

Estudio de la difusión de calor en sistemas de dos capas de GaAs/GaSb unidos mediante la técnica de fusión

R. A. Muñoz Hernández y A. Calderón
CICATA-IPN, Legaria 694 Col. Irrigación, México D. F.
E-mail: calder@df1.telnet.mx

J. F. Sánchez Ramírez y J. L. Herrera Pérez
Instituto de Física, BUAP, Apdo. Postal J-48, Puebla, Pue., 72570, México

A. Cruz-Orea, M. López López y F. Sánchez Sinencio
CINVESTAV-IPN. Apdo. Postal 14-740, 07000 México City, México

Presentamos un estudio de la difusión de calor en sistemas de dos capas de GaAs/GaSb formado por la unión de obleas mediante la técnica de fusión que demuestra que el análisis de la difusividad térmica en estos sistemas permite conocer el grado de importancia que desempeña la interface en el transporte de calor en estos sistemas en función de la temperatura utilizada del proceso de unión. La medición de la difusividad térmica se realiza mediante la técnica fotoacústica en una configuración de transmisión de calor. Además, realizamos un estudio de las propiedades térmicas en la interface aplicando un modelo obtenido de la generalización del modelo para la difusividad térmica efectiva de un sistema de dos capas.

We present a study about the heat diffusion in two layers system GaAs/GaSb formed by the joined of waffles by means of the fusion technique which shows that the analysis of the thermal diffusivity on this system allows to know the roll that the interface plays in the heat transport in these systems as a function of the temperature used in the joining process. The thermal diffusivity measurements were realized by means of the photoacoustic technique in a heat transmission configuration. Besides this, we realized a study about the thermal properties on the interface applying a model obtained by the generalization of the model for the effective thermal diffusivity of a two layers system.

PACS numbers: 78.20.Hp; 44.50.+f

INTRODUCCION

Es conocido que la difusividad térmica es una cantidad física extremadamente sensible a la composición y estructura de los materiales, así como de las condiciones de procesamiento [1, 2]. Este es en particular el caso de los materiales compuestos por capas, los cuales presentan una importancia especial debido a que aparecen frecuentemente tanto en la naturaleza como en los materiales hechos por el hombre.

La técnica fotoacústica en la configuración de transmisión de calor denominada celda fotoacústica abierta (CFA) aplicada a la caracterización térmica en sólidos se ha utilizado desde su presentación [1, 2] hasta nuestros días en la medición de las propiedades térmicas en una variedad de materiales de pequeño espesor [3, 4].

Para unir diferentes materiales semiconductores, recientemente se ha desarrollado una técnica denominada *fusión de obleas* [5] la cual es un caso especial de unión directa en donde se crean enlaces químicos fuertes directamente en la interface de los materiales. Para que la unión ocurra, los materiales libres de óxidos se colocan en contacto directo y se calientan a temperaturas elevadas mientras se aplica simultáneamente una presión uniaxial a este sistema por un tiempo determinado en un ambiente de hidrogeno. Mientras que el estudio de las propiedades eléctricas en estos sistemas ha recibido un interés creciente [6], las propiedades térmicas que presentan es un tema poco estudiado hasta ahora.

En este trabajo se investiga la difusión de calor en sistemas de dos capas de GaAs/GaSb formados por la unión de obleas mediante el procedimiento anteriormente

descrito y se muestra que el análisis de la difusividad térmica de estos sistemas permite conocer el grado de importancia que desempeña la interface en el transporte de calor en estos sistemas de dos capas en función de la temperatura utilizada en el proceso de unión.

TEORIA

De acuerdo al modelo de difusión térmico de Rosencwaig y Gersho [7] se tiene que, para muestras ópticamente opacas ($m \ll l_s$), la amplitud y fase de la señal fotoacústica (FA) medida con la técnica de la celda fotoacústica abierta (CFA) están dadas, respectivamente, por [3, 8]:

$$A = C_0 \frac{1}{f \sqrt{\cosh(2\sqrt{f/f_c}) - \cos(2\sqrt{f/f_c})}} \quad (1)$$

$$\Delta j = -atan \left(\frac{\tan(\sqrt{f/f_c})}{\tanh(\sqrt{f/f_c})} \right) - p/2 \quad (2)$$

