 Institución Universitaria	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-27

# **Difusión atómica en hetero-estructuras de metal-calco-genuros usando dinámica molecular.**

Mateo Velásquez Molina

Brayhan Alexander Zuluaga Arroyo

Ingeniería Mecatrónica

Ingeniería Electrónica

David Zubia

Maria Constanza Torres

**INSTITUTO TECNOLÓGICO METROPOLITANO**

**30 de agosto de 2018**

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

## RESUMEN

---

En este trabajo se realiza un estudio del comportamiento de los átomos en heteroestructuras de compuestos calcogenuros, utilizados en diversos semiconductores como lo son las celdas solares, con el fin de comprender un poco más acerca del fenómeno de interdifusión bajo ciertas circunstancias.

Se analizaron nueve simulaciones proporcionadas por el laboratorio de integración de nanomateriales de la universidad de Texas en El Paso (UTEP) mediante la dinámica molecular y la solución de las leyes de Fick (funciones de error complementario y factor pre-exponencial intrínseco). Para ello, se hizo uso de los softwares MATLAB y OVITO, y se variaron las condiciones iniciales de cada simulación, como lo es la energía incidente, la posición de los compuestos, la polaridad de deposición y crecimiento de estos compuestos. Los resultados de los análisis indican que la variación del parámetro de energía incidente ( $E_i$ ) afecta la difusión de tal forma que entre más alta es la  $E_i$ , más alta es la difusión. Además, se encontró relación entre el tamaño del átomo y la difusión, entre más pequeño es el átomo, mas difusión tiene. Finalmente, otro factor que determina que tan alta es la difusión, es el crecimiento del cristal, encontrándose una difusión mayor cuando el crecimiento es policristalino.

*Palabras clave: Difusión, Calcogenuros, Deposición, MATLAB, OVITO, Interface, crecimiento Monocristalino, crecimiento Policristalino.*

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

## RECONOCIMIENTOS

Nuestros más sinceros agradecimientos a todas las personas que de manera directa o indirecta ayudaron a que la realización de este trabajo fuera posible, así como a todas aquellas personas que contribuyeron en nuestra formación personal y profesional.

Este trabajo fue financiado en parte por las siguientes subvenciones: DOE/BRIDGE:DE-EE0005958, NSF ACI-1053575, una subvención de U.S. El departamento del estado, la embajada de los estados unidos en Bogotá, Colombia, la sección de asuntos públicos. Fue administrado por Partners of the Americas. Las opiniones, los hallazgos y las conclusiones aquí mencionadas son las del autor(es) y no necesariamente reflejan las del Departamento de Estado de EEUU o Partners of the Americas.

Sandia National Laboratories es un laboratorio multimisión gestionado y operado por National Technology and Engineering Solutions de Sandia, LLC., Una subsidiaria de propiedad total de Honeywell International, Inc., para la Administración Nacional de Seguridad Nuclear del Departamento de Energía de los EE. UU. Bajo el contrato DE-NA0003525.

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

## ACRÓNIMOS

---

*Zn* Elemento de la tabla periódica Zinc.

*Cd* Elemento de la tabla periódica Cadmio.

*Te* Elemento de la tabla periódica Telurio.

*S* Elemento de la tabla periódica Azufre.

*eV* Electronvoltios.

*E<sub>i</sub>* Energía incidente.

*ALD Atomic Layer Deposition* Deposición Atómica por capas.

*MLD Molecular Layer Deposition* Deposición molecular por capas.

*CSS Closed-Spaced Sublimation* Sublimación espaciada cerrada

 Institución Universitaria	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

## TABLA DE CONTENIDO

1. MARCO TEÓRICO.....	8
Celdas solares .....	8
Materiales calcogenuros.....	9
Deposición de Átomos.....	10
Crecimiento de los cristales.....	12
Leyes de Fick .....	13
Función de error complementario .....	14
2. METODOLOGÍA.....	15
Análisis visual en OVITO.....	16
Análisis cuantitativo usando MATLAB. ....	18
Ajuste de difusión mediante función de error y factor exponencial intrínseco.....	21
3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	23
Resultados de simulaciones de crecimiento mono cristalino. ....	23
Simulaciones de CdTe sobre ZnTe .....	23
Simulaciones de ZnTe sobre CdTe .....	26
Resultados de simulaciones de crecimiento policristalino.....	30
Resultados Generales .....	32
4. CONCLUSIONES, RECOMENDACIONES Y TRABAJO FUTURO .....	34
REFERENCIAS .....	36
APÉNDICE.....	38
Apéndice A: Ecuación de difusión.....	38

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

## INTRODUCCIÓN

Actualmente, las celdas solares, así como algunos dispositivos electrónicos semiconductores, requieren una juntura de un material de tipo P y un material de tipo N para su correcto funcionamiento (ECATEPEC, 2009). Estos materiales son construidos capa por capa depositando estructuras que pueden ser calcogenuros (Hincapié, Rios, Cruz, & Dorantes, 2017). Como resultado de la deposición de compuestos por capas, los átomos se deslizan entre los espacios vacíos de la capa depositada anteriormente, fenómeno que se conoce como Interdifusión atómica.

La interdifusión atómica tiene afectaciones en el desempeño de la celda solar, afectando de forma negativa o positiva su eficiencia (Samoilenko, Abbas, Walls, & Wolden, 2018). Si bien este fenómeno se está estudiado en algunos tipos de estructuras basadas en silicio, el fenómeno aun es poco comprendido para elementos como lo son el Zinc, el Cadmio, el azufre o el telurio y, por tanto, no es del todo predecible.

Este trabajo se realiza con el fin de lograr avances en el entendimiento del fenómeno de la difusión mediante el análisis del comportamiento de los átomos en los compuestos metalcalcogenuros usados en semiconductores y celdas solares.

Para estudiar este fenómeno se analizaron simulaciones de deposición de compuestos provistas por el laboratorio de integración de nanomateriales de la universidad de Texas en El Paso (UTEP), las cuales fueron realizadas usando dinámica molecular, a una temperatura de 1200 grados kelvin y variando sus parámetros iniciales para obtener estructuras con crecimiento monocristalino y policristalino. Posteriormente, con softwares como MATLAB y OVITO se hicieron análisis composicionales, obteniéndose perfiles que describen la constitución y concentración de la muestra.

 Institución Universitaria	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

La difusión y el factor pre-exponencial fueron estudiados mediante el ajuste de la función de error complementaria y la ecuación de difusión intrínseca, que se obtienen de la solución de las leyes de Fick (ver Apéndice A). Adicionalmente se llevaron a cabo comparaciones de los resultados para observar cómo afecta la variación de las condiciones de energía incidente, polaridad y el orden de deposición al valor final de la interdifusión.

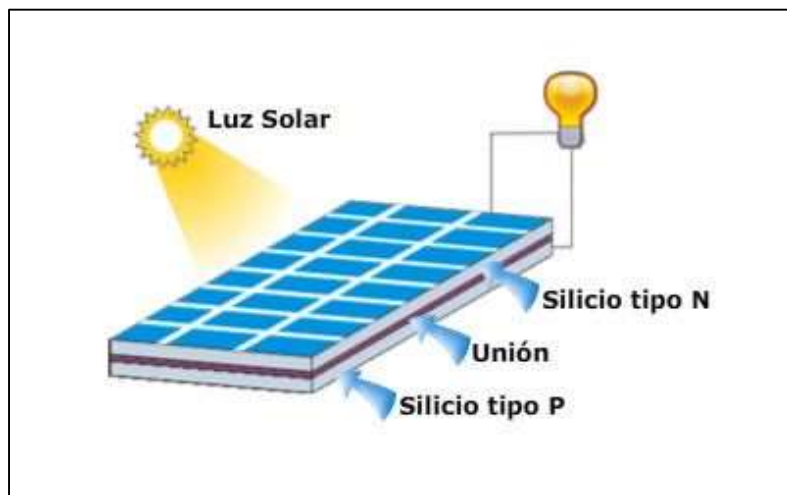
	<b>INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO</b>	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

# 1. MARCO TEÓRICO

## Celdas solares

Las celdas solares son las unidades estructurales en los paneles, que gracias al efecto fotovoltaico captan y convierten la energía solar en energía eléctrica (Gal Energy Celdas solares, 2018). Para su construcción, se usan distintos tipos de materiales compuestos de estructura cristalina (Godoy, 2016). Estos materiales deben ser semiconductores, es decir que conducen energía eléctrica bajo ciertas condiciones.

Su funcionamiento depende de las partículas de luz, cuando estas entran en contacto con las celdas, son absorbidas. Al interior, se encuentra una capa cargada de electrones la cual es liberada, gracias a los fotones (partículas de luz) hacia una capa inferior, haciendo que los electrones fluyan a través de las diferentes celdas y paneles (Godoy, 2016). Para que la corriente circule, los materiales semiconductores deben ser tipo P (Cargados positivamente) y Tipo N (Cargados negativamente), luego de esto, son dirigidos a los convertidores para hacer uso de la energía obtenida.



**Figura 1.1.** esquema de un panel solar. (Godoy, 2016)

imagen obtenida de <http://panelesfotovoltaicosaiiep.blogspot.com/2016/>

Los estudios que se han realizado sobre el efecto fotovoltaico desde que se descubrió, han hecho que actualmente las celdas solares sean cada vez más eficientes, mejorando desde



	<b>INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO</b>	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

los compuestos utilizados, hasta las técnicas de deposición y control de crecimiento de cristales.

De lo anteriormente, se encuentran aún en estudio el uso de las hetero-estructuras de compuestos metal-calcogenuros, controlando su deposición y crecimiento que puede ser del tipo monocristalino o policristalino.

