



Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Facultad de Ciencias

Doctorado en Ciencias Aplicadas

Diseño de Nanodispositivos 2DEG para Detección en la Región THz

Tesis doctoral

Irving Eduardo Cortes Mestizo

Directores:

Dr. Víctor Hugo Méndez García

Dr. Edgar Briones

Octubre 2017

A mi familia

Contenido:

Contenido.	i
Resumen.	iii
Agradecimientos.	v
Lista de abreviaciones.	vi
Lista de figuras.	ix
Capítulo I: Introducción.	1
I.I Heteroestructuras de alta movilidad.	3
I.II La superficie III-V.	6
I.III Superficie y THz.	10
I.III.I Generación de radiación THz.	10
I.III.II Detección de radiación THz.	11
I.IV Motivación y objetivos.	14
Capítulo II: Bases experimentales y numéricas.	16
II.I La técnica de MBE.	16
II.I.II Crecimiento de heteroestructuras por MBE.	17
II.II. Técnicas ópticas para caracterizar la superficie.	20
II.II.I. Espectroscopia fotorreflectancia.	20
II.II.II. Raman.	25
II.III. Método numérico de análisis.	27
Capítulo III: resultados del estudio de superficies y heteroestructuras.	30
III.I Heteroestructuras usadas en este estudio.	32
III.II Evaluación de los efectos superficiales.	34
III.II.I Control de los efectos superficiales por la capa de dopaje.	35
III.II.II Control de los efectos superficiales por pasivación.	39
III.II.III Control de los efectos superficiales por temperatura.	41
III.III Efecto de N_s sobre el espectro de PR.	43
III.IV Efecto de D_R en sistemas D-2DEG.	46

Capítulo IV: Resultados del estudio de dispositivos self-switching diode.	51
IV.I Parámetros geométricos y de análisis.	51
IV.II Principio de operación del SSD.	53
IV.III Respuesta I-V.	56
IV.IV. Consideraciones sobre el diseño de SSD.	58
IV.IV.I Ancho del canal.	58
IV.IV.II Largo del canal.	60
IV.IV.III Grosor de las trincheras.	62
IV.V. Geometría y sensibilidad.	63
IV.VI. Rectenna basada en tecnología SSD.	66
IV.VII. Estrategias de optimización del SSD.	71
IV.VIII. Rectificador de onda completa SOI.	74
Capítulo V: Conclusiones y perspectiva a futuro.	78
Referencias.	81
Productos generados.	85
Publicaciones en revistas dentro del JCR.	85
Presentaciones en congresos internacionales.	85
Presentaciones en congresos nacionales.	87

Resumen:

Con la reducción a escala nanométrica de los dispositivos semiconductores, la interfaz semiconductor-ambiente se vuelve de vital importancia para predecir el comportamiento óptico y eléctrico de estos. Al afectarse la relación entre el volumen total del dispositivo y el volumen ocupado por los átomos de la superficie se deben considerar los efectos de la densidad de estados superficiales disponibles para ser ocupados por electrones provenientes de semiconductor. La redistribución de portadores ocasionada por los efectos de la superficie abre la posibilidad de desarrollar una ingeniería de estados superficiales para dispositivos semiconductores, donde se modulen las propiedades opto-electrónicas con el llenado/vaciado de dichos estados.

Esta tesis aborda la problemática de entender, predecir y manipular a los estados superficiales con el propósito de mejorar las propiedades de transporte que presentan las heteroestructuras AlGaAs/GaAs. El conocimiento adquirido sobre la relación entre la superficie y las propiedades de la heteroestructura ofrece un camino para entender y mejorar el desempeño rectificador de los dispositivos denominados *self-switching diodes*; tecnología donde la modulación de las propiedades de la superficie es aplicada. El interés en los *self-switching diodes* radica en el bajo valor de voltaje umbral necesario para encenderlo y en que son capaces de alcanzar frecuencias de corte en el régimen THz, características derivadas de la velocidad de recombinación de los estados superficiales.

En este trabajo se presenta la influencia que tiene la región de agotamiento superficial en las heteroestructuras AlGaAs/GaAs mediante análisis de espectros de fotorreflectancia y Raman. Se explora un método para determinar la extensión de la región de agotamiento dentro de las heteroestructuras AlGaAs/GaAs utilizando los modos LO y L- presentes en el espectro Raman de las heteroestructuras. Se encontró que el proceso de modulación de fotorreflectancia no se lleva a cabo cuando los estados superficiales están parcialmente llenos o vacíos, reflejándose en el espectro de fotorreflectancia como una ausencia de oscilaciones en la región espectral de 1.42 a 1.8 eV ya que no ocurre la suficiente foto-generación de portadores para inducir la modulación necesaria para producir oscilaciones Franz-Keldysh. Por tanto, al analizar los espectros de fotorreflectancia es necesario tener muy en cuenta las propiedades superficiales ya que de no considerarlas se podría recaer en interpretaciones incorrectas.

El análisis adecuado de los espectros de fotorreflectancia permite estimar si existe la formación de un gas bidimensional de electrones. Esto es principalmente útil cuando se trabaja con heteroestructuras diseñadas para contener doble gas bidimensional de electrones, donde usualmente una interfaz de uno de los gases bidimensionales es colocada cerca de la superficie. Esto permite afrontar la problemática originada en las deficiencias que existen en los diseños de heteroestructuras planeadas para contener un doble gas bidimensional de electrones. Aportándose el resultado de que si la posición del pozo potencial donde se alojará un gas bidimensional de electrones se encuentra dentro de la extensión de la región de agotamiento, no ocurrirá la formación de éste. Este resultado ayudará en la decisión de la secuencia de capas que deben de conformar una heteroestructura de esta clase para garantizar que los efectos superficiales afecten en menor medida la densidad y movilidad de portadores en el pozo.

En la segunda parte de este trabajo se presenta un análisis numérico de las características corriente-voltaje de los self-switching diodes. Se presentan guías de diseño con lo que se espera incrementar la eficiencia de estos dispositivos, obteniendo un voltaje de umbral de cero volts. Se determinó que la geometría del diodo, la carga en los estados superficiales de las trincheras y el material dieléctrico en ellas son las que determinan principalmente la respuesta en corriente directa del self-switching diode. Se explica por primera vez de manera teórica su principio de operación de forma detallada al analizar la distribución de portadores en el nanocanal para cada régimen de polarización.

Finalmente, se investiga nuevamente mediante simulaciones el comportamiento de los *self-switching diodes* cuando son acopladas a una antena tipo espiral cuadrado y a una antena tipo espiral de Arquímedes. El análisis de la eficiencia de conversión de estos tipos de rectennas indican que menos del 0.04% de la energía captada por la antena será convertida a una corriente directa aprovechable. Esto se debe al gran desacople entre la baja impedancia de la antena en resonancia y el alto valor exhibido por el rectificador. Sin embargo, los dispositivos rectificadores con geometría tipo L y tipo V presentan interesantes propiedades a cero volts como una sensibilidad de al menos 20 V^{-1} lo que es superior a la tecnología empleada hoy en día en estos sistemas.

Agradecimientos:

Quisiera expresar mi más sincero agradecimiento a todos aquellos que han contribuido al desarrollo de esta Tesis:

A los directores de la misma, Dr. Víctor Hugo Méndez García y Dr. Edgar Briones por su entrega y ayuda a nivel científico, así como por el trato amigable que me han brindado. Sus talentos y cualidades han sido mis modelos a seguir durante el desarrollo de este trabajo.

A los Doctores Ravindranath Droopad, Cristo Yee Rendon y Luis Zamora Peredo, por haber contribuido a la parte experimental de este trabajo al ofrecer sus laboratorios de manera siempre atenta.

A mis colegas que se han convertido en amigos, Dra. Leticia Espinosa, Dr. Alejandro Cisneros, Dr. Ángel Espinoza, Dr. Eric Eugenio, y Dr. Antonio del Rio. A los Maestros Christian Mercado, Alfredo Belio y todos los miembros de SQS.

A los revisores de esta tesis, Dr. Máximo López, Dr. Esteban Cruz y Dr. Hugo Navarro.

Finalmente y no menos importante, un agradecimiento eterno a mi familia y amig@s que han tenido que sobrellevar las secuelas de mi pasión por esta profesión al convertirse en pilares sobre los que me he apoyado en los momentos más difíciles.

Lista de abreviaciones:

- 1D: Una dimensión.
2D: Dos dimensiones.
2DEG: Gas Bidimensional de Electrones.
3D: Tres dimensiones.
AS: Antena tipo espiral de Arquímedes.
CS: Antena tipo espiral Cuadrado.
d: Longitud de penetración del láser en el material.
D-2DEG: Doble Gas Bidimensional de electrones.
DIW: Agua desionizada.
Dr: Región de agotamiento.
E: Campo eléctrico.
E_{Al}: Campo eléctrico en las capas de AlGaAs.
E_c: Energía de la banda de conducción.
E_f: Energía de Fermi.
E_g: Energía de banda prohibida.
E_{int}: Campo eléctrico interno.
E_s: Campo eléctrico en la superficie
EtOH: Etanol.
E_v: Energía de la banda de valencia.
FKO: Oscilaciones Franz–Keldysh.
FKOs: FKO producidas al modular el E_s.
HEMT: Transistor de alta movilidad de electrones.
IPA: Alcohol isopropílico.
I_{sc}: Corriente en corto circuito de una antena.
I-V: Corriente-Voltaje
L: Modo acoplado fonón-plasmón.
L₀: Largo del canal.
LO: Modo longitudinal óptico.
MBE: Epitaxia por haces moleculares.
MOVCD: *Metalorganic chemical vapor deposition*.
N: Densidad de portadores foto-generados.

n: Densidad volumétrica de electrones.
N_s: Estados superficiales
n_{sl}: Densidad de carga en la superficie de las trincheras.
n_{ss}: Densidad de carga en la superficie.
N_{ss}: Densidad de estados superficiales
N_v: No-linealidad.
PR: Fotorreflectancia.
q: Carga del electrón.
QW: Pozo cuántico.
R: Coeficiente de reflexión.
RS: Espectroscopía Raman.
R_v: Resistencia diferencial.
SRH: Shockley-Read-Hall
SSD: *Self-Switching Diode*
TCAD: *Technology Computer Assisted Design*.
TDS: Espectroscopia THz en dominio del tiempo
THz: Tera Hertz
V_{oc}: Voltaje en circuito abierto de una antena.
V_{ss}: Voltaje en la superficie
V_{TH}: Voltaje umbral.
W: Ancho del canal.
W_H: Grosor de la trinchera horizontal.
W_V: Grosor de la trinchera vertical.
X: Concentración molar de Aluminio.
Z_A: Impedancia de las antenas.
α: Coeficiente de absorción.
α₀: Ángulo de inclinación.
Γ: Coeficiente de reflexión
γ₀: Sensibilidad del diodo.
γ_{50Ω}: Sensibilidad efectiva a 50Ω
δ-doping: Dopaje tipo delta.
ε: Función dieléctrica del semiconductor.
ε_r: Constante dieléctrica.
η_e(%): Eficiencia de conversión.

λ : Longitud de onda de modulación.

ρ : Densidad de carga en el 2DEG litografiado,

Φ : Barrera de potencial en la superficie.

Φ_i : Barrera de potencial de la superficie bajo iluminación.

$\hbar\Omega$: Energía electro-óptica.

Lista de figuras:

<i>Figura 1.1.</i> Secuencia de capas típica para una heteroestructura con un solo 2DEG creado en la interface AlGaAs/GaAs.	4
<i>Figura 1.2.</i> Diagrama de bandas de un pozo triangular donde el 2DEG es alojado.	6
<i>Figura 1.3.</i> Diferentes condiciones para la superficie de un semiconductor. (a) Superficie ideal. (b) Superficie real. (c) Superficie pasivada.	7
<i>Figura 1.4.</i> Perfil de la banda de conducción (E_C), banda de valencia (E_V) y nivel de fermi (F_F) para una superficie (a) ideal, (b) real y (c) pasivada.	9
<i>Figura 1.6.</i> Imagen típica de un SSD, se observa la distribución de las trincheras en el dispositivo y la dirección de flujo de corriente. ²⁰	12
<i>Figura 1.7.</i> En área sombreada se representa la extensión de la D_R dentro del SSD para: (a) 0V, (b) $v < 0$, polarización inversa. (c) $V > 0$ polarización directa. ²¹	12
<i>Figura 1.8.</i> Respuesta (a) DC para dispositivos SSD con diferentes valores de ancho de canal ¹⁹ y (b) en AC para dispositivos SSD con diferentes longitudes de canal. ²⁴	13
<i>Figura 2.1.</i> Diagrama de un sistema MBE para materiales III-V.	17
<i>Figura 2.2.</i> Espectro RHEED para una superficie (a) con impurezas y (b) una vez que ha ocurrido la desorción superficial en un sustrato de GaAs (100).	18
<i>Figura 2.3.</i> Tiempo de crecimiento necesario para realizar la heteroestructura diseñada considerando una razón de crecimiento de 0.5 y 0.6 μ /hora para GaAs y $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, respectivamente.	19
<i>Figura 2.4.</i> Arreglo experimental de un sistema de PR. ²⁹	21
<i>Figura 2.5.</i> Modulación del campo eléctrico superficial causado por la foto-generación de pares electrón-hueco. ²⁹	21
<i>Figura 2.6.</i> Longitud de penetración para el AlGaAs y GaAs en función de la energía del láser. ³⁴	23
<i>Figura 2.7.</i> Espectro típico de fotorreflectancia para heteroestructuras AlGaAs/GaAs.	24
<i>Figura 2.8.</i> Espectro Raman de una heteroestructura AlGaAs/GaAs presentada en Ref. 40.	26
<i>Figura 2.9.</i> Proceso TCAD donde se ilustra un ejemplo de parámetros de entrada y salida.	27
<i>Figura 2.10.</i> (a) Heteroestructura InGaAs/InAlAs donde el concepto de SSD ha sido probado ⁴⁶ y (b) el comportamiento de la banda de conducción.	28
<i>Figura 2.11.</i> (a) 2DEG con la geometría correspondiente a un L-Shape SSD, (b) comparación entre estudios publicados ²⁴ y el modelo (TCAD) obtenido en este trabajo.	29
<i>Figura 3.1.</i> (a) Heteroestructura analizada por PR donde se muestra la penetración de cada longitud de onda del láser. (b) Espectro de PR tomado utilizando láseres con diferentes longitudes de onda.	30

Figura 3.2. Simulación de la heteroestructura de la Fig. 3.1(a) donde se muestra el comportamiento de la banda de conducción para la superficie ideal y la real.	32
Figura 3.3. Heteroestructuras usadas en este trabajo. Las muestras A han sido diseñadas para presentar un 2DEG, mientras que las muestras M deberán de presentar un D-2DEG.	32
Figura 3.4. Espectro de PR para A1 y A2.....	35
Figura 3.5. Espectro de PR para una muestra de GaAs donde un dopaje tipo delta ha sido colocado a la profundidad indicada para cada espectro en relación a la superficie. ⁴⁸	36
Figura 3.6. Espectro Raman para las heteroestructuras A, se observa la diferente intensidad de los modos presentes.	37
Figura 3.7. Simulación de la banda de conducción y la distribución de portadores (n) para las muestras A1 y A2. “ δ ” representa la posición de la capa dopada, el área sombreada indica la extensión de D_R	38
Figura 3.8. (a) RS de A2 antes y después del proceso de pasivación. (b) D_R Vs solvente utilizado en el proceso de pasivación, ϵ_s indica la constante dieléctrica del solvente.	39
Figura 3.9. PR de A2 tomado con un láser de 325nm, las FKO que dominan el espectro en el rango de 1.45 a 1.8 eV no son apreciadas después de la pasivación.	40
Figura 3.10. Fotorreflectancia para una muestra de GaAs con un δ -doping a 100nm de la superficie en función de la temperatura. ⁴⁸	41
Figura 3.11. Espectro de PR para A2 a diferentes temperaturas tomado con un láser de $\lambda=405\text{nm}$	42
Figura 3.12. Espectros de PR tomados a 300k para las heteroestructura tipo M.....	47
Figura 3.13. PR medido con una pequeña línea de modulación. Las oscilaciones asociadas con la formación del 2DEG en la muestra M2 es presentada con una área sombreada.	48
Figura 3.14. Simulación del perfil de la E_c para las muestras tipo M, el área sombreada indica la extensión de D_R	49
Figura 4.1. Topología bidimensional de (a) L-Shape y (b) V-Shape SSD. Los parámetros variados en este estudio son: L_0 , largo del canal. W , ancho del canal, W_V y W_H refieren al grosor de la trinchera vertical y horizontal, respectivamente. α_0 indica el ángulo de inclinación.	52
Figura 4.2. Distribución de electrones (en escala logarítmica) para los SSD con la geometría mostrada en Fig. 4.1. El L-Shape es analizado para las polarizaciones (a) $v=0$, (c) $v = -0.5$ y (e) $v= +0.5$; mientras que el V-Shape es mostrado en (b) $v=0$, (d) $v = -0.5$ y (f)= $+0.5$. Las líneas de las cruces representan 100nm de longitud cada una.	54
Figura 4.3. Simulación del potencial interno a lo largo del canal del SSD para las polarizaciones indicadas.	56
Figura 4.4. Simulación de un barrido en DC de -0.5 a 0.5v de los SSD mostrados en Fig. 4.1. (a) curva I-V; (b) Resistencia diferencial; (c) No-linealidad; (d) Sensibilidad.	57
Figura 4.5. Comportamiento I-V para los SSD de la Fig. 4.1 cuando únicamente se ha modificado el valor de W para (a) L-Shape y (b) V-Shape. En (c) se muestra las curvas I-V para varios ángulos de apertura del canal en los V-shapes. Los insets muestran el comportamiento de R_V y de K_V para las variaciones propuestas.	59

Figura 4.6. Respuesta DC para los SSD cuando el largo de canal (L_0) es modificado. (a) L-Shapes; (b) V-Shapes. En los insets se muestra el comportamiento de R_v y K_v	61
Figura 4.7. Simulación de la respuesta DC del V-Shape cuando W_v es variado de 5 a 25nm. En el inset se muestra la respuesta I-V para el L-Shape.	62
Figura 4.8. Característica I-V de (a) L-Shape y (b) V-Shape SSD para variaciones sobre W_H . En los inset la respuesta de R_v y K_v es mostrada para esta modificación.	63
Figura 4.9. Sensibilidad de los SSD en función de la variación de los parámetros geométricos de la fig. 4.1 cuando uno es variado y los demás son mantenidos fijos para (a) L-Shape y (b) V-Shape.	64
Figura 4.10. Sensibilidad de los SSD en función de la variación de los parámetros geométricos de la Fig. 4.1 cuando se considera acoplados a una fuente de 50Ω para (a) L-Shape y (b) V-Shape.	65
Figura 4.11. γ_0 y V_{TH} en función de la variación de W de la Fig. 4.1.	66
Figura 4.12. Representación esquemática de las antenas de banda ancha propuestas en este trabajo: (a) Espiral cuadrado y (b) Espiral de Arquímedes.	67
Figura 4.13. Impedancia de entrada en función de la frecuencia para los diseños de las antenas mostradas en la Fig. 4.12.	68
Figura 4.14. Modelo de circuito equivalente para una rectenna.	69
Figura 4.15. Desempeño de la rectennas para recolectar la energía electromagnética de una fuente de $1w/cm^2$: (a) voltaje rectificado y (b) potencia eléctrica en DC.	70
Figura 4.16. Eficiencia de conversión óptica a eléctrica para la rectenna propuesta.	71
Figura 4.17. Arreglo de SSD en paralelo (a) simulado para 1,2,4,8 y 16 elementos con los parámetros geométricos de la Fig. 4.1 para cada SSD utilizado (b).	72
Figura 4.18. Comportamiento I-V al cambiar el material dieléctrico dentro de las trincheras. El comportamiento del voltaje umbral es mostrado en el inset.	73
Figura 4.19. Simulación del comportamiento I-V para el SSD mostrado donde se ha variado la densidad de carga superficial en las trincheras.	74
Figura 4.20. (a) diseño esquemático de un L-Shape SSD fabricado en un sustrato de Silicio basado en tecnología SOI. (b) Dimensiones del SSD utilizado en este análisis.	75
Figura 4.21. Simulación del comportamiento eléctrico del SSD mostrado en la Fig. 4.20(b) cuando se varía (a) el ancho del canal, W , y el grosor de la capa activa de silicio, Z , (b).	75
Figura 4.22. (a) Diseño esquemático del SSD considerado como un rectificador de media onda y onda completa. (b) Respuesta de la simulación en modo transitorio para determinar la forma de onda de la corriente a la perturbación de entrada.	76
Figura 4.23. Simulación de la respuesta en frecuencia para la corriente de fuga del SSD de la Fig. 4.20 cuando se ha modificado el largo del canal, L , y el grosor vertical de las trincheras, W_v	77

Capítulo I

Introducción.

La técnica de MBE, del inglés *Molecular Beam Epitaxy*, en conjunción con el avance de la ingeniería de bandas ha permitido el desarrollo de dispositivos semiconductores fundamentados en estructuras multicapa. Un ejemplo de ello es el desarrollo del HEMT, siglas en inglés del transistor de alta movilidad de electrones, creado por Takashi Mimura y demostrado por primera vez en los laboratorios Fujitsu en 1980.¹ El HEMT fue perfeccionado con el uso de heteroestructuras basadas en AlGaAs y GaAs donde un gas bidimensional de electrones (2DEG, *two-dimensional electron gas*) ocurre en la interface AlGaAs/GaAs, dando origen a la alta movilidad y confinamiento de los portadores necesarios en el concepto de HEMT.

El uso de heteroestructuras que contienen un 2DEG permitió trascendentales estudios en física del estado sólido,² avances en dispositivos usados en electrónica de alta frecuencia (mayor a 10^6 Hz), perfeccionamiento de láseres semiconductores,³ etc. Debido a lo anterior, a lo largo de la historia y en proyecciones al futuro⁴ el mercado de dispositivos basados en heteroestructuras se ha extendido de forma constante por lo que es necesario incrementar la movilidad de portadores en las heteroestructuras para satisfacer las demandas tecnológicas presentes y futuras.

En la búsqueda de más eficientes y rápidos dispositivos electrónicos y optoelectrónicos, el crecimiento por MBE de estructuras multicapa continúa mejorando mediante la optimización del proceso y la calidad de los materiales usados en la epitaxia. El diseño de la secuencia de capas se vuelve de vital importancia en la optimización de los heteroestructuras cuando se busca mejorar la movilidad electrónica. En esta situación es necesario determinar las propiedades y características de cada una de las capas que conforman el dispositivo y cómo, de manera individual, afectan las propiedades del sistema completo.

La naturaleza multicapa de las heteroestructuras hace complicado el análisis individual de las películas de las que están formadas, algunas incluso de unos cuantos nanómetros de grosor. Mediante Efecto Hall Clásico es posible determinar la concentración y movilidad de los portadores en la capa más conductora del sistema.⁵ Sin embargo, determinar la contribución a la medición de las capas restantes se vuelve una tarea difícil. Una manera de determinar las propiedades de cada capa de manera no destructiva se obtiene al utilizar espectroscopías como fotorreflectancia (PR), Raman (RS) y fotoluminiscencia cuando son adecuadamente implementadas bajo una cuidadosa elección de los parámetros de medición.

Una de las capas menos estudiadas en las heteroestructuras es la capa superficial donde el material semiconductor está en contacto con el medio ambiente, sin embargo el mal diseño de esta capa puede conducir a efectos indeseables en el desempeño óptico o electrónico de las heteroestructuras debido a la interrupción de la simetría de la estructura cristalina, es decir, debido a la existencia de enlaces libres en la superficie. Entonces, la optimización de las capas más cercanas a la superficie en dispositivos multicapa juega un papel determinante en su comportamiento.

Recientemente se ha demostrado el efecto que tienen los átomos superficiales sobre la distribución y movilidad de los portadores en el 2DEG,⁶ así como en su formación.⁷ El estudio de la superficie se convierte en un tópico obligatorio para acrecentar el desempeño deseado en dispositivos semiconductores, especialmente aquellos de dimensiones nanométricas donde los átomos superficiales conforman un porcentaje importante de la estructura completa. Mediante el análisis de las propiedades superficiales y su efecto sobre el desempeño del dispositivo es posible aplicar la física de superficies e interfaces a diseños donde se manipulen conceptos como estados superficiales, carga en la superficie y región de agotamiento con la intención de desarrollar ingeniería de estados superficiales.

La primera parte del presente trabajo consiste en analizar el efecto de la superficie sobre heteroestructuras basadas en AlGaAs/GaAs. Las muestras fueron diseñadas para contener al menos un 2DEG y se fabricaron mediante MBE. Del análisis experimental se obtienen parámetros que son empleados en simulaciones numéricas, las cuales permitirán el diseño de un dispositivo rectificador (diodo) capaz de operar en el rango de frecuencia que comprende radiación de 300 GHz a 10 THz, que corresponde a longitudes de onda de 1 a 0.03 mm, conocida como región de los Tera Hertz (THz), en la segunda parte de esta tesis.

La región de THz se ubica entre de las microondas (electrónica) y la región del infrarrojo (fotónica) lo que ha dificultado que se desarrollen tecnologías de detectores y generadores compactas y económicas provocando que muchas de las aplicaciones de esta proporción del espectro queden sin utilizar, pero al mismo tiempo abren la posibilidad de estudios novedosos para explotarlo. *BCC research*,⁸ estima el mercado de dispositivos que trabajan en THz será de \$570 millones de dólares americanos para 2021 lo cual se traduce en una oportunidad de negocio y en un reto científico el producir dispositivos que trabajan en una región donde la tecnología convencional ha fracasado. El interés en la región de los THz radica gran parte en su habilidad de penetrar dentro de la materia sin provocar daños, como no lo haría en los organismos vivos los rayos X, abriendo aplicaciones potenciales en la detección de enfermedades, armas y fallas en dispositivos.

I.I Heteroestructuras de alta movilidad.

Las heteroestructuras de AlGaAs/GaAs con dopaje modulado han sido la estructura multicapa más útil, por ejemplo, para estudios fundamentales en el Efecto Hall Cuántico⁹ y en la fabricación del HEMT,¹⁰ dispositivo que funciona en frecuencias donde la electrónica convencional basada en Silicio ha fracasado. Para obtener excelentes propiedades en el 2DEG se debe de tener un cuidado especial en el diseño de la secuencia de capas que conforman la heteroestructura donde la relación entre sus espesores, dopaje y la densidad de portadores ha sido objeto de constante mejoramiento.

En la Fig. 1.1 se esquematiza la secuencia típica de capas que conforman una heteroestructura basada en AlGaAs/GaAs. Cada capa es de vital importancia para obtener una movilidad útil para una determinada aplicación. El desarrollo de este tipo de estructuras ha sido posible mediante dos técnicas que permiten un crecimiento ordenado y periódico de la estructura cristalina: MOVCD (*metalorganic chemical vapor deposition*) y MBE, siendo esta última abordada en sección II.I.

Las heteroestructuras generalmente son fabricadas utilizando un sustrato de GaAs (100), con la intención de obtener el menor efecto de estrés en las capas superiores. La capa colchón de GaAs se deposita lo suficientemente gruesa para evitar que cualquier imperfección del sustrato afecte los subsiguientes depósitos, además servirá para alojar espacialmente al 2DEG por lo que la calidad cristalina es de suma importancia para la movilidad de los portadores.

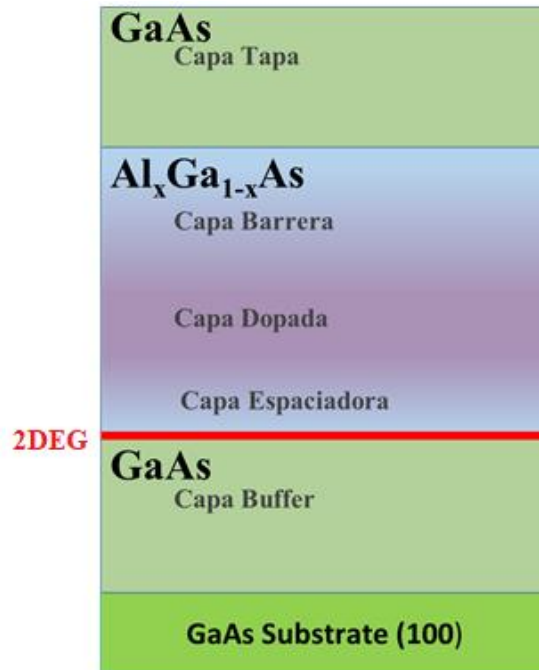


Figura 1.1. Secuencia de capas típica para una heteroestructura con un solo 2DEG creado en la interfase AlGaAs/GaAs.

Para propiciar la formación del 2DEG se debe de utilizar un material con una energía de banda prohibida, E_g , diferente al del GaAs. En este ejemplo se utiliza $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ debido a que el valor del E_g de este material puede controlarse con la fracción molar presente del Aluminio, X , y la diferencia entre constantes de red entre el GaAs y el AlAs es menor al 3%, por lo que se desprecian los efectos de desacople de red. La primera película depositada utilizando AlGaAs es la espaciadora la cual es ubicada sobre la capa colchón, seguida por la capa dopada que en ocasiones puede ser combinada con la barrera también producida con AlGaAs.

El diseño adecuado de la espaciadora es el corazón de la técnica de dopaje modulado propuesta por Dingle.¹⁰ Esta capa juega un papel muy importante en las propiedades del 2DEG ya que permite incrementar la movilidad de los electrones mediante la reducción de los mecanismos de scattering y controlar la población de portadores en el 2DEG. La espaciadora debe de estar planteada considerando el tipo de dopaje a utilizar y la densidad de portadores que este contribuirá. Si el diseño de una heteroestructura incluye una espaciadora con exceso de dimensiones producirá una baja concentración de portadores en el 2DEG, si es muy delgada producirá que el 2DEG tenga una abundancia de portadores con movilidad reducida y un gran efecto del campo eléctrico sobre el 2DEG.

Los tipos de esquemas de dopaje más utilizados en las heteroestructuras son el dopaje tipo delta (δ -doping) y el tipo lineal.¹¹ Si el AlGaAs es dopado mediante la evaporación de átomos de silicio de manera que se propicie la formación de media o una monocapa de este material se habla de un δ -doping. En este caso junto con Silicio se está depositando As. Si durante el crecimiento de AlGaAs toda la capa depositada se acompaña con Silicio, entonces, se obtendrá un esquema de dopaje lineal. Un δ -doping se expresa usando unidades de portadores por unidad de área, mientras que para el tipo lineal se expresa portadores por unidad de volumen.

