

## **FISICOQUÍMICA DE SEMICONDUCTORES I (48 hrs.)**

**Profesor:** Dr. Elioukyn Viatcheslav

**OBJETIVOS:** Introducir al estudiante a los diferentes métodos de fisicoquímica equilibrada usados en desarrollo de las tecnologías de semiconductores y tecnologías de dispositivos semiconductores. Al finalizar el curso el estudiante deberá conocer los modelos modernos y los métodos para descripción de las características de materiales semiconductores.

El estudiante deberá conocer como se hacen en realidad los modelos para predecir las características de semiconductores modernos y futuros. Deberá conocer las ventajas, desventajas y limitaciones de los diferentes modelos, aproximaciones y conocer los problemas que puede resolver.

El curso está enfocado principalmente a las aleaciones semiconductoras porque la mayoría de los materiales modernos de electrónica del estado sólido son tales aleaciones.

**Contenido:**

### **TEMA 1: INTRODUCCIÓN A LA FISICOQUÍMICA DE SEMICONDUCTORES.**

- 1.1 ¿Que es fisicoquímica?.
- 1.2. Métodos de termodinámica y termodinámica estadística.
- 1.3. Concepto de miscibilidad.
- 1.4. Diagramas binarias de fases.
- 1.5. Compuestos, aleaciones.
- 1.6. Diagramas ternarias de fases.
- 1.7. Materiales semiconductores.
- 1.8. Estructuras cristalinas de semiconductoras.

### **TEMA 2: MÉTODOS DE TERMODINÁMICA Y TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA.**

- 2.1 Formalismo matemático de termodinámica.
- 2.2 Postulados de mecánica estadística.
- 2.3 Ensamble microcanónico de Gibbs.
- 2.4 Ensamble canónico de Gibbs.
- 2.5 Ensamble macrocanónico de Gibbs.
- 2.6 Ley de Boltzman.
- 2.7 Función de partición, energía libre de los ensambles de Gibbs.
- 2.8 Sistemas macroscópicos y grados de libertad.

### **TEMA 3: ALEACIONES BINARIAS, TERNARIAS Y CUATERNARIAS DE TRES COMPUESTOS BINARIOS ESTRICTAMENTE REGULARES.**

- 3.1 Modelo de las aleaciones regulares.
- 3.2 Aleaciones binarias regulares.
- 3.3 Aproximación estrictamente regular.
- 3.4 Aleaciones binarias ideales, diluidas y no diluidas.

- 3.5 Zona immiscibilidad de las aleaciones binarias.
- 3.6 Zona de descomposición espínodal de las aleaciones binarias.
- 3.7 Aleaciones ternarias y cuaternarias ideales, diluidas y no diluidas.
- 3.8 Zona immiscibilidad de las aleaciones ternarias y cuaternarias.
- 3.9 Zona de descomposición espínodal de las aleaciones ternarias y cuaternarias.
- 3.10 Diagrama de fases del sistema (Al, Ga, B V ) LIQIDO – (Al x Ga 1-x B V ) SOLIDO , (B V = P, As, Sb).
- 3.11 Diagrama de fases del sistema (In, Ga, B V ) LIQIDO – (In x Ga 1-x B V ) SOLIDO , (B V = P, As).

**TEMA 4: ALEACIONES BINARIAS, TERNARIAS Y CUATERNARIAS DE TRES COMPUESTOS BINARIOS QUASIQUIMICAS Y EN MÉTODO DE VARIACIÓN DE CLUSTERES.**

- 4.1 Aproximación quasiquímica de las aleaciones regulares.
- 4.2 Orden del corto alcance de las aleaciones binarias.
- 4.3 Zona immiscibilidad de las aleaciones binarias.
- 4.4 Zona de descomposición espínodal de las aleaciones binarias.
- 4.5 Zona immiscibilidad de las aleaciones ternarias y cuaternarias.
- 4.6 Zona de descomposición espínodal de las aleaciones ternarias y cuaternarias.
- 4.7 Método de variación de clústeres de las aleaciones binarias.
- 4.8 Orden del corto alcance de las aleaciones binarias con estructuras diferentes.
- 4.9 Zona immiscibilidad de las aleaciones binarias con la estructura de diamante.
- 4.10 Zona immiscibilidad de las aleaciones ternarias con las estructuras de zincblenda y wurzita.

**TEMA 5: ALEACIONES CUATERNARIAS DE CUATRO COMPUESTOS BINARIAS Estrictamente REGULARES.**

- 5.1 Modificación del modelo de aleaciones regulares para aleaciones cuaternarias de cuatro compuestos binarios.
- 5.2 Aleaciones cuaternarias estrictamente regulares.
- 5.3 Zona immiscibilidad.
- 5.4 Zona de descomposición espínodal.
- 5.5 Diagrama de fases del sistema (A III , B III , C V , D V ) LIQIDO – (A III X B III 1- x C V y D V 1-y ) SOLIDO.

**TEMA 6: ALEACIONES CUATERNARIAS DE CUATRO COMPUESTOS BINARIAS QUASIQUIMICAS Y EN MÉTODO DE VARIACIÓN DE CLUSTERES.**

- 6.1 Aproximación quasiquímica.
- 6.2 Orden del corto alcance.
- 6.3 Zona immiscibilidad.
- 6.4 Zona de descomposición espínodal.
- 6.5 Diagrama de fases del sistema (A III , B III , C V , D V ) LIQIDO – (A III X B III 1-x C V y D V 1-y ) SOLIDO.

6.6 Modificación del método de variaciones de clusteres para aleaciones cuaternarias de cuatro compuestos binarios.

6.7 Energía libre en método de variación de clústeres.

## **TEMA 7: MODELO DE CAMPO DE FUERZA VALENCIA.**

7.1 Estructura de las aleaciones real.

7.2 Modelo del campo de fuerza de valencia.

7.3 Energía de deformación interna de las aleaciones  $A_x B_{1-x} C$  y  $AB_x C_{1-x}$  con la estructura de zincblenda.

7.4 Tendencia a formación de superestructura.

7.5 Orden del largo alcance.

7.6 Tipos de superestructuras y transiciones de fase.

7.7 Transición de fase con formación de superestructura en las aleaciones  $A_{0.5} B_{0.5} C$  y  $AB_{0.5} C_{0.5}$ .

7.8 Transición de fase con formación de superestructura en las aleaciones  $A_{0.75} B_{0.25} C$  y  $AB_{0.75} C_{0.25}$ .

7.9 Estabilidad termodinámica con respecto a descomposición espínodal y formación de superestructura de las aleaciones  $A_{0.75} B_{0.25} C$  y  $AB_{0.75} C_{0.25}$ .

## **BIBLIOGRAFÍA:**

- Peter Y. Yu and Manuel Cardona, Fundamentals of Semiconductors, Physics and Materials Properties, Springer, Berlin, 2002.
- S. H. Maron, C. F. Prutton, Fundamentos de Físicoquímica, LIMUSA, México, 2002.
- P. W. Atkins, Physical Chemistry, Vol. 1 and 2, Oxford University Press, Oxford, 1979.
- W. A. Harrison, Elementary Electronic Structure, World Scientific, Singapore, 1999.
- J. E. Mayer and M. G. Mayer, Statistical Mechanics, Wiley, New York, 1978.