En estas expresiones, f representa la frecuencia de modulación, $f_c (=a/pl_s^2)$ es un parámetro denominado *frecuencia de corte*, el cual representa la frecuencia a la cual la longitud de difusión térmica $m (=a/pf)^{1/2}$ es igual al espesor de la muestra ($m=l_s$), y C_0 es una constante que depende de las propiedades térmicas del aire, de los valores de la presión y la temperatura ambiente, así como de la intensidad I_0 de la fuente y las características del detector. Mediante la determinación del parámetro f_c a partir del proceso de ajuste de

cualquiera de las expresiones (1) o (2) a los datos experimentales, y conociendo el espesor l_s de la muestra en estudio, su difusividad térmica \mathbf{a} se obtiene de manera directa [3, 8]. Cuando se aplica este procedimiento a muestras compuestas (no homogéneas), como en el caso de sistemas de dos capas, el valor obtenido para \mathbf{a} representa la difusividad térmica total del sistema y se denomina difusividad térmica "efectiva" \mathbf{a}_{eff} del sistema [2, 4, 9-11].

El modelo de dos capas.

De acuerdo a la analogía entre resistencias eléctricas y térmicas [12], la resistencia térmica efectiva en la dirección perpendicular de un sistema de dos capas puede expresarse como la suma de las dos resistencias térmicas de cada capa. Por tanto, la difusividad térmica efectiva de este sistema puede expresarse en términos de las propiedades térmicas y valores del espesor promedio de sus capas componentes en la forma [2, 11]:

$$\mathbf{a} = \left(\frac{x^2}{\mathbf{a}_1} + \frac{(1-x)^2}{\mathbf{a}_2} + x(1-x) \left[\frac{I_{12}}{\mathbf{a}_1} + \frac{1}{I_{12}\mathbf{a}_2} \right] \right)^{-1} \quad (3)$$

donde $x = l_1 / l$ y $I_{12} = k_1 / k_2$. Aquí, l_1 es el espesor de la capa 1, l es el espesor total de la muestra, y k_i , \mathbf{a}_i denotan la conductividad y la difusividad térmica de la capa i respectivamente. Esta ecuación implica que la difusividad térmica efectiva de la muestra compuesta depende, no sólo de la difusividad térmica de las capas constituyentes, sino también de la razón de sus conductividades térmicas individuales. Esta expresión ha sido demostrada válida experimentalmente en diversos sistemas de dos capas constituidos por materiales de diferentes espesores y parámetros térmicos [2, 4, 9-11].

Una forma más clara de esta última expresión se obtiene al escribirla en la forma:

$$\frac{l^2}{\mathbf{a}} = \frac{l_1^2}{\mathbf{a}_1} + \frac{l_2^2}{\mathbf{a}_2} + \frac{2l_1l_2}{\sqrt{\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2}} \left(1 + \frac{(e_1 - e_2)^2}{2e_1e_2} \right) \quad (4)$$

donde $e_i (= \sqrt{k_i r_i c_i})$ representa la efusividad térmica de la capa i . En caso que los dos medios tengan la misma capacidad de intercambio térmico, esto es $e_1 = e_2$, esta ecuación (4) se reduce a la forma:

$$\frac{l}{\sqrt{\mathbf{a}}} = \frac{l_1}{\sqrt{\mathbf{a}_1}} + \frac{l_2}{\sqrt{\mathbf{a}_2}} \quad (5)$$

Cabe mencionar que la solución directa de la ecuación de difusión de calor con las condiciones de frontera de continuidad de la temperatura y el flujo de calor en las interfaces arroja expresiones complejas extensas muy complicadas e inmanejables para la distribución de temperatura en este sistema de dos capas y no es posible obtener una expresión general para \mathbf{a}_{eff} de esta manera [13]. Solo para el caso en que $e_1 = e_2$ este procedimiento conduce a una difusividad térmica

efectiva dada precisamente por la Ec. (5) obtenida a partir de la analogía térmica y eléctrica.