### Materiales calcogenuros

Las estructuras de calcogenuros son compuestos constituidos por un metal de carácter electropositivo (Aquel que tiende a ceder electrones) y un elemento del grupo 16 de la tabla periódica, los cuales se conocen también como anfígenos (Blétry, 2009)

	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII B	VIII B	VIII B	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

**Figura 1.2.** Elementos anfígenos del grupo 16.

Imagen tomada de: <https://www.quimicas.net/2015/07/ejemplos-de-anfígenos.html>

La creación de estas estructuras para aplicaciones como las celdas solares u otros dispositivos semiconductores se logran por medio de diferentes técnicas de deposición como pueden ser la ALD, MLD o CSS; y crecimiento de cristales, factores que afectan el comportamiento final de la celda.

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

## Deposición de Átomos

Existen varias técnicas de deposición de átomos, como lo es la MLD (Molecular Layer Deposition). Tal como su nombre en inglés lo indica, este método se trata de depositar moléculas de un compuesto capa por capa para crear la estructura. También se encuentra la técnica CSS o Sublimación espaciada cerrada, la cual consiste en depositar las moléculas mediante un gas inerte. (Amin & Rahamn, 2017)

Este método comienza por un material sobre el cual se depositan las moléculas de compuestos calcogenuros, este material puede ser SnO<sub>2</sub>: F/SnO<sub>2</sub> u otros tipos de vidrios aptos para el uso como sustrato (Poplawsky, et al., 2016). Se pasa el material primeramente por una etapa de limpieza. Dependiendo del semiconductor a construir, luego es necesario realizar una oxidación, estas se realizan en una maquina al que eleva su temperatura mediante inductancia, la temperatura ideal esta entre 900 o 1200 grados Celsius. Dentro de esta máquina se encuentra un tubo de cuarzo fundido que sostiene las láminas de silicio de manera vertical y que posteriormente son atravesados por un flujo de oxígeno.



**Figura 1.3.** Proceso de oxidación. A la izquierda, la maquina donde se lleva a cabo la oxidación. A la derecha, láminas de silicio oxidadas.

Luego del respectivo proceso al material que será sustrato, se procede a elaborar una deposición CSS mediante un método llamado *sputtering* o pulverización catódica, el cual crea una vaporización de átomos de un material solido comúnmente conocido como blanco o tarjeta. El sustrato es bombardeado usando iones energéticos mediante una pistola de plasma.



**Figura 1.4.** Método CSS. A la izquierda, una pistola de plasma realizando pulverización catódica y a la derecha, el resultado.

Otro método de deposición de átomos altamente utilizado es el método de evaporación térmica en vacío, que consiste en calentar el material hasta que este se condense y forme una lámina delgada en el sustrato. Este método se realiza a presiones muy bajas de entre  $10^{-6}$  a  $10^{-5}$  Torr (Albella, 2018).



**Figura 1.5.** Método de evaporación en vacío, cámara de vacío y resultados.

Finalmente, de los métodos más conocidos y utilizados está el método de pulverización catódica reactiva. En este método se usa un gas molecular además de los iones positivos disparados por la pistola de plasma, que intermitentemente, bombardea al objetivo. Los

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

productos de disociación del gas reactivo también causan una reacción en el objetivo logrando así que depositar una película en el sustrato, la cual se forma en la combinación del material pulverizado y el gas reactivo.



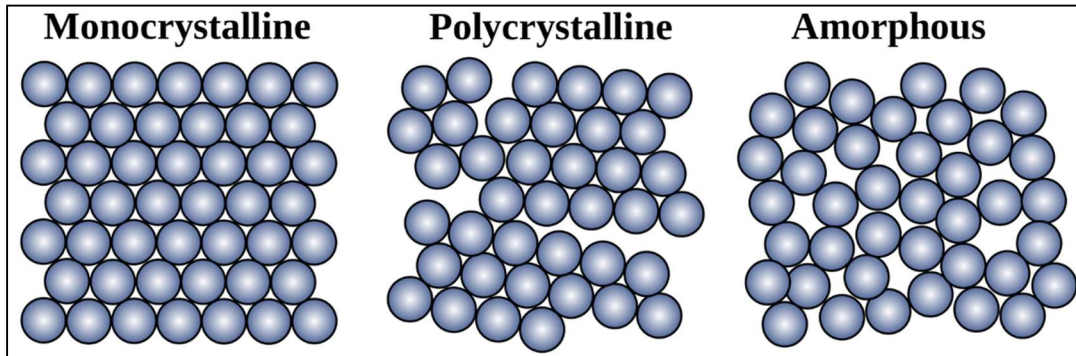
**Figura 1.6.** Método Pulverización catódica reactiva

Finalmente, dependiendo del método/técnica que se use para realizar la deposición de las moléculas, la estructura crecerá de una manera determinada u otra, pudiendo ser monocristalina o policristalina.

### **Crecimiento de los cristales.**

Los cristales son sólidos cuyas partículas constituyentes se ordenan conforme a un patrón que se repite en las tres direcciones del espacio. (Unidad Didáctica 5, n.d.)

Muchos materiales como cerámicos o metales presentan un crecimiento estructural, a nivel atómico, de varios cristales conglomerados, esto se conoce como material policristalino. Por otro lado, en elementos como el silicio, se pueden conseguir estructuras monocristalinas, es decir, a nivel atómico su composición es uniforme sin fronteras de grano (Heywang & Zaininger, 2004). En caso de no ser ninguno de los dos tipos anteriores, se dice que el material tiene estructura amorfa. (ver figura 1.7)



**Figura 1.7.** Tipos de estructura de un material. De izquierda a derecha: Monocristalino, policristalino, amorfo.

Imagen tomada de: <https://www.kisspng.com/png-monocrystalline-silicon-amorphous-silicon-polycrys-1412511/preview.html>

El método o técnica de deposición influye en el modo en que se organiza el material a nivel molecular, y a su vez, la forma de su estructura afecta el comportamiento que tiene el material frente a la interdifusión. Esta difusión puede explicarse mediante las leyes de Fick.

### Leyes de Fick

La difusión es un flujo irreversible de materia de las altas concentraciones a las bajas, que se origina en un sistema termodinámico multicomponente con un gradiente de concentraciones para devolverlo a su estado de equilibrio de concentración constante.

La primera ley de Fick habla sobre que existe un flujo de difusión que atraviesa una superficie y que este es proporcional al gradiente de concentración. El coeficiente de proporcionalidad es la difusión. (Madrid, n.d.)

Según lo anterior, la fórmula que describe esta ley es:

$$J = D * \frac{\Delta_c}{\delta}$$

Donde  $\Delta_c$  es la diferencia de concentraciones molares y  $\delta$  es el espesor de la estructura.

La segunda ley de Fick se deriva de la primera y de la ley de conservación de masa en ausencia de cualquier reacción química. Describe la tasa de como la concentración cambia con el tiempo de difusión (Smith & Hashemi, 2005):



	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D * \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

Donde  $\phi$  es la concentración en dimensiones de cantidad,  $t$  es el tiempo en s y  $D$  es el coeficiente de difusión.

De las dos leyes de Fick se obtienen la función de error complementaria y los factores de difusión intrínseca. (ver Apéndice A)

### Función de error complementario

La función de error es una función usada en el campo de la probabilidad y estadística además de la solución de ecuaciones diferenciales. De esta función deriva la función de error complementaria la cual se usa en base a la segunda ley de Fick para describir el nivel y comportamiento de la difusión. y  $t$  es el tiempo.

$$C(x, t) = \frac{C}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right]$$

**Ecuación 1.1.** Función de error complementaria

Donde se tiene que  $C$  es la concentración máxima de los átomos,  $D$  es el valor de difusión,  $X$  la distancia de la difusión y  $t$  es el tiempo.

Además de tener una función de error y una función de error complementaria se tiene también coeficientes de difusión intrínseca la cual se usa para hallar el factor pre-exponencial  $D^0$ .

$$D = D^0 \exp \left( -\frac{E_A}{kT} \right)$$

**Ecuación 1.2.** Ecuación de difusión intrínseca

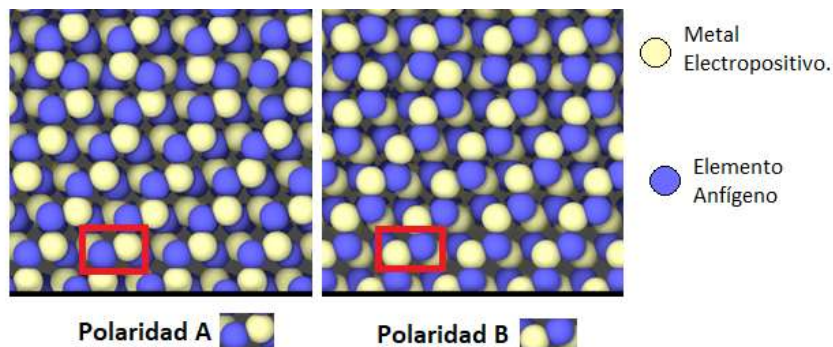
Donde  $k$  es la constante de Boltzmann,  $T$  es la temperatura en grados kelvin y  $E_A$  la energía de activación.

 Institución Universitaria	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

## 2. METODOLOGÍA

Con el fin de estudiar y conocer más acerca del comportamiento de la difusión en las juntas en hetero-estructuras de CdTe y ZnTe, se analizaron en total ocho simulaciones de la deposición de estos compuestos con crecimiento monocristalino provistas por el laboratorio de integración de nanomateriales de la universidad de Texas en El Paso (UTEP), las cuales fueron realizadas a una temperatura de 1200 kelvin usando dinámica molecular y variando sus parámetros iniciales.

Los parámetros variados fueron el tiempo de simulación, la energía incidente ( $E_i$ ) y la polaridad de la capa sobre la cual es depositado, de esta depende la orientación del elemento electropositivo. Se decidió denominar polaridad A cuando este se encuentra en la parte superior y B cuando el elemento anfígeno se encuentra arriba (ver imagen 2.1). Posteriormente se intercambié el orden de deposición de los compuestos para comparar el modo en que se afecta la difusión.



**Figura 2.1.** Polaridad de la capa sobre la cual se realiza la deposición del compuesto.

Adicionalmente, se analizó una novena simulación para observar el comportamiento de la difusión cuando el sustrato tiene una organización policristalina y, sobre este, se tiene una capa extra de CdS, creando una interface de CdS/CdTe.

