina hexagonal e índices de Miller muy parecidos a los que se encuentran en la base de datos del Powder Diffraction File para el GaN y el AlN. Para el caso del AlGaN, el espectro muestra que las fases del material están separadas, aunque se observa que si existe la fase compuesta en cantidades pequeñas.

El estudio de catodoluminiscencia muestra que la banda de energía prohibida del GaN es de 3.34 eV. Para todas las demás muestras, las formas tan peculiares en el espectro CL pueden deberse a fallas de apilamiento, que son defectos planos que pueden ocurrir en materiales cristalinos.<sup>11</sup> Además también pueden deberse a impurezas de oxígeno.<sup>12</sup> Estas impurezas pueden causar dislocaciones en la red, además de generar trampas o subniveles en el proceso de recombinación del excitón.

El estudio de espectroscopia UV-VIS de reflectancia indica que el material comienza a reflejar luz desde 375 nm hacia longitudes de onda mayores, y además, a medida que aumenta la cantidad de aluminio, la reflectancia del material aumenta progresivamente para todas las longitudes de onda pero en especial para la región entre 200 y 375 nm.

El estudio EDS muestra que efectivamente el material contiene los elementos galio y nitrógeno (para el GaN), contiene los elementos aluminio y nitrógeno (para el AlN), y contiene los elementos galio, aluminio y nitrógeno en las concentraciones correctas (para el  $Al_xGa_{1-x}N$ ) en su composición.

Las imágenes SEM indican que los tamaños de grano son del orden de micrómetros. En algunos materiales no se pudo calcular el tamaño de grano promedio debido a que no se alcanzan a observar granos lo suficientemente separados de los cúmulos. Esto sugiere que la pulverización del material pudo haberse realizado utilizando otro tipo de equipo técnico, como un molino de bolas, en vez de realizarlo manualmente en un mortero.

En conclusión, se elaboraron polvos de GaN, AlN y AlGaN por el método de reacción directa con amoníaco en un horno de tubo de cuarzo. El método de síntesis es un método relativamente rápido y no requiere de equipo sofisticado. Los polvos presentan un aspecto de buena calidad.

## 6. REFERENCIAS

- [1] A. R. Acharya, "Group III – Nitride Semiconductors: Preeminent Materials for Modern Electronic and Optoelectronic Applications", *Himalayan Physics*, vol. 5, pp. 22–26, Jun. 2015.
- [2] R. M. Farrell, D. J. Friedman, N. G. Young, E. E. Perl, N. Singh, J. R. Lang, C. J. Neufeld, M. Iza, S. C. Cruz, S. Keller, W. E. McMahon, S. Nakamura, S. P. DenBaars, U. K. Mishra, J. E. Bowers, and J. S. Speck, "InGaN-Based Solar Cells and High-Performance Broadband Optical Coatings for Ultrahigh Efficiency Hybrid Multijunction Device Designs," in *CLEO: 2013*, OSA Technical Digest (online) (Optica Publishing Group, 2013), paper ATH4N.4.
- [3] Singh, D. K., Roul, B. K., Nanda, K. K., & Krupanidhi, S. B. (2021). Group III-Nitrides and Their Hybrid Structures for Next-Generation Photodetectors. *Light-Emitting Diodes and Photodetectors - Advances and Future Directions* [Working Title]. <https://doi.org/10.5772/INTECHOPEN.95389>
- [4] Plenary lecture of the XIII SBPMat (Brazilian MRS) meeting, given on September 30th, 2014, in João Pessoa (Brazil) by Sir Colin Humphreys, Professor at University of Cambridge (U.K.).
- [5] U. V Leds and N. Dame, "Gallium nitride quantum dots and deep UV light emission," vol. 9, no. 2, pp. 98–100, 2014.
- [6] H. Hirayama, "Ultraviolet LEDs," in *Nitride Semiconductor Light-Emitting Diodes (LEDs): Materials, Technologies and Applications*, Elsevier Ltd., 2013, pp. 497–532.
- [7] Choi, Seok & Ansari, Abusaad & Yun, Hee & Kim, Hogyoun & Shong, Bonggeun & Choi, Byung Joon. (2021). Growth of Al-rich AlGaIn thin films by purely thermal atomic layer

deposition. Journal of Alloys and Compounds. 854. 157186. 10.1016/j.jallcom.2020.157186.