La capa barrera debe de ser lo suficientemente ancha para evitar que el pozo formado en la heterounión colchón-espaciadora sea afectado por otros niveles energéticos, principalmente los presentes en la superficie y los formados por otro pozo en las heteroestructuras multipozo, es decir evitar cualquier tipo de acoplamiento. También el espesor debe considerarse en el diseño de esta capa, ya que debe de ser el adecuado para garantizar que el dopaje provoque que la barrera adquiera las propiedades de un semiconductor tipo-n.

La última capa depositada es la tapa, en esta se utiliza GaAs ya que previene la oxidación del AlGaAs, además debe de considerarse los efectos de los estados superficiales y sus consecuencias. Dependiendo de las aplicaciones, esta capa es dopada tipo-n para facilitar la fabricación de contactos óhmicos, favoreciendo la aleación entre el GaAs y el metal seleccionado.

Un pozo potencial cuadrado es obtenido cuando un material con E_g estrecho (como el GaAs) es colocado entre un material con E_g ancho en comparación con el primero (tal como AlGaAs). En heteroestructuras con dopaje modulado, como es el caso de la Fig. 1.1, el tipo de pozo cuántico (QW , del inglés *quantum well*) formado en esta estructura se conoce como “triangular” debido al perfil que toma la banda de conducción, E_C , a lo largo de la heteroestructura. Un QW adquiere una forma triangular cuando un material de banda estrecha es colocado a una cierta distancia (determinada por la capa espaciadora de un material con un E_g mayor) de la capa dopada, ilustrado en la Fig. 1.2.

Cuando los dos materiales con diferente E_g son colocados juntos ocurre una discontinuidad en el diagrama de bandas del sistema, doblando la E_C por debajo del nivel de Fermi, E_F . Cuando se equilibra el nivel de Fermi, los electrones del AlGaAs pasan hacia el GaAs por difusión, dejando tras de sí iones positivos fijos a los átomos de Silicio, formándose dipolos entre los iones y los electrones produciéndose un doblamiento de las bandas, esto da origen a la formación de un QW .¹²

La discontinuidad entre las bandas de conducción y la banda de valencia puede ser representada por un potencial constante, considerando esto se puede modelar utilizando la ecuación de Schrödinger que al resolverla se obtendrán niveles energéticos dentro del QW que pueden ser llenados por portadores. En el pozo los electrones se mantienen confinados y se mueven solo en un plano paralelo a la heterounión, formándose así lo que se conoce como un 2DEG con una gran movilidad de portadores.

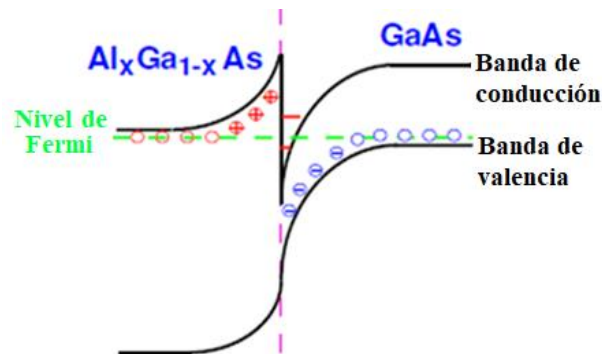


Figura 1.2. Diagrama de bandas de un pozo triangular donde el 2DEG es alojado.

I.II La superficie III-V.

Uno de los principales limitantes a la que se ha enfrentado el desarrollo de dispositivos III-V ha sido las propiedades superficiales ya que la calidad de esta es muy importante en la fabricación de forma reproducible. Lo anterior ocurre debido a la interrupción de la estructura cristalina en la superficie, en esta situación, los átomos superficiales tienen un efecto en las propiedades ópticas y eléctricas del dispositivo. En esta sección, se abordarán los conceptos fundamentales de física de superficie, con el fin de servir de sustento a este trabajo.

Los átomos superficiales presentan menos enlaces completos en comparación con los átomos dentro del material, provocando que la estructura electrónica de una superficie sea diferente a la del resto del material jugando un rol muy importante en el comportamiento de las bandas energéticas; ya que cuando la repetición periódica de la estructura cristalina del semiconductor no se cumple produce una cantidad inaceptable de estados energéticos altos. Estos átomos buscarán mecanismos para reducir el número de electrones desapareados.

En la Fig. 1.3(a) se muestra la estructura cristalina de un semiconductor ideal, en este caso los átomos en la superficie presentan un ordenamiento como si existiera una reproducción de la repetición periódica y que continuara de manera ideal, de manera que después de los últimos átomos del semiconductor existieran átomos virtuales que continúen esta red cristalina. Esta repetición periódica en la superficie no es presentada en la mayoría de los semiconductores debido a ser inestable desde el punto de vista energético.

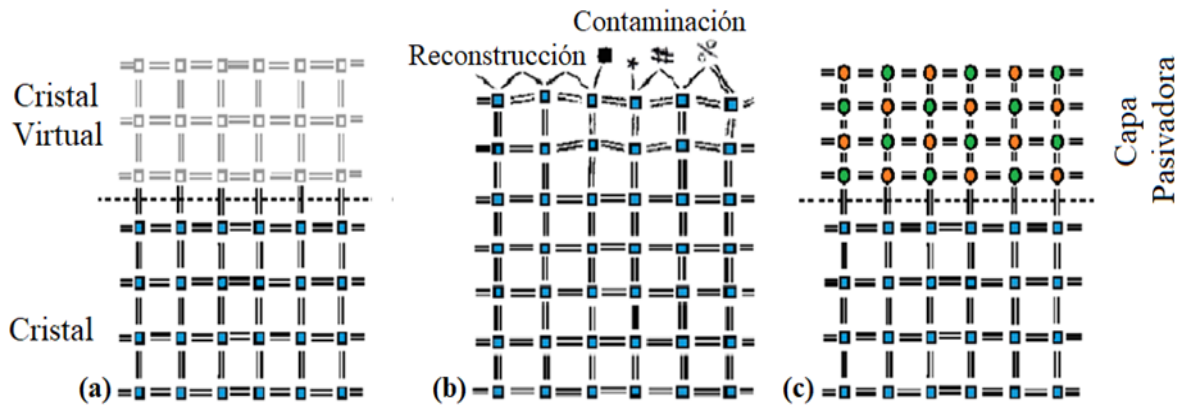


Figura 1.3. Diferentes condiciones para la superficie de un semiconductor. (a) Superficie ideal. (b) Superficie real. (c) Superficie pasivada.

Existen dos mecanismos principales para que una superficie se estabilice, estos son presentados en el caso de la Fig. 1.3(b). Los electrones siempre buscan ocupar los estados energéticos menores, para evitar estar en estados energéticos altos, los enlaces sin completarse tienden a presentar reconstrucción enlazándose entre ellos o bien completarán los enlaces faltantes con contaminantes. Este tipo de superficie es la más común en semiconductores, sin embargo en algunos materiales (como GaAs) no es buena para la fabricación de dispositivos.

En la Fig. 1.3(c) se muestra el uso de una de los métodos más eficiente para corregir los defectos de la superficie: la pasivación. La técnica consiste en depositar una capa de un material cuyos átomos presenten propiedades específicas para que pueda reproducir la estructura cristalina del material en la interface semiconductor-pasivante, evitando la reconstrucción, mientras que al mismo tiempo forma una superficie inerte, con lo que se protege la superficie de la oxidación.

Como se comentó, la repetición periódica de la estructura cristalina interrumpida en la superficie resulta en reconstrucción y reacción con el ambiente. Estos mecanismos implican una modificación en la estructura de bandas del semiconductor (afectándose al aproximarse a la superficie) causado por la existencia de niveles energéticos que dependen de la estructura cristalina del material, denominados estados superficiales (N_s), los cuales, como su nombre lo indica, están localizados en la superficie viéndose reflejados en la estructura de bandas como niveles energéticos dentro del E_g .

La estructura de bandas en una superficie ideal es mostrada en la Fig. 1.4(a), en este caso se presenta la condición de bandas planas ya que la superficie ideal no presenta N_s . El caso de la superficie real es exhibido en la Fig. 1.4(b), se observa que existen N_s con una menor energía que la banda de conducción. El número de estados superficiales por área (nombrado como densidad de estados superficiales, N_{ss}) es dependiente del número de átomos por unidad de área de la superficie. Estos estados pueden estar compuestos por estados energéticos que en condiciones sin frontera pertenecerían a las bandas de conducción o valencia.

Los N_s llenos tienen portadores que en principio ocupan un nivel energético menor que su estado basal, este fenómeno distingue dos tipos de N_s .¹³ Los estados tipo donador se distinguen si al estar ocupados presentan una densidad de carga neutra y al estar vacíos presenta una carga positiva. Si un estado al ser ocupado adquiere carga negativa y al estar vacío presenta carga neutra se considera del tipo aceptor. Cuando electrones llenan a un estado tipo aceptor originan que en la superficie se presenta un aglomeración de electrones de unos cuantos angstroms de espesor por lo que se puede considerar como una distribución de carga negativa tipo hoja, es decir, una densidad de carga superficial (n_{ss} , en cm^{-2}).

Para los semiconductores intrínsecos, la cantidad de electrones que ocupan un N_s es igual al número de electrones que fueron removidos de su estado basal. A fin de mantener la neutralidad de la carga, se crea una región de carga positiva dentro del cristal con carga igual a la carga superficial pero de signo contrario (positiva para un material tipo-n) y se nombra región de agotamiento o depleción, D_R . La carga en D_R es debida a los huecos que dejaron atrás los electrones de la banda de conducción que ahora llenan los estados superficiales. Como se explicó, la n_{ss} es localizada apenas en unos cuantos parámetros de red en la superficie, formando un plano de electrones en cambio D_R puede medir varias decenas de parámetros de red dentro del semiconductor presentando una carga de $n_{sc} = -n_{ss}D_R$.

La distribución de carga en la superficie es gobernada por la ecuación de Poisson.¹⁴ El campo eléctrico en la superficie es:

$$E_S = -\frac{n_{sc}D_R}{2\varepsilon}, \quad (\text{Ec. 1.1})$$

donde $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$. El voltaje en la superficie se puede obtener a partir del campo eléctrico y la región de agotamiento ya que

$$V_{SS} = E_S \frac{D_R}{2}. \quad (\text{Ec. 1.2})$$

Conociendo estos valores se puede calcular uno de los fenómenos más importantes que ocurre en la superficie: la formación de una barrera de potencial de valor $\Phi = qV_{SS}$, q es la carga del electrón.

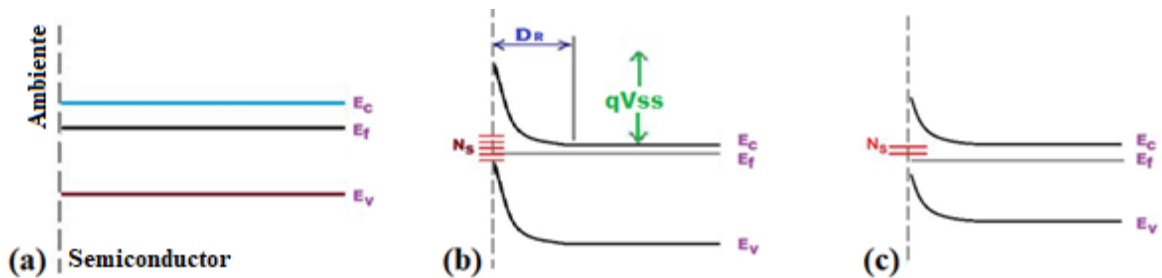


Figura 1.4. Perfil de la banda de conducción (E_C), Banda de valencia (E_V) y nivel de Fermi (E_F) para una superficie (a) ideal, (b) real y (c) pasivada.

En el caso de una superficie pasivada, la capa depositada modificará la N_{ss} , es decir, el tratamiento de pasivación ha reemplazado los antiguos N_s dentro del E_g con nuevos valores provenientes de la capa pasivadora, estando estos nuevos valores energéticos se traducen en un diferente valor de la posición del doblado de las bandas energéticas. Como se puede observar en la Fig. 1.4(c), la presencia de la película pasivadora modifica a la n_{ss} , y a su vez modificando las propiedades de la superficie.

Al pasivar una superficie se obtiene una disminución en la población de los N_{ss} , esto alterará las propiedades de eléctricas de los portadores ya que como se verá la relación entre el volumen de un dispositivo y la región de agotamiento superficial definen el comportamiento óptico y eléctrico de este. Por ejemplo, cuando se reduce la ocupación de los N_s , se obtendrán una mayor cantidad de portadores disponibles para participar en fenómenos de transporte con lo que se optimiza la densidad de corriente del dispositivo junto con su velocidad de operación.

I.III Superficie y THz.

La estructura cristalina de los semiconductores utilizados hoy en día en la fabricación de dispositivos presenta alta calidad y pureza, sin embargo no son perfectos y contienen defectos e impurezas no deseadas incluso en el grueso del semiconductor, también denominado como “*Bulk*”. Estos eventos no deseados producen la presencia de estados energéticos dentro del E_g , siendo nombrados como centros de recombinación. En este tipo de niveles energéticos los eventos de generación/recombinación son llamados como Shockley-Read-Hall (SRH).

Los eventos SRH tienen un alto impacto en el tiempo de vida de los portadores, debiendo ser considerados además de los que ocurren banda a banda. En el diseño de dispositivos semiconductores, la elección del material para una determinada aplicación está muy relacionada con el tiempo de vida, *v.gr.* para dispositivos bipolares, un tiempo de vida pequeño es deseable para obtener una velocidad de conmutación rápida; mientras que para dispositivos donde se requiere una alta densidad de corriente es preferible un tiempo de vida largo.¹⁵

Como se mencionó, los N_s pueden ser considerados como niveles energéticos dentro del E_g , por lo que eventos SRH ocurren en ellos, de aquí se desprenden dos conceptos: razón y velocidad de la recombinación en los estados superficiales. La razón de recombinación en la superficie es limitada por la cantidad de portadores minoritarios que se mueven hacia la superficie. La velocidad de recombinación superficial es dada en unidades de cm/seg. En una superficie en la que no se presenta recombinación, la razón de movimiento de los portadores a la superficie es cero, al igual que la velocidad. En superficies donde ocurre recombinación esta es limitada, por lo tanto la velocidad lo es también. La mayoría de los semiconductores presentan una velocidad de recombinación superficial de $\sim 10^7$ cm/seg.

I.III.I Generación de radiación THz.

El hecho de que los eventos de generación/recombinación en la superficie sean rápidos puede ser aprovechado para emitir radiación THz, el mecanismo primario para construir esta clase de emisores radica en el efecto foto-Dember el cual es basado en emisiones ultrarápido transporte de carga. Este fenómeno junto con el desarrollo de láseres que pueden encender y apagar en una fracción de segundo ha permitido el desarrollo de espectroscopia THz en dominio del tiempo (TDS).

El efecto foto-Dember radica en la diferencia de movilidad entre los portadores mayoritarios y minoritarios, aprovechando los N_s y la Φ existente en la superficie. Cuando un láser pulsado ultrarápido genera portadores en la superficie de un semiconductor estos no pueden extenderse más allá de la misma superficie, es decir hacia el ambiente, por lo que ocurre una corriente de difusión de los portadores generados hacia el bulto del material. Cuando los portadores mayoritarios y minoritarios se han difundido en dirección perpendicular a la superficie y, como se dijo, la diferente movilidad ha provocado que los huecos se queden ubicados espacialmente atrás de los electrones (más rápidos), favoreciendo la creación de un dipolo.¹⁶ Este proceso es ilustrado en la Fig. 1.5.

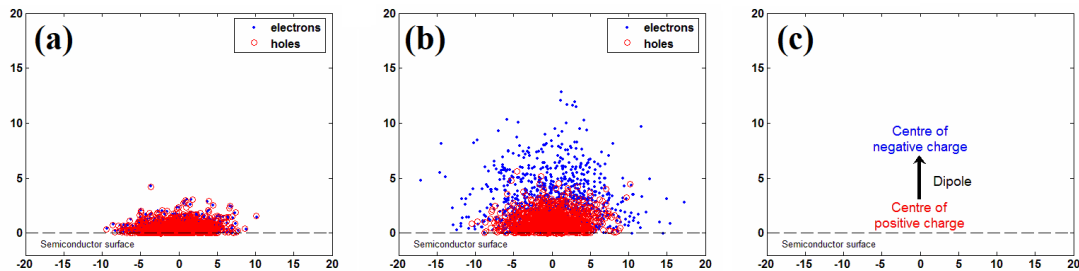


Figura 1.5. Efecto foto-Dember. (a) Distribución de portadores al momento de que el láser impacta la superficie, (b) cuando se han separado y (c) dipolo formado.¹⁷

Cuando se ha formado el dipolo ocurre una emisión de forma perpendicular y cilíndrica a la excitación con el láser. Sin embargo, esta radiación ha sido difícil de recolectar y condicionar para hacerla útil como emisor. La forma más utilizada de extraer esta señal ha sido mediante el uso de una antena foto-conductiva acoplada a arseniuro de galio crecido en condiciones de baja temperatura, ya que este material presenta características únicas como un corto tiempo de vida de los portadores y, al mismo tiempo, una buena movilidad.¹⁸

I.III.II Detección de radiación THz.

En 2003 A.M. Song en su publicación “Unidirectional electron flow in a nanometer-scale semiconductor channel: A self-switching device” propuso un dispositivo basado en estados superficiales para la detección de radiación con longitud de onda milimétrica.¹⁹ El dispositivo fue denominado Self-Switching Diode (SSD), realizado mediante un nanocanal en donde se rompe la simetría de forma intencionada mediante trincheras aislantes en forma de L como se muestra en la Fig. 1.6.

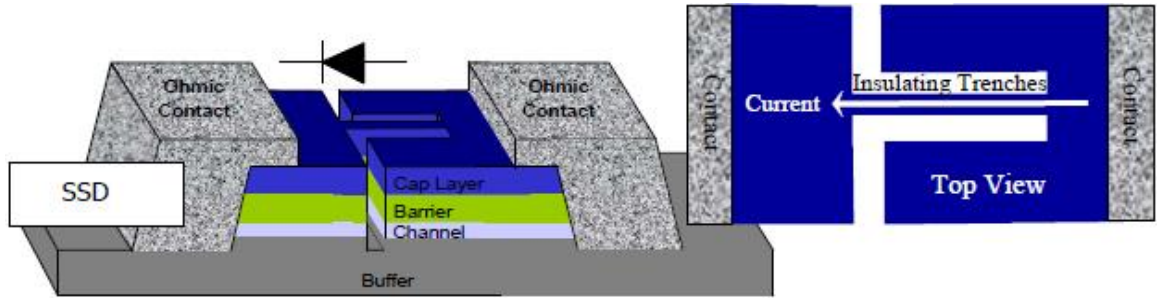


Figura 1.6. Imagen típica de un SSD, se observa la distribución de las trincheras en el dispositivo y la dirección de flujo de corriente.²⁰

El principio del funcionamiento del dispositivo radica en la ruptura de la periodicidad de la estructura cristalina causada por el proceso de fabricación de las trincheras, originando estados superficiales a lo largo de estas y obligando a cualquier corriente de portadores a pasar por el canal del dispositivo como efecto de la forma en “L”. El efecto de los N_s es atraer electrones a sus niveles energéticos más bajos que el nivel de la E_C provocando una D_R cerca de la superficie.

Aplicando un potencial en el extremo derecho del dispositivo con respecto al contacto izquierdo se puede modular la D_R mediante la apertura o cierre del canal semiconductor. Cuando se polariza negativamente el contacto derecho y se une a tierra el izquierdo, la carga superficial vacía y corta el canal de manera que no se tiene corriente a través del dispositivo. Por el contrario si se aplica un potencial positivo, el canal se abre y permite el paso de corriente, como se observa en la Fig. 1.7.

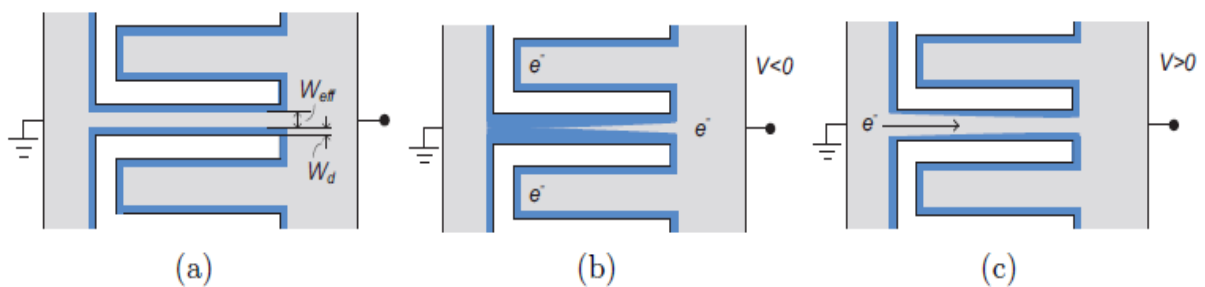


Figura 1.7. En área sombreada se representa la extensión de la D_R dentro del SSD para: (a) $0V$, (b) $V < 0$, polarización inversa. (c) $V > 0$ polarización directa.²¹

Debido a la necesidad de aplicar un voltaje positivo para obtener conducción de portadores es posible obtener un dispositivo que permita el paso de corriente sólo cuando esta es positiva, lo cual es el comportamiento típico de un diodo. En la Fig. 1.8(a) se observa la respuesta en DC de un SSD. Se observa la curva característica corriente voltaje, $I-V$, de un diodo. El voltaje de umbral va a depender de la densidad de carga en la superficie provocada por los N_s y los parámetros geométricos del SSD como la longitud y anchura del canal. En la Fig. 1.8(b) se muestra la corriente que pasa en el dispositivo para una onda seno de frecuencia 100 GHz y 1 THz en SSD con diferentes longitudes de canal, ilustrando el efecto de la rectificación al permitir el paso únicamente del semi-ciclo positivo. La alta velocidad de recombinación en los N_s ha permitido que los SSD superen la frecuencia de corte de los dispositivos basados en Silicio.

Por no ser el funcionamiento del dispositivo basado en transporte balístico, se puede obtener comportamiento de diodo utilizando el concepto de SSD en prácticamente cualquier material, como se ha demostrado en Si²² e ITO;²³ sin embargo para trabajar en la región de THz el transporte debe ser balístico, por lo que se necesitan materiales con una alta movilidad de portadores que favorezcan esa clase de transporte. Debido a lo anterior, se ha optado por el uso de heteroestructuras basadas en GaAs, GaN y InGaAs, siendo el último material donde se ha logrado obtener rectificación en ultra altas frecuencias.²¹

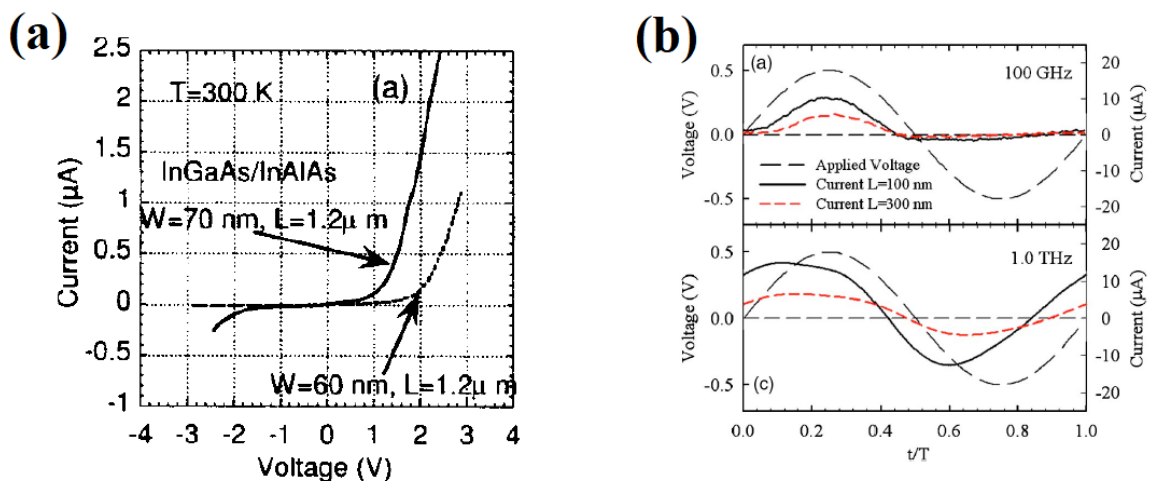


Figura 1.8. Respuesta (a) DC para dispositivos SSD con diferentes valores de ancho de canal¹⁹ y (b) en AC para Dispositivos SSD con diferentes longitudes de canal.²⁴

I.IV Motivación y objetivos.

El problema de estudio de esta tesis surge cuando se analiza los estudios previos existentes a los estados superficiales y sus efectos sobre las heteroestructuras AlGaAs/GaAs. Ante la necesidad de entender, evitar y/o manipular los efectos superficiales se propone realizar una investigación que aporte conocimientos sobre como evaluar y dominar las propiedades superficiales en las heteroestructuras para evitar efectos negativos sobre el 2DEG y al mismo tiempo saber cómo manipular la carga en la superficie con la intención de diseñar un dispositivo rectificador en la región de los THz.

La primera etapa de esta tesis consiste en reconocer los efectos de la superficie sobre los espectros de fotorreflectancia y espectroscopía Raman, utilizando heteroestructuras AlGaAs/GaAs que contienen un 2DEG. Este estudio aporta consideraciones de diseño que permitirán mejorar las propiedades de transporte de portadores en el 2DEG, permitiendo el diseño de heteroestructuras con un D-2DEG. El conocimiento adquirido permitirá confirmar o refutar la hipótesis primaria de esta tesis: Es posible manipular los efectos de los estados superficiales para la obtención de dispositivos electrónicos capaces de presentar las características en corriente directa adecuadas para ser usados en sistemas de recolección de energía en la región de THz.

La hipótesis planteada busca contribuir al llenado del denominado *THz Gap* que consiste en la ausencia de tecnología eficiente que trabaje en el rango de frecuencia de 0.3 a 3×10^{12} Hz. Dentro de los dispositivos de recolección de energía la tecnología más empleada para la rectificación a frecuencias THz y ópticas (sin la necesidad de aplicar un voltaje externo) son las barreras túnel asimétricas metal-aislante-metal y metal-aislante-aislante-metal.^{25,26} Este tipo de dispositivos incorporan un barrera aislante entre dos electrodos metálicos lo suficientemente delgada para propiciar el paso de electrones por efecto túnel, dado que es un mecanismo de transporte ultra-rápido, los rectificadores pueden mostrar velocidades de operación a frecuencias ópticas^{27,28} y su mecanismo de rectificación está basado en la asimetría del transporte túnel lo que causa un flujo neto de corriente en una dirección y son denominados rectificadores tipo “*square-law*” debido a que la corriente es proporcional a la no-linealidad de la curva I-V.

Sin embargo, a pesar de que dichos dispositivos pueden funcionar como rectificadores hasta frecuencias en el espectro visible, la eficiencia de rectificación de los dispositivos basados en efecto túnel es bastante pobre ($< 10^{-6}$), introduciendo etapas de post-amplificación para la detección de las señales rectificadas. A manera de solucionar los problemas que presentan las barreras metal-aislante-metal se propone la manipulación de los estados superficiales para obtener un dispositivo rectificador en THz utilizando la arquitectura de los *self-switching diodes* en heteroestructuras crecidas mediante MBE.

Este proyecto se realizó mediante las siguientes etapas/objetivos puntuales de investigación:

1. Realizar un modelo por computadora que permita predecir las propiedades de un gas bidimensional en diferentes diseños de heteroestructuras.
2. Fabricación de un gas bidimensional de electrones de alta movilidad en interfaces AlGaAs/GaAs por MBE. Esto tendrá el objetivo de evaluar los estados superficiales sobre el 2DEG y serán las bases para una futura fabricación de SSD.
3. Caracterización de las propiedades ópticas de los gases bidimensionales fabricados. Permitirá entender los estados superficiales, como controlarlos y la forma en que pueden ser modulados con mira en una ingeniería de estados superficiales.
4. Diseño y modelado de las propiedades de distribución de portadores en los nanocanales asimétricos generados a partir de los gases bidimensionales. Con esta se pretenden entender el principio de funcionamiento de los SSD.
5. Determinación y optimización numérica de un comportamiento *square-law* en los nano-canales.

Capítulo II

Bases experimentales y numéricas.

En esta sección se presenta las técnicas experimentales empleadas en este trabajo. Se inicia con la técnica de MBE para el crecimiento de heteroestructuras y se incluye las bases de la caracterización óptica empleada para determinar las propiedades superficiales de heteroestructuras basadas en AlGaAs/GaAs. Se presenta los aspectos básicos utilizados en el análisis asistido por computadora de las heteroestructuras que se utilizan en este trabajo y el método utilizado para el diseño numérico de los SSD utilizado en la sección IV de este trabajo.

II.I La técnica de MBE.

La palabra epitaxia (de la raíz griega epi "arriba", y taxis "de manera ordenada") refiere al proceso de crecer una capa que reproduce las propiedades de un sustrato. Dentro de la epitaxia se distinguen dos tipos: Homoepitaxia, ocurre cuando una película de un material es crecida sobre un sustrato del mismo material y Heteroepitaxia, la cual se presenta cuando se hace crecer una película de diferente material al que es utilizado en el sustrato. La epitaxia es usada cuando se pretende crecer semiconductores con una calidad cristalina ordenada, con espesores controlados y propiedades específicas, siendo la epitaxia por haces moleculares una de las técnicas que permiten el crecimiento con un gran control y eficiencia.

Desde su invención en los años 1960's por J. R. Arthur y A. Y. Cho, el sistema de MBE ha sido ampliamente utilizado en el crecimiento de materiales III-V y fabricación de heteroestructuras de AlGaAs/GaAs con películas epitaxiales nanométricas. Un sistema de MBE típico se ilustra en la Fig. 2.1 el cual consiste en tres cámaras llamadas cámara de introducción, de análisis y de crecimiento. En cada una de ellas el nivel de vacío al que se somete el sistema va aumentando en el orden descrito gracias a un sistema complejo de bombeo. La cámara de crecimiento se encuentra en condiciones de ultra-alto vacío durante el crecimiento lo que ayuda a evitar la incorporación de impurezas en la muestra, además puede ser asistida por el enfriamiento de un criopanel situado en el interior de la cámara.