Todas las simulaciones mencionadas anteriormente fueron sometidas a un análisis composicional mediante el software OVITO y MATLAB, siendo el primero la herramienta

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

para obtener información visual acerca del comportamiento atómico en la deposición y la interdifusión de la interface; el segundo se utilizó para el análisis cuantitativo de los datos, que fueron llevados a un perfil donde se pudo observar la concentración atómica máxima de cada compuesto dependiendo de la distancia a la interface.

### Análisis visual en OVITO.

OVITO (Open Visualización Tool) es un software para la visualización y el análisis científico de conjuntos de datos atómicos, resultados de las simulaciones moleculares estático/dinámicas. (Stukowski, 2010).

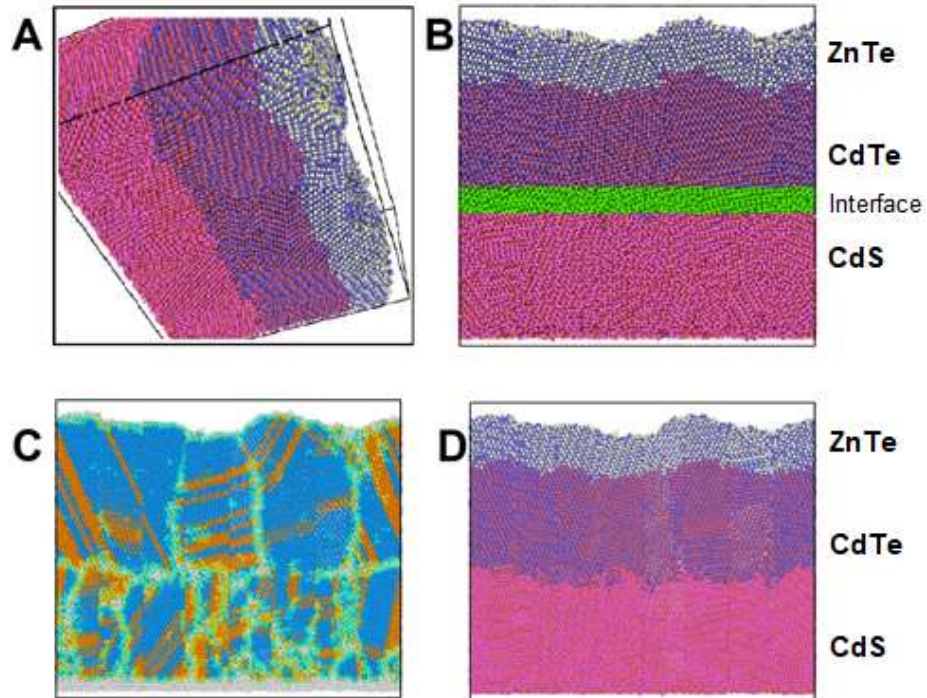
Como se mencionó anteriormente, con OVITO es posible obtener información visual de la deposición, tal como se puede observar en la figura 2.2, donde cada color representa el tipo de átomo o elemento, para este caso se tuvo la siguiente convención de colores:



**Figura 2.2.** Convención de colores usada en las visualizaciones de OVITO.

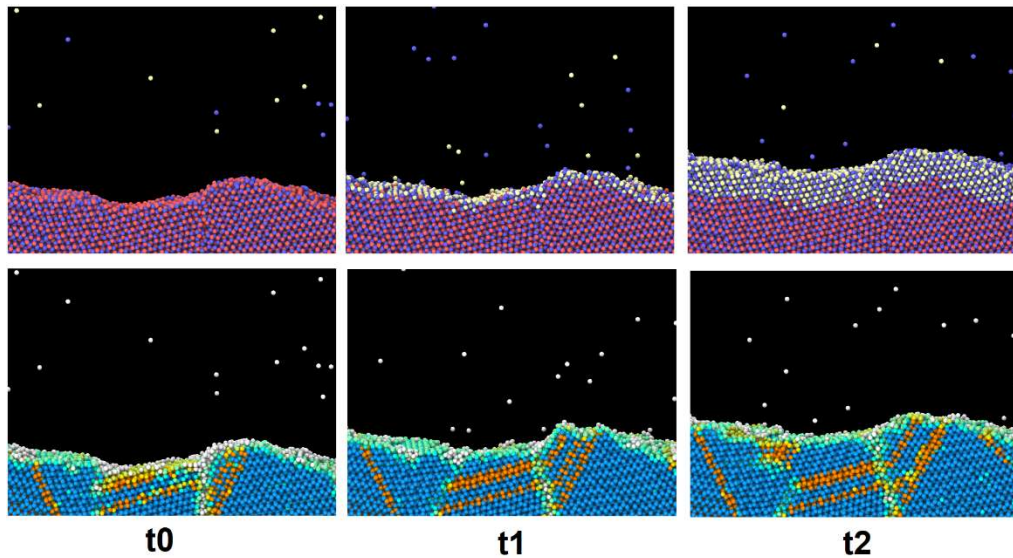
Datos como el crecimiento del cristal, el grosor de las capas, la distancia de la interface desde el comienzo de la deposición, la rugosidad de la interface y la orientación de los átomos pueden obtenerse mediante la herramienta OVITO.





**Figura 2.3.** Análisis visual en OVITO de una deposición de ZnTe en CdTe/CdS policristalino. En la imagen A y D se puede apreciar la deposición en 2 y 3 dimensiones; en la imagen B se puede apreciar la interface en verde entre el CdTe y el CdS; Y en la imagen C se puede apreciar la forma y crecimiento de las estructuras cristalinas.

Además, es posible también con OVITO, un monitoreo de la simulación en diferentes espacios de tiempo tal como se puede observar en la figura 2.4, donde los colores en las imágenes superiores representan los elementos en crecimiento; y en las imágenes inferiores muestran el tipo de estructura cristalina. Para efectos de este trabajo solo se utilizaron dos datos de las visualizaciones superiores.



**Figura 2.4.** Visualización de simulación una deposición de ZnTe en CdTe/CdS policristalino a diferentes tiempos.

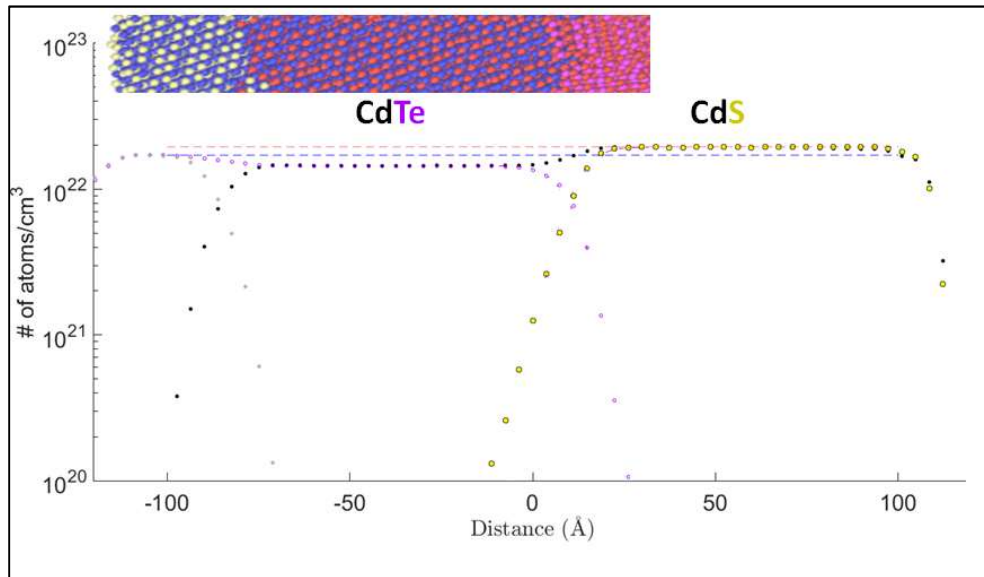
Las nueve simulaciones desarrolladas y proporcionadas por el laboratorio de integración de nanomateriales de la UTEP fueron visualizadas y analizadas usando OVITO, en este se encontraron las distancias a la que está ubicada la interface partiendo del punto desde que comienza a crecer el sustrato, y se determinó un factor de rugosidad de interface que más adelante se usó en el código implementado en MATLAB, para determinar la frontera entre los compuestos.

Luego de la interpretación visual de estos datos, se exportaron desde OVITO, una tabla de valores numéricos que contiene registro del tipo de átomo, es decir, el elemento seguido de su posición en las 3 dimensiones, dicha tabla es analizada posteriormente usando MATLAB.

### **Análisis cuantitativo usando MATLAB.**

MATLAB (MATrix LABoratory) es un entorno técnico de altas prestaciones para cálculo numérico y visualización, que integra análisis, calculo matricial, procesamiento de señales y procesamiento de gráficos. (Sánchez, 2008)

Partiendo del registro de datos obtenido de OVITO, se realizaron los perfiles que describen el comportamiento de los átomos en la deposición usando MATLAB (ver figura 2.5). En estos perfiles es posible apreciar de forma gráfica la interface y el fenómeno de difusión, además se puede conocer la distancia a la que todavía es posible encontrar una determinada concentración del elemento estudiado.



**Figura 2.5.** Perfil de comportamiento de simulación una deposición de ZnTe en CdTe/CdS. Es posible apreciar la distancia (en Angstroms) contra la concentración atómica (Numero de átomos por centímetro cubico). En la parte superior de la imagen se puede ver la estructura en OVITO. Los colores de los puntos representan cada elemento donde: Negro es cadmio, Violeta es Telurio, Amarillo es Azufre y Gris es Zn.