Generalización del modelo de dos capas

Si consideramos un sistema de dos capas en el que la interface opone cierta resistencia térmica al paso del calor, entonces debemos tomar en cuenta el efecto de la misma en los parámetros térmicos efectivos del sistema. Recordemos que en una medición lo que obtenemos son precisamente cantidades efectivas de estos parámetros. De esta manera, la difusividad térmica efectiva del sistema de dos capas se generaliza de la Ec. (4) a la expresión [8]:

$$\frac{l^2}{\mathbf{a}} = \frac{l_1^2}{\mathbf{a}_1} + \frac{l_2^2}{\mathbf{a}_2} + \frac{l_c^2}{\mathbf{a}_c} + \frac{2l_1l_2}{\sqrt{\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2}} \left(1 + \frac{(e_1 - e_2)^2}{2e_1e_2} \right) + \frac{2l_1l_c}{\sqrt{\mathbf{a}_1\mathbf{a}_c}} \left(1 + \frac{(e_1 - e_c)^2}{2e_1e_c} \right) + \frac{2l_2l_c}{\sqrt{\mathbf{a}_2\mathbf{a}_c}} \left(1 + \frac{(e_2 - e_c)^2}{2e_2e_c} \right) \quad (6)$$

donde las cantidades con el subíndice c corresponden a la interface. Observemos que en el caso $e_1 = e_2 = e_c$ esta ecuación se reduce de inmediato a la generalización de la expresión (5):

$$\frac{l}{\sqrt{\mathbf{a}}} = \frac{l_1}{\sqrt{\mathbf{a}_1}} + \frac{l_2}{\sqrt{\mathbf{a}_2}} + \frac{l_c}{\sqrt{\mathbf{a}_c}} \quad (7)$$

Para utilizar la ecuación (6) en la medición de la contribución de la interface en un material que consiste de la unión de dos capas mediante el ajuste de este modelo a los datos experimentales de la señal FA es conveniente escribir esta ecuación en la forma [8]:

$$\frac{l^2}{\mathbf{a}_{eff}} = \frac{l_1^2}{\mathbf{a}_1} + \frac{l_2^2}{\mathbf{a}_2} + RC + l_1l_2 \left(\frac{k_1}{k_2\mathbf{a}_1} + \frac{k_2}{k_1\mathbf{a}_2} \right) + R \left(l_1 \frac{k_1}{\mathbf{a}_1} + l_2 \frac{k_2}{\mathbf{a}_2} \right) + C \left(\frac{l_1}{k_1} + \frac{l_2}{k_2} \right) \quad (8)$$

En esta, l es el espesor total y l_i , k_i , \mathbf{a}_i denotan el espesor, la conductividad y la difusividad térmica de la capa i respectivamente. Los parámetros R y C están relacionados con las propiedades térmicas de la interface de la siguiente manera:

$$R = l_c / k_c \quad \text{Resistencia térmica} \quad (9)$$

$$C = l_c r c \quad \text{Capacidad calorífica} \quad (10)$$

$$t_d = CR = l_c^2 / \mathbf{a}_c \quad \text{Tiempo de difusión} \quad (11)$$

$$e = \sqrt{C/R} \quad \text{Efusividad térmica} \quad (12)$$

La ecuación (8) implica que la difusividad térmica efectiva del sistema depende no sólo de los parámetros térmicos de las capas constituyentes, sino también de las propiedades térmicas de la interface. De esta expresión es posible obtener una medida de los parámetros térmicos en la interface a partir de la medición de la difusividad

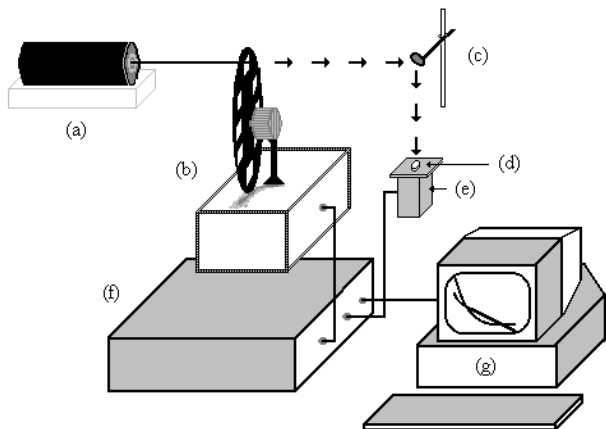
térmica efectiva y los valores conocidos de las dos capas componentes.