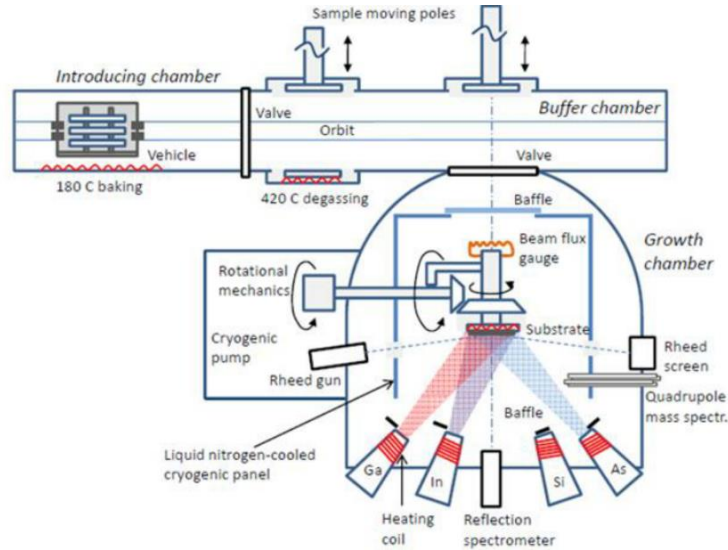


Figura 2.1. Diagrama de un sistema MBE para materiales III-V.

Las celdas Knudsen se encuentran situadas dentro del reactor principal y cuentan con una resistencia de tantalio por lo que alcanzan temperaturas del orden de 1000 °C, permitiendo obtener un vapor molecular de los elementos contenidos en las celdas. El haz atómico obtenido puede ser controlado mediante la corriente eléctrica aplicada a la celda y procesos de apertura/cierre de shutters colocados a la salida de las celdas que contienen los elementos de los grupos III-V y los materiales dopantes, con lo que se controla el depósito de ellos.

La difracción de electrones reflejados de alta energía (RHEED) es utilizada como la principal técnica que permite controlar el proceso de crecimiento. El sistema MBE incorpora un cañón de electrones que opera a una energía de 12 keV, por lo que se obtiene una longitud de onda en el rango del parámetro de red de los semiconductores crecidos por MBE. La difracción-reflexión de los electrones en la superficie de la muestra (índice en un ángulo pequeño $< 5^\circ$) genera una imagen en una pantalla fosforescente situada enfrente del cañón con lo que es posible observar la velocidad y calidad del crecimiento.

II.I.II Crecimiento de heteroestructuras por MBE.

Comparado con otras técnicas de crecimiento, MBE es relativamente lenta (típicamente 1 monocapa/segundo). Sin embargo, esta lentitud es una importante ventaja al permitir el crecimiento ordenado de capas con una excelente calidad cristalina. Se consiguen cambios abruptos y con un preciso control de espesores,

dopajes y composición. Esto es muy útil en el desarrollo de heteroestructuras con aplicaciones a alta frecuencia ya que debe de ser cuidadosamente llevado a cabo con la intención de obtener una adecuada calidad cristalina, así como la mayor reproducibilidad posible.

El sistema de AlGaAs-GaAs se considera virtualmente sin desacople de red, por lo que es posible crecer semiconductores con buena calidad cristalina utilizando un rango amplio de temperatura de crecimiento que va de 550 a 650 °C.¹¹ Se debe de utilizar 10°C arriba de la temperatura de desorción del sustrato utilizado. Para lograr determinar que se ha alcanzado la temperatura de desorción adecuada se utiliza la herramienta RHEED. En la Fig. 2.2(a) se observa el patrón RHEED obtenido a ~300 °C de una superficie de GaAs (100) que presenta reconstrucciones y contaminantes, en este punto la temperatura del sustrato es elevada en búsqueda de evaporar los óxidos presentes en la superficie. En la Fig. 2.2(b) se observa una reconstrucción 2x en el azimut [011] a ~600 °C que indica que se ha obtenido una superficie libre de contaminantes y rica en As, definiendo la temperatura del proceso.

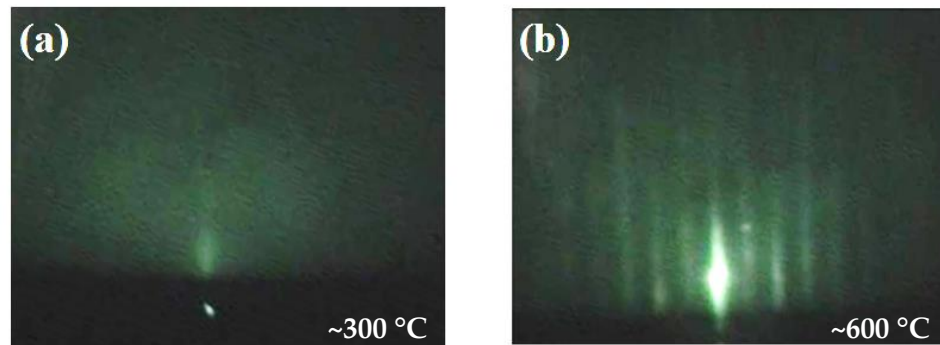


Figura 2.2. Espectro RHEED para una superficie (a) con impurezas y (b) una vez que ha ocurrido la desorción superficial en un sustrato de GaAs (100).

Mediante el uso de estos patrones de reflexión-difracción se puede monitorear *in situ* la calidad del crecimiento. Cuando la superficie sea plana y las condiciones del crecimiento no cambien, las reconstrucciones observadas se deben de mantener. En un proceso donde la superficie ha adquirido rugosidad el patrón de reflexión-difracción pasará a conformarse por puntos en lugar de líneas, debido a que la difracción ocurre en estructuras tridimensionales que aparecen en la superficie crecida. Además se puede monitorear en tiempo real la cantidad de material depositado al observar la evolución de la intensidad del patrón RHEED a lo largo del tiempo, obteniéndose la razón de crecimiento ($\mu\text{m}/\text{hora}$).

Cuando se conoce la razón de crecimiento de los materiales a utilizar en la heteroestructuras se puede controlar mediante la apertura y cierre de los shutters de cada celda el espesor de la capa depositada. Por ejemplo, en la Fig. 2.3 se muestra una heteroestructura hipotéticamente crecida a una razón de 0.5 y 0.6 $\mu\text{m}/\text{hora}$ para GaAs y $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$. Durante el proceso de desorción, la superficie de la muestra se mantiene recibiendo de forma constante el haz molecular de As, por lo que el inicio del proceso es marcado por la liberación del haz molecular de Ga, comenzando el crecimiento de la capa buffer.

Dos horas después se habrán depositado 1 μm de GaAs, la capa espaciadora será depositada al abrir el shutter de Al; 42 segundos son suficientes para depositar la delgada espaciadora por lo que se inicia la barrera dopada al permitir el flujo de Silicio hacia la muestra. Cuando el tiempo total de crecimiento ha alcanzado dos horas, 8 minutos y 42 segundos se ha formado una capa dopada de AlGaAs de 80nm, por lo que se deberán obstruir los flujos de Al y Si para iniciar el depósito de la tapa. Al haber depositado 25 nm de GaAs el flujo molecular de Ga es obstruido con lo que se inicia el fin del crecimiento de la heteroestructura.

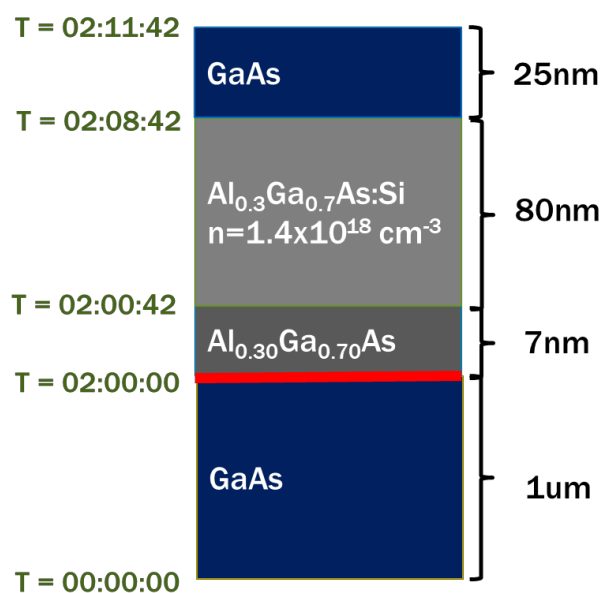


Figura 2.3. Tiempo de crecimiento necesario para realizar la heteroestructura diseñada considerando una razón de crecimiento de 0.5 y 0.6 $\mu\text{m}/\text{hora}$ para GaAs y $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$, respectivamente.

II.II. Técnicas ópticas para caracterizar la superficie.

Las espectroscopias ofrecen la posibilidad de extraer propiedades de cada capa que conforma una heteroestructura incluso cuando tienen algunos nanómetros de espesor únicamente.²⁹ Técnicas como fotorreflectancia, fotoluminiscencia y Raman han sido tradicionalmente empleadas en la caracterización de semiconductores y en este trabajo serán utilizadas para explorar una capa que comúnmente ha sido olvidada: la tapa. Además es posible evaluar los efectos de los N_s sobre la heteroestructura cuando estas técnicas son empleadas en un arreglo experimental adecuado, debido a lo anterior se presenta en las siguientes líneas la manera en que fotorreflectancia y Raman son empleadas para caracterizar los efectos superficiales en heteroestructuras AlGaAs/GaAs.

II.II.I. Espectroscopia fotorreflectancia.

Fotorreflectancia denomina a la espectroscopía que se basa en la medición del cambio en el coeficiente de reflexión de un material cuando se aplican pequeñas perturbaciones periódicas de luz. Esto se logra cuando el campo eléctrico superficial o en la interfaz es modulado por la generación de pares electrón-hueco provocados por fotones que inciden sobre el semiconductor los cuales han sido enviados hacia el material en pulsos a una determinada frecuencia por un láser y un chopper. En la Fig. 2.4 se muestra el arreglo experimental típico de PR.²⁹ Una lámpara con filamento de tungsteno y/o de gas halógeno es usada para brindar un haz idealmente blanco que llega hasta un monocromador que separa la luz en diferentes longitudes de onda, aproximadamente con una resolución de 2nm por paso.

Por otro lado se tiene un láser que proporciona la energía para modular los campos eléctricos presentes en la muestra, para ello la luz emitida por el láser es interrumpida mecánicamente por un obturador o “Chopper” a una frecuencia generalmente en el rango 130 a 260 Hz, evitando múltiplos de 60 con lo que se evita que la iluminación artificial provoque ruido en las mediciones. Tanto la luz del láser y la proveniente del monocromador se hace incidir en la muestra en el mismo punto sobre la superficie, para lograr lo anterior se hace uso de un sistema de lentes que condicionan las señales ópticas. La luz reflejada por la muestra es enfocada a un fotodetector que convierte la señal de luz en corriente o voltaje y que está conectado a un amplificador lock-in para aumentar la razón señal a ruido. Finalmente, la señal detectada es procesada mediante software especializado.

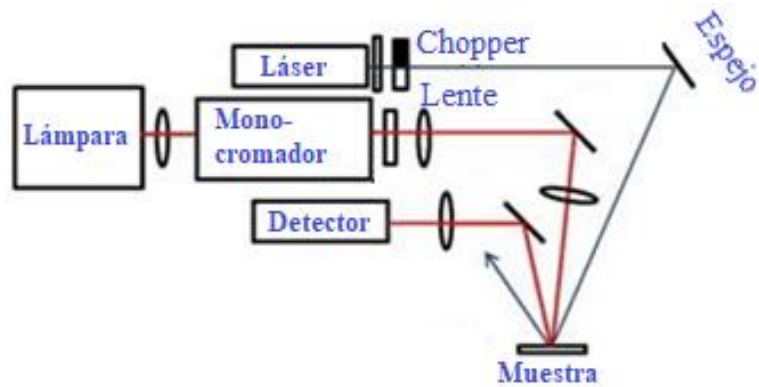


Figura 2.4. Arreglo experimental de un sistema de PR.²⁹

El mecanismo de modulación del campo eléctrico en la superficie puede ser entendido cuando se considera la superficie no ideal mostrada en la Fig. 2.5(a), donde el doblamiento de las bandas energéticas ha ocurrido a causa del llenado de los N_s . Cuando el láser proporciona fotones con una energía mayor que la del E_g del material bajo estudio y estos fotones alcanzan la superficie, pares electron-hueco son creados por foto-exitación. A causa del E_s , los pares electrón-hueco son separados de tal manera que los electrones se dirijan hacia la D_R y los huecos hacia la n_{ss} , recombinándose en cada distribución de carga lo que se traduce en una disminución en la ocupación de los N_s provocando una reducción en Φ y en E_s como es mostrado en la Fig. 2.5(b).

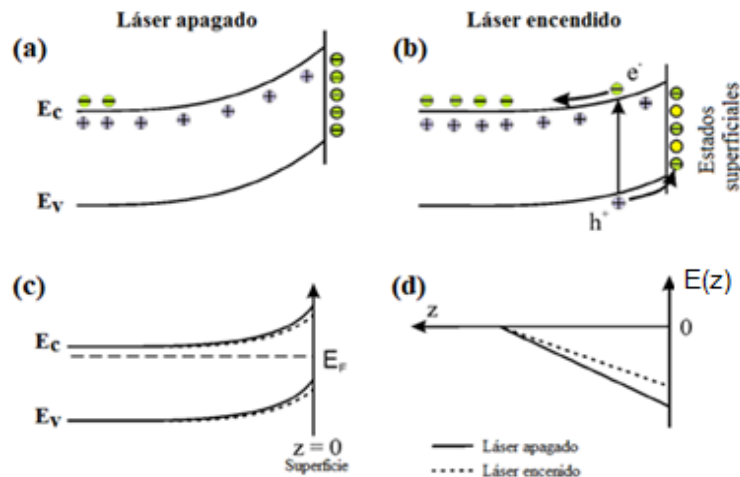


Figura 2.5. Modulación del campo eléctrico superficial causado por la foto-generación de pares electrón-hueco.²⁹

A causa del *chopper*, el láser pasa de un estado encendido (se permite el paso de luz) y apagado (obstrucción del haz). Cuando el láser se encuentra apagado el doblamiento de las bandas permanece sin alterarse. Si el láser está encendido la población de los N_s es reducida, disminuyendo el doblamiento, esto se ilustra en Fig. 2.5(c). Desde el punto de vista del E_s , lo que se obtiene es una reducción de n_{ss} de la forma que es indicado en Fig. 2.5(d). Con lo que se logra la modulación del E_s y de la misma forma se modula cualquier campo eléctrico interno (E_{int}) dentro de la estructura que es alcanzado por los fotones provenientes del láser.

Mediante el encendido y apagado del láser se produce un cambio en E_s lo cual modificará el coeficiente de reflexión (R) de la zona modulada, de esta forma la técnica de fotorreflexancia medirá estos cambios de acuerdo a la ecuación

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R_{off} - R_{on}}{R_{off}}, \quad \text{Ec. 2.1}$$

donde R_{off} y R_{on} son los coeficientes de reflexión cuando el láser está apagado y encendido, respectivamente. Los cambios normalizados son relacionados a la perturbación de la función dieléctrica del material ($\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$) por lo que se puede escribir el cambio como:³⁰

$$\frac{\Delta R}{R} = \alpha [\epsilon_1, \epsilon_2] \Delta \epsilon_1 + \beta [\epsilon_1, \epsilon_2] \Delta \epsilon_2, \quad \text{Ec. 2.2}$$

α y β son los coeficientes de Seraphin, relacionados a la función dieléctrica y $\Delta \epsilon_1$ y $\Delta \epsilon_2$ derivan de la relación Kramers–Kronig.

Para dispositivos multicapa, PR permite determinar los campos eléctricos tanto en la superficie como al interior de la muestra. Cuando se logra diferenciar el origen de cada una de las firmas espectrales que aparecen en la medición se puede determinar la posición en la que se encuentra algún campo eléctrico en el dispositivo. Una de las técnicas empleadas para determinar la posición del campo eléctrico que se modula mediante PR radica en eliminar mediante ataques químicos las diferentes capas de la muestra bajo estudio. De esta forma es posible estudiar señales provenientes de cada sección ya que desaparecerán junto con la capa donde se ubican.³¹

Un método no destructivo consiste en realizar dos diferentes mediciones ocupando una longitud de onda de modulación (λ) diferente en cada una;³² un espectro medido con una pequeña λ será originado en los primeros nanómetros con relación a la superficie mientras que un láser que proporcione una de mayor λ ofrecerá información incluso del sustrato. Esto puede ser entendido cuando se

considera que el coeficiente de absorción, α , para un material en específico está en función de la longitud de onda de la luz incidente sobre el material, por lo tanto los fotones penetrarán una cierta distancia desde la superficie, denominada como longitud de penetración, d .

Pavesi *et al.*³³ han realizado experimentos en los cuales se ha determinado la d que provoca un láser dentro del GaAs y AlGaAs con la finalidad de observar de qué profundidad se está obteniendo información de la muestra bajo estudio. Una aproximación de cuanto penetra la energía proveniente del láser en función de la energía de la onda se observa en la Fig. 2.6 para el GaAs y AlGaAs,^{33,34} en una heteroestructura real de estos materiales se deberá considerar también la modulación indirecta ocasionada por los portadores foto-generados.³⁵

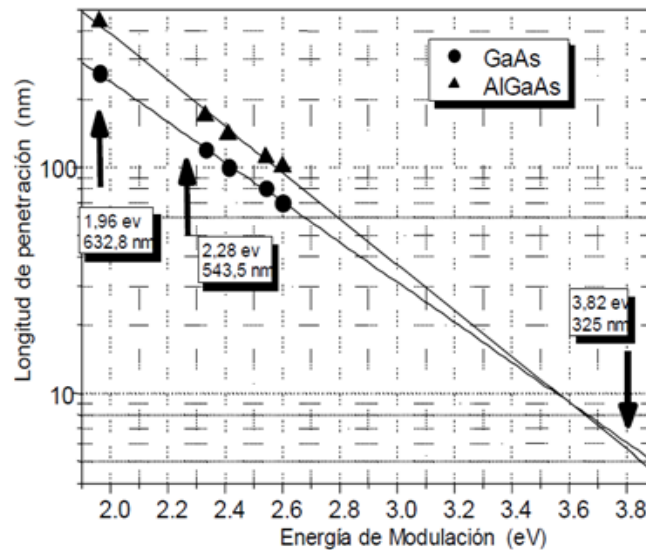


Figura 2.6. Longitud de penetración para el AlGaAs y GaAs en función de la energía del láser.³⁴

El espectro típico de PR para una heteroestructura AlGaAs/GaAs a 300K se muestra en la Fig. 2.7. Se pueden distinguir tres regiones espectrales: Región I, ubicada entre 1.3 y 1.45 eV está asociada a campos eléctricos en la interface AlGaAs/GaAs donde el 2DEG es formado.³⁵ Región II, presenta oscilaciones desde 1.45 hasta 1.8 eV y han sido asociadas a la superficie;³⁶ para energías mayores a 1.8 eV (dependiendo de la X) se presentan firmas espectrales asociadas con AlGaAs.²⁹

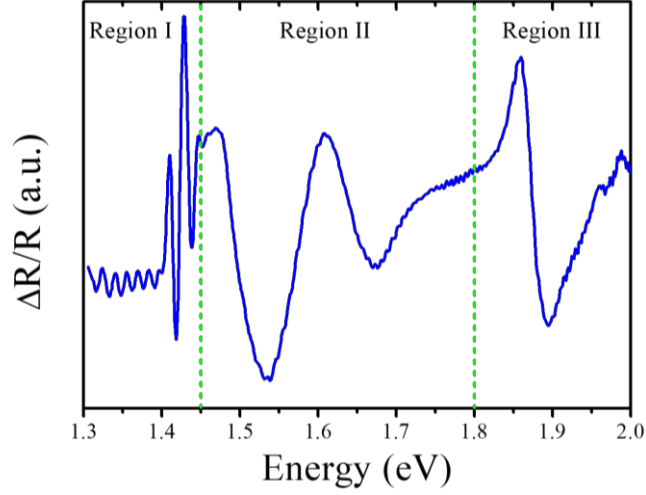


Figura 2.7. Espectro típico de fotorreflectancia para heteroestructuras AlGaAs/GaAs.

Dependiendo de la intensidad del campo eléctrico modulado, E_{int} , es posible distinguir tres tipos de señales en el espectro de PR.²⁹ En el régimen de campo bajo (la energía electro-óptica es mayor que el factor de ensanchamiento) se obtendrá una forma de onda que corresponde con la primera derivada de la ϵ .³⁷ Cuando el criterio del régimen bajo no es satisfecha y, además, $qE_{int}a_0 \ll E_g$ (a_0 es la constante de red) se cae en el régimen del campo medio donde ocurre la aparición de oscilaciones tipo coseno amortiguadas, denominadas oscilaciones Franz-Keldysh (FKO, del inglés *Franz-Keldysh oscillations*). Cuando no se cumple el criterio del campo bajo y además $qE_{int}a_0 \approx E_g$, los fenómenos apreciados caen en el campo alto y generalmente son dominados por el efecto Stark.

En el caso del campo intermedio, las FKO pueden ser modeladas mediante la ecuación³⁸

$$\cos \left[\frac{4}{3} \left(\frac{E_n - E_g}{\hbar\Omega} \right)^{\frac{3}{2}} + \chi \right], \quad \text{Ec. 2.3}$$

donde E_n es la posición de la energía de la señal de PR, χ es un factor de fase arbitrario y $\hbar\Omega$ es la energía electroóptica definida como:

$$\hbar\Omega = \left(\frac{e^2 E_{int}^2 \hbar^2}{2\mu} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad \text{Ec. 2.4}$$

μ está en función de la masa efectiva de electrones y huecos. Utilizando la Ec. 2.3 se observa que los extremos de las oscilaciones ocurrirán cuando

$$\frac{4}{3} \left[\frac{E_n - E_g}{\hbar\Omega} \right]^{\frac{2}{3}} + \chi = n\pi \quad \text{Ec. 2.5}$$

de esta forma se puede manipular utilizando el valor energético del enésimo pico o valor extremo de las FKO, E_n , entonces la ecuación se escribe como:

$$E_n = \hbar\Omega F_n + E_g \quad \text{Ec. 2.6}$$

si se hace que $F_n = \left[\frac{3\pi}{4} \left(n - \frac{1}{2} \right) \right]^{\frac{2}{3}}$.

De los valores de E_n y F_n se puede aproximar una línea recta con cualquier software que realice ajustes lineales de datos, obteniéndose el valor de la pendiente “ m ” y la intersección “ b ” de la línea resultante del ajuste que corresponden al valor de $\hbar\Omega$ y al E_g del material, respectivamente. Con la Ec. 2.4 se encuentra el valor de E_{int} en unidades (V/m) como:

$$E_{int} = \sqrt{\frac{2\mu(\hbar\Omega)^3}{e^2\hbar^2}}. \quad \text{Ec. 2.7}$$

Cuando lo que se quiere analizar es E_s , este campo eléctrico puede ser modelado como originado como una densidad de carga superficial en forma de plano de carga, con la ecuación de la ley de Gauss para un semiconductor por lo que se puede obtener el valor de n_{ss} que origina dicho campo mediante:³⁹

$$n_{ss} = \varepsilon\varepsilon_0 E_s \quad \text{Ec. 2.8}$$

II.II.II. Raman.

Cuando la luz incidente sobre una muestra sufre un proceso inelástico de dispersión, denominado dispersión Raman, es posible obtener información de la muestra bajo estudio al analizar el cambio en la longitud de onda que sufre la luz dispersada. RS ha sido ampliamente utilizada para para identificar compuestos químicos y, aunque no es un método intrínseco para caracterizar la región superficial de un material, el principio básico de la técnica puede ser aplicado al análisis de superficies e interfaces cuando se puede distinguir de las originadas en el cuerpo de la muestra.

Para las heteroestructuras AlGaAs/GaAs el espectro Raman característico es el exhibido en la Fig. 2.8.⁴⁰ Cuando el arreglo experimental se ha configurado en geometría backscattering, una heteroestructura crecida sobre un sustrato (100)

exhibirá típicamente modos longitudinales ópticos relacionados con GaAs y el AlAs. Mediante la posición en la que aparecen estos modos es posible determinar la X presente en el ternario, ya que los modos característicos del AlAs sufrirán un desplazamiento relacionados con la concentración.³³ La calidad cristalina con la que el material ha sido elaborado puede ser evaluada al considerar las reglas de selección de los modos vibraciones permitidos para un determinado arreglo experimental en función de la estructura cristalina.⁴¹

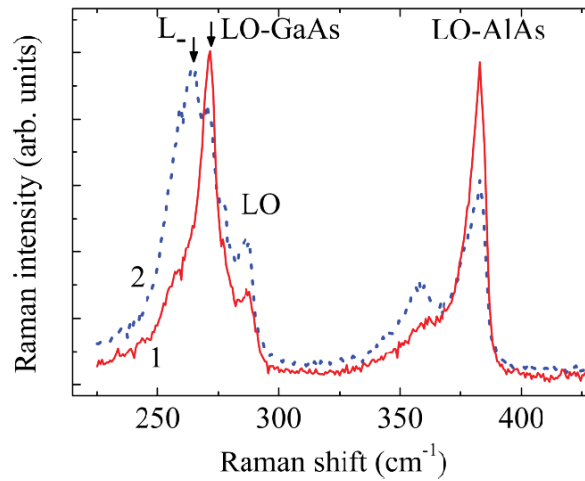


Figura 2.8. Espectro Raman de una heteroestructura AlGaAs/GaAs presentada en Ref. 40.

Para algunos compuestos III-V como InP y GaAs en la RS aparecen dos contribuciones: (a) el modo longitudinal óptico (LO), originado en la región de agotamiento donde no existe electrones libres y (b) los modos acoplados fonón-plasmon (L^+ o L^-), consecuencia de una concentración de portadores libres en el cuerpo del material.⁴² Al utilizar los modos anteriores descritos se puede extender el uso de RS a caracterizar la superficie de GaAs, particularmente obtener una aproximación del grosor de la región de agotamiento presente.

Cuando se utiliza un láser con una d constante y mayor que el grosor de la D_R , se obtendrá una relación directamente proporcional entre LO y D_R de tal manera que utilizando L^- como referencia, es posible comparar las intensidades de los modos utilizando:

$$\frac{I(\text{LO})}{I(L^-)} = R = R_0 [e^{2D_R/d} - 1], \quad \text{Ec. 2.9}$$

en esta relación $R_0 = 1.44$.⁴³ De acuerdo a la Ec. 2.9 es evidente que la intensidad de la señal Raman para el modo LO depende de la dispersión que ocurre en D_R , por lo tanto conociendo los parámetros presentes en la ecuación es posible estimar la D_R .

II.III. Método numérico de análisis.

Gummel en 1964 presentó como trabajo doctoral la simulación de un transistor BJT, con el cual inició el diseño asistido por computadora de dispositivos semiconductores denominado usualmente como TCAD (del inglés *Technology Computer Assisted Design*).⁴⁴ TCAD incluye simulación numérica de procesos de fabricación, litografía, dispositivos, interconexiones, tiempo de vida, etc. lo que ha permitido analizar parámetros estructurales, procesos, condiciones ambientales y como estos afectan el desempeño de los dispositivos sin la necesidad, incluso, de haberse fabricado.⁴⁵

La principal ventaja del uso de TCAD es que es posible determinar parámetros que en ocasiones pueden resultar imposibles de medir así como obtener una aproximación del desempeño del dispositivo sin la necesidad de fabricarlo. Básicamente el proceso inicia al introducir la estructura del dispositivo a analizar, la cual consiste en parámetros geométricos, materiales empleados y dopajes usados. Se debe de incluir la posición de los electrodos y las propiedades de estos. Dentro del simulador se deben escoger los modelos adecuados que describan el fenómeno a emplear y un método numérico que el programa utilizará para resolver las ecuaciones de los modelos empleados considerando los parámetros dados a la entrada. Finalmente, se obtendrán medidas que describen el comportamiento del dispositivo a condiciones dadas de polarización, temperatura, frecuencia etc. Este proceso se ilustra en la Fig. 2.9.

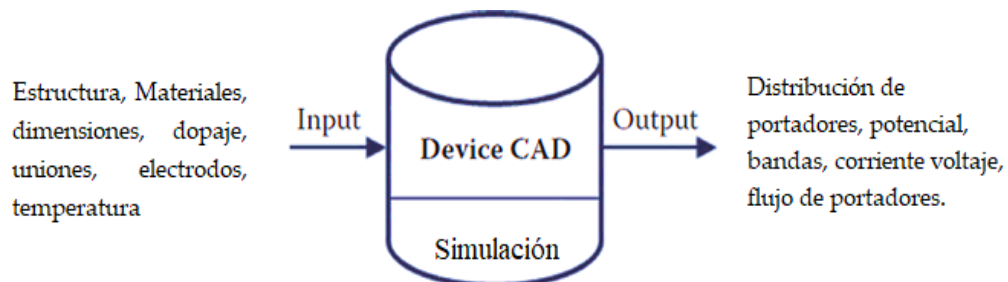


Figura 2.9. Proceso TCAD donde se ilustra un ejemplo de parámetros de entrada y salida.

El trabajo con estructuras en tres dimensiones (3D) requiere de complejos clúster computacionales para realizar las simulaciones; si se tienen limitaciones en equipo de cómputo se debe de reducir un análisis 3D a un sistema de menor dimensionalidad. El SSD mostrado en la Fig. 1.6 requiere una simulación en 3D para describir su funcionamiento de forma adecuada. Sin embargo, puede ser simplificado al dividir el análisis de esta clase de dispositivos en una simulación de una dimensión (1D) donde se investiga principalmente las propiedades de la heteroestructura y en una simulación de dos dimensiones (2D) donde se analiza las propiedades del 2DEG cuando se ha litografiado el SSD.