El código en MATLAB funciona de la siguiente manera:

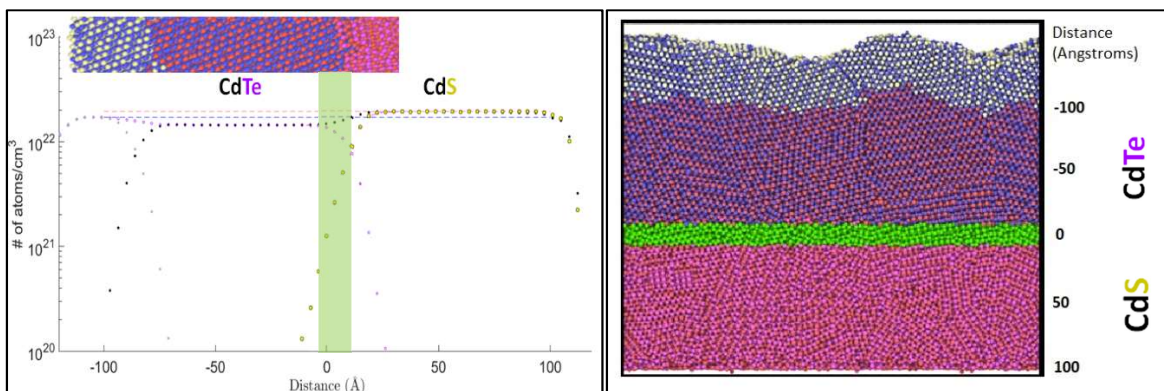
Inicialmente, se cargan los archivos y se definen los parámetros iniciales, se ingresan manualmente el grosor de la capa (*thickness*), y un rango dentro del cual se ubica la frontera o interface entre el sustrato y la epitaxia. El programa subdivide el grosor total del compuesto en capas más pequeñas, más precisamente subcapas de 3.74 angstroms de grosor, parámetro que se ha denominado *Step*, el cual se define al inicio y depende en gran medida del tamaño del átomo. Esto se hace con el fin de evitar contar más de una vez los mismos átomos y obtener una medida más precisa de la concentración.

	<b>INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO</b>	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

Los átomos dentro de una subcapa se cuentan y se clasifican por elemento, se avanza a la siguiente subcapa, se suma un *Step* y el proceso se repite hasta completar el grosor total del compuesto. Cada que se avanza en una capa se acumula el *Step* y este dado corresponde a la distancia partiendo del punto donde comienza el crecimiento del cristal. En ese punto, los valores obtenidos de las distancias y el número de átomos de la capa se almacenan en una tabla que posteriormente se gráfica, obteniendo así el histograma de comportamiento para cada elemento dentro del compuesto.

El código automáticamente fue programado para medir concentraciones superiores a  $1 \times 10^{-20}$  número de átomos, ignorando las concentraciones menores a estas, ya que están por debajo de la resolución a la que el simulador puede trabajar y que generan errores de precisión en la medida, afectando el factor de difusión calculado en etapas posteriores.

Partiendo de la tabla de valores y del histograma, se fija un nuevo punto de referencia para medir la distancia de las concentraciones. Esta referencia parte del punto exacto de unión del sustrato y la epitaxia, es decir en la interface (ver figura 2.6). Para ello se tiene en cuenta el factor de rugosidad obtenido mediante OVITO, y se calcula el promedio entre el punto más alto y el punto más bajo en las crestas del compuesto, obteniendo así la nueva referencia para las distancias del eje coordenado.



**Figura 2.6.** Comparativa del análisis visual en OVITO y perfil de comportamiento en MATLAB de una deposición de ZnTe en CdTe/CdS policristalino. La franja verde corresponde a la interface o juntura entre el sustrato y la epitaxia, que en este caso son CdS y CdTe respectivamente.

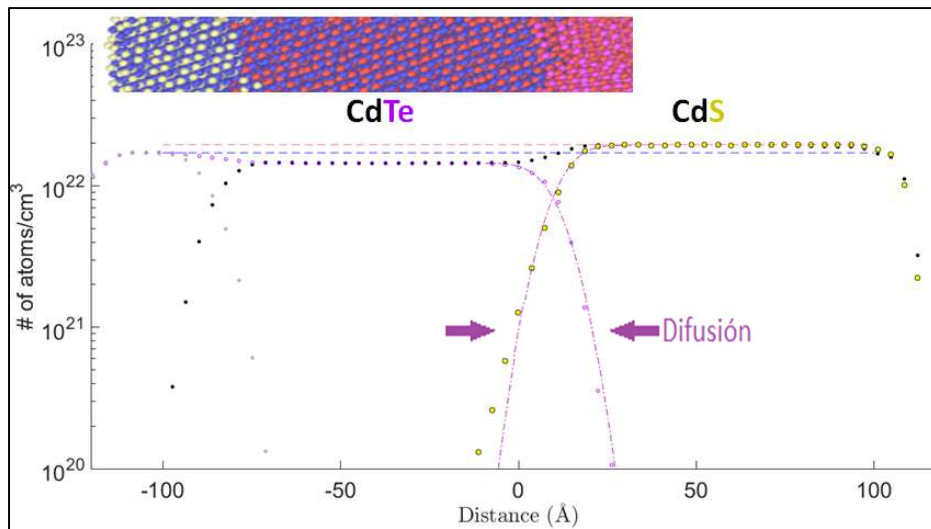
Posteriormente, el histograma de cada elemento se recorre partiendo del punto de referencia asignado anteriormente hacia ambos extremos con el fin de encontrar el punto de concentración máxima para cada elemento (ver figura 2.7).

Finalmente, conociendo el tiempo y los valores de la concentración en función de la distancia es posible calcular el nivel de difusión mediante la función de error proveniente de la solución de las ecuaciones de Fick. Este cálculo también se realiza usando MATLAB.

### Ajuste de difusión mediante función de error y factor exponencial intrínseco.

Partiendo de las gráficas y los datos que, obtenidos por medio de MATLAB, se realiza un ajuste usando las ecuaciones de error y de error complementario, procedentes de solucionar las ecuaciones de Fick (Ver ecuación 1.1).

El ajuste se realiza mediante MATLAB, manteniendo constantes los valores de concentración máxima y tiempo, pero variando el parámetro de difusión hasta que su comportamiento coincide con el de los átomos en la interface sustrato-epitaxia.



**Figura 2.7.** Perfil de comportamiento de simulación una deposición de ZnTe en CdTe/CdS. Las líneas punteadas en la parte superior (naranja y azul) representan la concentración máxima de los elementos. La ecuación de error complementario describe el comportamiento de la difusión, adecuándose al comportamiento de los átomos.

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

El valor del parámetro de difusión que mejor se adapte al comportamiento del perfil de MATLAB se selecciona para encontrar las propiedades intrínsecas de la interdifusión.

El factor pre-exponencial  $D^0$  es un coeficiente intrínseco de la difusión (ver ecuación 1.2), este se calcula despejándose de la ecuación resultante de la segunda ley de Fick (Ver apéndice A). La temperatura de todas las simulaciones estudiadas es de 1200 K, mientras que la difusión depende de cada caso. La energía de activación depende de cada elemento y varia depende de la simulación, para este estudio fue tomada la del Zinc del trabajo Crystal Growth and Atom Diffusion in (Cu)ZnTe/CdTe via Molecular Dynamics (Aguirre, et al., 2018), la cual es de 1.9eV.

La función de error complementario y la ecuación de coeficiente intrínseco permitió analizar y determinar la difusión de los átomos. Todos resultados se obtuvieron realizando las simulaciones con una temperatura de 1200 K y variando sus condiciones de polaridad, energía incidente, y también intercambiando de ubicación de los compuestos entre el sustrato y la epitaxia.



### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

#### Resultados de simulaciones de crecimiento mono cristalino.

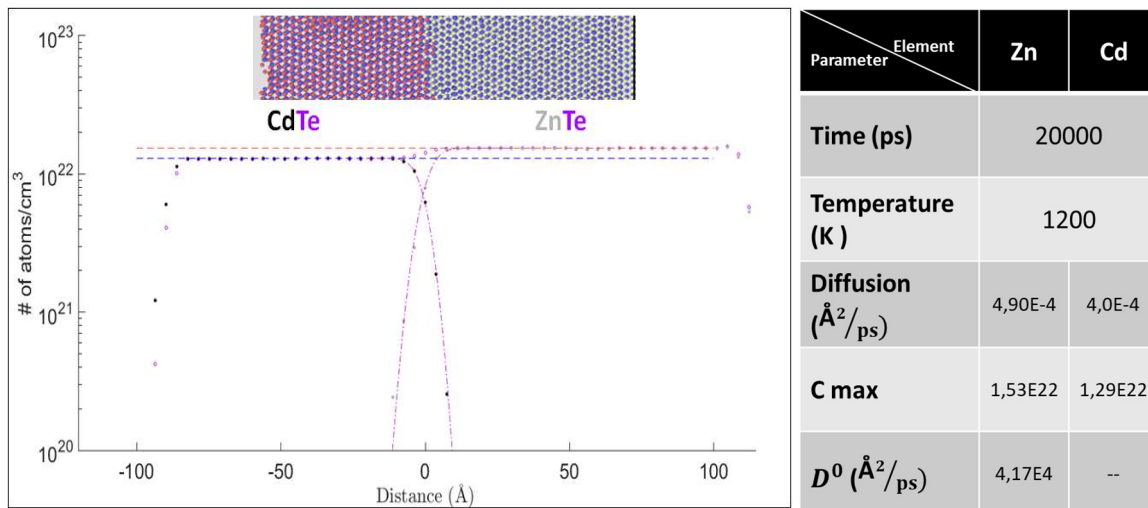
Las primeras simulaciones estudiadas fueron las de crecimiento mono cristalino, estas se realizaron con una temperatura de 1200 K, tiempos de deposición variados, polaridades y energías de incidencia diferentes.

#### Simulaciones de CdTe sobre ZnTe

Se empezó analizando las simulaciones de CdTe sobre ZnTe, donde el ZnTe es el sustrato y el CdTe la epitaxia.