[8] Kang, S., Nandi, R., Kim, H., Jeong, K. U., & Lee, C. R. (2018). Synthesis of n-AlGaIn nanowires by MOCVD for high-performance ultraviolet-C photodetectors. Journal of Materials Chemistry C, 6(5), 1176–1186. <https://doi.org/10.1039/C7TC05182D>

[9] Kuppulingam, B., Singh, S., & Baskar, K. (2014). Synthesis, morphology, and optical properties of GaN and AlGaIn semiconductor nanostructures. AIP Conference Proceedings, 1591, 1437–1439. <https://doi.org/10.1063/1.4872988>

[10] Zhao, S., Woo, S. Y., Sadaf, S. M., Wu, Y., Pofelski, A., Laleyan, D. A., Rashid, R. T., Wang, Y., Botton, G. A., & Mi, Z. (2016). Molecular beam epitaxy growth of Al-rich AlGaIn nanowires for deep ultraviolet optoelectronics. APL Materials, 4(8). <https://doi.org/10.1063/1.4961680>

[11] Gabriela Guzmán Navarro, (2016), Semiconductores magnéticos diluidos basados en nanohilos de GaN (Tesis Doctoral), Ensenada, Baja California, México.

[12] Ma. Magdalena García Fabiola, (2016), Apuntes para Espectrometría de Radiación Ultravioleta Visible (UV/VIS), Universidad Autónoma del Estado De México, Estado de México.

[13] Siklitsky, V. (n.d.). NSM Archive - Gallium Nitride (GaN). NSM Archive - Physical Properties of Semiconductors. Retrieved March 21, 2021, from <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/GaN/index.html>

- [14] Elwell, D., Feigelson, R. S., Simkins, M. M., & Tiller, W. A. (1984). Crystal growth of GaN by the reaction between gallium and ammonia. *Journal of Crystal Growth*, 66(1), 45–54. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(84\)90075-7](https://doi.org/10.1016/0022-0248(84)90075-7)
- [15] Sánchez, J. D. T., & Alfonso, A. B. (2012). El nitruro de galio y sus aleaciones: ¡y se hizo la luz... azul! *Mundo Nano. Revista Interdisciplinaria En Nanociencias y Nanotecnología*, 5(1). <https://doi.org/10.22201/CEIICH.24485691E.2012.1.45127>
- [16] Nagasawa, Y., & Hirano, A. (2019). Review of encapsulation materials for AlGaN-based deep-ultraviolet light-emitting diodes. *Photonics Research*, 7(8), B55. <https://doi.org/10.1364/prj.7.000b55>
- [17] Nagasawa, Y., Hirano, A., Ippommatsu, M., Sako, H., Hashimoto, A., Sugie, R., Honda, Y., Amano, H., Akasaki, I., Kojima, K., & Chichibu, S. F. (2020). Detailed analysis of Ga-rich current pathways created in an n-Al<sub>0.7</sub>Ga<sub>0.3</sub>N layer grown on an AlN template with dense macrosteps. *Applied Physics Express*, 13(12), 0–5. <https://doi.org/10.35848/1882-0786/abcb49>
- [18] D. Reusch and J. Glaser, *DC-DC Converter Handbook, Power Conversion Publications*, 2015. ISBN 978-0-9966492-0-9
- [19] S.J. Pearton, C.R. Abernathy, M.E. Overberg, G.T. Thaler, A.H. Onstine, B.P. Gila, F. Ren, B. Lou, J. Kim, “New applications advisable for gallium nitride”, *Materials Today*, Volume 5, Issue 6, Pages 24-31, 2002.
- [20] S. Eaton-Magaña and C. M. Breeding, “AN INTRODUCTION TO PHOTOLUMINESCENCE SPECTROSCOPY FOR DIAMOND AND ITS APPLICATIONS IN GEMOLOGY,” *GEMS Gemol.*, vol. 52, no. 1, pp. 2–17, 2016, doi: 10.5741/GEMS.52.1.2.