Las simulaciones 1D estudian a la heteroestructura, en particular cómo los espesores y materiales que conforman cada capa afectan principalmente el diagrama de bandas ya que, como se comentó, el 2DEG es la parte más importante de la heteroestructura y debe de ser cuidadosamente evaluado antes de que el diseño de una heteroestructura sea crecido debido a que MBE es una técnica poco económica. En la Fig. 2.10(a) se exhibe una heteroestructura InAlAs/InGaAs donde el concepto de SSD ha sido probado.⁴⁶ Para analizar el comportamiento de la banda de conducción se debe de analizar únicamente los espesores y el material de cada capa, con lo que se analiza únicamente el eje Z.

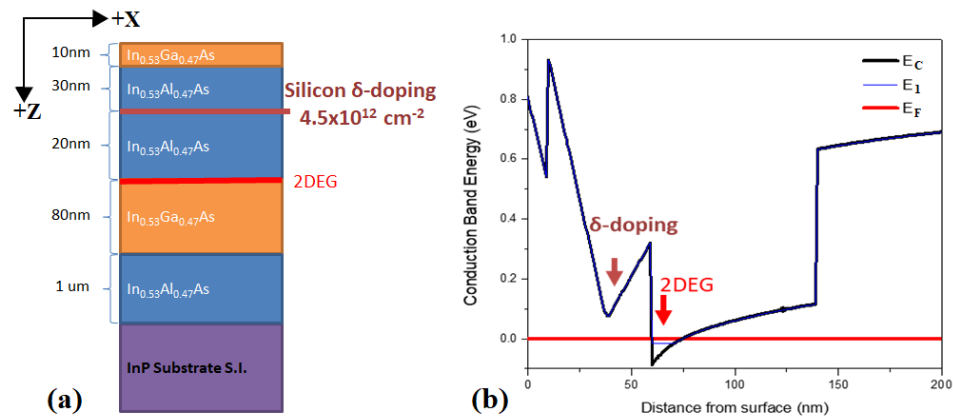


Figura 2.10. (a) Heteroestructura InGaAs/InAlAs donde el concepto de SSD ha sido probado⁴⁶ y (b) el comportamiento de la banda de conducción.

En la Fig. 2.10(b) el comportamiento de la E_C de la heteroestructura de la Fig. 2.10(a) es mostrada, obteniéndose al emplear un modelo que resuelve de forma auto consistente la ecuación de Poisson- Schrödinger junto con un modelo de carga en la superficie. Cuando se resuelve la ecuación de Schrödinger se obtiene la posición de

los niveles energéticos dentro del pozo formado donde se alojará el 2DEG. Mediante esta clase de análisis es posible diseñar los materiales y espesores de cada capa, el tipo de dopaje, concentración del ternario, etc., con la finalidad de garantizar que la heteroestructura fabricada presente las cualidades necesarias para la aplicación buscada.

El análisis de un SSD es necesario considerar una simulación 2D, para ello es necesario reducir la heteroestructura a un solo parámetro que describa sus propiedades. En este estudio se utiliza un corte en 2D de la heteroestructura donde se extrae las propiedades del 2DEG. En la Fig. 2.11(a) se muestra el 2DEG tal como si fuera idealmente grabado mediante litografía. Cuando se le pide al software que analice el comportamiento corriente-voltaje, I-V, considerando la distribución de portadores y los eventos SRH en la superficie es posible obtener la respuesta en DC del dispositivo, como lo muestra la Fig. 2.11(b).

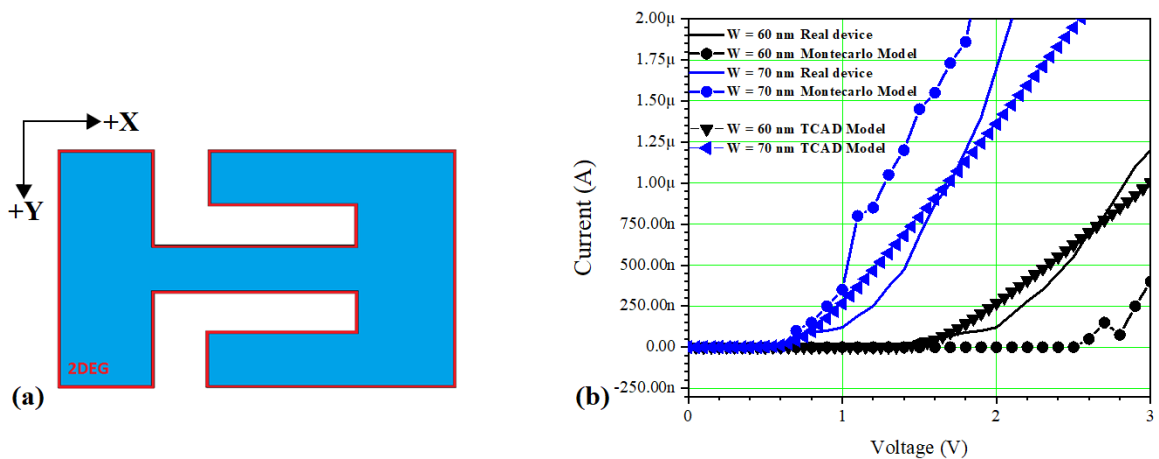


Figura 2.11. (a) 2DEG con la geometría correspondiente a un L-Shape SSD, (b) comparación entre estudios publicados²⁴ y el modelo (TCAD) obtenido en este trabajo.

En la simulación de la Fig. 2.11(b) se utiliza como referencia el SSD analizado en la Ref. 24 el cual ha sido experimentalmente realizado y su comportamiento I-V determinado, además fue analizado numéricamente utilizando un software basado en el método de Montecarlo, estos elementos son comparados con el resultado del modelo TCAD utilizado en esta tesis. Se observa una adecuada reproducibilidad entre la curva experimental y la dada por el modelo, especialmente en la región del voltaje umbral, con lo que se valida el modelo empleado en el Capítulo IV de este trabajo.

Capítulo III

Resultados del estudio de superficies y heteroestructuras.

El uso de técnicas ópticas para la caracterización de materiales semiconductores ha sido ampliamente empleado desde 1965 hasta convertirse en herramientas presentes en cualquier laboratorio. En 1985 Glembocki presentó el primer análisis de fotorreflectancia para un sistema GaAs/AlGaAs, iniciando el uso de esta técnica para la caracterización de heteroestructuras. Las propiedades de un 2DEG embebido en una heteroestructura han sido exploradas mediante el uso de técnicas de modulación en múltiples estudios, sin embargo han quedado nichos por ser llenados y efectos que se deben de considerar en la correcta interpretación de los espectros de PR. Un problema a estudiar es mostrado en la Fig. 3.1 al observar las FKO de la Región I.

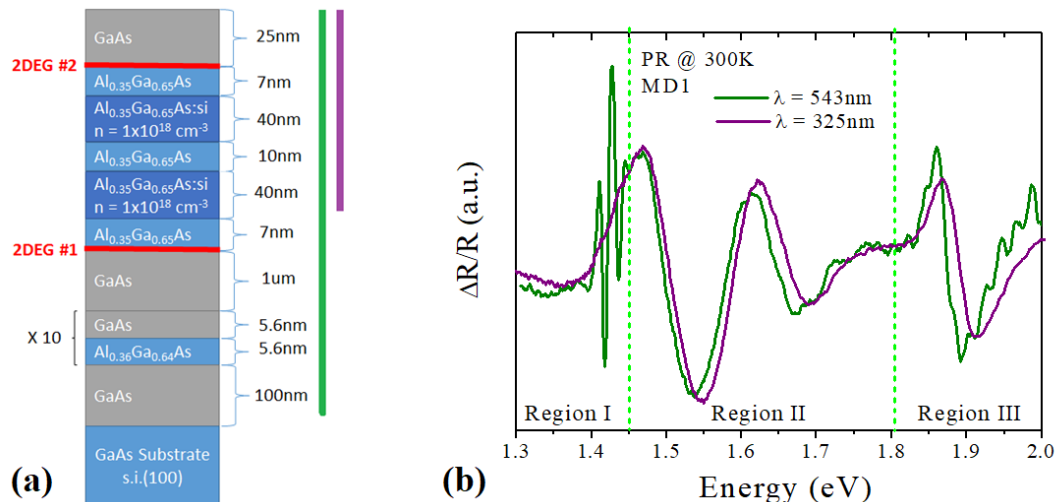


Figura 3.1. (a) Heteroestructura analizada por PR donde se muestra la penetración de cada longitud de onda del láser. (b) Espectro de PR tomado utilizando láseres con diferentes longitudes de onda.

En la Fig. 3.1(a) una heteroestructura reportada en Ref. 7 muestra el problema a analizar en esta sección de la tesis. La heteroestructura, a diferencia de la mostrada en la Fig. 1.1, fue diseñada para presentar un doble 2DEG, D-2DEG, con la finalidad de ser utilizada en la reproducción del estándar de resistencia eléctrica basada en el efecto Hall Cuántico.⁹ En este caso la heteroestructura presenta el 2DEG#1 a 129nm de la superficie, mientras que el 2DEG#2 está a menos de 25nm de esta. A la mitad de la barrera dopada se ha insertado una tercera capa espaciadora de 10nm con la intención de provocar una población de electrones en cada 2DEG equilibrada.

El análisis de PR se llevó a cabo a una temperatura de 300K utilizando dos longitudes de onda diferentes como mecanismo de modulación, el resultado se muestra en la Fig. 3.1(b). Con el láser de 543nm es posible obtener información virtualmente de toda la muestra, como es esquematizado en la parte (a) de la misma figura, y se muestran claramente la presencia de las 3 regiones anteriormente mencionadas. Cuando se repite el análisis de PR utilizando un láser ultra violeta (325nm) se obtiene información de los primeros 100nm posteriores a la superficie. Es de notarse la similitud existente entre los dos espectros, donde existe una marcada diferencia en la falta de las oscilaciones en la Región I en el espectro de 325nm.

Mediante el espectro obtenido con el láser UV y el proceso descrito en la sección II.II.I y en las Ref. 7,29 es posible determinar para esta muestra un campo eléctrico superficial (E_s) de 10^7 V/m y $n_{ss} = 4 \times 10^{12}$ cm⁻². Cuando los parámetros en la superficie son retroalimentados a la simulación en 1D de la heteroestructura se obtiene la gráfica de la Fig. 3.2. En el caso de la superficie ideal se obtiene un comportamiento de la E_c que permite que el pozo formado más cerca de la superficie (QW #2) caiga debajo del nivel de fermi al igual que el QW #1, esto indica que la existencia de un sistema D-2DEG es probable. Para el caso de la superficie real, se obtiene una Φ de 0.7 eV, por lo que el doblamiento de la banda evita que QW #2 este por debajo del nivel de fermi, evitando el D-2DEG.

Debido al impacto de la superficie sobre las propiedades de toda la heteroestructura se debe de analizar cómo controlar dichos efectos, interpretar adecuadamente los resultados espectrales obtenidos y diseñar heteroestructuras que sean inmunes a las propiedades de la superficie. En las páginas siguientes se muestra un estudio diseñado con la finalidad de entender el comportamiento de los N_s para utilizarlos adecuadamente en el diseño de dispositivos, esto permitirá el desarrollo de una ingeniería basada en estados superficiales.

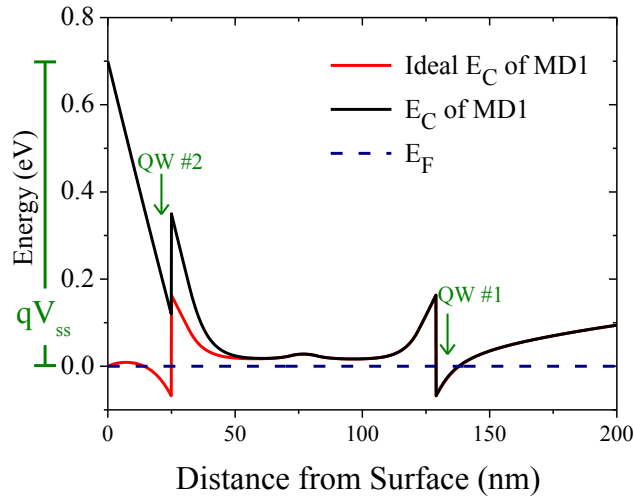


Figura 3.2. Simulación de la heteroestructura de la Fig. 3.1(a) donde se muestra el comportamiento de la banda de conducción para la superficie ideal y la real.

III.I Heteroestructuras usadas en este estudio.

La heteroestructura usada para la fabricación de dispositivos SSD es básicamente la misma que la desarrollada para la fabricación de los HEMTs. Sin embargo se deben de tener en cuenta algunas propiedades de las capas para garantizar que todo flujo de portadores sea únicamente a través del 2DEG. También se requiere un conjunto de muestras que permitan el estudio de la superficie y el efecto sobre el 2DEG. Con lo anterior en mente se realiza el diseño de 4 heteroestructuras mostradas en la Fig. 3.3.

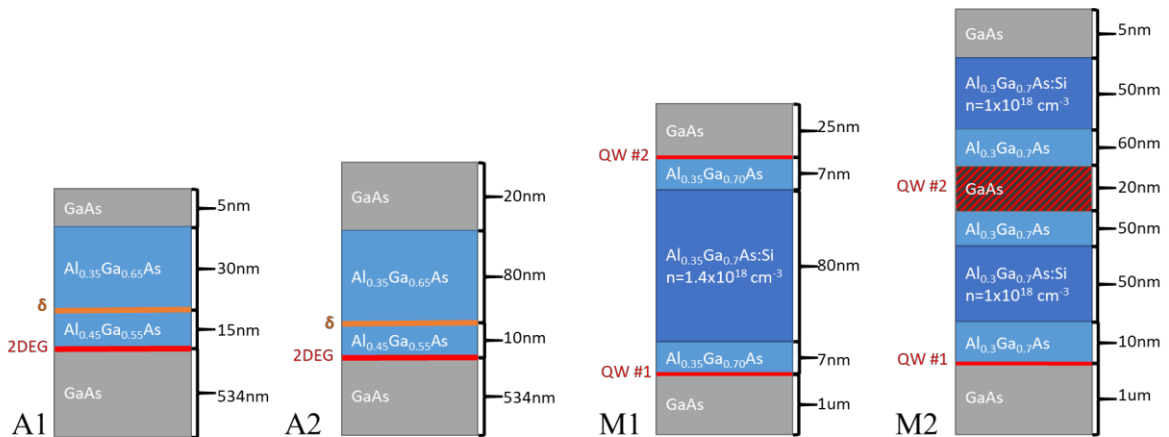


Figura 3.3. Heteroestructuras usadas en este trabajo. Las muestras A han sido diseñadas para presentar un 2DEG, mientras que las muestras M deberán de presentar un D-2DEG.

La muestra A1 ha sido utilizada por C. Balocco *et al.*⁴⁷ para la fabricación de dispositivos SSD y se ha propuesto como punto de partida y de comparación en la literatura. Es de observarse la reducida distancia entre la superficie y la ubicación donde debe de estar el 2DEG (50nm) por lo cual se espera que esta estructura tenga baja concentración de portadores en el 2DEG y la movilidad sea reducida por efecto de la capa espaciadora y la baja concentración de portadores. A2 consiste nuevamente en un solo canal con dopaje tipo delta basada en la heteroestructura propuesta por Balocco, en la cual se le ha hecho dos modificaciones para intentar mejorar la movilidad del 2DEG: se ha aumentado la distancia entre la superficie y el 2DEG a 110nm y el espesor de la capa espaciadora se ha reducido a 10nm.

En el caso de las muestras M diseñadas para presentar un D-2DEG se tienen dos casos. M1 ha sido utilizada para estudiar los efectos de la superficie y presenta el mismo inconveniente que la muestra exhibida en Fig. 3.1(a); difícilmente existirá un D-2DEG a temperatura ambiente. Por otro lado, M2 replicó una heteroestructura tipo doble canal con diseño asimétrico reportado por K. Pierz *et al.*⁹ por lo que se sabe que en este diseño se obtendrá un D-2DEG; con esto se obtendrá una comparación entre los espectros de PR de muestras donde existe y donde se evita la formación de un D-2DEG por los efectos de la superficie.

Los diseños propuestos fueron crecidos mediante la técnica MBE en la universidad estatal de Texas en EUA; en el laboratorio del Dr. R. Droopad. Las heteroestructuras fueron crecidas utilizando un sustrato de GaAs (100) con una presión base de la cámara de crecimiento $< 3 \times 10^{-11}$ torr. Se utilizó una razón de crecimiento para GaAs de 0.8 monocapas/segundo con una razón de flujo de As/Ga de 20, en este caso el As proviene de una celda cracker. Después del proceso de desorción, el crecimiento fue llevado a cabo a una temperatura de 580 °C, donde se depositaron 100nm de GaAs seguido de una súper red de diez periodos de AlGaAs/GaAs (5.6/5.6 Å). Las capas siguientes fueron depositadas tal y como se muestran en la Fig. 3.3.

Se realizaron mediciones de Efecto Hall Clásico con el equipo LEI 1605 Contactless mobility system a 300 K, esta clase de equipo es especializado en dispositivo tipo HEMT, por lo que se obtienen lecturas con más certeza de las propiedades del 2DEG que con el uso de la técnica de Van der Pauw. Comparando A1 y su versión optimizada A2, se tiene una densidad de portadores en el 2DEG de 9.8 y $10.4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ respectivamente, el incremento puede ser entendido al haber reducido el espesor de la capa espaciadora 5nm ya que favorece la difusión de

electrones hacia el 2DEG, también el aumentar la distancia entre el δ -doping y la superficie se evita que los electrones tengan preferencia por llenar los N_s antes que los estados disponibles en el QW. El incremento de portadores en el canal también afecta la movilidad del 2DEG al presentar un cambio de 3900 a 5537 cm^2/Vs para A1 y A2, respectivamente, por lo que se deduce que las modificaciones en A2 tuvieron el efecto deseado.

Para el caso de las muestras con D-2DEG se encontró una concentración de portadores y movilidad en el 2DEG de $7.09 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ y 4415 cm^2/Vs para M1, mientras que M2 mostró $14 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ y 5920 cm^2/Vs . El interés particular en las muestras M2, con miras a trabajo a futuro, radica en ofrecer dos 2DEG sobre los cuales pueda establecerse el transporte balístico, con esto se busca reducir la resistencia del canal de los SSD por un factor de 2; ya que estos dispositivos al ser nanométricos presentan una resistencia de varios miles de ohm.

III.II Evaluación de los efectos superficiales.

Como fue mostrado al principio de esta sección, los N_s juegan un papel determinante sobre el comportamiento de las heteroestructuras y PR marca una herramienta muy útil al describir que sucede en la superficie. En el grueso de este capítulo se muestra un método que promete evaluar el E_s y la D_R existente en las heteroestructuras, con la finalidad de obtener una correcta interpretación de los espectros de PR y RS. Con la adecuada interpretación de dichos espectros es posible evaluar la existencia de un D-2DEG sin la necesidad de complejos experimentos de magneto-resistencia.

Las mediciones de PR fueron llevadas a cabo utilizando un arreglo experimental como lo es descrito en la Fig. 2.4. Con la intención de explorar campos eléctricos alojados a diferentes profundidades con respecto de la superficie dentro de la heteroestructura se utilizan tres diferentes láseres ($\lambda = 532, 405$ y 325 nm) como fuente de modulación que ofrecen una potencia óptica de 30, 1.6 y 15 mW/cm^2 . Se realizó un estudio a temperaturas de 300, 150 y 77 K. Por otro lado, RS fue medido utilizando un equipo Horiba Xplora Plus en condiciones atmosféricas. La excitación provino de un láser de 532nm en una geometría backscattering.

III.II.I Control de los efectos superficiales por la capa de dopaje.

En la Fig. 3.4 se muestra los espectros de PR obtenidos de la muestra A1 y A2 tomados con las condiciones indicadas. Se observa nuevamente la firma espectral típica de las heteroestructuras en las tres regiones. La muestra A1 se presenta una ausencia de oscilaciones para la Región II, caso contrario para la muestra A2 donde un comportamiento coseinoidal amortiguado es exhibido por lo que se pueden considerar FKO en la Región II, que en adelante se denominaran como FKOs. Con el uso del análisis ya presentado fue posible determinar el valor de campo eléctrico presente en la superficie, $E_s = 2.9 \times 10^7$ V/m, en la muestra A2. Se observa en la Fig. 3.1, la diferencia entre las muestras A1 y A2 es la distancia que existe entre la superficie y la capa dopada a 35 y 100 nm, respectivamente, por lo que se estima que la ausencia de FKOs está asociado a esta modificación en las heteroestructuras.

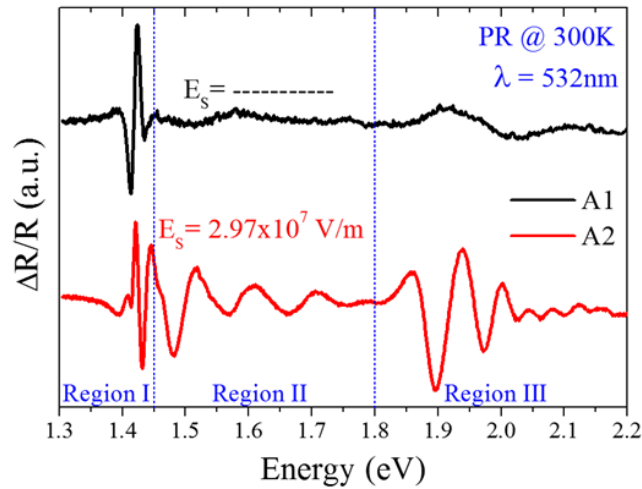


Figura 3.4. Espectro de PR para A1 y A2.

Recordando que las oscilaciones en la Región II han sido asociadas a la superficie, el espectro de A1 hace pensar que se tiene una pequeña intensidad de E_s por lo que las FKOs no son producidas. Sin embargo, tanto A1 como A2 deben presentar los mismos N_s ya que las diferencias entre ellas no están en la capa superficial. En este sentido la ausencia de las FKOs debe ser originada en la posición cercana a la superficie del dopaje para A1. Se sabe que una modificación de la N_{ss} por el tipo, densidad y/o posición de la capa dopada no es esperado, entonces la ausencia de las FKOs se debe al llenado/vaciado de los N_s .

En la literatura, un fenómeno parecido es exhibido por películas de GaAs crecidas por MBE donde un δ -dopaje ha sido colocado a diferentes distancias de la superficie reportado por T.M. Hsu *et al.* en Ref. 48. El espectro de PR para ese set de muestras es mostrado en la Fig. 3.5 donde se aprecia que conforme se acerca la capa dopada a la superficie el periodo de las FKO_s aumenta, lo cual es un indicativo de un incremento en la intensidad del E_s . Para la muestra a la que se le colocó el dopaje a 25 nm de la superficie es evidente la ausencia de las FKO_s.

Para este comportamiento, Hsu sugiere que la desaparición de las FKO_s en la muestra con el dopaje a 25nm de la superficie se debe a que la D_R presente en la superficie es tan pequeña que difícilmente es modulada por el láser lo que implica que no se podrá medir en PR.⁴⁸ Es bien sabido que cuando se tiene una capa dopada la extensión de la D_R será menor que la de un material semi-intrínseco cuando los electrones migran hacia los N_s debido a que existen electrones libres que pueden llenar estos estados en un menos volumen.

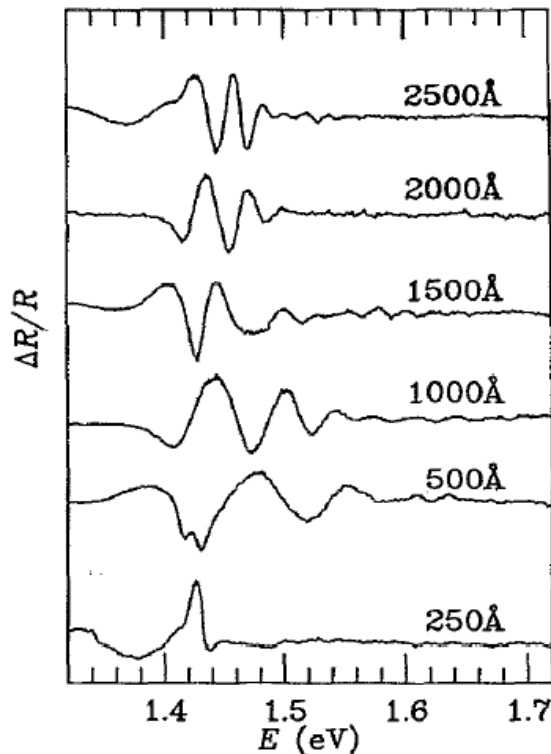


Figura 3.5. Espectro de PR para una muestra de GaAs donde un dopaje tipo delta ha sido colocado a la profundidad indicada para cada espectro en relación a la superficie.⁴⁸

Para comprobar la hipótesis planteada por Hsu, se pretende medir el espesor de la Región de agotamiento. Aunque el método planteado en la sección II.II.II ha sido ampliamente utilizado para estimar D_R en materiales en bulto, en este trabajo es utilizado para caracterizar heteroestructuras. Con el fin de estimar el valor de D_R se analiza el espectro de Raman de A1 y A2 mostrados en la Fig.3.6; tres modos están presentes: LO-GaAs asociados a la D_R , LO GaAs-like relacionado con capas profundas de AlGaAs en la heteroestructura y L- a frecuencias de 287.2, 275.1 y 265.9 cm^{-1} , respectivamente.

El valor de $I(\text{LO})/I(\text{L-})$ es de 0.24 y 1.81 para A1 y A2, con lo que la D_R presenta valores de 9.25 y 49 nm para las muestras. El pequeño valor de D_R en A1 se debe a que la posición del δ -doping cerca de la superficie contribuye a llenar los N_s . Produciendo una D_R pequeña, como era esperado. Este resultado hace pensar que en una D_R con pequeño grosor el proceso de modulación óptica no se lleva a cabo; tal y como es indicado por el comportamiento de PR en la muestra A1 de la Fig. 3.4 y por la muestra con el δ -doping a 25nm en la Fig. 3.5.

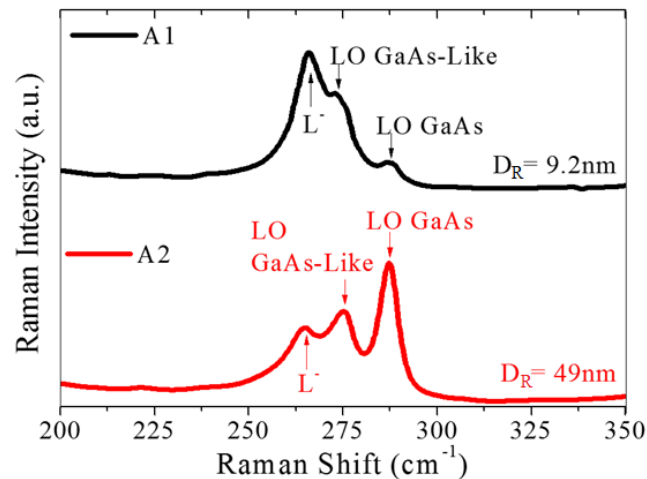


Figura 3.6. Espectro Raman para las heteroestructuras A, se observa la diferente intensidad de los modos presentes.

Para validar el método para determinar la D_R se utiliza una simulación TCAD en modo 1D donde se resuelve la ecuación de Poisson-Schrödinger tomando en cuenta dos niveles energéticos para los N_s , los cuales consisten en un tipo aceptor y un tipo donador como es descrito en la Ref. 49. Estos niveles fueron considerados con una N_{ss} máxima de 10^{13} cm^{-2} disponibles para ser llenados por portadores.⁵⁰ El resultado de la simulación es presentado en la Fig. 3.7, donde se aprecia que las

muestras presentan una Φ de 0.72 y 0.84 eV para A1 y A2, respectivamente, este valor es muy cercano a lo reportado para GaAs en bulo, el cual muestra un barrera de ~ 0.78 eV.

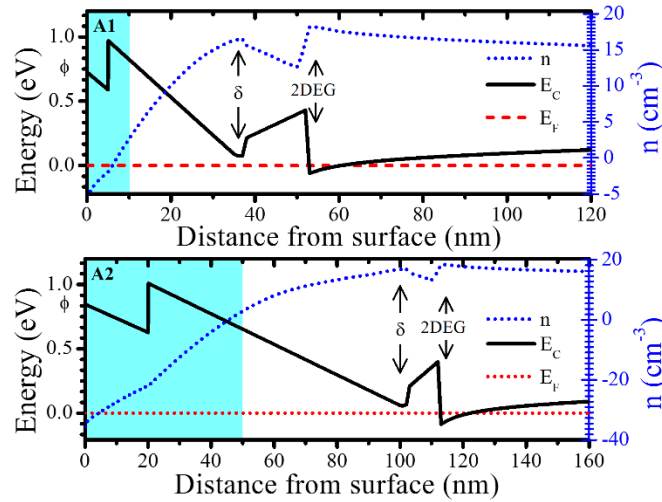


Figura 3.7. Simulación de la banda de conducción y la distribución de portadores (n) para las muestras A1 y A2 en escala logarítmica. “ δ ” representa la posición de la capa dopada, el área sombreada indica la extensión de D_R .

El impacto de los N_s en la distribución de portadores (n , en cm^{-3}) es obtenida utilizando la misma simulación y es mostrada en la Fig. 3.7. La difusión de electrones que migran desde sus hipotéticas posiciones dentro de los átomos que conforman la estructura cristalina hasta ocupar los N_s se lleva a cabo incluso para los átomos que están dentro de la barrera para ambas muestras. La concentración de aluminio usada en la capa barrera ($X = 0.35$) indica que esta capa presentará una concentración intrínseca de electrones del orden de $\sim 10^3 \text{ cm}^{-3}$ por lo que se asume que si $n < 10^3 \text{ cm}^{-3}$ dentro de la barrera se tiene una zona de depleción.⁵¹ De acuerdo a la Fig. 3.7, D_R es de aproximadamente 10nm para A1 y 50nm para A2, valores que concuerdan con los obtenidos experimentalmente, validando la medición.

Con el estudio numérico es posible concluir parcialmente los resultados mostrados, primero se confirma la hipótesis de Hsu al mostrar que A1 presenta una región de agotamiento al menos 5 veces menor que la exhibida por A2, lo cual podría ser la explicación de la falta de FKO_s para la muestra A1. Se observa que esto es efecto de la cerca posición del δ -doping a la superficie para M1. No obstante, la N_{ss} es la misma para ambas estructuras, ya que el método numérica indica que se tendrá una Φ similar en ambos casos.

III.II.II Control de los efectos superficiales por pasivación.