#### Simulación 1: CdTe sobre ZnTe con polaridad A y energía incidente de 5eV

Esta simulación se realizó con una capa de deposición inicial de polaridad A, un tiempo de deposición de 20ns y una energía incidente (Ei) de 5eV. Los resultados obtenidos de esta simulación fueron los siguientes:

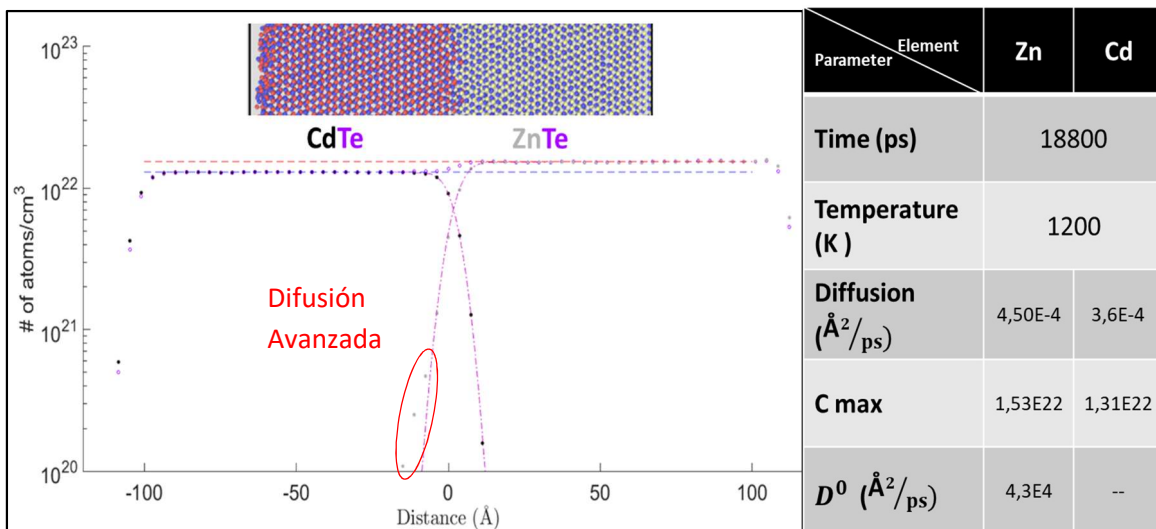


**Figura 3.1.** Simulación de CdTe sobre ZnTe, la simulación fue realizada con las condiciones mencionadas anteriormente. En la parte izquierda se observa el perfil realizado en MATLAB donde la línea punteada naranja representa la concentración máxima del Zn y la línea punteada azul la del Cd. En la parte superior, la visualización de la estructura en OVITO y a la derecha se encuentran los resultados del análisis.

El parámetro  $D^0$  para el Cd no es posible hallarse debido a que no se cuenta con los datos de energía de activación. En el caso del Zinc, la  $E_A$  fue tomada del trabajo Crystal Growth and Atom Diffusion in (Cu)ZnTe/CdTe via Molecular Dynamics (Aguirre, et al., 2018), y el  $D^0$  fue comparado con los valores que se presentan en ese documento.

*Simulación 2: CdTe sobre ZnTe con polaridad A y energía incidente de 0.5eV*

A continuación, se varia la energía incidente ( $E_i$ ) en la simulación manteniendo la polaridad, con el fin de estudiar su relación con los niveles de difusión. Para este caso, se usa una  $E_i$  de 0.5eV, mucho menor a la usada en la simulación 1. El tiempo de simulación es de 18.8ns, un poco menor con respecto al caso anterior. Los resultados obtenidos son los siguientes:



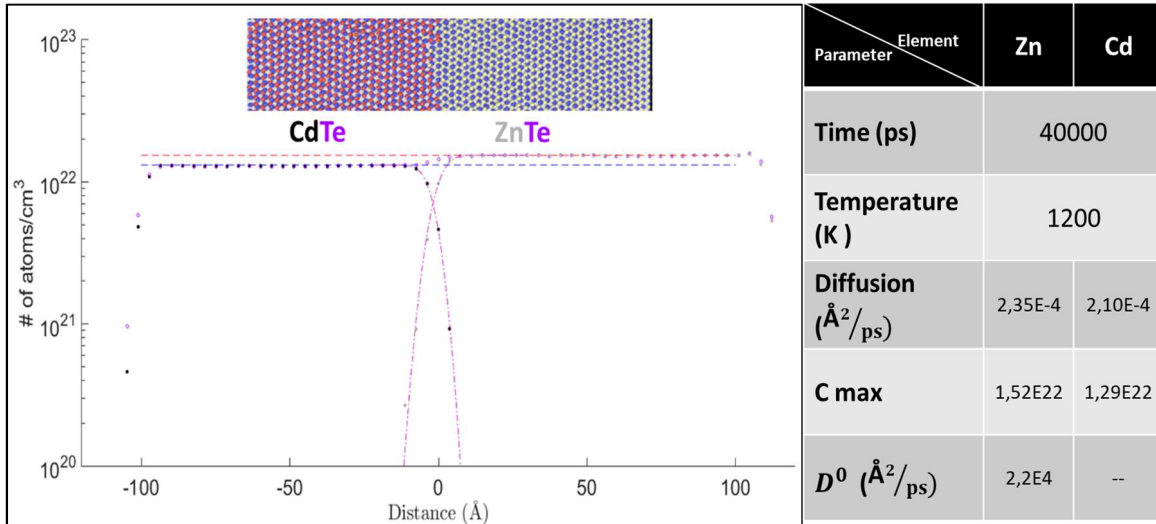
**Figura 3.2.** Simulación de CdTe sobre ZnTe. Con Polaridad A(Zn) y  $E_i$  0.5eV

Los resultados para esta simulación muestran una pequeña disminución de la difusión cuando la energía incidente es menor, aun cuando el tiempo de simulación es mayor y la polaridad es igual, comparando estos resultados con el primer caso (Ver figura 3.1)



*Simulación 3: CdTe sobre ZnTe con polaridad B y energía incidente de 5eV*

Esta simulación, junto con la siguiente, se realizan para estudiar el efecto del cambio de polaridad en la difusión. Los parámetros utilizados en este caso son una polaridad de B, una energía incidente de 5eV y un tiempo de simulación de 40ns.



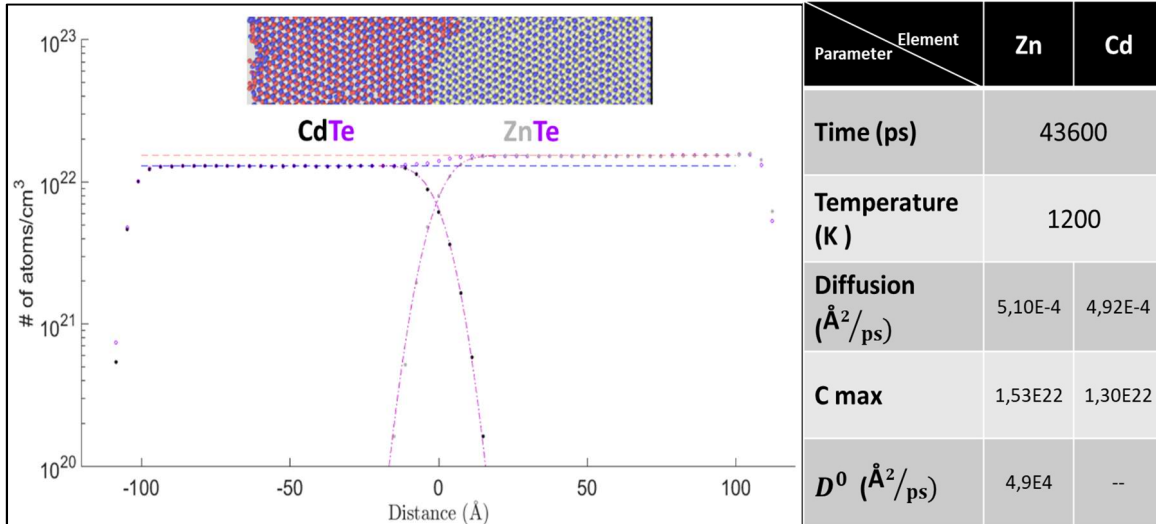
**Figura 3.3.** Simulación de CdTe sobre ZnTe. Resultados cuando la energía incidente  $E_i$  es de 5eV y la polaridad es B.

Comparado con los casos anteriores, los resultados de la difusión disminuyeron considerablemente aun cuando el tiempo de simulación fue mayor. Por esta razón, no se descarta que este cambio tan drástico pueda deberse a algún error surgido en etapas de simulación o de análisis mediante MATLAB y OVITO.

*Simulación 4: CdTe sobre ZnTe con polaridad B y energía incidente de 0.5eV.*

Por medio de la cuarta simulación es posible saber si hubo algún error en la simulación 3, puesto que el nivel de difusión depende en gran medida de la  $E_i$  y del tiempo de simulación (Aguirre, et al., 2018), dicho de otro modo, una  $E_i$  alta conlleva a tener una difusión alta y entre más tiempo pase, más difusión se encuentra en los perfiles. Es por ello por lo que, en la cuarta simulación, los valores de la difusión deben ser menores que los valores de la tercera simulación, en caso contrario, existe un error con la simulación número 3.

Los parámetros iniciales para esta simulación son una polaridad B con energía incidente ( $E_i$ ) de 0.5eV y un tiempo de simulación de 43.6ns. Los resultados son:



**Figura 3.4.** Simulación de CdTe sobre ZnTe. Resultados cuando la energía incidente  $E_i$  es de 0.5eV y la polaridad es B.