RESULTADOS EXPERIMENTALES

En la tabla 1 se muestra el conjunto de muestras estudiadas de GaAs/GaSb. La temperatura de calentamiento del proceso de unión se denota por la letra *T*, en tanto que *l*₁, *l*₂ y *l* denotan los espesores de las capas de GaAs, GaSb y total, respectivamente. Las muestras 2-5 fueron elaboradas mediante un calentamiento a la temperatura deseada *T* durante un tiempo de 30 min bajo la aplicación de una presión uniaxial de 200 KPa [14]. La muestra 1 es una muestra hipotética de dos capas con una supuesta unión perfecta a temperatura ambiente, para las otras muestras la temperatura de calentamiento varía desde 300 a 650 °C.

Tabla I. Conjunto de muestras de GaAs/GaSb.

Muestra	<i>T</i> (°C)	<i>l</i> ₁ ±3 (mm)	<i>l</i> ₂ ±3 (mm)	<i>l</i> ±3 (mm)
1	25	150	150	300
2	300	249	132	379
3	400	116	103	220
4	500	128	132	262
5	650	156	95	255



El esquema experimental utilizado, mostrado en la figura 1, consiste de un láser de Argón de 40 mW cuyo haz se modula mediante un modulador mecánico de rapidez variable (SRS-modelo 540). Este haz modulado se hace incidir perpendicularmente sobre la muestra en estudio, la cual se ha colocado previamente sobre la base de un micrófono de electreto. La señal proveniente del micrófono se mide mediante un amplificador “lock-in” (SRS-modelo 850). La adquisición de datos esta controlada totalmente por un computador personal.

Fig.1 Esquema experimental. (a) láser, (b) modulador mecánico, (c) espejo, (d) muestra, (e) CFA, (f) amplificador “lock-in” y (g) computador.

Tabla II. Valores medidos de *a*_{eff} del conjunto de muestras de GaAs/GaSb.

Muestra	<i>T</i> (°C)	<i>l</i> (mm)	<i>f</i> _c (Hz)	<i>a</i> _{eff} (cm ² /s)
1	25	300	90.2	0.240
2	300	379	52.6	0.237
3	400	220	87.9	0.207
4	500	262	49.8	0.107
5	650	255	48.6	0.099

En la tabla II se dan los valores obtenidos a temperatura ambiente, mediante la técnica de la CFA, de la frecuencia de corte *f*_c y el correspondiente valor de la difusividad térmica efectiva (*a*_{eff} = *pl*_s²*f*_c) de cada muestra del conjunto GaAs/GaSb descrito en la tabla I. En la figura 2 se muestra la gráfica de *a*_{eff} en función de la temperatura *T* de calentamiento del proceso de unión.

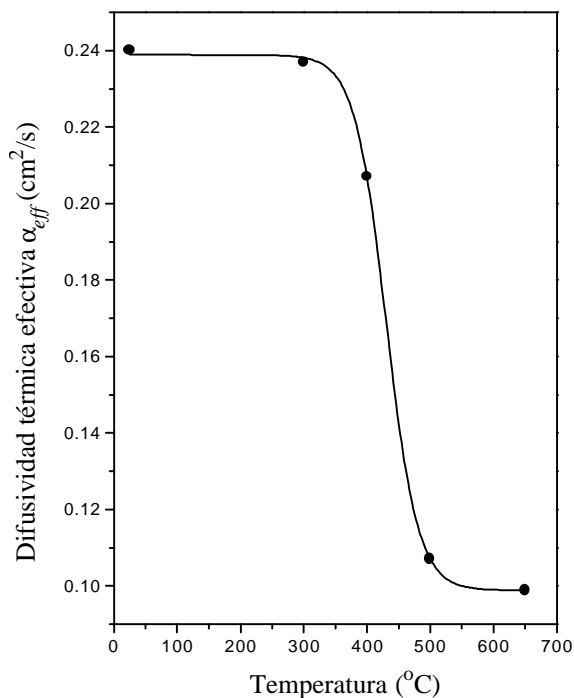


Fig. 2 Gráfica de *a*_{eff} en función de la temperatura *T* de calentamiento del proceso de unión de las obleas.