- [21] H. Hirayama, "Quaternary InAlGaN-based high-efficiency ultraviolet light-emitting diodes," *J. Appl. Phys.*, vol. 97, no. 9, p. 091101, May 2005, doi: 10.1063/1.1899760.
- [22] Y. Nagasawa and A. Hirano, "Review of encapsulation materials for AlGaIn-based deep-ultraviolet light-emitting diodes," *Photonics Res.*, vol. 7, no. 8, p. B55, 2019, doi: 10.1364/prj.7.000b55.
- [23] Y. Nagasawa *et al.*, "Detailed analysis of Ga-rich current pathways created in an n-Al<sub>0.7</sub>Ga<sub>0.3</sub>N layer grown on an AlN template with dense macrosteps," *Appl. Phys. Express*, vol. 13, no. 12, pp. 0–5, 2020, doi: 10.35848/1882-0786/abcb49.
- [24] G. Parish, "Growth and characterization of aluminium gallium nitride / gallium nitride ultraviolet detectors," *Electr. Comput. Eng.*, vol. Dr. of Phi, no. March, pp. XIV, 163 S.: III., 2001.
- [25] F. Sima, C. Ristoscu, L. Duta, O. Gallet, K. Anselme, and I. N. Mihailescu, "Laser thin films deposition and characterization for biomedical applications," in *Laser Surface Modification of Biomaterials*, Elsevier, 2016, pp. 77–125.
- [26] J. Verma, S. M. Islam, V. Protasenko, P. Kumar Kandaswamy, H. Xing, and D. Jena, "Tunnel-injection quantum dot deep-ultraviolet light-emitting diodes with polarization-induced doping in III-nitride heterostructures," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 104, no. 2, p. 021105, Jan. 2014, doi: 10.1063/1.4862064.
- [27] A. Zukauskas, M. S. Shur, and R. Gaska, *Introduction to Solid-State Lighting*. 2002.
- [28] Y. T. Rebane, Y. G. Shreter and M. Albrecht, *Phys. Stat. Sol. A* 164, 141 (1997)
- [29] B-C. Chung and M. Gershenson, *J. Appl. Phys.* 72, 651 (1992).

[30] Ana M. Herrera, Godofredo García, Erick Gastellóu, Fabiola Nieto, Rafael García, Gustavo A. Hirata, Oscar E. Contreras, Crisoforo Morales, Enrique Rosendo, and Tomas Díaz, Hexagonal Nanocrystals into AlGa<sub>N</sub> Powders Obtained via Pyrolysis from an Organometallic Compound, EJERS, European Journal of Engineering Research and Science Vol. 4, No. 3, (March 2019), pp. 68-72.

[31] Ana M. Herrera, Rafael García, Godofredo García, Erick Gastellou, Fabiola Nieto, Gustavo A. Hirata, Oscar E. Contreras, Crisoforo Morales, Enrique Rosendo, Tomas Díaz, Experimental determination of the pyrolysis temperatures of an organometallic complex to obtain Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N powders, Journal of Alloys and Compounds 775 2019 109-115.

[32] Ana María Herrera Castillo, (2019), Síntesis de polvos de Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N por la ruta pirolítica y su caracterización estructural y óptica (Tesis Doctoral), Puebla, Puebla, México.

[33] S. Zhao, J. Lu, X. Hai, and X. Yin, "AlGa<sub>N</sub> Nanowires for Ultraviolet Light-Emitting: Recent Progress, Challenges, and Prospects," Micromachines, vol. 11, no. 2, p. 125, Jan. 2020, doi: 10.3390/mi11020125.