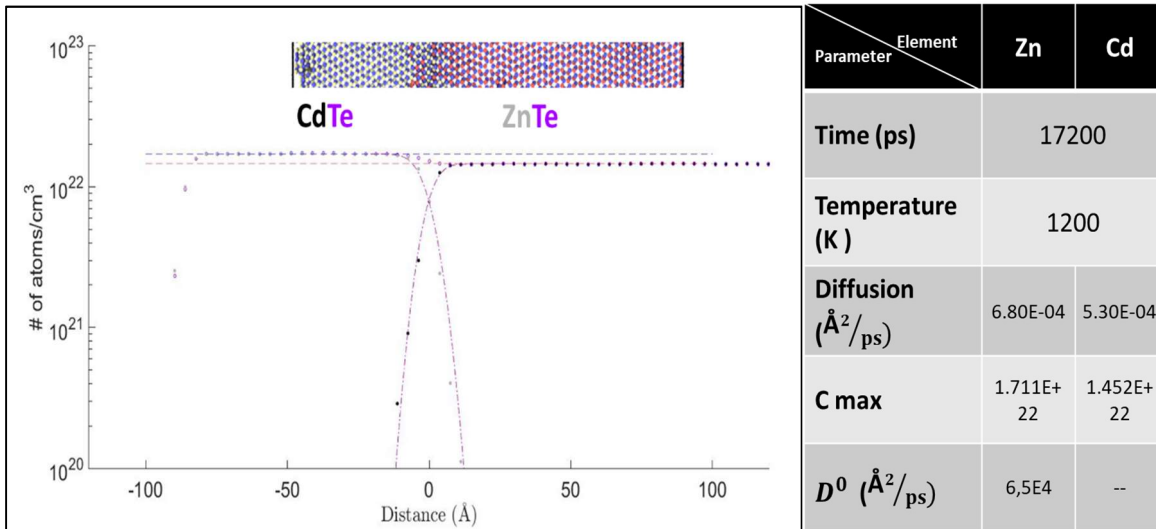
Es posible observar que la difusión es mucho mayor en este caso, lo cual no corresponde a lo estipulado en lo teórico, confirmando así que la simulación 3 presenta algún error en las etapas anteriores a su análisis.

### Simulaciones de ZnTe sobre CdTe

Para estudiar el comportamiento de la difusión según la posición del compuesto, se realizaron adicionalmente simulaciones y análisis invirtiendo los compuestos del sustrato y la epitaxia.

#### *Simulación 5: ZnTe sobre CdTe con polaridad A y energía incidente de 0.5eV.*

La simulación se realizó teniendo como parámetros iniciales una polaridad A, que en este caso es el Cd, una energía incidente de 0.5eV y un tiempo de simulación de 17.2ns. Los resultados se presentan a continuación:

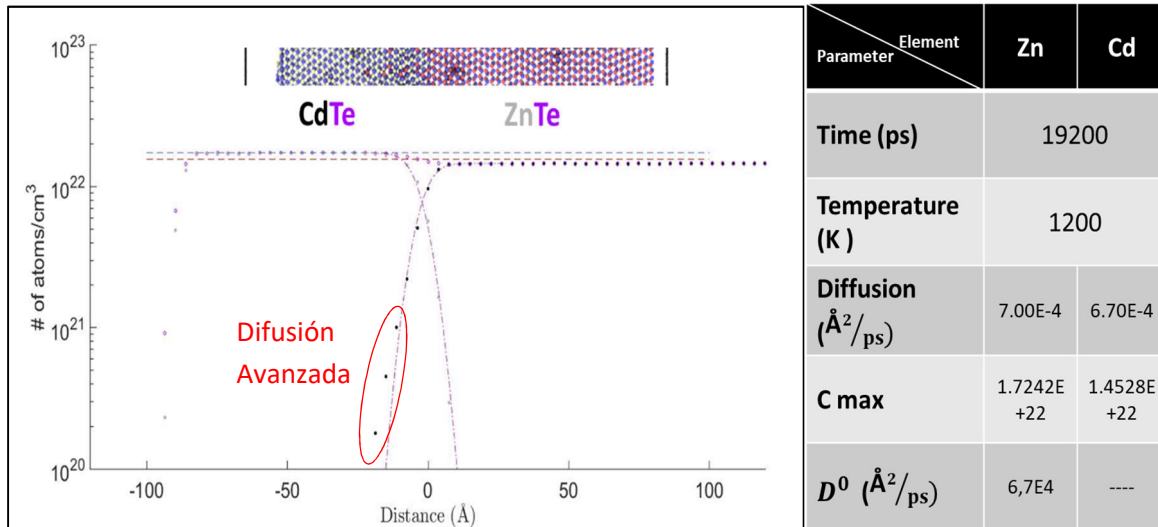


**Figura 3.5.** Simulación de ZnTe sobre CdTe. Resultados cuando la energía incidente  $E_i$  es de 0.5eV y la polaridad es A.

Se puede observar que, aunque el tiempo de simulación es un poco más corto, la difusión es mayor que en los casos anteriores, esto es probablemente debido al intercambio de compuestos del substrato y la epitaxia, pero se comprueba analizando las demás simulaciones realizadas bajo ese parámetro de intercambio.

*Simulación 6: ZnTe sobre CdTe con polaridad A y energía incidente de 5eV*

Para analizar el comportamiento del aumento de  $E_i$ , cuando los compuestos están intercambiados. La simulación tiene como parámetros iniciales una polaridad A, una  $E_i$  de 5eV y un tiempo de 19.2nS.

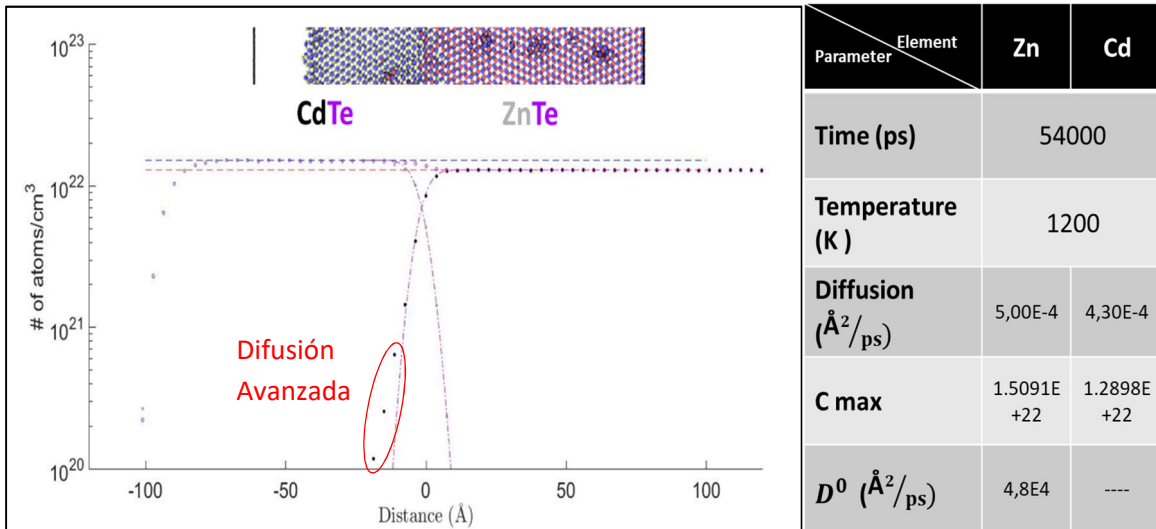


**Figura 3.6.** Simulación de ZnTe sobre CdTe. Resultados cuando la energía incidente  $E_i$  es de 5eV y la polaridad es A.

La difusión es mucho mayor que en el caso anterior, esto se debe en gran medida a que su energía incidente es mayor también. Este caso, además, presenta difusión avanzada, lo que quiere decir, que existe otro mecanismo que describe el comportamiento de la difusión de los átomos, y es diferente a la función de error complementario.

*Simulación 7: ZnTe sobre CdTe con polaridad B y energía incidente de 0.5eV*

De la misma forma que en las simulaciones de CdTe sobre ZnTe, es necesario estudiar la forma en que la polaridad puede afectar la difusión. En este caso, los parámetros son polaridad B,  $E_i$  de 0.5eV y un tiempo de simulación de 54nS.

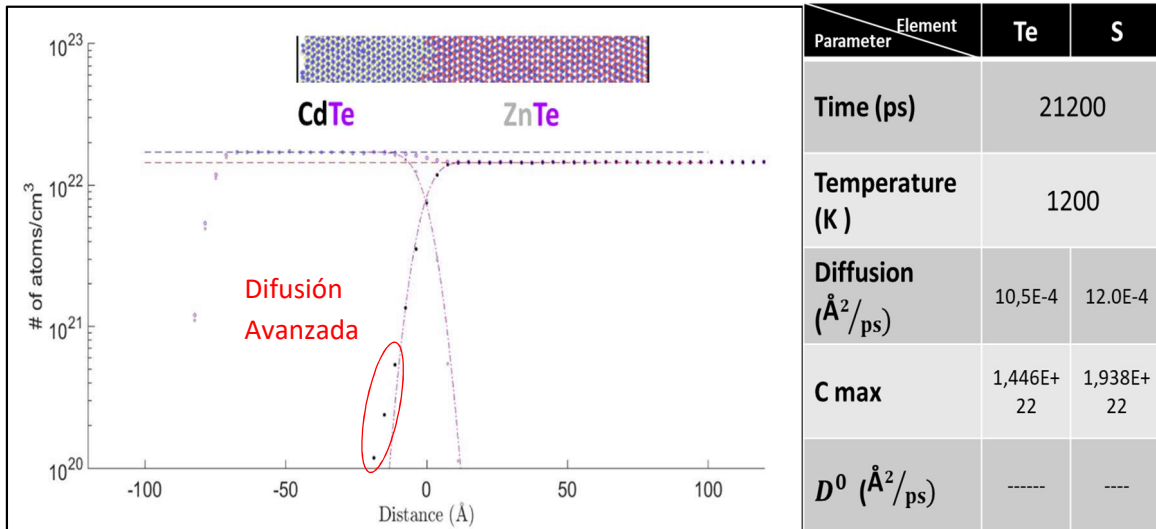


**Figura 3.7.** Simulación de ZnTe sobre CdTe. Resultados cuando la energía incidente  $E_i$  es de 0.5eV y la polaridad es B.

Los resultados para esta simulación también muestran un caso de difusión avanzada en el Zn, por lo que no es posible determinar exactamente su verdadero nivel de difusión. Aun así, aunque su tiempo de simulación es alto, el valor de  $D$  no presenta valores tan elevados.