Extendiendo el estudio al otro tipo de superficie indicada en la Fig. 1.3, la superficie pasivada, se propone modificar tanto N_s como N_{ss} al utilizar un proceso de pasivación basado en Azufre el cual ha sido ampliamente utilizado en la superficie de GaAs.^{38,42,52} La muestra A2 fue sometida a un ataque húmedo utilizando HCl:H₂O₂:H₂O (1/10/5000) durante 10 segundos, con esto se busca remover los primeros 3nm⁵³ de la capa tapa donde se alojan los óxidos y reconstrucciones. Posteriormente se utilizó sulfuro de amonio (NH₄)₂Sx [20%] como pasivante.

El proceso de pasivación se llevó a cabo utilizando (NH₄)₂Sx diluido en varios solventes: Agua desionizada (DIW), etanol (EtOH) y alcohol isopropílico (IPA). Con esto se pretende obtener diferentes niveles de reducción en N_{ss} , se obtendrá una pequeña modificación para la solución con DIW y una gran modificación cuando se utiliza IPA. De acuerdo a estudios, esto se debe a que cuando se modifica la constante dieléctrica de la solución pasivante se obtiene un incremento en el efecto pasivador en el GaAs bulto.²⁹

El efecto de la pasivación sobre RS de una heteroestructura AlGaAs/GaAs es mostrado en la Fig. 3.8(a) para la muestra A2 en el cual se ha empleado (NH₄)₂Sx + IPA, comparado con el espectro de la muestra sin pasivar. La intensidad del modo LO después de la pasivación se redujo, mostrando la dependencia de este con la D_R . Este experimento demuestra que incluso para heteroestructuras el método basado en RS para determinar D_R es válido al mostrar el mismo comportamiento que un material en bulto.⁴² Como resultado del proceso de pasivación la D_R en A2 pasó de 49nm para la muestra sin tratar a 33nm en la muestra pasivada con (NH₄)₂Sx + IPA.

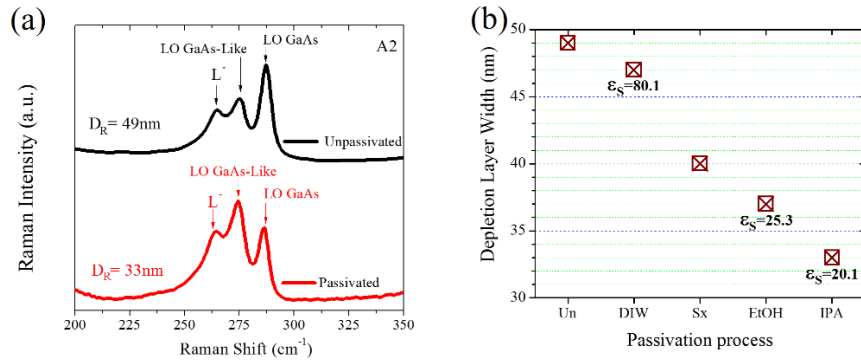


Figura 3.8. (a) RS de A2 antes y después del proceso de pasivación. (b) D_R Vs solvente utilizado en el proceso de pasivación, ϵ_s indica la constante dieléctrica del solvente.

El método de pasivación es mejorado cuando se utiliza un solvente con una menor constante dieléctrica, ϵ_s . El resultado para la muestra A2 indica que cuando se pasiva de la manera tradicional utilizando únicamente $(\text{NH}_4)_2\text{S}_x$ se obtiene una reducción en D_R a 40nm. Esto puede ser controlado modificando con diferentes solvente, al reducir el efecto con DIW se obtiene que D_R pasa a 47nm únicamente, no obstante IPA produce una reducción de 14nm con respecto al valor de D_R sin tratamiento, como es resumido en la Fig. 3.8(b). Para GaAs en bulto, Bessolov *et al.* explican el fenómeno como resultado de un incremento exponencial en la razón de la reacción de formación de una capa de Azufre con el decremento de ϵ_s .⁵²

Las muestras tratadas de A2 fueron sometidas a un análisis de PR utilizando una $\lambda = 325\text{nm}$ y el espectro obtenido se ilustra en la Fig. 3.9, con lo que se busca observar con más detalle el E_s .⁵⁰ Incluso con el cambio en la fuente de modulación, el espectro de PR de la muestra sin tratar presenta FKO's además, comparando con la Fig. 3.4 donde un láser de 532nm fue empleado, la transición asociada a la Región I, aparece con muy poca intensidad ya que la penetración del láser de 325nm es pequeña ($\sim 100\text{nm}$). Es notorio que las FKO's para las muestras pasivadas desaparecen completamente.

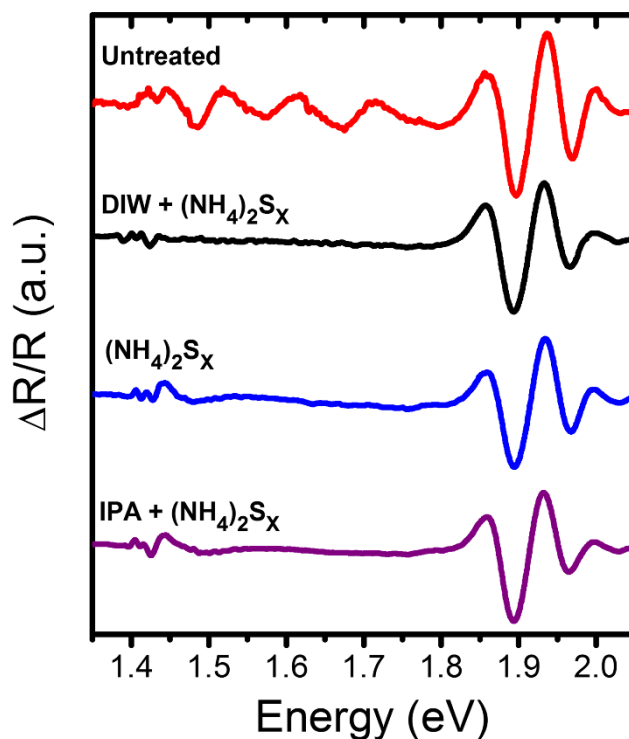


Figura 3.9. PR de A2 tomado con un láser de 325nm, las FKO que dominan el espectro en el rango de 1.45 a 1.8 eV no son apreciadas después de la pasivación.

Cuando se analiza los espectros de PR y Raman para la muestra pasivada utilizando DIW, es de distinguir que la reducción en la región de agotamiento solo fue de 3 nm, es decir se redujo ~5% con respecto a la muestra sin tratar. El hecho anterior sugiere que un D_R pequeña no es la responsable de la ausencia de las FKO's en la muestra A1, sino que se debe de tratar a un efecto en el llenado de los N_{SS} , esto se abordará en la Sec. III.III.

III.II.III Control de los efectos superficiales por temperatura.

El comportamiento de las FKO ha sido estudiado durante tiempo considerable en GaAs, dentro de los cuales se incluyen múltiples análisis referentes al comportamiento de estas en función de la temperatura. En la Fig. 3.10 un análisis hecho por Hsu a las FKO's en función de la temperatura del experimento es mostrado para una muestra de GaAs a la que se le colocó un dopaje delta a 100nm de la superficie.⁴⁸ El estudio hace evidente que las FKO's son sensibles a la temperatura, ya que se observa que conforme se disminuye la temperatura, también lo hace el periodo de las oscilaciones.

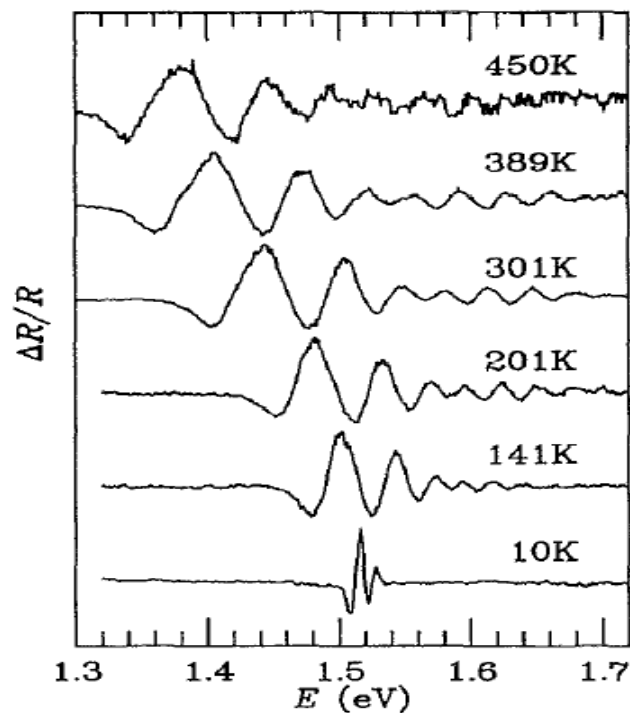


Figura 3.10. Fotorreflectancia para una muestra de GaAs con un δ -doping a 100nm de la superficie en función de la temperatura.⁴⁸

El resultado mostrado por las FKO en el trabajo de Hsu es exhibido también por el espectro de PR de la muestra A2 en la Fig. 3.11 cuando se evalúa a temperaturas de 295, 150, 77, 14 K usando un láser de $\lambda = 405\text{nm}$ como fuente de modulación. A 295K el espectro presenta nuevamente oscilaciones en las tres regiones, al igual que la medición de la Fig. 3.4, indicando que el efecto del cambio de laser nuevamente es mínimo; empero para las oscilaciones de la Región I son reducidas debido a la pequeña modulación que proporciona la señal de 405nm proveniente del láser.

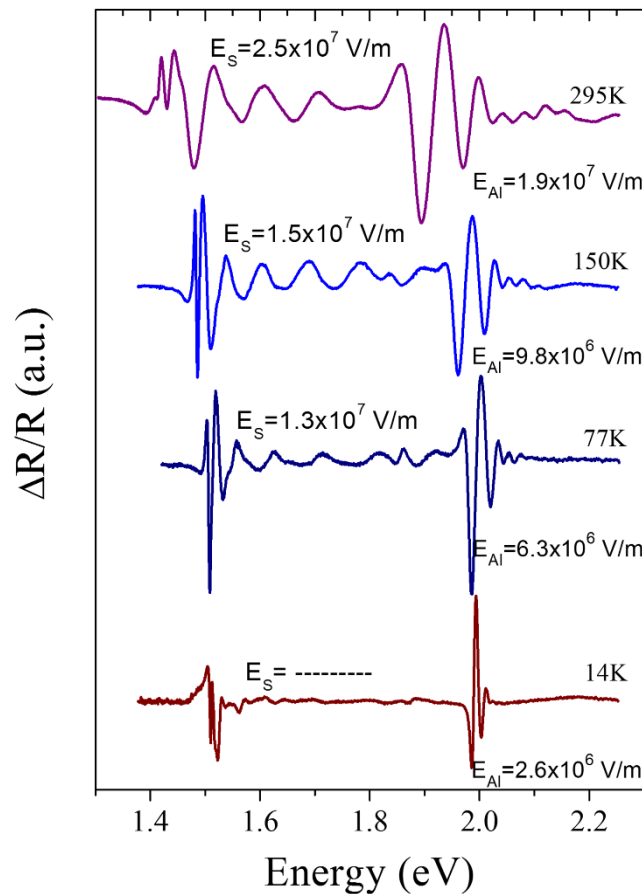


Figura 3.11. Espectro de PR para A2 a diferentes temperaturas tomado con un láser de $\lambda=405\text{nm}$.

Cuando la temperatura es disminuida se observa que las FKO disminuyen en periodo en las tres regiones, además un efecto adicional es mostrado por las oscilaciones de la Región I y II las cuales sufren un corrimiento hacia energías mayores, comportamiento esperado debido a la dependencia del E_g con la

temperatura. Se observa en la Fig. 3.11 que las FKO sufren el comportamiento esperado, al reducir el periodo de estas se reduce también el campo eléctrico que las origina.^{48,54} Las FKO_s sufren una reducción en el periodo, el cual pasa de 47 a 23 meV, lo que indica que E_s va de 2.5 a 1.3×10^7 V/m con la reducción de la temperatura de 295 a 77K. El valor de E_s para el espectro a 14K no fue posible determinarlo ya que no exhibió claramente FKO_s. Zhuo *et al.* explican la disminución del campo eléctrico como un efecto del vaciado de los N_s .⁵⁴

Un efecto interesante de la reducción de la temperatura sobre el espectro de PR ocurre en las oscilaciones de la Región III. Esas oscilaciones disminuyen conforme se disminuye la temperatura, lo que confirma que se trata de FKO asociadas a campos eléctricos dentro del ternario. El campo eléctrico determinado mediante el análisis de dichas FKO es indicado por E_{AI} en el lado derecho de la Fig. 3.11. De acuerdo a la teoría presentada en la Sec. II.II.I, de la intersección del ajuste lineal con el eje y es posible determinar el E_g del material bajo análisis de las oscilaciones FKO en el espectro de PR. Cuando se extiende a las FKO de la Región III es posible evaluar el comportamiento del E_g en función de la temperatura, $E_g(T)$, para el AlGaAs y , de esta forma, extraer la concentración molar de aluminio (X) presente. Utilizando la ecuación:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{(5.41 \times 10^{-4})(T^2)}{(T+204)}, \quad \text{Ec. 3.1}$$

donde

$$E_g(0) = 1.519 + 1.155X + 0.37X^2. \quad \text{Ec. 3.2}$$

Es posible determinar el valor de X al conocer $E_g(T)$ realizando un poco de algebra. En este caso se determina que para todas las temperaturas la concentración obtenida es de 0.35.

III.III Efecto de N_s sobre el espectro de PR.

En la sección III.II se presentó el comportamiento del espectro de PR para las muestras A1 y A2, donde la discusión se centró en la presencia/ausencia de FKO_s; en ese análisis no se demostró una discusión formal de porqué se presenta dicho fenómeno cuando las condiciones en las superficie son variadas. Sin embargo, un pobre entendimiento del efecto que tiene la estructura en sí sobre el espectro de PR puede hacer caer el análisis en una incorrecta interpretación.

De acuerdo al análisis presentado para A1 y A2 se tiene que D_R es de solo 9.2nm para A1 y esto puede ser la causa de la ausencia de las FKO_s, no obstante cuando se analiza la muestra A2 pasivada utilizando DIW como disolvente se tiene el caso en el que el valor de D_R es de 47nm, solo 5% menor que la muestra sin tratar, no obstante las FKO_s no están presente. El resultado anterior sugiere que no es el grosor de D_R responsable de evitar o favorecer la formación de las FKO_s al modular el E_s .

El efecto de D_R sobre el espectro de PR puede ser entendido mejor cuando se consideran los resultados presentados al momento en conjunción con la Ec. 1.2 donde se expresa la relación entre V_{SS} , E_s y D_R . En el caso de A1, si se considera que se obtuvo un valor de $D_R = 9.2\text{nm}$ y una $\Phi \sim 0.72\text{ eV}$, por lo que de acuerdo a la Ec. 1.2 en la superficie de dicha muestra cuando no existe una perturbación causada por el láser está presente un $E_s \sim 1.5 \times 10^8\text{ V/m}$, el cual es producido por una $n_{SS} \sim 10^{13}\text{ cm}^{-2}$, un valor cercano a la totalidad de la N_{SS} disponibles para ser llenados por los electrones provenientes del δ -doping.⁵⁰ Recordando que la función de la capa dopada es proporcionar electrones para el 2DEG y los N_s , la cercana posición del δ -doping producirá un máximo llenado de los estados disponibles que se traduce en una gran intensidad de E_s .

El mecanismo de PR presentado en la sección II.II.I es producido cuando los pares electrón-hueco inyectados por el láser modulan a E_s .²⁹ Este efecto produce una reducción en Φ , denominado como barrera de potencial de la superficie bajo iluminación:

$$\Phi_i = qV_s, \quad \text{Ec. 3.3.}$$

donde V_s es el foto-voltaje dado por:

$$V_s \approx \frac{kT}{q} \ln[N + 1], \quad \text{Ec. 3.4}$$

en función de k , la constante de Boltzmann, T es la temperatura del experimento y N es densidad de portadores foto-generados mediante la iluminación del láser.⁵ La contribución de N es usualmente analizada considerando las corriente foto-inducida y la de saturación (J_{PC} y J_{Sat} , respectivamente).⁵⁵ Además se debe de considerar una razón (r) que describe la relación entre los estados superficiales y el área iluminada⁵⁰, por lo que:

$$N = \frac{J_{PC}}{rJ_{Sat}}. \quad \text{Ec. 3.5}$$

El impacto de un pequeño valor de D_R y uno de N_{ss} prácticamente lleno, afectará a J_{PC} , ya que:^{50,55}

$$J_{PC} = \frac{qP\gamma(1-R)}{\hbar\omega} \left[1 - e^{-\alpha D_R} + \frac{\alpha L_d}{1+\alpha L_d} e^{-\alpha D_R} \right], \quad \text{Ec. 3.6}$$

en esta última ecuación, P es la intensidad de la luz, γ es la eficiencia cuántica, α es el coeficiente de absorción y L_d es la distancia de difusión de los portadores minoritarios, $L_d \sim 10^{-6}$ m para GaAs.⁵⁶

Los láseres usados en este estudio presentan un valor de α que permiten que $\alpha L_d \gg 1$, lo cual implica que el láser utilizado no altera la generación de FKO (como se ha demostrado) y que el efecto de D_R sobre J_{PC} puede considerarse despreciable, lo que reduce la Ec. 3.6 a:

$$J_{PC} = \frac{qP\gamma(1-R)}{\hbar\omega}. \quad \text{Ec. 3.7}$$

En la medición de PR de la Fig. 3.4 el mismo láser se utilizó para modular las dos muestras, entonces solo γ y R de la Ec. 3.7 variarán para cada muestra y están implicadas en la ausencia de las FKO_s para A1. La reflectividad de la superficie es directamente proporcional a E_s^{14} . Por lo que para una gran intensidad de E_s , R aumentará. Además, considerando que los N_s están virtualmente llenos en A1, γ tendrá un valor reducido. De acuerdo a la Ec. 3.7, si R incrementa y γ se reduce se obtendrá una pobre cantidad de corriente foto-inducida, lo que se traduce en una pobre densidad de N (Ec. 3.5).

De acuerdo a la ecuación 3.4, cuando se tiene la condición de que N presenta un valor despreciable Φ_i exhibirá un valor muy cercano a Φ , reduciendo la amplitud del espectro de PR:⁵⁶

$$\frac{\Delta R}{R} \sim V_{SS}^{2/3} \left(1 - \sqrt{1 - V_s/V_{SS}} \right). \quad \text{Ec. 3.8}$$

El análisis anterior implica que la ausencia de FKO_s para la muestra A1 no es solo efecto del pequeño valor de D_R , también el hecho de que N_{ss} estén suficientemente llena afectan la modulación de PR porque, como se demostró, alteran los procesos de generación/recombinación en los superficies. El mismo efecto sucede en A2 pasivado cuando (incluso) la muestra con 43nm de Región de deplexión no presenta FKO_s debido a que el proceso de pasivación llenó los N_s disponibles, nuevamente evitando la modulación.

En el escenario de que una superficie tenga pocos estados energéticos disponibles para participar en la modulación por el láser, la presencia de FKO es poco probable ya que solo pueden ser creadas cuando E_s es modulado entre las condiciones de campo bajo y campo alto.¹⁴ Es decir, E_s debe ser variado al menos entre 10^5 y 10^7 V/m, para lo cual es requerido una gran N , imposible de obtener en cuando los N_s están llenos. El caso contrario ocurre para bajas temperaturas donde los N_s están parcialmente vacíos, la N generada en estas condiciones no es suficiente para llevar al campo eléctrico en la superficie a la condición de campo alto, por lo tanto no se producirán FKO.

Para la correcta interpretación de los espectros de PR se debe de tener muy en cuenta la distribución de las capas en las heteroestructuras, el grosor de la región de agotamiento y la densidad de estados superficiales. Aunque PR es una técnica muy poderosa para caracterizar la superficie de un semiconductor y el efecto que tiene sobre una heteroestructura se ha demostrado que la ausencia de señales espectrales correspondientes al campo eléctrico en la superficie no es necesariamente una evidencia de que la superficie es ideal.

III.IV Efecto de D_R en sistemas D-2DEG.

Una alternativa que se ha empleado para mejorar el desempeño de las heteroestructuras consiste en diseñarlas para que contengan un D-2DEG, ya que este tipo de heteroestructuras son muy útiles en el área de metrología donde es necesario disponer de arreglos de resistencias que puedan ofrecer valores diferentes a la constante de von Klitzing.⁵⁸ En HEMT ha mejorado la velocidad de operación⁵⁹ y reducido las corrientes de fuga,⁶⁰ dos de los problemas de optimización más importantes en este dispositivo. Sin embargo, la formación de un sistema D-2DEG continúa siendo un problema en el crecimiento de heteroestructuras y se hace más evidente cuando se busca que cada 2DEG presente las mismas propiedades. La física de superficie e interfaces juega un papel muy importante para el desarrollo de sistemas D-2DEG, por lo que en esta sección se muestra la implementación de técnicas ópticas no destructivas para evaluar el efecto de la superficie sobre esta clase de sistemas.

El análisis de la muestra M1, diseñada para presentar un D-2DEG, mediante PR se inicia cuando se considera el espectro mostrado en la Fig. 3.12 realizado con una $\lambda = 532\text{nm}$. Se observa la existencia de las firmas espectrales típicas para las tres regiones. Cuando se analizan las FKO se tiene que E_s posee un valor de 1.6×10^7 V/m,

lo cual indica que en la superficie existe una n_{ss} de $3.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Esta muestra al someterse a un proceso de pasivación utilizando $(\text{NH}_4)_2\text{S}_x$ sin diluir pierde las oscilaciones en la Región II, como era de esperarse. Para el caso de la muestra M2 se obtiene únicamente ausencia de FKO's, como consecuencia de la cercana posición de la capa dopada a la superficie.

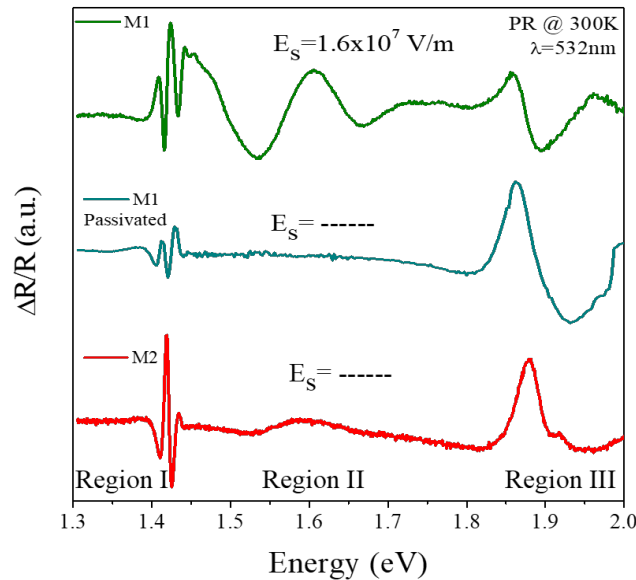


Figura 3.12. Espectros de PR tomados a 300K para las heteroestructura tipo M.

El análisis mediante PR puede ser mejor entendido cuando se considera la profundidad de penetración, d ; si se usa un láser con $\lambda = 532\text{nm}$ se obtendrá información de aproximadamente 1200nm desde la superficie. Por lo que en el espectro analizado en la Fig. 3.12 se exponen señales de los dos QW embebidos en la heteroestructura, siendo las oscilaciones en la Región I una mezcla de las provenientes en las interfaces AlGaAs/GaAs. Cuando se cambia el láser usado para modular la muestra a $\lambda = 325\text{nm}$ se reduce la d que se puede explorar, con lo que las señales obtenidas serán originadas a aproximadamente hasta 100nm desde la superficie.^{7,33} Considerando lo anterior es posible dividir el análisis utilizando una longitud de onda pequeña para caracterizar las capas más cercanas a la superficie, esto incluye a los QW#2 en las heteroestructura tipo M.

En la Fig. 3.13 se presenta la medición de PR para las muestras M con un láser de pequeña longitud de onda. Cuando se modula con $\lambda = 325\text{nm}$ a la muestra M1 se observa que las FKO's dominan el espectro, por lo que se obtiene que el campo

eléctrico es de 3.5×10^7 V/m, el cual es un valor superior al obtenido con $\lambda = 532$ nm y es explicado debido a la variación en la potencia óptica de los láseres.⁴⁸ Para M1 se observa una clara ausencia de las oscilaciones en la Región I, caso contrario a lo exhibido por esta misma muestra en la Fig. 3.12, aunque con $d = 100$ nm proporcionada por la modulación con $\lambda = 325$ nm debería ser suficiente para modular el campo eléctrico en QW#2 de la muestra M1.

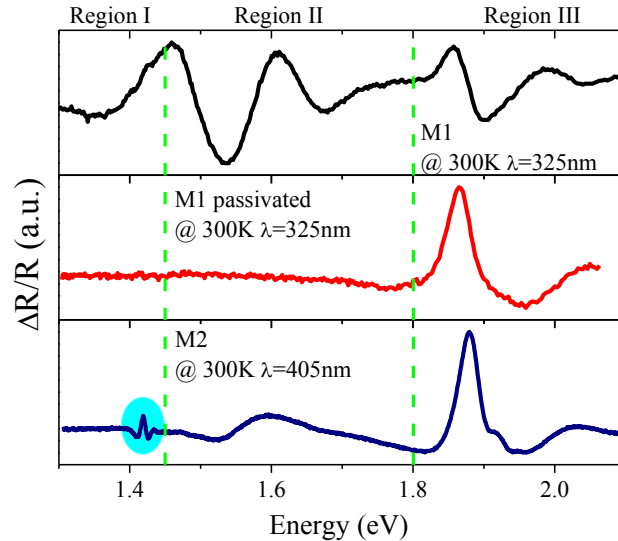


Figura 3.13. PR medido con una pequeña línea de modulación. Las oscilaciones asociadas con la formación del 2DEG en la muestra M2 es presentada con una área sombreada.

Para la muestra M1 después del proceso de pasivación en la Fig.3.13 el espectro de PR tampoco muestra oscilaciones en Región I, ni FKO's. El hecho de que la muestra M1 antes y después del proceso de pasivación no exhiba oscilaciones en la Región I es debido a que no existe un campo eléctrico atribuible a la interface AlGaAs/GaAs marcada como QW#2 en la Fig. 3.3, esto se puede entender como un efecto de los N_S y la D_R como será explicado en líneas subsecuentes.

Para analizar el QW#2 para la muestra M2 se utiliza $\lambda = 405$ nm ya que este se ubica a mayor distancia que el QW#2 de M1, por lo que es necesario incrementar ligeramente d a 120nm para modular los campos eléctricos presentes en esta interfaz. A diferencia de M1, esta muestra presenta una señal en la Región I, indicando que es probable la formación de un 2DEG en QW#2. Además no existe un comportamiento de FKO's incluso con esta línea de modulación causada por la pequeña distancia de la capa dopada a la superficie, cayéndose en el caso de la muestra A1.

El análisis numérico resulta de mucha ayuda para interpretar los resultados de PR obtenidos por la muestras M y es mostrado en la Fig. 3.14. Para el caso de la muestra M1 con una superficie ideal no se tendrían efecto de los N_s serán despreciables sobre el sistema 2DEG por lo que no se afectará la n en el dispositivo y el doblamiento de la E_c cercano a la superficie será prácticamente cero. Como consecuencia el QW#2 se ubica debajo del nivel de Fermi por lo que la formación de un 2DEG es posible. Cuando se considera la superficie real una $\Phi \sim 0.7$ eV es formada, el doblamiento de las bandas ocurre y el QW#2 es empujado hacia arriba del nivel de Fermi, evitando la formación del 2DEG.

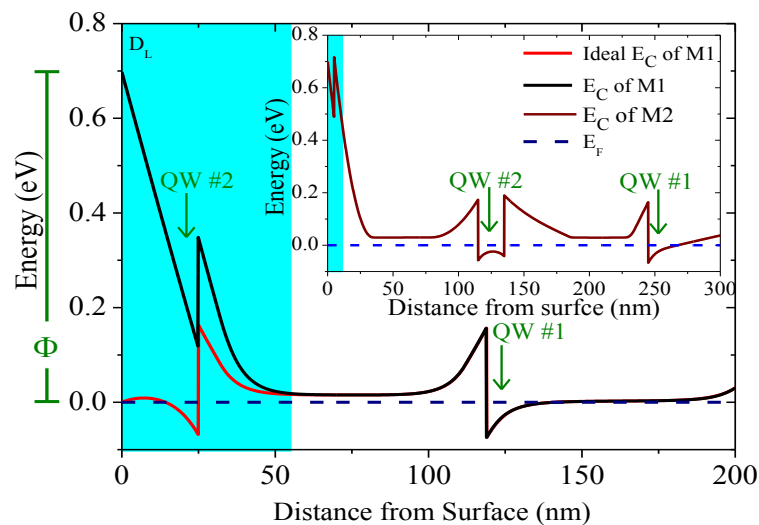


Figura 3.14. Simulación del perfil de la E_c para las muestras tipo M, el área sombreada indica la extensión de D_R .

El análisis de RS indica que para la muestra M1 pasivada se presenta una D_R de 30nm por lo que el QW#2 radica dentro de la región de agotamiento, esto evita la formación del 2DEG y la presencia de oscilaciones en la Región I para esta muestra en la Fig.3.13. Por el otro lado, M2 presenta una D_R de solo 11nm, por lo que la posición de QW#2 está bastante lejos de la influencia de los N_s . En el inset de la Fig. 3.14 se muestra el diagrama de la E_c para M2 donde se aprecia que el doblamiento de la banda se encuentra en una región espacial muy pequeña, permitiendo la formación del sistema D-2DEG ya que los dos QW se ubican por debajo de E_F .

El análisis numérico indica que solo la muestra M2 presentará un D-2DEG debido a que solo en esta heteroestructura los dos pozos cuánticos se ubican por debajo del nivel de Fermi. Este estudio concuerda con el resultado experimental de PR en el hecho de que solo la muestra M2 presenta oscilaciones en la Región I. Los hechos presentados en esta sección confirman que cuando las primeras capas de las muestras M son analizadas mediante PR con una línea de modulación de pequeña d , las oscilaciones en la Región I aparecerán solo cuando la formación del 2DEG más cercano a la superficie ocurra.^{36,61} Por lo tanto, un análisis de PR será útil para evaluar la formación de un D-2DEG sin la necesidad de usar complejas y costosas técnicas de caracterización como magneto-resistencia.