DISCUSION

De acuerdo a la figura 2, los valores obtenidos para *a*_{eff} del conjunto de muestras estudiadas presentan una tendencia decreciente en función de la temperatura *T* utilizada en el proceso de unión. Al intentar ajustar una función que nos describa el comportamiento de *a*_{eff} vs *T* obtenemos que el mejor ajuste corresponde una función logística decreciente de la forma:

$$a = a_0 - \Delta a \frac{\exp\left(\frac{T - T_0}{\Delta T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{T - T_0}{\Delta T}\right)} \tag{13}$$

El mejor ajuste esta representado en la figura 2 con la curva continua y se obtienen los valores siguientes: $T_0=430.5^\circ\text{C}$ representa la temperatura en la que ocurre el punto de inflexión en la curva, $\Delta T=25^\circ\text{C}$ es el intervalo en el que toma lugar este, $\Delta a = 0.14\text{cm}^2/\text{s}$ representa el cambio de a_{eff} en el recorrido total de la curva y $a_0=0.24\text{cm}^2/\text{s}$ al valor de la difusividad térmica del primer punto.

En la figura 3 se muestra la primera y segunda derivadas, de la curva logística de la figura 2. De estas podemos diferenciar la ocurrencia de dos procesos: un primero, correspondiente al intervalo 25-430 °C que se caracteriza por un incremento en la rapidez en que disminuye a desde su nivel inicial, y el otro, correspondiente al intervalo de 430 °C en adelante, caracterizado por un incremento en la rapidez en que a_{eff} alcanza el valor de saturación. Se presentan tres puntos relevantes. En el valor de 430 °C ocurre la máxima variación de a y es el punto de separación de los dos procesos mencionados anteriormente. En 396°C se tiene el valor máximo de la rapidez de cambio de a en el primer proceso, y en 466°C el valor máximo de la rapidez de cambio de a en el segundo.

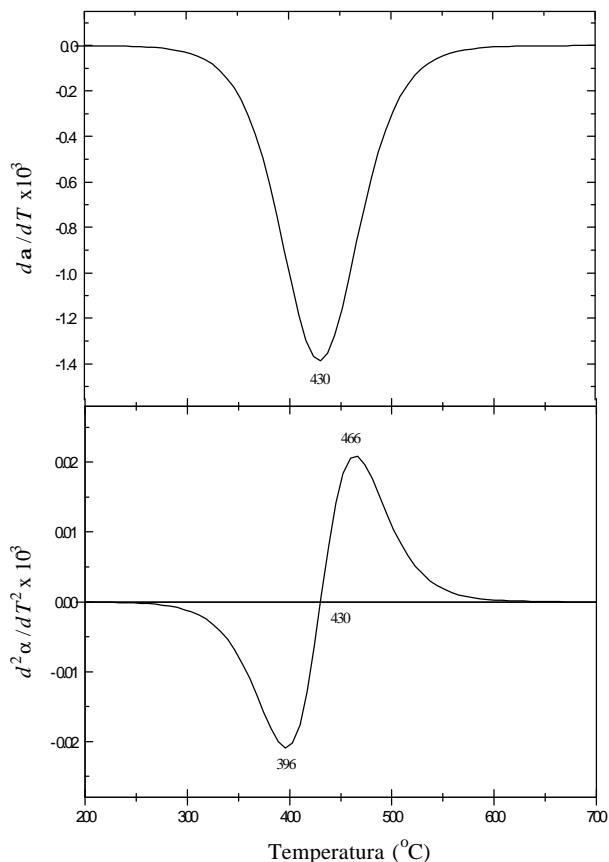


Fig. 3 Primera y segunda derivadas de la curva logística representativa del comportamiento de a_{eff} vs T .

Estos resultados indican que la temperatura del proceso de unión determina la capacidad de difusión de

calor en estos sistemas. En el proceso de unión, el calentamiento de las dos obleas bajo una presión uniaxial conduce a la difusión de un tipo de material hacia el otro [5, 6], lo cual provoca que al final del proceso de unión la interface entre las obleas tenga una estructura amorfa con un espesor característico creciente con la temperatura de calentamiento. Medidas de difracción de rayos x en la interface de muestras de GaAs/GaSb unidas mediante la técnica de fusión demuestran la ocurrencia de la difusión de átomos de Sb hacia la oblea de GaAs [14].