*Simulación 8: ZnTe sobre CdTe con polaridad B y energía incidente de 5eV*

Finalmente, para el último caso de las simulaciones monocristalinas, se realiza el ajuste para una simulación con polaridad B,  $E_i$  de 5eV y un tiempo de simulación de 18nS. Los resultados que se obtienen son:



**Figura 3.8.** Simulación de ZnTe sobre CdTe. Resultados cuando la energía incidente  $E_i$  es de 5eV y la polaridad es B.

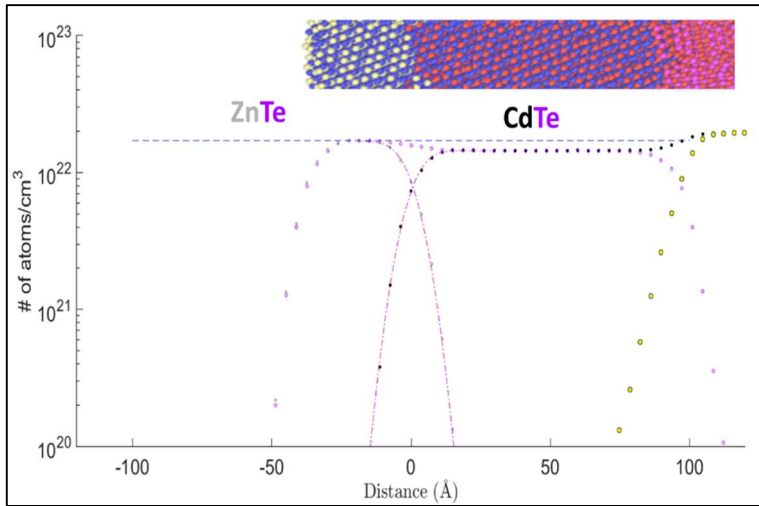
La difusión obtenida en el último caso es mayor comparado con la anterior simulación, además, presenta un caso de difusión avanzada en el Zn.

En general, las simulaciones monocristalinas muestran una mayor difusión cuando la energía incidente es mayor. También, es posible observar que el elemento que más se difunde es el Zn, sin importar si se encuentra en el sustrato o la epitaxia.

### Resultados de simulaciones de crecimiento policristalino.

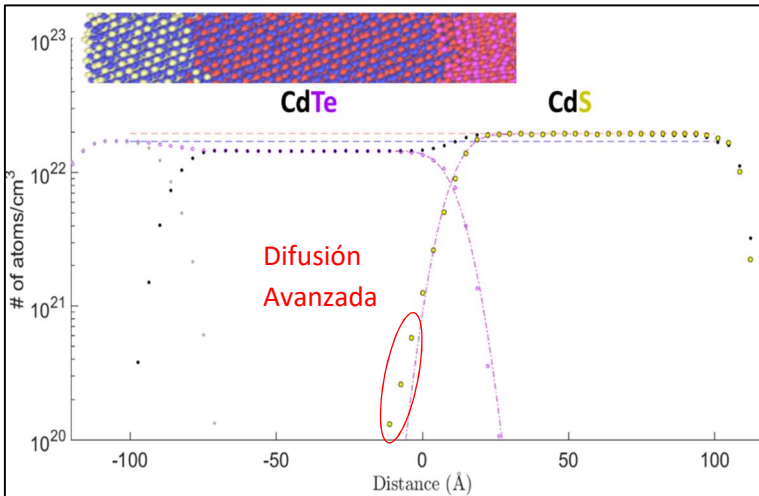
Finalmente, se estudia la simulación de crecimiento policristalino, esta está hetero estructura fue realizada depositando ZnTe sobre una estructura de CdTe/CdS policristalina. Es por ello por lo que se forman dos interfaces, la interface 1: ZnTe-CdTe; y la interface 2: CdTe-CdS. La temperatura de esta simulación también es de 1200K y el tiempo de deposición es de 21.2ns.

### Interface 1



Parameter \ Element	Zn	Cd
Time (ps)	21200	
Temperature (K)	1200	
Diffusion ( $\text{Å}^2/\text{ps}$ )	8,65E-4	8,30E-4
C max	1,685E+22	1,140E+22
$D^0$ ( $\text{Å}^2/\text{ps}$ )	8,25E4	----

### Interface 2



Parameter \ Element	Te	S
Time (ps)	21200	
Temperature (K)	1200	
Diffusion ( $\text{Å}^2/\text{ps}$ )	10,5E-3	9,80E-4
C max	1,446E+22	1,938E+22
$D^0$ ( $\text{Å}^2/\text{ps}$ )	-----	----

Figura 3.9. Simulación policristalina. Resultados de cada interface.

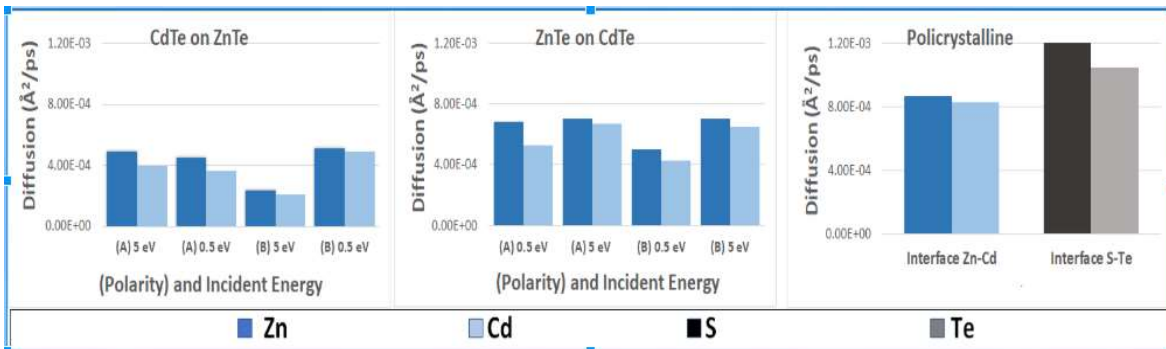
Los resultados que se obtienen al estudiar la simulación policristalina muestran que existe una mayor difusión de los elementos con respecto a las simulaciones de crecimiento monocristalino, esto se debe a que un crecimiento incoherente de los cristales permite que los átomos se deslicen entre los límites del grano, llegando más profundo en el compuesto (Poplawsky, et al., 2016).

## Resultados Generales

Los datos de todas las simulaciones se tabularon nuevamente con el fin de compararlos, además, se realizaron histogramas de barras para visualizar mejor el fenómeno.

Single Crystal																Polycrystalline				
Polarity	CdTe on ZnTe								ZnTe on CdTe								ZnTe on PX-CdTe/CdS			
	A (Zn)				B (Te)				A (Cd)				B (Te)							
Time (ns)	20		18,8		40		43,6		17,2		19,2		54		18		21.2			
Incident energy (eV)	5		0,5		5		0,5		5		0,5		5		0,5		-----			
Max. Concentration (#Atom/cm <sup>3</sup> ) x10 <sup>22</sup>	Zn	Cd	Zn	Cd	Zn	Cd	Zn	Cd	Zn	Cd	Zn	Cd	Zn	Cd	Zn	Cd	Zn	Cd	Te	S
	1.53	1.29	1.53	1.31	1.52	1.29	1.53	1.30	1.72	1.45	1.71	1.45	1.70	1.44	1.50	1.29	1.68	1.14	1.44	1.94
Diffusion (Å <sup>2</sup> /ps)x10 <sup>-4</sup>	4.9	4	4.5	3.6	2.3	2.1	5.1	4.9	7.00	6.70	6.80	5.30	7.00	6.50	5.00	4.30	8.65	8.30	10.5	12
D <sup>0</sup> (Å <sup>2</sup> /ps) x10 <sup>-4</sup>	4.7	--	4.3	--	2.2	--	4.9	--	6.5	--	6.7	--	2.3	--	6.7	--	8.25	--	--	--

**Tabla 3.1.** Resumen del análisis realizado a las simulaciones. Los cambios de tonalidad entre las columnas representan la interface de los compuestos en cada simulación.



**Tabla 3.2.** Visualización de los datos obtenidos mediante el análisis de las simulaciones.

La función de error permite analizar y determinar la difusión atómica. Se puede observar que, en la interface policristalina, el valor de la difusión es mucho más alto que en las interfaces monocristalinas. Además, también se puede apreciar que los perfiles con una energía incidente  $E_i$  de 5eV presentan también, una mayor difusión. Adicionalmente, el posible observar una difusión más alta cuando el Zn se encuentra depositado sobre el Cd, que cuando el Cd es depositado sobre el Zn.

En las interfaces donde se encuentran Zn y Cd, normalmente el Zn tiene mayor Interdifusión. La hipótesis inicial es que el radio atómico puede tener una influencia en que tanto se difunde el elemento. Partiendo de ese fenómeno, se tabularon los diferentes



 Institución Universitaria	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

radios atómicos (Tabla 1.3) de cada elemento utilizado en las simulaciones, para comprobar si existe relación del tamaño, con la difusión que presentan dentro de la estructura.

Elemento	Radio Calculado	Radio Van der Waals	Radio Covalente	Radio Metálico
<b>Azufre (S)</b>	88 pm	180 pm	102 pm	---
<b>Zinc (Zn)</b>	142 pm	139 pm	131 pm	134 pm
<b>Telurio (Te)</b>	123 pm	206 pm	135 pm	--
<b>Cadmio(Cd)</b>	161 pm	158 pm	148 pm	151 pm

**Tabla 3.3:** Diferentes radios atómicos de los elementos de la estructura.

En la tabla anterior, los elementos están ubicados según el radio calculado, del menor al mayor. El elemento que más difusión presenta en las simulaciones es el Azufre, y el que menos presenta es el cadmio. Al mismo tiempo, el azufre es el elemento que menor radio atómico tiene entre el resto, permitiendo así, ver que el tamaño del átomo tiene relación con la interdifusión.