Capítulo IV

Resultados del estudio de dispositivos Self-Switching Diode.

La importancia del estudio de los Self-Switching Diode, SSD, radica en el valor que han adquirido al convertirse en el centro de nuevos avances en la detección de frecuencia THz.⁶² Las novedosas propiedades que presentan estos dispositivos como la detección de señales débiles sin la necesidad de aplicar voltaje extra,⁶³ junto con una alta sensibilidad⁴⁷ y sencillez en su fabricación¹⁹ hacen de este dispositivo una interesante promesa para contribuir al llenado del vacío existente de aplicaciones en la región de THz. De este modo, el SSD más estudiado para efectos de detección ha sido típicamente el ilustrado en la Fig. 1.6. Esta forma del dispositivo se denomina “L-Shape” por la forma de sus trincheras.²⁰ La geometría planar de este dispositivo ha permitido demostrar que el concepto es útil a ultra altas frecuencias.

Cuando se mezcla la ingeniería de estados superficiales con los modernos procesos de litografía es posible contribuir a la fabricación de dispositivos novedosos con arquitectura planar, es decir donde las terminales eléctricas se encuentran situadas lateralmente, en lugar de estar colocados en la superficie y el sustrato. En transistores, por ejemplo, el uso de la arquitectura planar permite disminuir las capacitancias parasitas presentes en comparación con tecnologías convencionales. Por lo tanto, en las páginas siguientes se presenta un análisis numérico de un dispositivo basado en estados superficiales con arquitectura planar: El SSD.

IV.I Parámetros geométricos y de análisis.

El estudio realizado consiste en un análisis paramétrico sistemático de dos geometrías de SSD, la geometría tipo L y la tipo V, denominadas como L-Shape y V-Shape, respectivamente. Un gráfico esquemático de estas geometrías es presentado en la Fig. 4.1, donde los parámetros geométricos a variar son ilustrados. Este tipo de

El análisis numérico arrojará, entre otros resultados, el comportamiento I-V del SSD en función de la geometría analizada. Conociendo este parámetro es posible evaluar al SSD y contrastarlo con otro tipo de rectificadores al considerar que en presencia de una polarización a pequeña señal el SSD se comportará como un dispositivo tipo *square-law*. En este caso, la resistencia diferencial de un SSD puede ser determinada cuando se tiene que

$$R_V = \left(\frac{dI}{dV} \Big|_{V=0} \right)^{-1}. \quad \text{Ec. 4.1}$$

Y la no-linealidad es

$$N_V = \frac{d^2I}{dV^2} \Big|_{V=0}, \quad \text{Ec. 4.2}$$

Este parámetro es de mucha importancia en la caracterización del dispositivo ya que una mayor N_V se traduce en una mayor señal rectificada. Otro parámetro que describe que tan buen rectificador es un SSD es la sensibilidad [69]

$$\gamma_0 = R_V N_V. \quad \text{Ec. 4.3}$$

La magnitud de la salida DC de un rectificador está en función del valor de la señal de entrada (V_{in}) de acuerdo a las expresiones:

$$V_{DC} = -\frac{1}{4}\gamma_0|V_{in}|^2, \quad \text{Ec. 4.4}$$

$$I_{DC} = -\frac{1}{4R_V}\gamma_0|V_{in}|^2. \quad \text{Ec. 4.5}$$

IV.II Principio de operación del SSD.

La densidad de carga en el 2DEG litografiado, ρ , para las geometrías L- y V-Shapes (cuando no se ha aplicado polarización en los electrodos) es mostrado en la Fig. 4.2 (a) y (b), respectivamente. Fuera del nanocanal, ρ presenta un valor cercano al valor del dopaje de background dado en la simulación ($\sim 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) para ambas estructuras y representado por un color naranja-rojizo. La distribución espacial de los electrones dentro del canal es diferente para las estructuras L y V. En el L-Shape se presenta el caso de que ρ decrece a $1.5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, color cian, a lo largo de W y disminuye sistemáticamente conforme se acerca desde el centro del canal a las trincheras, indicado por un color morado el mínimo valor de ρ ($1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$). La

reducción de ρ a lo largo del nanocanal en el L-Shape puede ser explicada cuando se considera el efecto de n_{SL} , los cuales al ser llenados producirán una D_R a lo largo. Esto también es observado para los V-Shapes, donde la formación de la D_R ocurre a lo largo de las trincheras y, para esta geometría, un vórtice de ausencia de electrones es formado con una mínima ρ de $6.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ con una extensión de 50nm como es indicado en la Fig. 4.2(b).

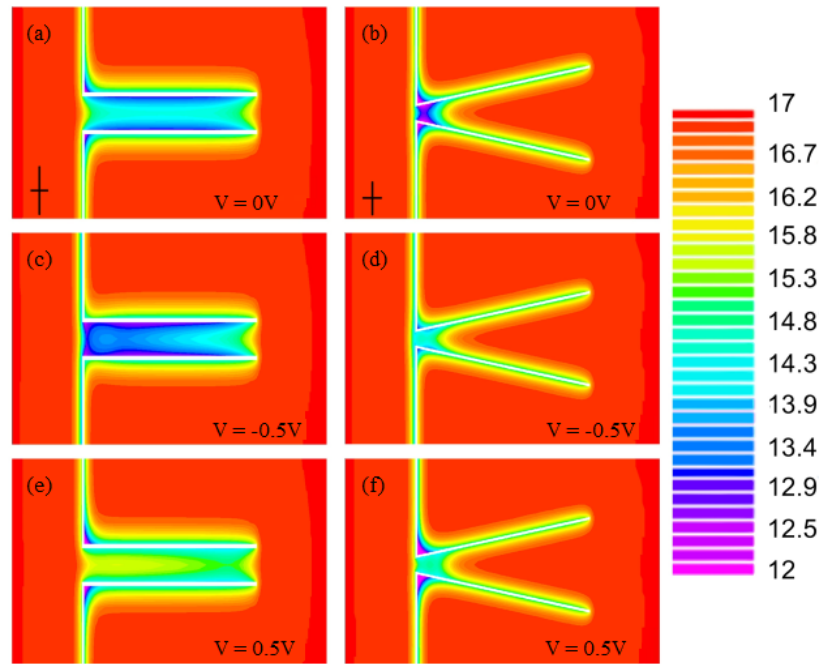


Figura 4.2. Distribución de electrones (en escala logarítmica) para los SSD con la geometría mostrada en Fig. 4.1. El L-Shape es analizado para las polarizaciones (a) $V=0$, (c) $V = -0.5$ y (e) $V = +0.5$; mientras que el V-Shape es mostrado en (b) $V=0$, (d) $V = -0.5$ y (f) $= +0.5$. Las líneas de las cruces representan 100nm de longitud cada una.

La simulación sin polarización permite describir un parámetro interesante, ya que la D_R presente en estas condiciones definirá parte del comportamiento I-V del SSD. Se observa que si el canal está agotado completamente o parcialmente, es necesario que exista una ρ mínima que asegure una trayectoria que los portadores puedan seguir para cruzar el dispositivo de electrodo a electrodo. De esta manera, en un diseño inicial de un SSD se debe de garantizar que el nanocanal a 0V presente una baja densidad de portadores, esto garantizará el comportamiento tipo diodo del SSD ya que será necesario aplicar un voltaje mínimo para que exista flujo de portadores en el canal, es decir, un voltaje de umbral, V_{TH} , al igual que en un diodo p-n.

Más adelante se describirá el efecto de la porción que ocupa D_R en términos del W , pero se debe tener en mente que una baja concentración de portadores en el canal a 0V se traduce en un V_{TH} mayor. Comparando la extensión de D_R para la Fig. 3.2(a) y (b) se espera que los V-Shapes presenten una menor demanda de voltaje para encender el SSD. Cuando el ánodo es polarizado con un voltaje negativo (y el cátodo se mantiene a 0V) se establece una polarización tipo inversa estableciendo una ρ diferente a la condición de 0V. En este caso, el efecto más notorio es el aumento de D_R en el nanocanal. En esta condición el canal puede considerarse en estado de *pinch-off* o ahorcamiento, debido a que la ausencia de portadores libres evitará cualquier flujo de corriente atravesado el canal. Como cualquier diodo, en un SSD puede ocurrir una corriente de fuga cuando la polarización inversa es fuertemente incrementada.

En la Fig. 4.2(c) se muestra la ρ para el L-Shape SSD en polarización inversa ($V = -0.5V$), donde una fuerte depleción es ocasionada ya que ρ dentro del nanocanal es disminuida dos órdenes de magnitud en comparación con la condición de 0V. Para el V-Shape SSD en la Fig. 4.2(d) se observa que en este caso la condición de *pinch-off* no ocurre ni en el vórtice del canal a $V = -0.5V$ debido a la pequeña extensión espacial de D_R en el nanocanal. Por lo tanto en este caso, se esperaría que la ρ sea fácilmente modificada por la polarización inversa permitiendo la existencia de una corriente de fuga.

La distribución de portadores para los SSD en una polarización directa ($V = +0.5V$) es mostrada en la Fig. 4.2(d) y 4.2(e) para los L- y V-Shapes, respectivamente. La polarización directa es establecida cuando la terminal positiva de la fuente de voltaje es colocada sobre el ánodo. Para voltajes mayores que V_{TH} los N_S presentes en las trincheras son vaciados, provocando una reducción en el tamaño de la D_R permitiendo la conducción eléctrica a lo largo del canal. De forma similar, para el V-Shape la redistribución de la ρ causada por la polarización directa será reflejado en una reducción de D_R e incrementando ρ a $3.1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, valor suficiente para favorecer el flujo de portadores.

Con el análisis del potencial eléctrico interno del dispositivo es posible entender su funcionamiento cuando se examina a lo largo del canal, desde el cátodo hasta el ánodo que se muestra en la Fig.4.3. Cuando se polariza el ánodo con $V = -2V$, los electrones que desean viajar del ánodo al cátodo encuentran en el canal un barrera de potencial de mayor energía a la suministrada evitando cualquier flujo de corriente. En este caso se presenta una región de agotamiento extendida por todo el

canal. Caso contrario se presenta cuando $V = 2V$ y los electrones no encuentran barrera al pasar de ánodo a cátodo, por lo cual el canal está abierto y es posible el flujo de portadores.

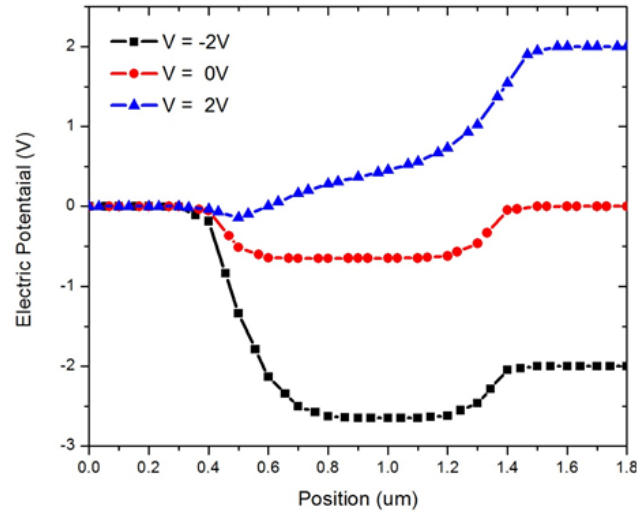


Figura 4.3. Simulación del potencial interno a lo largo del canal del SSD para las polarizaciones indicadas.

IV.III Respuesta I-V.

La respuesta I-V de los SSD en la Fig. 4.1 es mostrada por la Fig. 4.4(a) donde se aprecia que ambas geometrías tienen un $V_{TH} \sim 0V$, sin embargo como se ha comentado, la D_R para los L-Shapes es mayor que la mostrada por la geometría tipo V, consecuentemente los V-Shapes necesitarán un menor valor de V_{TH} para poder abrir el canal y permitir el flujo de portadores. La pequeña D_R para la geometría tipo-V también facilitará la aparición de una corriente en inversa para voltajes relativamente pequeños ($\geq -0.25V$, en este caso).

La resistencia diferencial en función del voltaje aplicado es graficada en Fig. 4.4(b), donde los cambios en R_V resultan de la modificación en la extensión de la D_R ya que esta afecta la concentración de portadores y consecuentemente a la resistencia eléctrica a lo largo del nanocanal. Para el L-Shape varía de $\sim 90M\Omega$, cuando existe una polarización inversa a $\sim 250K\Omega$ cuando se ha aplicado un voltaje mayor que V_{TH} . Por otro lado, para el SSD V-Shape R_V alcanza su máximo valor a $V = -0.01V$ de $2M\Omega$ y cae hasta $200K\Omega$ para un voltaje aplicado mayor que $0.25V$. Es de notar que la R_V para el V-Shape toma valores pequeños incluso para una polarización negativa, permitiendo la existencia de una corriente inversa en esta geometría. R_V es un

parámetro clave en el diseño de los SSD ya que el acople de impedancia entre el sistema que adquiere la señal y el rectificador será un elemento clave para definir la eficiencia del dispositivo.

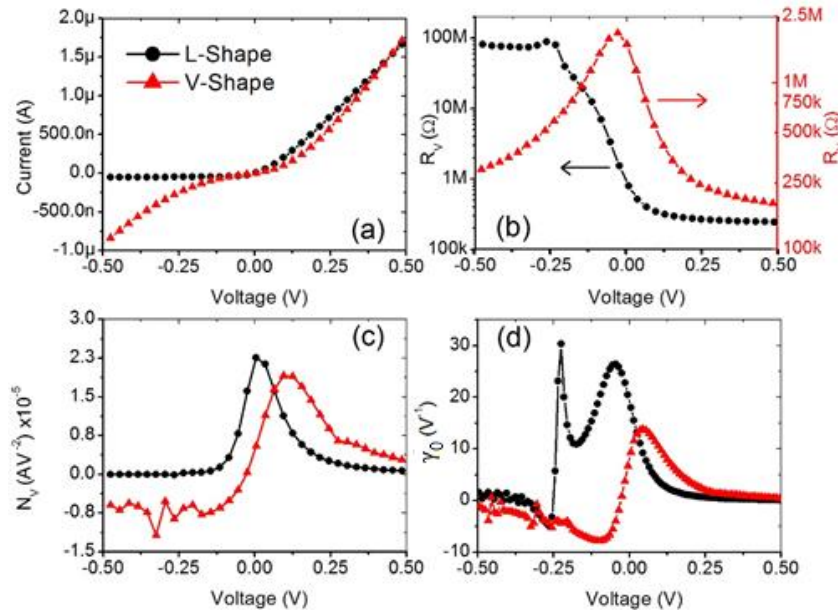


Figura 4.4. Simulación de un barrido en DC de -0.5 a 0.5V de los SSD mostrados en Fig. 4.1. (a) Curva I-V; (b) resistencia diferencial; (c) No-linealidad; (d) Sensibilidad.

La no-linealidad (N_v) y la sensibilidad (γ_0) de los SSD en función del voltaje aplicado son mostradas en la Fig. 4.4(c) y 4.4(d), respectivamente, siendo estos parámetros clave en la generación de una señal DC, como es indicado por las Ec. 4.4 y 4.5. A mayor N_v se producirá una mayor γ_0 , siendo este último parámetro directamente proporcional a la magnitud de la señal DC originada en el proceso de rectificación. La geometría del SSD es crítica para definir la extensión de D_R y de acuerdo a la Fig. 4.3(a) para el V-Shape el rango de voltaje aplicado que cambia la corriente de directa a reversa es estrecho. Esto impacta en N_v ya que esta presenta un valor de $4.5 \times 10^{-6} AV^{-2}$, valor en el rango de los detectores basados en tecnología metal-aislante-metal donde AV^{-2} varía entre 10^{-4} y $10^{-6} AV^{-2}$.⁶⁹

Considerando que el comportamiento I-V del dispositivo define N_v , la estructura L-Shape presenta una no-linealidad de $2.2 \times 10^{-5} AV^{-2}$ catapultando esta opción como una buena elección como rectificador para los sistemas de recolección de energía. La sensibilidad del L-Shape sugiere que la mejor rectificación puede ser obtenida usando un voltaje extra de -0.225 V, sin embargo a 0V la $\gamma_0 = 19.2 V^{-1}$, la

cual es al menos dos veces superior comparada con la $\gamma_0 = 8.1 \text{ V}^{-1}$ exhibida por la geometría tipo-V. Avances recientes en rectificadores Cu/CuO/Au han permitido obtener sensibilidades a cero volts de 4V^{-1} ,⁷⁰ por lo que el uso de las geometrías L- y V-shapes presentadas en este estudio indican que teóricamente se puede incrementar por un factor de 5 y 2, respectivamente. Siendo la sensibilidad de los SSD más alta reportada para un rectificador.

IV.IV. Consideraciones sobre el diseño de SSD.

Antes de fabricar un dispositivo siempre es necesario tener en claro el desempeño que presentará y garantizar que se tendrá la máxima eficiencia posible. En el caso de los SSD es importante seguir las consideraciones de diseño que puedan mejorar el performance ya que la geometría del dispositivo juega un papel vital en la respuesta I-V, por lo tanto también lo tendrá sobre la salida DC. En este sentido, dos parámetros tienen que ser afinados dependiendo de la aplicación: V_{TH} y γ_0 . Para esta tarea, un análisis sistemático fue realizado para evaluar todos los parámetros geométricos mostrados en la Fig. 4.1 (L, W, W_V , etc.) y es presentado en las siguientes subsecciones utilizando como figura de mérito. De la Ec. 4.5 se observa que la corriente rectificadora es proporcional a V_{in} y a $\gamma_0/4R_V$, siendo este último parámetro abreviado como K_V y utilizado como la segunda figura de mérito de este estudio.

IV.IV.I Ancho del canal.

El primer parámetro analizado a través de las simulaciones y de las curvas I-V es el ancho de canal, W . El L-Shape SSD exhibe el comportamiento I-V mostrado en la Fig. 4.5(a), donde se observa que el incremento en tamaño de W afecta el V_{TH} llevándolo a valores cada vez más cercanos a cero. Esto es consecuencia de variar el área donde se presenta la D_R , ya que para valores pequeños de W (60nm) prácticamente todos los electrones libres del canal se han movido para ocupar los estados superficiales disponibles en las trincheras, esto ocasiona que el canal se presente una R_V de $143\text{M}\Omega$. Como consecuencia de la ausencia de portadores libres será necesario vaciar una gran cantidad de estados superficiales para producir fenómenos de conducción a lo largo del canal, esto implica un valor de V_{TH} de al menos 0.25V para $W = 60\text{nm}$.

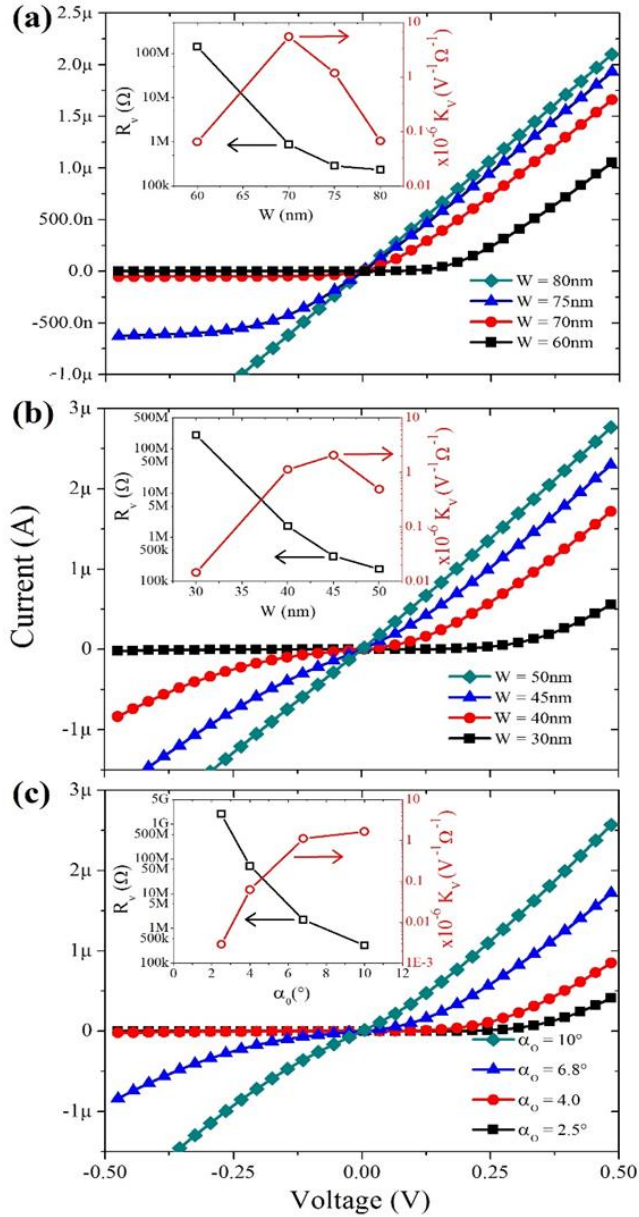


Figura 4.5. Comportamiento I-V para los SSD de la Fig. 4.1 cuando únicamente se ha modificado el valor de W para (a) L-Shape y (b) V-Shape. En (c) se muestra las curvas I-V para varios ángulos de apertura del canal en los V-Shapes. Los insets muestran el comportamiento de R_v y de K_v para las variaciones propuestas.

Por otro lado, si se incrementa el espesor de W se tendrá el caso de que el canal no llegue a la condición de *pinch-off* por lo que existirá un pobre o nulo comportamiento de rectificador. Este caso es mostrado por el SSD con $W = 80\text{nm}$ en la Fig. 4.5(a), donde se observa que existe una corriente inversa muy marcada, de

hecho la curva I-V no muestra un comportamiento tipo diodo sino que recuerda la curva de una resistencia eléctrica, en este caso a cero volts $R_V = 233\text{K}\Omega$, además K_V es disminuido por el bajo comportamiento I-V tipo diodo, pero V_{TH} es cero para esta geometría. Lo anterior indica que en los diseños habrá un relación entre conseguir un $V_{TH} \sim 0\text{V}$ y una alta K_V .

Para los V-Shapes la respuesta I-V en función del valor de W es mostrada en la Fig. 4.5(b). En esta geometría se presenta el mismo comportamiento DC en función de W que con la geometría L-Shape. Para la geometría tipo-V se tiene que la pequeña D_R entre las trincheras obliga a esta geometría a tener el comportamiento tipo diodo solo para valores de $W \leq 40\text{nm}$. En el inset de la Fig. 4.5(b) se encuentra que R_V cambia de $200\text{M}\Omega$ a $190\text{k}\Omega$ cuando W se incrementa de 30 a 50nm.

Para el caso de la variación del ángulo de inclinación de las trincheras en los V-Shapes (α_0) se tiene un comportamiento I-V mostrado en Fig. 4.5(c). Para esta geometría el aumento de los portadores libres que pueden ocupar los N_s disponibles disminuye conforme se acercan la distribución de estos a al vórtice del canal, provocando que la D_R sea estrecha cerca de este y cada vez más pequeña conforme se incrementa α_0 . En esta geometría la pequeña extensión de D_R en dispositivos presentará un incremento de K_V que va de 3×10^{-9} a 1.6×10^{-6} con la ampliación de α_0 de 2.5° a 10° , tal y como es resumido en el inset de la Fig. 4.5(c). Para un valor amplio de α_0 se producirá una corriente en reversa bastante importante, por lo que en diseños se debe de cuidar el valor de V_{TH} teniendo en cuenta la relación entre α_0 y K_V .

IV.IV.II Largo del canal.

El comportamiento I-V para los SSD cuando únicamente se ha variado el largo del canal, L_0 , en relación a la Fig. 4.1 es mostrado en la Fig. 4.6. Cuando se pretende tener un dispositivo que trabaje en frecuencias súper y ultra altas es necesario reducir el tiempo de transito de los portadores entre los electrodos, lo cual puede ser logrado al mejorar la movilidad del 2DEG o bien reduciendo L_0 , favoreciendo en ambos casos el transporte balístico en los SSD.²⁴ Como lo muestra la Fig. 5(a) y 5(b), el valor de V_{TH} cambia a voltajes menores para ambas geometrías cuando L_0 es reducido.

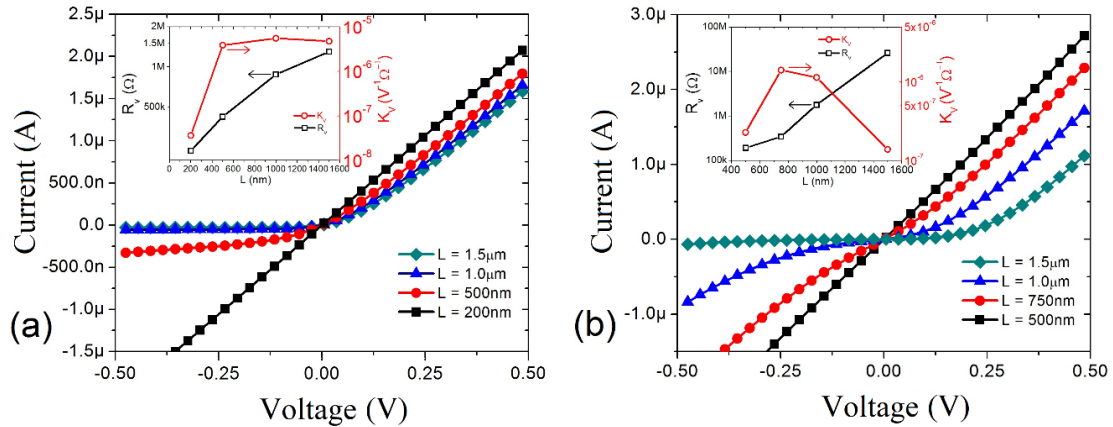


Figura 4.6. Respuesta DC para los SSD cuando el largo de canal (L_0) es modificado. (a) L-Shapes; (b) V-Shapes. En los insets se muestra el comportamiento de R_V y K_V .

La geometría V-Shape presenta mayor sensibilidad a la modificación de L_0 , ya que V_{TH} va de 0.125V para $L_0 = 1.5\mu\text{m}$ a $\sim 0\text{V}$ para $L_0 < 750\text{nm}$, en comparación a la geometría tipo L. Lo anterior es entendido cuando se analiza que en los V-Shapes el transporte de portadores es favorecido por la pequeña D_R existente, lo cual también mejorará la respuesta en frecuencia del dispositivo. En otras palabras, la pequeña D_R puede facilitar el transporte balístico ya que la trayectoria libre media es mayor que el tamaño de la D_R .

R_V y K_V a cero volts son graficadas en los insets de la Fig. 4.6 en función de la alteración en L_0 . La disminución de L_0 produce un decremento sobre R_V e impacta positivamente en la cantidad de portadores que fluye a través del nanocanal en ambas geometrías. Por ejemplo, la variación en L_0 de $1.5\mu\text{m}$ a 500nm produce un cambio sobre R_V de $1.3\text{M}\Omega$ a $423\text{k}\Omega$, mientras que la misma modificación en V-Shape produce la modificación en R_V de $25\text{M}\Omega$ a $190\text{k}\Omega$. Como se comentó, la reducción del largo del canal mejora la corriente eléctrica sobre el dispositivo, sin embargo la no-linealidad es disminuida. Esto impacta sobre la K_V , como es mostrado por los insets, para valores de L_0 menores que $1\mu\text{m}$ y 750nm para los L- y V-Shapes, respectivamente.

De acuerdo al análisis anterior, la principal consideración para diseñar un SSD que trabaje a THz es obtener un valor apropiado de L_0 . Mateos *et al.*, utilizando simulaciones basadas en el método de Montecarlo, determinó que un L-Shape SSD con $L_0 = 100\text{nm}$ mostró una mejor respuesta a THz que uno con $L_0 = 300\text{nm}$ debido al pequeño tiempo de tránsito entre los electrodos. Además es claro que otro factor

que puede incrementar el desempeño en frecuencia del dispositivo es incrementar la movilidad del 2DEG debido a que se mejorará con esto la velocidad de los portadores en el régimen balístico.^{20,71}

IV.IV.III Grosor de las trincheras.

Al incrementar la magnitud del campo eléctrico que modula los electrones en los estados superficiales, tendrá el efecto de reducir el valor V_{TH} necesario para encender el SSD y evitará la aparición de corriente inversa, a diferencia de lo que sucede cuando el V_{TH} es optimizado mediante la reducción de D_R . Los parámetros geométricos que propiciarán la modulación de los N_s : el grosor de la trinchera vertical (W_V) y horizontal (W_H). El comportamiento de la curva I-V originada por las variaciones en W_V es resumido por la gráfica de la Fig. 4.7 para el V-Shape y en el inset se ha ilustrado la dependencia en este parámetro del L-Shape. Se observa que en la geometría tipo-L la curva I-V no es afectada por W_V en el rango de 5 a 25nm, mientras que los V-Shapes presentan una discreta modificación en la I-V por este parámetro. Para valores de W_V mayores que 50nm la R_V comienza a incrementarse para ambas geometrías, por lo que es necesario mantener W_V dentro de un rango que conserve al V_{TH} cercano a cero. Aunque W_V presenta un discreto efecto sobre V_{TH} , este parámetro tiene un impacto importante en el desempeño AC del SSD al mejorar la frecuencia de corte y reduciendo el acople capacitivo parasito entre los electrodos.^{71,72}

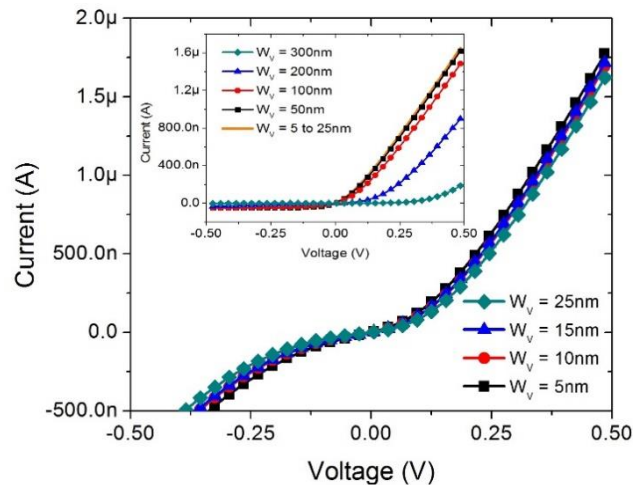


Figura 4.7. Simulación de la respuesta DC del V-Shape cuando W_V es variado de 5 a 25nm. En el inset se muestra la respuesta I-V para el L-Shape.