De acuerdo a lo anterior, podemos considerar que las características de la interface de nuestras muestras de GaAs/GaSb es determinante en el flujo de calor en estos sistemas de dos capas. El valor de la difusividad térmica efectiva depende no solo de los parámetros térmicos de las capas constituyentes, sino también de las propiedades térmicas de la interface. De la ecuación (8) es posible obtener una medida de los parámetros térmicos en la interface a partir de los valores obtenidos de la difusividad térmica efectiva y los valores conocidos de las dos capas componentes [15]. En la tabla III se muestran los resultados obtenidos de la aplicación de este procedimiento. Estos resultados corresponden al comportamiento decreciente de a_{eff} mostrado en la fig. 2.

Tabla III. Parámetros térmicos calculados de la interface del conjunto de muestras de GaAs/GaSb.

Muestra	$R (10^{-3})$ $\text{cm}^2\text{K/W}$	$C (10^{-3})$ $\text{J/cm}^2\text{K}$	t_d ms	e $\text{J/Kcm}^2\text{s}^{1/2}$
2	8.2	3.6	0.029	0.66
3	6.7	2.7	0.018	0.63
4	43	17	0.73	0.63
5	62	18	1.1	0.53

CONCLUSIONES

Hemos presentado un estudio de la difusión de calor en sistemas de dos capas de GaAs/GaSb formados por la unión de obleas mediante proceso térmico que demuestra que el análisis de la difusividad térmica nos permite conocer el grado de importancia que desempeña la interface en el transporte de calor a través de sistemas de dos capas. Por último, se presenta un estudio de la analogía térmica y eléctrica para sistemas de dos capas y se propone su generalización para el estudio de las propiedades térmicas en la interface de estos sistemas. Esta metodología se aplicó a la serie de muestras GaAs/GaSb obteniéndose resultados que corresponden a la tendencia mostrada por los valores de la difusividad térmica efectiva de las muestras.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue parcialmente financiado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), México. Los autores agradecemos a Patricia Rodríguez Frago, Marcela Guerrero Cruz y Esther Ayala Maycotte por su asistencia técnica.

REFERENCIAS

- [1] A. Rosencwaig, *Photoacoustic and Photoacoustic Spectroscopy*, John Wiley & Sons Inc. (1980) New York.
- [2] A. Calderón, J. J. Alvarado Gil, Yu. G. Gurevich, A. Cruz-Orea, I. Delgadillo, H. Vargas and L. C. M. Miranda., *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5022-5025 (1997).
- [3] A. Calderón, R. A. Muñoz Hernández, S. A. Tomás, A. Cruz Orea and F. Sánchez Sinencio, *J. Appl. Phys.* **84**, 6327-6329 (1998).
- [4] A. Cruz-Orea, I. Delgadillo, H. Vargas, A. Gudiño Martínez, E. Marín, C. Vázquez López, A. Calderón and J. J. Alvarado-Gil. *J. Appl. Phys.*, **79**, 8951-8954 (1996).
- [5] Z.L.Liau and D.E. Mull, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 737 (1990).
- [6] F. A. Kish, *Appl. Phys. Lett* **67**, 2060 (1995).
- [7] A. Rosencwaig and A. Gersho, *J. Appl. Phys.* **47**, 64 (1976).
- [8] R. A. Muñoz Hernández, PhD. Thesis, Centro de Investigación y Estudios Avanzados del IPN, México D. F., México (1998).
- [9] N. F. Leite and L. C. M. Miranda, *J. Mat. Sci.* **27**, 5449 (1992)
- [10] A. M. Mansanares, H. Vargas, F. Galembeck, J. Bujis and D. Bicanic, *J. Appl. Phys.*, **70**, 7046 (1991)
- [11] A. M. Mansanares, A.C. Bento, H.Vargas, N.F.Leite and L.C. M.Miranda, *Physical Review B* **42**, 4477 (1990).
- [12] H.S.Carslaw and J.C. Jager, *Conduction of Heat in solids*, 2nd Ed. Oxford Science Publications., New York 1989.
- [13] Tetsu Tominaga and Kenichi Ito, *Jap. J. Appl. Phys.* **27**, 2392 (1988).
- [14] J. F. Sánchez Ramírez, Tesis de Maestría, Instituto de Física BUAP, Puebla, Pue., México (1999).
- [15] Y. S. Touloukian, R. W. Powell, C. Y. Ho and M. C. Nicolaou, *Thermophysical properties of matter* (Plenum, New York 1970).