M. Benaissa, K. E. Gonsalves and S. P. Rangarajan, AlGa<sub>N</sub> nanoparticle/polymer composite: Synthesis, optical, and structural characterization, Applied Physics Letters 71, (1997), 3685-3687.

[34] Abdullahi, Sabiu & Güner, Sadik & Koseoglu, Yuksel & Musa, Ibrahim & Adamu, Bala & Abdulhamid, Mahmud. (2016). Simple Method For The Determination of Band Gap of a Nanopowdered Sample Using Kubelka Munk Theory. Journal of the Nigerian Association of Mathematical Physics. 35. 241-246.

[35] National Center for Biotechnology Information (2022). PubChem Patent Summary for US-5290393-A. Retrieved November 8, 2022 from <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/patent/US-5290393-A>.

[36] Ettmayer, Peter & Lengauer, Walter. (2000). Nitrides. 10.1002/14356007.a17\_341.

## 7. APÉNDICE

$$\# \text{ de moles} = \frac{\text{Masa (g)}}{\text{Masa Molar } \left(\frac{\text{g}}{\text{mol}}\right)}$$

<b><i>Al<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub></i></b>				
Elemento	Masa Molar (g/mol)	Masa (g)	# de moles	Concentración molar relativa
Al	26.982	1.34	0.05	X=0.5
Ga	69.723	3.48	0.05	X=0.5
Total	-----	<b>4.82</b>	<b>0.1</b>	<b>X=1</b>

$$\frac{\text{Masa Al (g)}}{\text{Masa Ga (g)}} = 0.3850$$

Esto se cumple solo para el ***Al<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub>***.

Para ***Al<sub>0.1</sub>Ga<sub>0.9</sub>***:

$$\frac{\text{Masa Al (g)}}{\text{Masa Ga (g)}} = 0.042998723$$

Para ***Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>***:

$$\frac{\text{Masa Al (g)}}{\text{Masa Ga (g)}} = 0.165852219$$

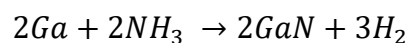
Para ***Al<sub>0.7</sub>Ga<sub>0.3</sub>***:

$$\frac{\text{Masa Al (g)}}{\text{Masa Ga (g)}} = 0.902973193$$

Para ***Al<sub>0.9</sub>Ga<sub>0.1</sub>***:

$$\frac{\text{Masa Al (g)}}{\text{Masa Ga (g)}} = 3.482896605$$

**Energía libre de Gibbs de reacción GaN:**



$$\Delta G_R^\circ = 2\Delta G_f^\circ(\text{GaN}) + 3\Delta G_f^\circ(\text{H}_2) - 2\Delta G_f^\circ(\text{Ga}) - 2\Delta G_f^\circ(\text{NH}_3)$$

Se buscan los valores para  $\Delta G_f^\circ(\text{GaN})$ ,  $\Delta G_f^\circ(\text{H}_2)$ ,  $\Delta G_f^\circ(\text{Ga})$ ,  $\Delta G_f^\circ(\text{NH}_3)$  correspondientes a una  $T = 1300 \text{ K} = 1026.85 \text{ }^\circ\text{C}$  en las tablas anexadas y se sustituyen:

$$\Delta G_R^\circ = (2\text{mol})(46.789 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}) + (3\text{mol})(0) - (2\text{mol})(0) - (2\text{mol})(97.091 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}})$$

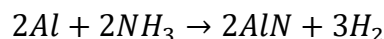
$$\Delta G_R^\circ = (2\text{mol})(46.789 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}) - (2\text{mol})(97.091 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}})$$

$$\Delta G_R^\circ = 93.578 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} - 194.182 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$\Delta G_R^\circ = -100.604 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$\Delta G_R^\circ < 0 \therefore$  la reacción es espontánea.