La variación del espesor en W_H tiene un efecto evidente sobre la curva I-V, esto es atribuido a la modificación en V_{TH} causada por este parámetro como es mostrado en la Fig. 4.8. W_H regula la población de los N_s y por lo tanto la extensión de la D_R . Siendo estos fuertemente afectados por el campo eléctrico transversal. La Fig. 4.7(a) muestra que la variación de W_H de 5 a 30nm resulta en una variación sobre V_{TH} que va de 0 a 0.2 V para la geometría tipo-L, mientras que el V-Shape modifica V_{TH} de 0 a 0.125 V, para la misma variación. En ambas geometrías se da el caso de que el comportamiento tipo diodo está presente para las variaciones propuestas las cuales mejoran la no-linealidad, resultado en una optimización de 100 a 7 veces en K_V para L- y V-Shape, respectivamente, como es mostrado en los insets de la Fig. 4.9.

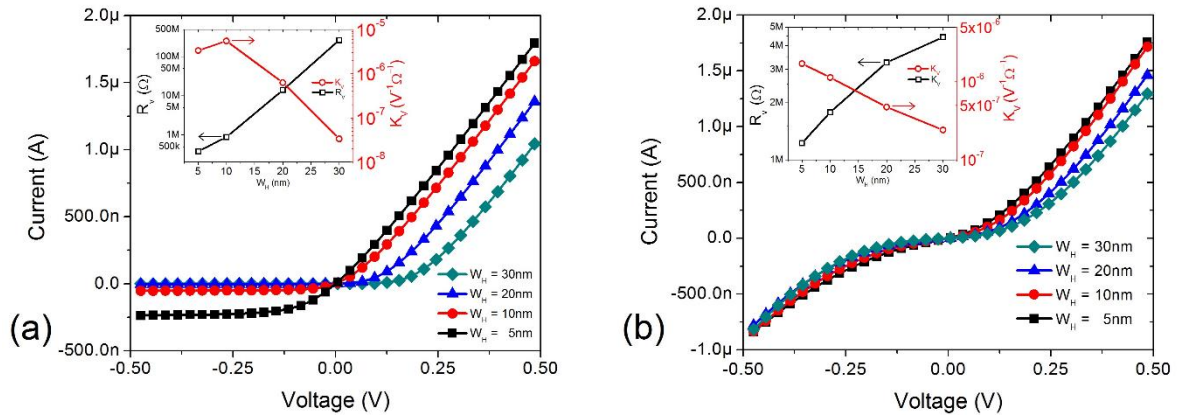


Figura 4.8. Característica I-V de (a) L-Shape y (b) V-Shape SSD para variaciones sobre W_H . En los inset la respuesta de R_V y K_V es mostrada para esta modificación.

IV.V. Geometría y Sensibilidad.

A lo largo de los insets de las figuras de la Sección IV.IV se ilustró el efecto de los parámetros geométricos sobre la resistencia a cero volts del SSD y su capacidad rectificadora. Sin embargo, la principal función de un dispositivo rectificador que opera a frecuencias THz es procesar la señal captada por una antena. Partiendo de la principal función, tres parámetros de la curva I-V entran en un juego de optimización: (a) V_{TH} , debe ser lo suficiente pequeño para aprovechar al máximo la señal incidente; (b) R_V , valor que debe de estar perfeccionado para acoplarse a la antena y aumentar la eficiencia del dispositivo; (c) γ_0 , este parámetro debe de ser maximizado ya que como se indicó a mayor valor de γ_0 se obtendrá una mayor salida en DC.

La sensibilidad del dispositivo puede ser regulada por los parámetros geométricos, como se ha demostrado en la sección IV.IV, al aumentar la no-linealidad. Es de esperarse que ciertos parámetros tengan un mayor efecto sobre γ_0 que otro en los SSD tipo-L y tipo-V, pero buscando incrementar γ_0 se obtenga un efecto no deseado sobre algún otro parámetro, como V_{TH} . De acuerdo con los resultados de la sección anterior, W es el parámetro que más afecta el desempeño del SSD independiente de ser L- o V-Shape. No obstante, para el L-Shape, γ_0 es fuertemente afectado también por la contribución de W_H y L_0 . En la Fig. 4.9 se resume la respuesta de γ_0 a las variaciones geométricas. Para el L-Shape el parámetro más importante para optimizar es W , con ello es posible obtener la mayor γ_0 , alcanzando un valor de incrementado hasta $40V^{-1}$ para esta geometría. Por otro lado, en el caso del V-Shape γ_0 es incrementado hasta $23V^{-1}$ cuando se tiene un diseño con un valor estrecho de α_0 , parámetro dominante sobre la sensibilidad tal y como se observa la Fig. 4.9(b).

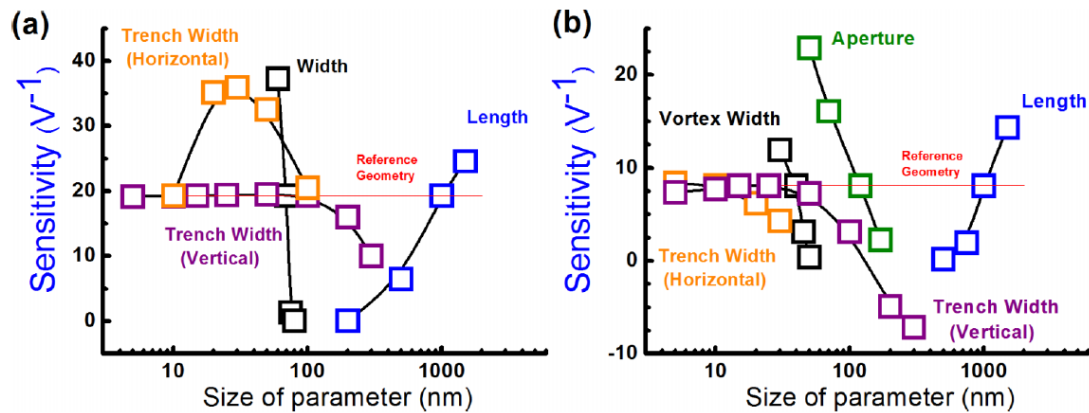


Figura 4.9. Sensibilidad de los SSD en función de la variación de los parámetros geométricos de la Fig. 4.1 cuando uno es variado y los demás son mantenidos fijos para (a) L-Shape y (b) V-Shape.

La Fig. 4.9 indica que para un valor estrecho del canal se obtendrá una mayor sensibilidad no obstante, como se mostró en la sección IV.IV.I, reducir el ancho de canal producirá un incremento en R_v de varios órdenes de magnitud. Estos cambios en la resistencia del canal traerán efectos en el acople de un SSD con una antena, ya que por un lado el SSD al ser de dimensiones nanométricas será altamente resistivo (cientos o miles de $K\Omega$) y por el otro una antena en su máxima eficiencia presentará una impedancia únicamente de 50Ω por lo que es necesario considerar este efecto sobre un diseño final de SSD.

R_V puede ser introducido al juego de la optimización del SSD al considerar una sensibilidad efectiva $\gamma_{50\Omega}$ definida para considerar los efectos de acoplar un SSD a una fuente con impedancia típica de 50Ω :⁷³

$$\gamma_{50\Omega} = \gamma_0(1 - |\Gamma|^2), \quad \text{Ec. 4.6}$$

donde Γ refiere al coeficiente de reflexión definido como:

$$\Gamma = \frac{R_V - 50\Omega}{R_V + 50\Omega}. \quad \text{Ec. 4.7}$$

La Fig. 4.10 muestra el comportamiento de $\gamma_{50\Omega}$ en función de la variación de los parámetros geométricos indicados, mientras el resto de ellos son mantenidos como en la Fig. 4.1. En primer lugar se debe de observar la reducción de la escala del eje y, indicando que cuando se considera al SSD acoplado a una fuente ideal se obtendrá una disminución de al menos 4 órdenes de magnitud en comparación con γ_0 , por lo que se considera un sistema altamente desacoplado.

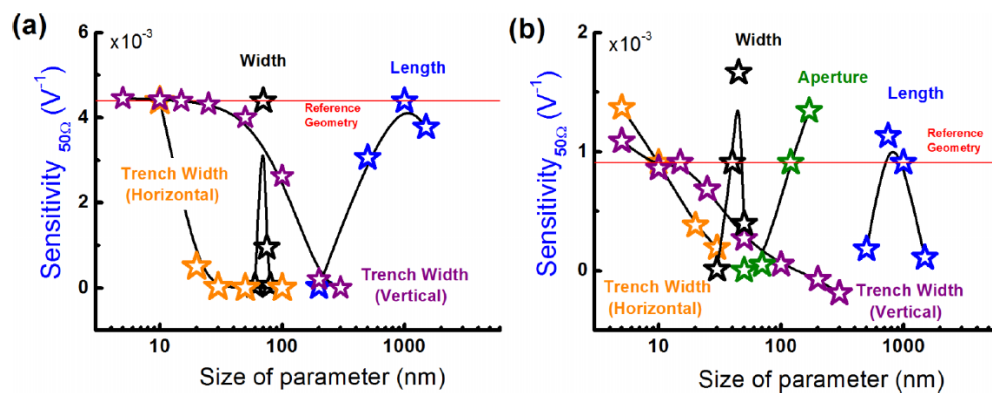


Figura 4.10. Sensibilidad de los SSD en función de la variación de los parámetros geométricos de la Fig. 4.1 cuando se considera acoplados a una fuente de 50Ω para (a) L-Shape y (b) V-Shape.

Se aprecia en la Fig. 4.10 que al reducir el ancho del canal para el L-Shape y la apertura de este en los V-Shape traerá como consecuencia una reducción en la eficiencia del dispositivo, además en el caso de la geometría tipo-L los parámetros tienden hacia el mismo valor de eficiencia con lo que se indica que el desacople entre la fuente y el rectificador es el mecanismo dominante en el desempeño como rectificador. De estos resultados se deduce que la geometría de referencia tipo L en la Fig. 4.10(a) muestra mejor desempeño que la geometría de referencia exhibida en la parte (b) de la misma figura.

Cuando se ha obtenido la mejor geometría posible para una aplicación requerida es necesario considerar la relación entre γ_0 y V_{TH} , es decir, obtener la geometría apropiada que permita maximizar γ_0 ($\sim 20 \text{ V}^{-1}$) mientras que V_{TH} es $\sim 0\text{V}$. De la Fig. 4.11 se puede observar que la geometría optimizada del SSD de la Fig. 4.1 dará una respuesta I-V siempre y cuando W , como parámetro que más impacta sobre γ_0 y V_{TH} , se mantenga dentro de un valor muy estrecho de tolerancia ($\sim 1\text{nm}$) alrededor de W para el L_0 . En esta condición se tendrá que las condiciones de $\gamma_0 \sim 20 \text{ V}^{-1}$ y $V_{TH} < 50 \text{ mV}$ son satisfechas (indicado con una línea roja en la Fig. 4.11). Si se desea obtener un mejor valor de γ_0 entonces se debe de buscar un diseño donde $W < 70\text{nm}$ alcanzando valores de $\gamma_0 = 50 \text{ V}^{-1}$, sin embargo una reducción en el valor de W se traduce en $V_{TH} > 50 \text{ mV}$. Caso contrario se obtendrá al buscar un $V_{TH} \sim 0\text{V}$ donde se tendrá q considerar valores de $W > 70\text{nm}$, afectando drásticamente a γ_0 . En conclusión en los diseños de SSD se tendrá el caso en el que el rango en el que se obtendrá una respuesta DC optima depende no solo en la aplicación a la que el SSD se aplicará, también a escoger una geometría que permita alcanzar los valores objetivo de γ_0 y V_{TH} .

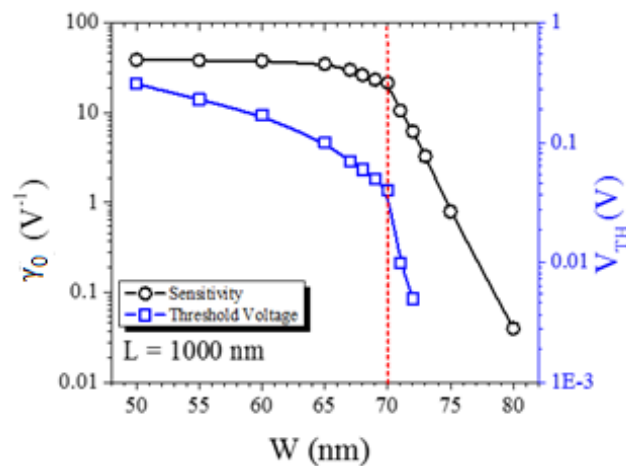


Figura 4.11. γ_0 y V_{TH} en función de la variación de W de la Fig. 4.1.

IV.VI. Rectenna basada en tecnología SSD.

En los años recientes las rectennas han tenido un creciente interés en su desarrollo debido a su habilidad de convertir energía óptica en potencia de corriente directa o DC.⁷⁴ Estos dispositivos están compuestos de una antena que recolecta la radiación y la convierte en una señal de corriente alterna (AC)⁷⁵ e incluyen un diodo de alta velocidad que rectifica la señal AC.⁷⁶ Las rectennas han sido ampliamente utilizadas como un dispositivo eficiente para convertir energía proveniente de las

microondas en DC,⁷⁷ pero el uso de esta tecnología para longitudes de onda menores ha sido limitado por la ausencia de un rectificador eficiente que opere en este rango.⁷⁸

Los SSD han sido conectados a antenas tipo dipolo, bowtie y espiral^{47,62} con la intención de desarrollar detectores de THz. Estos detectores han sido exitosamente empleados para medir radiación de hasta 1.5THz junto con radiación emitida por un cuerpo negro a 973K donde se determinó una eficiencia de 0.02% en convertir esa radiación a DC.⁷⁹ En esta sección se evalúa el diseño L-Shape mostrado por la Fig. 4.1(a) como dispositivo rectificador en el concepto de rectenna donde las antenas propuestas son tipo espiral de Arquímedes (AS) y espiral cuadrado (CS). La intención de este estudio es evaluar la viabilidad del SSD para contribuir en el desarrollo de recolectores de energía basado en rectennas a frecuencias THz. El diseño de las antenas usadas en este estudio es mostrado en la Fig. 4.12 para la AS y CS.

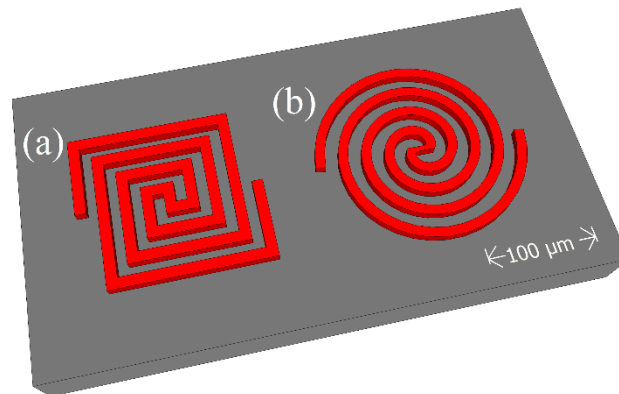


Figura 4.12. Representación esquemática de las antenas de banda ancha propuestas en este trabajo: (a) Espiral cuadrado y (b) Espiral de Arquímedes.

Estas antenas son consideradas como hechas de oro sobre un sustrato de SiO₂ (índice de refracción de $300+j*1000$ y 2, respectivamente^{80,81}). Las antenas fueron diseñadas para resonar en un rango de 1.5mm a 150 μ m (200GHz a 2THz) polarizadas circularmente a la derecha. Mediante simulaciones numéricas los parámetros más importantes de las antenas propuestas fueron determinados. La impedancia de las antenas (Z_A) fue calculada considerando la incidencia de una onda monocromática con una irradiancia de 1W/cm² proveniente de un láser THz perfectamente sintonizado.⁸²

El resultado numérico arrojó la distribución del campo eléctrico y magnético en las antenas, con lo que fue posible determinar Z_A :

$$Z_A = \frac{V_{OC}}{I_{SC}}, \quad \text{Ec. 4.8.}$$

donde V_{OC} es el voltaje generado por las antenas con sus terminales abiertas⁸³ y I_{SC} refiere a la corriente a través de la antena cuando sus terminales están en corto circuito.⁸³ En la Fig. 4.13 se representa el comportamiento de Z_A para las antenas propuestas en el rango de frecuencia de estudio.

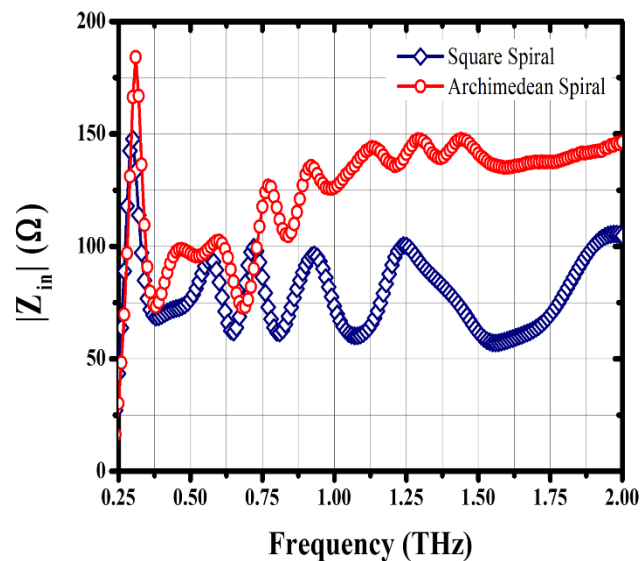


Figura 4.13. Impedancia de entrada en función de la frecuencia para los diseños de las antenas mostradas en la Fig. 4.12.

Cuando las rectenas operan en su frecuencia de resonancia pueden ser descritas mediante el circuito equivalente mostrado en la Fig. 4.14.^{83,84} Una antena se comporta como una fuente de voltaje igual a V_{OC} con una impedancia real de valor R_A .^{83,84} Cuando la antena se considera en modo receptor, V_{OC} es el voltaje generado por la antena en resonancia si no existe alguna carga conectada en sus terminales, cuando un diodo es conectado a las terminales de la antena esta proporcionará un voltaje alterno, V_{AC} , a través del diodo con una magnitud dada por:

$$V_{AC} = \frac{V_{OC} \cdot Z_0}{(Z_0 + Z_A)}. \quad \text{Ec. 4.9}$$

El V_{AC} entre las terminales del diodo será rectificado, generando un voltaje en DC, V_{DC} , de acuerdo a la Ec. 4.4 por lo que la potencia en DC asociada a la capacidad del rectificador está definida mediante

$$P_{DC} = \frac{V_{DC}^2}{R_0}. \quad \text{Ec. 4.10}$$

Por otro lado, la potencia de la antena puede ser evaluada con:

$$P = P_{rad} + P_{loss}, \quad \text{Ec. 4.11}$$

donde P_{rad} y P_{loss} son la potencia reemitida por la antena y la potencia disipada por pérdidas dinámicas, respectivamente. Con los parámetros de las Ec. 4.8-4.11 es posible deducir el porcentaje de eficiencia de conversión, $\eta_e(\%)$, de la antena con el rectificador acoplado:

$$\eta_e(\%) = \frac{P_{DC}}{P} \times 100. \quad \text{Ec. 4.12}$$

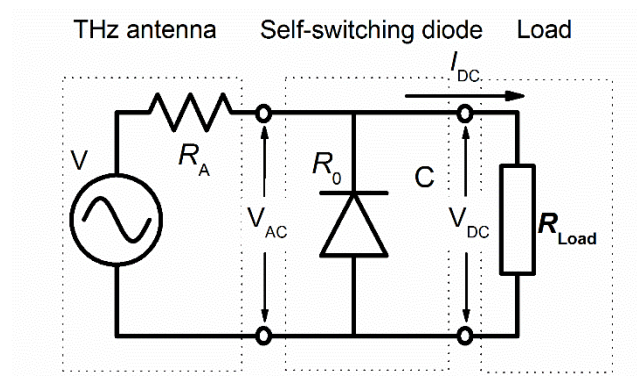


Figura 4.14. Modelo de circuito equivalente para una rectenna.

En este análisis el SSD fue considerando tomando en cuenta la simplificación de que las propiedades del SSD no varían con la frecuencia en el rango donde las antenas son operadas. Esta simplificación es justificada cuando se toma en cuenta los valores de la frecuencia de corte presentada por otros autores donde se establece que la frecuencia máxima para esta clase de SSD está en 5 THz.¹⁹ En la Fig. 4.15(a) y 4.15(b) se ha graficado el voltaje y la potencia eléctrica en DC generada utilizando la radiación THz entrante a la antena en función de la frecuencia. Los diseños presentan un valor de *full width at half-maximum* de más de 1.8 THz, este parámetro puede ser mejorado al incrementar el número de vueltas que presenten las antenas tipo espiral.

La potencia DC generada por la AS es mayor que la generada por el CS a frecuencias superiores de 1.37THz. El pico máximo de potencia alcanza un valor de 1.8 y 0.6 μW para AS y CS, respectivamente. Este hecho es debido a la considerable diferencia entre las Z_A de cada diseño, para la AS Z_A es mayor que la presente en la CS por un factor de 2 para frecuencias mayores que 0.75 THz, mejorando el acoplamiento eléctrico entre antena y diodo.

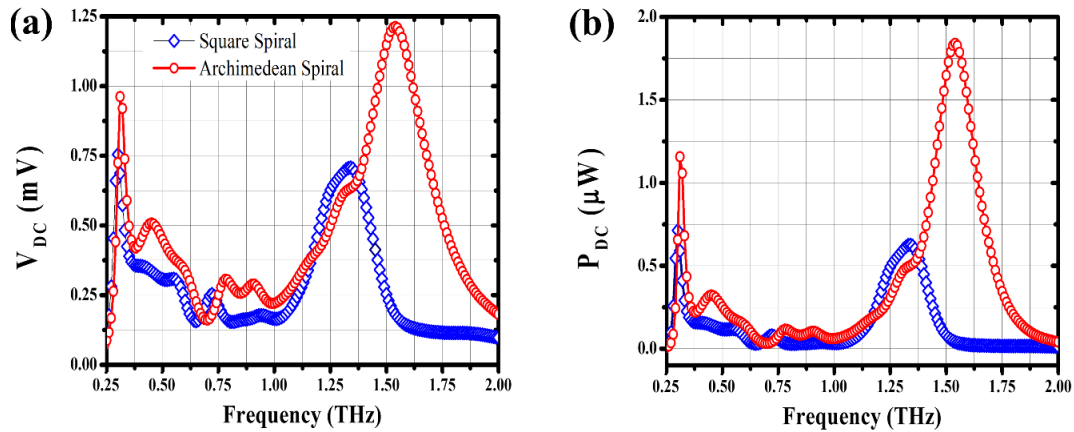


Figura 4.15. Desempeño de la rectennas para recolectar la energía electromagnética de una fuente de $1\text{W}/\text{cm}^2$: (a) Voltaje rectificado y (b) Potencia eléctrica en DC.

La eficiencia de conversión de las rectennas es mostrada en Fig. 4.16 en función de la frecuencia. Considerando la aplicación específica de recolectar energía proveniente de radiación THz. En la banda espectral de 0.2 a 2 THz, la eficiencia total (η_{tot}) puede ser calculada al usar la relación:⁸⁵

$$\eta_{tot} = \frac{\int_{0.2\text{THz}}^{2\text{THz}} S(f) \cdot \eta_e(f) \cdot df}{\int_{0.2\text{THz}}^{2\text{THz}} S(f) df}, \quad \text{Ec. 4.13}$$

donde $\eta_e(f)$ refiere a la eficiencia de conversión de la rectenna en función de la frecuencia, mientras que $S(f)$ indica la irradiancia de la fuente de THz (por simplicidad, $1\text{W}/\text{cm}^2$ para cada frecuencia).

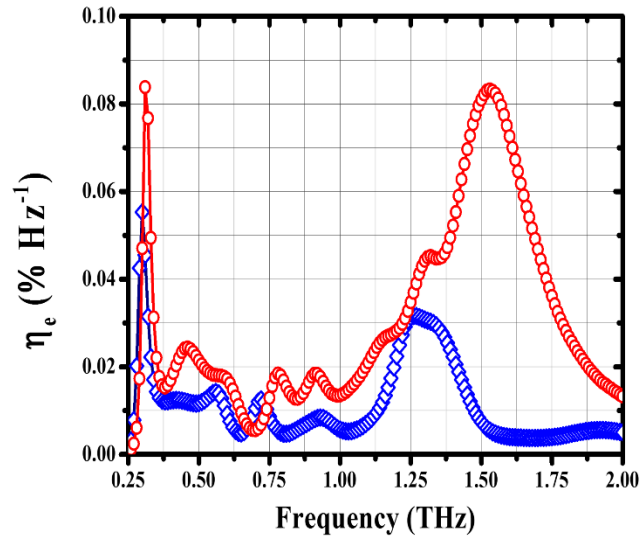


Figura 4.16. Eficiencia de conversión óptica a eléctrica para la rectenna propuesta.

La η_{tot} para ambas propuestas fue determinada de 0.032 y 0.013 % para la AS y la CS, en ese orden. Se observa que mediante el uso de los L-Shape SSD como rectificadores en el concepto de rectenna en lugar de un diodo metal-aislante-metal, la eficiencia de las rectennas puede ser incrementada por un factor de 10^6 al ser el SSD más eficiente y presentar una mejor no-linealidad. Por otro lado la baja eficiencia mostrada ($\sim 10^{-2}$ %) es principalmente atribuida al desacople eléctrico existente entre el rectificador y la antena. Esto es verificado cuando se evalúa el coeficiente de reflexión entre ambos elementos, considerando la Ec. 4.7 y sustituyendo el valor de la resistencia de la antena en frecuencia. Exhibiendo valores promedio de 99.96 y 99.8 % para AS y CS, respectivamente. Los valores indican que solamente el 0.04 y 0.02% de la energía que llega a la antena es aprovechada.

IV.VII. Estrategias de optimización del SSD.

Como se ha mostrado en la sección anterior, un problema clave que reduce el desempeño de los SSD en aplicaciones de recolección de energía refiere a su alta resistencia, incrementando Γ . Algunos métodos han sido propuestos para mejorar la transferencia de potencia entre los elementos de la rectenna, principalmente el uso de arreglos de SSD en paralelo.²⁰ A continuación se presenta el análisis de cómo el uso de arreglo de SSD, mostrado en la Fig. 4.17(a), modifica las carencias de un solo SSD.

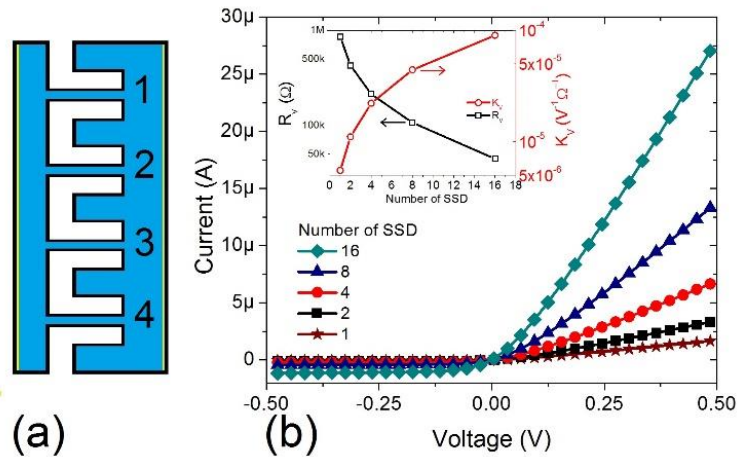


Figura 4.17. Arreglo de SSD en paralelo (a) simulado para 1,2,4,8 y 16 elementos con los parámetros geométricos de la Fig. 4.1 para cada SSD utilizado (b).

Al incrementar el número de elementos presentes en el arreglo es de notar que se obtiene un mayor flujo de corriente que cruza los nanocanales, reflejándose en la respuesta I-V de la Fig. 4.17(b), esto se debe a que la resistencia total del dispositivo (R_{Total}) es reducido al menos en dos órdenes de magnitud, comportamiento mostrado el inset de la Fig. 4.17(b). Los cambios en R_{Total} pueden ser analizados cuando se considera a cada SSD como una resistencia en paralelo, por lo que se puede determinar $R_{Total} = R_0/N$, donde R_0 refiere a la resistencia de un SSD en el arreglo y N al número de elementos. Se observa en el mismo inset que K_V en función de se incrementa con las modificaciones.

Otro método de optimización para los SSD consiste en mejorar la eficiencia de rectificación y obtener un bajo valor de V_{TH} usando un material dieléctrico para rellenar las trincheras diferentes al aire. Para observar mejor el efecto de modificar el dieléctrico en las trincheras, se considera un V-Shape SSD con $L_0 = 1\mu\text{m}$, $W = 30\text{nm}$, $W_H = W_V = 60\text{nm}$ y $\alpha_0 = 3.4^\circ$ (no diseñado para aplicaciones de baja potencia), en este caso, el dieléctrico se modificó de $\epsilon_r = 1$ (aire) a $\epsilon_r = 20$ con lo que se obtuvo la curva I-V mostrada en la Fig. 4.17. Es evidente el efecto del dieléctrico sobre la curva I-V donde se observa que la elección del ϵ_r afecta fuertemente a V_{TH} como es mostrado en el inset de la Fig. 4.17 el valor de V_{TH} cambio de 1.75 a 0.25 V como consecuencia de variar ϵ_r desde 1 a 20. Además de la modificación del voltaje umbral, la corriente que atraviesa el nanocanal fue mejorada por el incremento de ϵ_r debido a que la polarización del material dieléctrico incrementa la intensidad del campo eléctrico que modula la región de agotamiento presente a lo largo del material.