 Institución Universitaria	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

## 4. CONCLUSIONES, RECOMENDACIONES Y TRABAJO FUTURO

---

- El estudio de las simulaciones proporcionó información para entender un poco más acerca de la interdifusión. Se observa la forma en que cada parámetro afecta este fenómeno.
  - La energía incidente afecta la difusión, puede observarse que entre más alta sea esta energía, más alta será la difusión de los elementos.
  - La polaridad del sustrato no tiene una afectación significativa en la interdifusión.
  - El crecimiento del cristal tiene bastante influencia en la difusión, siendo esta mayor en las muestras con crecimiento policristalino, esto se debe en mayor parte a que el crecimiento incoherente de las moléculas y las fronteras de grano, crean espacios por donde los otros átomos pueden deslizarse más profundo en la estructura.
- Analizando el tamaño de los átomos del material se puede observar que el de menor radio atómico es el Zn y el del mayor es el Cd. Al mismo tiempo, en todos los perfiles se encontró que los átomos de Zn tenían más difusión que el resto de elementos incluyendo el Cd. Esto da a entender, que existe una relación entre el tamaño del átomo y su difusión.
- La posición del compuesto en la estructura también está relacionada con la interdifusión. Las simulaciones donde el elemento de menor radio atómico está ubicado en la epitaxia (ZnTe/CdTe y ZnTe sobre CdTe/CdS), presentan mayor nivel general de interdifusión.
- Como recomendación, se pueden realizar nuevas simulaciones a temperaturas de deposición diferentes a 1200K, para estudiar el efecto de la temperatura en la interdifusión de los compuestos.

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

- Con estos resultados es posible, como trabajo a futuro, estudiar más afondo la eficiencia de las celdas solares construidas con los elementos Zn, Cd, Te y S teniendo en cuenta como se afecta esta según la interdifusión. Además, se pueden estudiar otros métodos de deposición de estructuras y crecimientos amorfos para ver que implicaciones tiene tanto en la difusión como en la eficiencia final.

 Institución Universitaria	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

## REFERENCIAS

---

- Aguirre, R., Chavez, J. J., Li, J., Wang Zhou, X., Almeida, S. F., Wolden, C., & Zubia, D. (2018). Crystal Growth and Atom Diffusion in (Cu)ZnTe/CdTe via Molecular Dynamics. *IEEE JOURNAL OF PHOTOVOLTAICS*, Vol 8, 594-599.
- Albella, D. J. (25 de 08 de 2018). *icmm*. Obtenido de <http://www.icmm.csic.es/fis/espa/evaporacion.html>
- Amin, N., & Rahamn, K. S. (2017). Close-Spaced Sublimation (CSS): A Low-Cost, High-Yield Deposition System for Cadmium Telluride (CdTe) Thin Film Solar Cells. *Modern Technologies for Creating the Thin-film Systems and Coatings*, 362-379.
- Blétry, J. (2009). *Algunas aplicaciones de los Vidrios Calcogenuros a Nano-Optoelectrónica*. España: Boletín de la Sociedad Española de la Cerámica y Vidreo.
- ECATEPEC. (2009). *Tecnologías Solar-Eólica-Hidrógeno-Pilas de Combustible como fuentes de energía*. México: .
- Gal Energy Celdas solares. (25 de 08 de 2018). Obtenido de GALT ENERGY: <http://galt.mx/celdas-solares/>
- Godoy, D. (29 de 06 de 2016). Obtenido de <http://panelesfotovoltaicosaiop.blogspot.com/2016/>
- Heywang, W., & Zaininger, K. (2004). Silicon: The semiconductor material. *Silicon: evolution and future of a technology*.
- Hincapié, S., Rios, B. E., Cruz, B., & Dorantes, R. J. (2017). *Deposición y Caracterización de Películas delgadas CERMET por medio de la técnica CVD-AA con aplicaciones en tecnología solar*. Pereira, Colombia.: Universidad Tecnológica de Pereira.
- Madrid, U. C. (s.f.). *7 Difusion - Ley de Fick*. Obtenido de <http://webs.ucm.es/info/termo/PDFS/practica7.pdf>
- Poplawsky, J. D., Li, C., Paudel, N. R., Guo, W., Yan, Y., & Pennycook, S. J. (2016). Nanoscale doping profiles within CdTe grain boundaries and at the CdS/CdTe interface revealed by atom probe tomography and STEM EBIC. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 95-101.

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

Samoilenko, Y., Abbas, A., Walls, M., & Wolden, C. A. (2018). Copper-induced recrystallization and interdiffusion of CdTe/ZnTe thin films . *Journal of Vacuum Science & Technology* , 031201-1 -031201-9.

Sánchez, J. L. (2008). *MATLAB / Octave*. Obtenido de Introduccion a MATLAB:  
<http://nereida.deioc.ull.es/~pcgull/ihiu01/cdrom/matlab/contenido/matlab.html>

Smith, W. F., & Hashemi, J. (2005). *Foundations of Materials Science and Engineering* . McGraw-Hill Companies, 4th edition.

Stukowski, A. (2010). *OVITO - the Open Visualization Tool*. Obtenido de Scientific Visualization and analysis of atomistic simulation data: <https://ovito.org/>

*Unidad Didáctica 5*. (s.f.). Obtenido de Átomos, Moléculas y Cristales:  
[http://www.quimicaweb.net/grupo\\_trabajo\\_fyq3/tema5/index5.htm](http://www.quimicaweb.net/grupo_trabajo_fyq3/tema5/index5.htm)

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

## APÉNDICE

---

### Apéndice A: Ecuación de difusión

La primera ley de Fick se puede describir matemáticamente de la siguiente manera:

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x}$$

Donde F es el flujo, D es la difusividad y  $\partial C / \partial x$  es el gradiente de la concentración. Gracias a la segunda ley de Fick se tiene una descripción más práctica que relaciona la concentración de ambas variables de tiempo y espacio. La segunda ley de Fick es una ley fundamental de la conservación, explica el incremento en la concentración en una sección cruzada por unidad de área con un tiempo que es la diferencia entre el flujo dentro del volumen y fuera del volumen.

$$\frac{\Delta C}{\Delta t} = \frac{\Delta F}{\Delta x} = \frac{F_{in} - F_{out}}{\Delta x}$$

La primera ley de Fick es válida en cualquier instante incluso cuando la concentración y el gradiente de la concentración están cambiando con el tiempo. Se reemplaza F en la ecuación:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial C}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \end{aligned}$$

La generalización de esta ecuación tridimensional es la siguiente:

$$\frac{\partial y}{\partial x} = -\nabla \cdot F = \nabla \cdot (D \nabla C)$$

La solución analítica de la ecuación de difusión ocurre cuando se aplica una condición en estado estable y no hay variación en la concentración con el tiempo:

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0$$

Al integrar dos veces se obtiene:

 Institución Universitaria	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

$$C = a + bx$$

Se tiene que una solución en un medio infinito al tener las siguientes condiciones:

$$C \rightarrow 0 \text{ as } t \rightarrow 0 \text{ for } x > 0$$

$$C \rightarrow \infty \text{ as } t \rightarrow 0 \text{ for } x = 0$$

Y:

$$\int_{-\infty}^{\infty} C(x, t) dx = Q$$

Q es la cantidad de dopante contenido, la solución de la segunda ley de Fick que satisface estas condiciones de frontera es:

$$C(x, t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) = C(0, t) \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

Para una solución cerca de una superficie, la concentración de esta está dada por:

$$C(0, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}}$$

Para el desarrollo de la función de error en un medio infinito se tienen las siguientes condiciones de frontera:

$$C = 0 \text{ at } t = 0 \text{ for } x > 0$$

$$C = C \text{ at } t = 0 \text{ for } x < 0$$

Para obtener la solución para este caso se puede hacer uso de una suposición lineal dada por:

$$C(x, t) = \frac{C}{2\sqrt{\pi Dt}} \sum_{i=1}^n \Delta x_i \exp - \frac{(x - x_i)^2}{4Dt}$$

La sumatoria se convierte en integral teniendo la siguiente solución:

$$C(x, t) = \frac{C}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{-\infty}^0 \exp - \frac{(x - \alpha)^2}{4Dt} d\alpha$$

Reemplazando:

$$\frac{(x - \alpha)}{2\sqrt{Dt}} = \eta$$

	INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO	Código	FDE 089
		Versión	03
		Fecha	2015-01-22

Y sustituyendo:

$$C(x, t) = \frac{C}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty} \exp(-\eta^2) d\eta$$

Una relación de integrales es tabulada porque es común en la solución de la ecuación de difusión, esta ecuación es llamada función de error y es definida por:

$$\text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-\eta^2) d\eta$$

La solución para la ecuación de difusión desde una fuente infinita se convierte en:

$$C(x, t) = \frac{C}{2} \left[ 1 - \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \right]$$

Simplificando la notación, la función de error complementaria puede ser definida por:

$$\text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x)$$

Así que:

$$C(x, t) = \frac{C}{2} \left[ \text{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \right]$$

La solución de la función de error cerca de una superficie:

$$C(x, t) = C_s \left[ \text{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \right]$$

más precisamente:

$$Q = \int_0^{\infty} C_s \left[ 1 - \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \right] dx = \frac{2C_s}{\sqrt{\pi}} \sqrt{Dt}$$

Obteniéndose finalmente el coeficiente de difusión intrínseca del dopante:

$$D = D^0 \exp\left(\frac{-E_A}{kT}\right)$$





INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADO

Código	FDE 089
Versión	03
Fecha	2015-01-22

FIRMA ESTUDIANTES *Fateo & Juan*

FIRMA ASESORES *Quiroz* August 27, 2018  
*CyberPlay* Agosto 28, 2018

FECHA ENTREGA: Agosto 30, 2018

FIRMA COMITÉ TRABAJO DE GRADO DE LA FACULTAD \_\_\_\_\_

RECHAZADO \_\_\_      ACEPTADO \_\_\_      ACEPTADO CON MODIFICACIONES \_\_\_

ACTA NO. \_\_\_\_\_

FECHA ENTREGA: \_\_\_\_\_

FIRMA CONSEJO DE FACULTAD \_\_\_\_\_

ACTA NO. \_\_\_\_\_

FECHA ENTREGA: \_\_\_\_\_