#### **Energía libre de Gibbs de reacción AlN:**



$$\Delta G_R^\circ = 2\Delta G_f^\circ(\text{AlN}) + 3\Delta G_f^\circ(\text{H}_2) - 2\Delta G_f^\circ(\text{Al}) - 2\Delta G_f^\circ(\text{NH}_3)$$

Se buscan los valores para  $\Delta G_f^\circ(\text{AlN})$ ,  $\Delta G_f^\circ(\text{H}_2)$ ,  $\Delta G_f^\circ(\text{Al})$ ,  $\Delta G_f^\circ(\text{NH}_3)$  correspondientes a una  $T = 1300 \text{ K} = 1026.85 \text{ }^\circ\text{C}$  en las tablas anexadas y se sustituyen:

$$\Delta G_R^\circ = (2\text{mol})(-176.532 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}) + (3\text{mol})(0) - (2\text{mol})(0) - (2\text{mol})(97.091 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}})$$

$$\Delta G_R^\circ = (2\text{mol})(-176.532 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}) - (2\text{mol})(97.091 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}})$$

$$\Delta G_R^\circ = -353.064 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} - 194.182 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$\Delta G_R^\circ = -547.246 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$\Delta G_R^\circ < 0 \therefore$  la reacción es espontánea.

<b>AlN</b>		<b>ALUMINIUM NITRIDE</b>								40.988
Phase	T [ K ]	C <sub>p</sub> [ ————— ]	S J / (K mol)	-(G-H298)/T [ ————— ]	H [ ————— ]	H-H298 kJ / mol	G [ ————— ]	ΔH <sub>f</sub> [ ————— ]	ΔG <sub>f</sub> [ ————— ]	log K <sub>f</sub> [ - ]
SOL	298.15	30.140	20.150	20.150	-317.984	0.000	-323.992	-317.984	-286.997	50.281
	300.00	30.291	20.337	20.151	-317.928	0.056	-324.029	-318.000	-286.805	49.937
	400.00	36.402	29.967	21.422	-314.566	3.418	-326.553	-318.603	-276.303	36.082
	500.00	40.448	38.547	24.006	-310.714	7.270	-329.987	-318.862	-265.693	27.757
	600.00	43.683	46.215	27.080	-306.503	11.481	-334.232	-318.897	-255.053	22.204
	700.00	45.719	53.113	30.315	-302.025	15.959	-339.205	-318.808	-244.418	18.239
	800.00	47.083	59.313	33.559	-297.381	20.603	-344.831	-318.721	-233.798	15.265
	900.00	48.054	64.917	36.737	-292.622	25.362	-351.047	-318.738	-223.183	12.953
	1000.00	48.783	70.020	39.814	-287.778	30.206	-357.798	-329.459	-211.799	11.063
	1100.00	49.131	74.687	42.775	-282.881	35.103	-365.037	-329.386	-200.036	9.499
	1200.00	49.400	78.974	45.616	-277.954	40.030	-372.723	-329.308	-188.281	8.196
	1300.00	49.617	82.937	48.336	-273.003	44.981	-380.821	-329.229	-176.532	7.093
	1400.00	49.798	86.621	50.941	-268.032	49.952	-389.301	-329.149	-164.789	6.148
	1500.00	49.952	90.062	53.435	-263.044	54.940	-398.137	-329.071	-153.052	5.330
	1600.00	50.084	93.290	55.826	-258.042	59.942	-407.306	-328.993	-141.319	4.614
	1700.00	50.201	96.330	58.120	-253.028	64.956	-416.788	-328.916	-129.592	3.982
	1800.00	50.305	99.202	60.324	-248.003	69.981	-426.566	-328.840	-117.869	3.420
	1900.00	50.398	101.924	62.442	-242.968	75.016	-436.624	-328.765	-106.151	2.918
	2000.00	50.484	104.512	64.481	-237.923	80.061	-446.947	-328.690	-94.436	2.466

Tabla 1. Propiedades termoquímicas del AlN

<b>83.730</b>		<b>GALLIUM NITRIDE</b>								<b>GaN</b>
Phase	T [ K ]	C <sub>p</sub> [ ————— ]	S J / (K mol)	-(G-H298)/T [ ————— ]	H [ ————— ]	H-H298 kJ / mol	G [ ————— ]	ΔH <sub>f</sub> [ ————— ]	ΔG <sub>f</sub> [ ————— ]	log K <sub>f</sub> [ - ]
SOL	298.15	40.756	29.706	29.706	-109.621	0.000	-118.478	-109.621	-77.741	13.620
	300.00	40.773	29.959	29.707	-109.546	0.075	-118.533	-109.621	-77.543	13.501
	400.00	41.673	41.811	31.317	-105.423	4.198	-122.148	-115.308	-65.039	8.493
	500.00	42.572	51.207	34.387	-101.211	8.410	-126.815	-115.263	-52.474	5.482
	600.00	43.472	59.048	37.862	-96.909	12.712	-132.338	-115.121	-39.928	3.476
	700.00	44.371	65.817	41.382	-92.517	17.104	-138.589	-114.911	-27.412	2.046
	800.00	45.271	71.801	44.818	-88.035	21.586	-145.475	-114.641	-14.930	0.975
	900.00	46.170	77.185	48.120	-83.463	26.158	-152.929	-114.314	-2.485	0.144
	1000.00	47.070	82.096	51.276	-78.801	30.820	-160.897	-113.928	9.920	-0.518
	1100.00	47.970	86.624	54.286	-74.049	35.572	-169.335	-113.482	22.284	-1.058
	1200.00	48.869	90.837	57.158	-69.207	40.414	-178.211	-112.971	34.604	-1.506
	1300.00	49.769	94.784	59.902	-64.275	45.346	-187.494	-112.393	46.879	-1.884
	1400.00	50.668	98.505	62.528	-59.253	50.368	-197.160	-111.745	59.107	-2.205
	1500.00	51.568	102.032	65.045	-54.141	55.480	-207.189	-111.024	71.286	-2.482
	1600.00	52.467	105.388	67.462	-48.939	60.682	-217.561	-110.229	83.414	-2.723
	1700.00	53.367	108.596	69.788	-43.648	65.973	-228.261	-109.357	95.491	-2.934
	1773.00	54.024	110.854	71.433	-39.728	69.893	-236.272	-108.671	104.273	-3.072

Tabla 2. Propiedades termoquímicas del GaN

NH3[g]		AMMONIA (GAS)							17.031	
Phase	T [K]	C <sub>p</sub>	S	-(G-H298)/T	H	H-H298	G	ΔH <sub>f</sub>	ΔG <sub>f</sub>	log K <sub>f</sub>
		[	J / (K mol)	]	[		kJ / mol			[ - ]
GAS	298.15	35.650	192.778	192.779	-45.940	0.000	-103.417	-45.940	-16.409	2.875
	300.00	35.699	192.999	192.779	-45.874	0.066	-103.774	-45.981	-16.226	2.825
	400.00	38.741	203.673	194.214	-42.157	3.783	-123.626	-48.081	-5.984	0.781
	500.00	42.026	212.670	197.027	-38.118	7.822	-144.453	-49.897	4.756	-0.497
	600.00	45.259	220.620	200.308	-33.753	12.187	-166.125	-51.417	15.834	-1.379
	700.00	48.349	227.830	203.732	-29.071	16.869	-188.553	-52.663	27.145	-2.026
	800.00	51.260	234.479	207.165	-24.089	21.851	-211.672	-53.665	38.617	-2.521
	900.00	53.984	240.675	210.548	-18.826	27.114	-235.433	-54.451	50.202	-2.914
	1000.00	56.519	246.496	213.855	-13.299	32.641	-259.795	-55.050	61.864	-3.231
	1100.00	58.967	251.994	217.074	-7.528	38.412	-284.722	-55.486	73.577	-3.494
	1200.00	61.035	257.211	220.204	-1.532	44.408	-310.184	-55.781	85.325	-3.714
	1300.00	63.031	262.176	223.243	4.673	50.613	-336.156	-55.955	97.091	-3.901
	1400.00	64.861	266.915	226.194	11.069	57.009	-362.612	-56.022	108.867	-4.062
	1500.00	66.535	271.448	229.061	17.640	63.580	-389.532	-55.997	120.645	-4.201
	1600.00	68.060	275.792	231.847	24.371	70.311	-416.895	-55.893	132.418	-4.323
	1700.00	69.446	279.960	234.555	31.248	77.188	-444.684	-55.719	144.182	-4.430
	1800.00	70.702	283.966	237.190	38.256	84.196	-472.882	-55.486	155.935	-4.525
	1900.00	71.836	287.819	239.754	45.384	91.324	-501.472	-55.202	167.673	-4.610
	2000.00	72.858	291.530	242.250	52.619	98.559	-530.441	-54.876	179.395	-4.685
	2100.00	73.777	295.108	244.683	59.952	105.892	-559.774	-54.513	191.099	-4.753
	2200.00	74.602	298.559	247.054	67.372	113.312	-589.458	-54.122	202.786	-4.815
	2300.00	75.343	301.892	249.366	74.870	120.810	-619.482	-53.707	214.455	-4.870
	2400.00	76.008	305.113	251.622	82.438	128.378	-649.833	-53.274	226.105	-4.921
	2500.00	76.608	308.228	253.824	90.069	136.009	-680.501	-52.826	237.736	-4.967
	2600.00	77.150	311.243	255.975	97.758	143.698	-711.475	-52.368	249.350	-5.009
	2700.00	77.645	314.164	258.076	105.498	151.438	-742.746	-51.902	260.945	-5.048
	2800.00	78.102	316.997	260.130	113.285	159.225	-774.305	-51.430	272.524	-5.084
	2900.00	78.529	319.745	262.139	121.117	167.057	-806.143	-50.955	284.085	-5.117
	3000.00	78.938	322.414	264.104	128.990	174.930	-838.251	-50.477	295.630	-5.147

Tabla 3. Propiedades termoquímicas del NH3

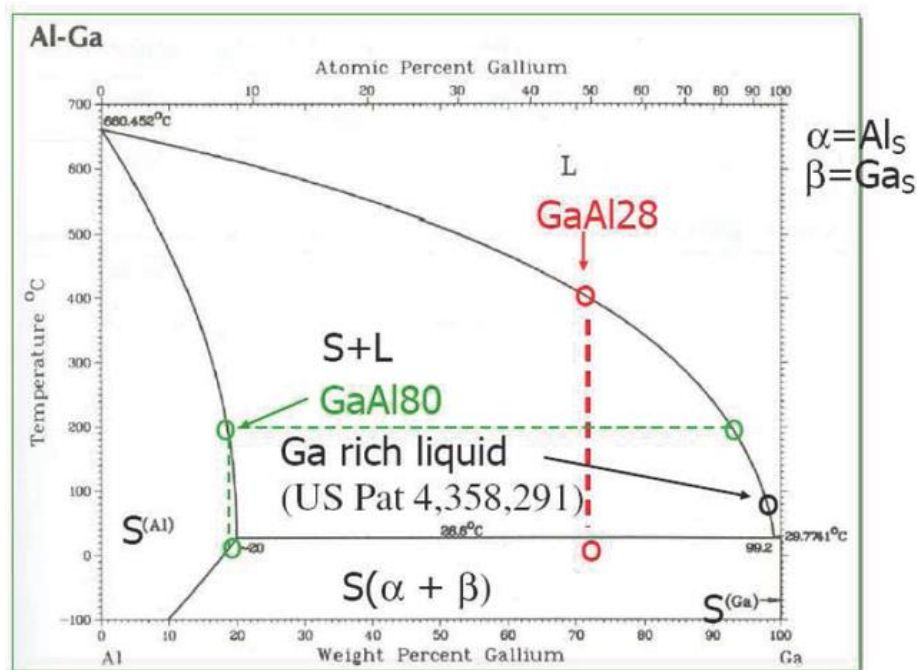


Figura 82. Diagrama de fase de aleación Al-Ga