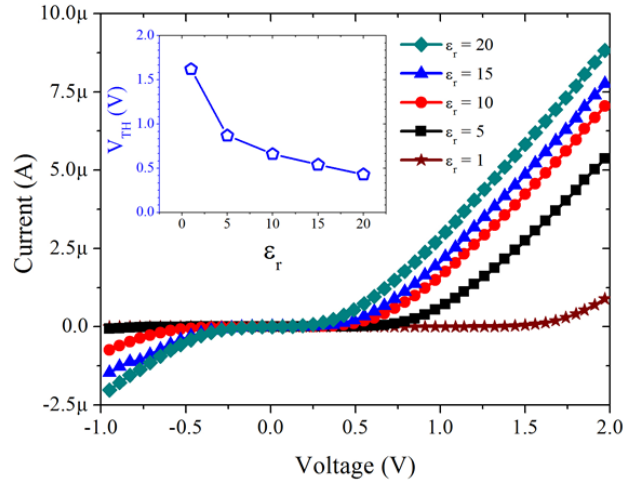


Figura 4.18. Comportamiento I-V al cambiar el material dieléctrico dentro de las trincheras. El comportamiento del voltaje umbral es mostrado en el inset.

De acuerdo al estudio presentado en la sección III.II.II, cuando una superficie es pasivada se reduce la cantidad de estados superficiales disponibles para ser llenados por electrones, como consecuencia se reduce también la región de agotamiento. Cuando este análisis es llevado al concepto de SSD se obtendrá una nueva técnica con la que se puede alterar químicamente la respuesta I-V de un SSD ya fabricado. Como el funcionamiento del SSD se basa en los efectos de modular la n_{SL} , es necesario analizar el comportamiento I-V de un SSD cuando se varía la densidad de carga lateral, esto se puede lograr mediante la pasivación.

En la Fig. 4.19 se ejemplifica la respuesta I-V cuando n_{SL} va de 0 a $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para el L-Shape SSD mostrado en el inset de la gráfica. Cuando se analiza el comportamiento de la curva I-V se observa que el efecto rectificador ha desaparecido y el dispositivo solo se comporta como una resistencia para $n_{SL} = 0.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, caso parecido se tiene que para una $n_{SL} = 0.30 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Cuando $n_{SL} = 0.35$ y $0.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ el efecto rectificador se observa en las curvas I-V, donde se observa que el incremento de la densidad de carga tiende a correr a valores más altos al V_{TH} , hasta que es necesario aplicar más de 2V para abrir el canal cuando $n_{SL} = 0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

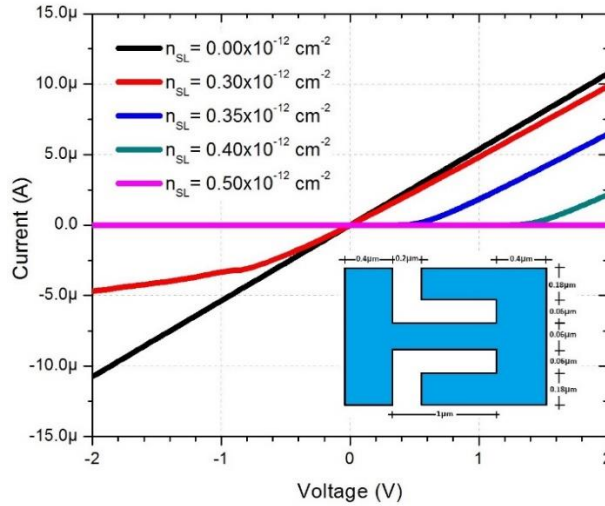


Figura 4.19. Simulación del comportamiento I-V para el SSD mostrado donde se ha variado la densidad de carga superficial en las trincheras.

Con este estudio se demuestra que, aunque el valor de n_{SL} es fijado por el proceso de fabricación de las trincheras, un valor grande producirá que el SSD presente un V_{TH} mayor a cero volts, por otro lado un valor muy pequeño de n_{SL} evitará el comportamiento tipo diodo. Sin embargo, n_{SL} puede ser controlado por un proceso de pasivación y de acuerdo a lo presentado en la sección III.II.II es posible modificar el efecto del pasivante al diluirlo, con lo que es viable obtener un $V_{TH} \sim 0V$ sin la necesidad de alterar la geometría de un SSD.

IV.VIII. Rectificador de onda completa SOI.

Aunque el análisis presentado hasta ahora se ha basado en SSD fabricados en una heteroestructura $In_{0.53}Al_{0.47}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$, el trabajo principal de esta tesis se centra en heteroestructuras el concepto de SSD puede ser trabajado en diferentes materiales, incluso materiales en bulto.^{19,23} Además, con los conocimientos obtenidos sobre estados superficiales, es posible diseñar dispositivos electrónicos que exploten estos estados energéticos para controlar su comportamiento eléctrico.

En la Fig. 4.20 (a) se muestra un diseño de un SSD basado en Silicio tipo-n, con un dopaje de $2.5 \times 10^{11} cm^{-3}$ y $n_{SL} = 0.4 \times 10^{12} cm^{-2}$ en tecnología SOI.²² En este caso se explora este material para ofrecer un tipo diferente de diodo que sea capaz de modificar el valor del voltaje umbral dependiendo de la aplicación y la sencillez de fabricación del dispositivo ya que solo requeriría dos etapas de litografía. El análisis numérico se realizó considerando la geometría mostrada en la Fig. 4.20(b).

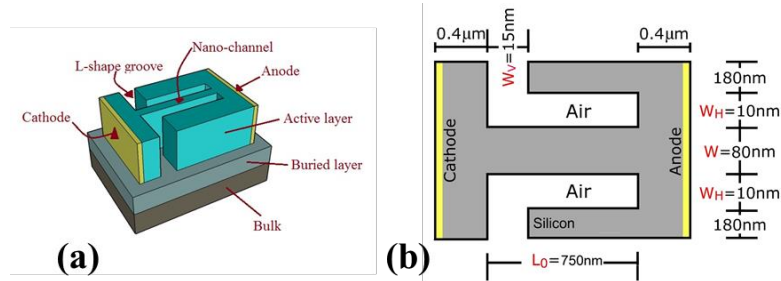


Figura 4.20. (a) Diseño esquemático de un L-Shape SSD fabricado en un substrato de Silicio basado en tecnología SOI. (b) Dimensiones del SSD utilizado en este análisis.

El método de simulación en 2D fue utilizado para definir las propiedades del L-Shape SSD propuesto en la Fig. 4.20(b), este dispositivo se sometido a variaciones en los parámetros geométricos tal como la presentada en la sección IV.IV, obteniéndose el mismo comportamiento a la modificación de cada parámetro geométrico que el que revela el SSD analizado en dicha sección. A manera de ejemplo en la Fig. 4.21 se ha simulado el comportamiento del SSD cuando se varía el valor de W y el espesor de la capa activa de Silicio, Z , en la parte (a) y (b), respectivamente.

El análisis mostrado en la Fig. 4.21(a) muestra la misma dependencia de la curva I-V con W que en las secciones anteriores, se tiene que a mayor valor de W se tendrá una mayor corriente que pasa por el nanocanal y un menos valor de V_{TH} , sin embargo se pierde no-linealidad. Cuando se analiza cómo afecta la elección del substrato SOI para la fabricación del SSD se muestra que entre mayor sea el grosor de la capa activa se obtendrá una mayor densidad de corriente que cruce el canal, esto se puede explicar cuando se considera que al aumentar Z disminuye la resistencia del nanocanal, esto se ilustra en la Fig. 4.21(b).

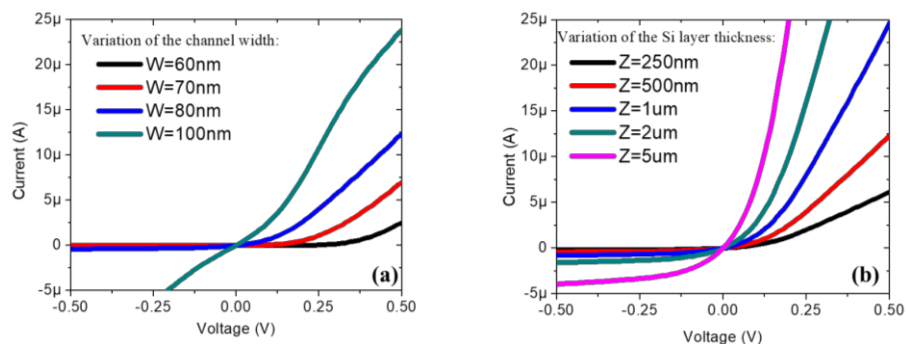


Figura 4.21. Simulación del comportamiento eléctrico del SSD mostrado en la Fig. 4.20(b) cuando se varía (a) el ancho del canal, W , y el grosor de la capa activa de Silicio, Z , (b).

Debido a que el transporte en silicio no puede ser considerado en algún momento de naturaleza balística, es posible utilizar modelos estándar que predigan el comportamiento del SSD en función de la frecuencia. En la Fig. 4.22 se ilustra el SSD en forma de rectificador de media onda (*half wave*) y un arreglo de SSD configurado para ser un rectificador de onda completa (*full wave*) en la Fig. 4.24(a). Este dispositivo fue analizado cuando se aplica una señal alterna tipo seno a una frecuencia de 2.5GHz, como es mostrado en Fig. 4.22(b). En el caso del rectificador de media onda, se tiene que la corriente que cruza en el nanocanal responde solo a la parte positiva de la onda de entrada, no se observa corriente en el semiciclo negativo. Por otro lado, cuando el SSD ha sido configurado como rectificador de onda completa la corriente del dispositivo responde tanto al semiciclo positivo como al negativo de la señal de entrada, dando a la salida un valor positivo, con lo que se tiene el comportamiento característico de un rectificador de onda completa.

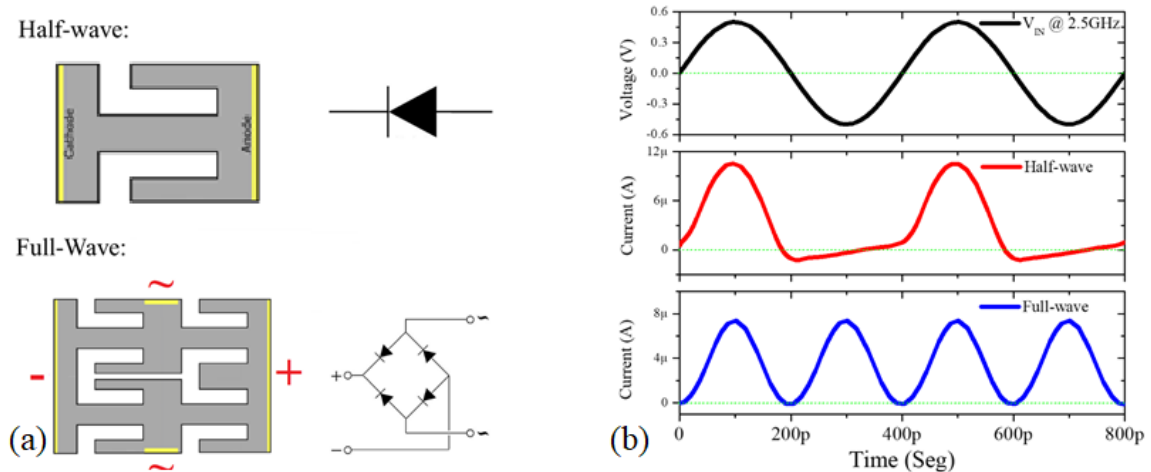


Figura 4.22. (a) Diseño esquemático del SSD considerado como un rectificador de media onda y onda completa. (b) Respuesta de la simulación en modo transitorio para determinar la forma de onda de la corriente a la perturbación de entrada.

El análisis numérico fue utilizado una vez más, pero esta vez se utilizó en modo Barrido AC, con esto se expuso a un análisis en frecuencia para determinar su comportamiento. Se obtuvo que la frecuencia máxima que puede alcanzar un diodo basado en silicio es ~ 10 GHz, un valor muy superior a cualquier diodo pn basado en silicio. Para analizar la frecuencia de corte del SSD se propone tomar a la corriente inversa que presenta el dispositivo al variar las geometrías que componen el SSD. Tomando esto como figura de mérito es posible confirmar el estudio realizado en

Ref. 63 donde indican que los parámetros geométricos que más impactan el desempeño AC del dispositivo son el largo del canal y el grosor de las trincheras verticales. En la Fig. 4.23(a) se observa el efecto de L sobre la respuesta AC del dispositivo, al reducir el tiempo de trayecto entre electrodos se incrementa la frecuencia de corte, mismo caso sucede en la Fig. 4.23(b) cuando se reduce el grosor de la trinchera en W_v .

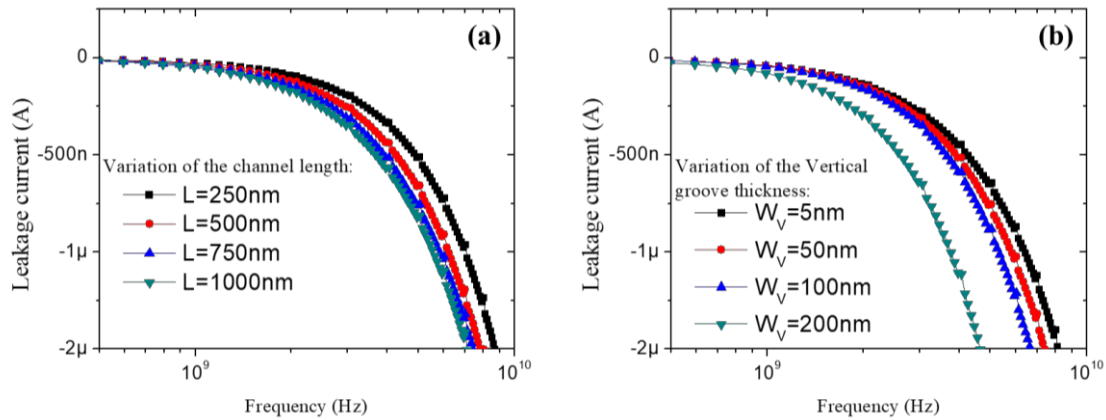


Figura 4.23. Simulación de la respuesta en frecuencia para la corriente de fuga del SSD de la Fig. 4.20 cuando se ha modificado el largo del canal, L , y el grosor vertical de las trincheras, W_v .

Capítulo V.

Conclusiones y perspectiva a futuro.

En este trabajo se evaluó la influencia de la superficie sobre las heteroestructuras AlGaAs/GaAs y el que presenta sobre la formación del 2DEG. Se exploró un método para estimar el grosor de la región de agotamiento superficial en las heteroestructuras mediante el uso de los modos vibracionales LO y L⁻ del espectro Raman que presentan las heteroestructuras. Se encontró que la relación existente entre LO y L⁻ está en función de la posición donde la capa dopada de la heteroestructura fue colocada además de los procesos químicos que pudieran suceder en la superficie, en este caso, es sensible al proceso de pasivación con (NH₄)₂S_x. Se reportó el efecto que tiene el llenado de los estados superficiales sobre las mediciones de fotorreflectancia de las heteroestructuras AlGaAs/GaAs, encontrándose que el análisis de la distribución de las capas que conforman la heteroestructura, el grosor de la región de agotamiento y la densidad de estados superficiales es necesario para entender el efecto de la superficie sobre los espectros de Raman y fotorreflectancia. Aunque fotorreflectancia es una técnica bastante poderosa para determinar el campo eléctrico en la superficie de las heteroestructuras, la ausencia de oscilaciones Franz-Keldysh asociadas a la modulación del campo eléctrico en la superficie no es necesariamente una evidencia de que no existan efectos superficiales sobre la heteroestructura. Para temperaturas menores de 77K y/o cuando los estados superficiales se encuentran virtualmente llenos o vacíos las oscilaciones Franz-Keldysh no aparecerán en el espectro de fotorreflectancia, ya que no existirán las condiciones de foto-generación apropiadas para el proceso de modulación. Cuando los efectos de la superficie las técnicas espectroscópicas son entendidos, es posible determinar la consecuencia que tienen estos efectos sobre la formación del 2DEG, en este caso se demostró que las oscilaciones Franz-Keldysh que tradicionalmente están asociadas a campos eléctricos en la interface AlGaAs/GaAs desaparecen si la distancia entre la superficie y esta interface es menor que el grosor de la región de agotamiento. Esto es útil al evaluar la formación de un 2DEG, ya que si no existen electrones que puedan llenar los niveles energéticos del pozo formado en la interface no se presentaran alguna firma espectral en la fotorreflectancia asociado al 2DEG, sirviendo esto para determinar su formación.

En la segunda parte de este trabajo se realizó un análisis numérico de una heteroestructura de InAlAs/AlGaAs sobre la cual teóricamente se gravó las geometrías V-Shape y L-Shape propuestas para generar SSD. EL trabajo resulta en una guía de diseño que puede ser utilizada para mejorar la respuesta I-V de los dispositivos fabricados. Se demostró que al variar los parámetros geométricos que conforman al SSD se obtiene variaciones en el comportamiento eléctrico del dispositivo, por lo que es posible construir dispositivos rectificadores que sean capaces de presentar características únicas al alcanzar frecuencia de corte en la región de los THz, así como un voltaje de umbral virtualmente de cero volts, muy por debajo de los 0.7V necesarios para hacer conducir un diodo convencional de Silicio. Se determinó que la respuesta DC está principalmente dominada por el ancho del canal y el grosor de las trincheras fabricadas. Además de los parámetros geométricos, es posible modular la respuesta DC de los SSD mediante el dieléctrico presente en las trincheras y el control de los estados superficiales en las trincheras mediante la pasivación. El desempeño de los L-Shape y V-Shape SSD para convertir una señal alterna en energía DC fue evaluada al optimizar los parámetros geométricos del SSD, los cuales al ser optimizados presentan una sensibilidad de entre 40 y 20 V^{-1} , valores muy atractivos para ser utilizados como detectores tipo square-law en dispositivos dedicados a la recolección de energía. Se planteó un diseño experimentalmente realizable de rectenna consistente en una antena espiral (cuadrado o de Arquímedes) acoplado a un L-Shape SSD como elemento rectificador, las simulaciones indicaron que las rectennas propuestas alcanzan eficiencias de 0.032% y 0.013% para la antena tipo espiral de Arquímedes y la cuadrada, respectivamente. Este pobre desempeño es ocasionado por la alta resistencia del nanocanal en los SSD, lo que origina un desacoplamiento de impedancia con la antena provocando que muy poca de la energía recolectada por la antena sea convertida a una señal DC. Sin embargo, este dispositivo presenta características que pueden competir con la madura tecnología de los diodos metal-aislante-metal ya que la no linealidad de este último es pobre comparada con el SSD. Una de las alternativas que se pueden manejar para reducir la resistencia de los SSD consiste en incrementar el número de trayectorias que los portadores pueden seguir para viajar entre electrodos, esto se puede lograr al utilizar arreglos de SSD en paralelo, con esto la resistencia de un SSD es dividida por el número total de nanocanales presentes en el diseño, reduciendo con esto el desacople de impedancia mientras que se mantiene el voltaje de umbral de cero volts.

El trabajo a futuro consistirá en buscar diseños de heteroestructuras cuya secuencia de capas haga de esta inmune a los efectos de la superficie, evitando el transporte parasito en las capas diseñadas y al mismo tiempo incrementando la movilidad de los electrones en el 2DEG. Esto se puede lograr al realizar experimentalmente diseños que sean probados de forma numérica con el modelo TCAD desarrollado en este trabajo para ser analizados con las técnicas ópticas que han mostrado ser sensibles a la superficie: fotorreflectancia y Raman.

En el área de los SSD se deberán probar experimentalmente que las variaciones geométricas mostradas en esta tesis tengan el efecto esperado sobre la curva corriente-voltaje. Cuando sean fabricados se debe de comprobar que al pasivar los estados superficiales presentes en las trincheras es posible regular el voltaje umbral necesario para hacer conducir el nanocanal, este experimento resulta interesante ya que será posible corregir errores originados en un proceso de fabricación no ideal ya que, como se mostró una, una variación de incluso un nanómetro implica un corrimiento en el voltaje umbral del sistema.

El problema de acoplamiento entre una antena y un SSD debe de ser solucionado, por ello se debe de plantear estrategias de acoplamiento de impedancias como el uso de brazos o “stubs” diseñados en la antena. Para garantizar el adecuado diseño de los stubs es necesario conocer las propiedades del SSD en la frecuencia de operación, principalmente los parámetros de impedancia y admitancia por lo que se deberá trabajar en un modelo TCAD que pueda predecir los efectos del transporte balístico en el régimen de THz para el SSD. Una alternativa para reducir la resistencia del nanocanal consiste en utilizar heteroestructuras que contengan un doble gas bidimensional de electrones, con esto se estima que cada SSD fabricado en este tipo de estructura presentará la mitad de resistencia diferencial, mismo caso se obtendrá al fabricar arreglos en paralelo.

Referencias:

- [1] T. Mimura, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. **50**, 780 (2002).
- [2] G. S. Boebinger, H. W. Jiang, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, Phys. Rev. Lett. **64**, 1793 (1990).
- [3] P. Gutowski, I. Sankowska, P. Karbownik, D. Pierscinska, O. Serebrennikova, M. Morawiec, E. Pruszyńska-Karbownik, K. Gołaszewska-Malec, K. Pierscinski, J. Muszalski, M. Bugajski, J. Cryst. Growth **466**, 22 (2017).
- [4] G. Fiori, F. Bonaccorso, G. Iannaccone, T. Palacios, D. Neumaier, A. Seabaugh, S. K. Banerjee, and L. Colombo, Nat. Nanotechnol. **9**, 768 (2014).
- [5] L.F. Lou, and W.H. Frye, J. Appl. Phys. **56**, 3150 (1984).
- [6] X. Z. Dang, E. T. Yu, E. J. Piner, and B. T. McDermott, J. Appl. Phys. **90**, 1357 (2001).
- [7] L. Zamora-Peredo, I. E. Cortes-Mestizo, L. García-González, J. Hernandez-Torres, D. Vazquez-Cortes, S. Shimomura, A. Cisneros de la Rosa, and V. H. Mendez-García, J. Cryst. Growth. **378**, 100 (2013).
- [8] BCC Research. Published: July 2013. Report Code: IAS029C.
- [9] K. Pierz, G. Hein, B. Schumacher, E. Pesel, and H. W. Schumacher, Semicond. Sci. Technol. **25**, 035014 (2010).
- [10] R. Dingle, H. L. Störmer, A. C. Gossard, and W. Wiegmann, Appl. Phys. Lett. **33**, 665 (1978).
- [11] V. Umansky and M. Heiblum, MBE growth of high-mobility 2DEG en Molecular Beam Epitaxy, Elsevier, First Edition (2013).
- [12] K. Hikosaka, N. Hidaka, Y. Hirachi and M. Abe (1987), IEEE Electron Device Lett. **8**, 521 (1987).
- [13] Hans Lüth, Solid surfaces, interfaces and thin films, Springer, Fifth Edition (2010).
- [14] R. E. Wagner and A. Mandelis, Phy. Rev. B **50**, 14228 (1994).
- [15] S.R. Lederhandler, and L.J. Giacoletto, Proceedings of the IRE **43**, 477 (1955).
- [16] V. Apostolopoulos, and M.E. Barnes, J. Phys. D Appl. Phys. **47**, 374002 (2014).
- [17] S.C. Corzo-Garcia, A.I. Hernandez-Serrano, E. Castro-Camus, and O. Mitrofanov, Phys. Rev. B **94**, 045301 (2016).
- [18] J. Zhang, Y. Hong, S.L. Braunstein, K.A. Shore, IEE Proceedings - Optoelectronics **151**, 98 (2004).
- [19] A.M. Song, M. Missous, P. Omling, A.R. Peaker, L. Samuelson, Appl. Phys. Lett. **83**, 1881 (2003).
- [20] J. Mateos, ROOTHZ Final Report (2013).
- [21] A. Westlund, P. Sangar, G. Ducournau, P. Nilsson, C. Gaquière, L. Desplanque, X. Wallart, and J. Grahn, Appl. Phys. Lett. **103**, 133504 (2013).
- [22] G. Farhi, E. Saracco, J. Beerens, D. Morris, S. A. Charlebois, and J. P. Raskin, Solid-State Electron. **51**, 1245 (2007).
- [23] J. Kettle, R. M. Perks, and R. T. Hoyle, Electron. Lett. **45**, 79 (2009).

- [24] J. Mateos, V. G. Vasallo, D. Pardo, and T. González, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 212103 (2005).
- [25] S. Rockwell, D. Lim, B.A. Bosco, J.H. Baker, B. Eliasson, K. Forsyth, and M. Cromar, in *Radio Frequency Integrated Circuits Symposium*, 171 (2007).
- [26] W. Fan, M. C. Dolph, J. Lu, and A. Wolf, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 252101 (2011).
- [27] C. Fumeaux, J. Alda, and G. D. Boreman, *Opt. Lett.* **24**, 1629 (1999).
- [28] M. Nagae. *Jap. J. Appl. Phys.* **11**, 1611 (1972).
- [29] J. Misiewicz, P. Sitarek, G. Sek, R. Kudrawiec, *Mater. Sci.-Poland* **21**, 263 (2003).
- [30] B.O. Seraphin, and N. Bottka, *Phys. Rev.* **145**, 628 (1966).
- [31] K. Jezierski, J. Misiewicz, P. Markiewicz, M. panek, B. Sciana, M. Tłaczała, R. Korbutowicz, *Phys. Stat. Sol.* **147**, 467 (1995).
- [32] P. Sitarek, J. Misiewicz, E. Veje, *Opt. Electr.* **10**, 261 (1999).
- [33] L. Pavesi, M. Guzzi, *J. Appl. Phys.* **75**, 4779 (1994).
- [34] L. Zamora, "Caracterización óptica y eléctrica de heteroestructuras AlGaAs/GaAs de dispositivos de efecto hall cuántico," Tesis de grado de Doctor en Ciencias Aplicadas no publicada. UASLP. SLP, México (2005).
- [35] O.J. Glembocki, B.V. Shanabrook, N. Bottka, W.T. Beard, J. Comas, *J. Appl. Phys.* **46**, 970 (1985).
- [36] C. R. Lu, C. L. Chang, C. H. Liou, J. R. Anderson, D. R. Stone, and R. A. Wilson, *Appl. Surf. Sci.* **92**, 404 (1996).
- [37] B.V. Shanabrook, O.J. Glembocki, W.T. Beard, *Phys. Rev. B* **35**, 2540 (1987).
- [38] H. Shen, and F. Pollak, *Phys. Rev. B* **42**, 7097 (1990).
- [39] W. Mönch "Semiconductor Surfaces and Interfaces," NY, USA: Editorial Springer (2000).
- [40] V. Kuryliuk, A. Podolian, and O. Korotchenkov, *Centr. eur. j. phys.* **8**, 65 (2010).
- [41] W. Hayes and R. Loudon, "Scattering of Light by Crystals", John Wiley & Sons, New York (1978).
- [42] X. Chen, X. Si, and V. Malhotra, *J. Electrochem. Soc.* **140**, 2085 (1993).
- [43] L.A. Farrow, C.J. Sandroff, and M.C. Tamargo, *Appl. Phys. Lett.* **51**, 1931 (1987).
- [44] H.K. Gummel, *IEEE Trans. Electron Dev.* **11**, 455 (1964).
- [45] C.K. Sarkar "Technology computer aided design," CCRC Press, Florida (2013).
- [46] A.M. Song, I. Maximov, M. Missous, and W. Seifert, *Physica E.* **21**, 1116 (2004).
- [47] C. Balocco, S. R. Kasjoo, X. F. Lu, L. Q. Zhang, Y. Alimi, S. Winnerl, and A. M. Song, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 223501 (2011).
- [48] T.M. Hsu, Y.C. Tien, N.H. Lu, S.P. Tsai, D.G. Liu, and C.P. Lee, *J. Appl. Phys.* **72**, 1065 (1992).
- [49] K. Horio, and T. Yamada, *IEEE Trans. Electron. Dev.* **46**, 648 (1999).

- [50] X. Yin, H.M. Chen, F.H. Pollak, Y. Chan, P.A. Montano, P.D. Kirchner, G.D. Pettit, and J.M. Woodall, *J. Vac. Sci. Technol. A* **10**, 131 (1992).
- [51] S. Adachi, *Properties of Aluminium Gallium Arsenide*, INSPEC ed., United Kingdom (1993).
- [52] V. N. Bessolov, M. V. Lebedev, and D. R. T. Zahn, *J. Appl. Phys.* **82**, 2640 (1997).
- [53] S. Sioncke, D. P. Brunco, M. Meuris, O. Uwamahoro, J. Van Steenberghe, E. Vrancken, and M. M. Heyns, *ECS Trans.* **16**, 451 (2008).
- [54] W. Zhou, C.H. Perry, L. Ma, K.-S. Lee, J.M. Worlock, A. Zrenner, F. Koch, K. Ploog, *J. Appl. Phys.* **69**, 4075 (1991).
- [55] H. Shen, and M. Dutta, *J. Appl. Phys.* **78**, 2151 (1995).
- [56] D. Paget, A.O. Gusev, V.L. Berkovits, *Phys. Rev. B* **53**, 4615 (1996).
- [57] A.N. Aleshin, A.S. Bugaev, M.A. Ermakova, and O.A. Ruban, *Crystallogr. Rep.* **61**, 299 (2016).
- [58] A. Bounouh, W. Poirier, F. Piquemal, G. Geneve's, and J. P. Andre, *IEEE Trans. Instrum. Meas.* **55**, 555 (2003).
- [59] T. Palacios, A. Chini, D. Buttari, S. Heikman, A. Chakraborty, S. Keller, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, *IEEE Trans. Electron Devices* **53**, 562 (2006).
- [60] A. Zanandra et al., *Microelectron. Reliab.* **52**, 2426 (2012).
- [61] M. Sydor, N. Jahren, W. C. Mitchel, W. V. Lampert, T. W. Haas, M. Y. Yen, S. M. Mudare, and D. H. Tomich, *J. Appl. Phys.* **67**, 7423 (1990).
- [62] A. Westlund, P. Sangaré, G. Ducournau, P. Nilsson, C. Gaquière, L. Desplanque, X. Wallart, and J. Grahn, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 133504 (2013).
- [63] J. Torres, P. Nouvel, A. Penot, L. Varani, P. Sangare, B. Grimbert, M. Faucher, G. Ducournau, C. Gaquiere, I. Iniguez-de-la-Torre, J. Mateos, and T. Gonzalez, *Semicond. Sci. Technol.* **28**, 125024 (2013).
- [64] K. Y. Xu, X. F. Lu, A. M. Song, and G. Wang, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 163503 (2008).
- [65] J. F. Millithaler, I. Iñiguez-de-la-Torre, A. Iñiguez-de-la-Torre, T. González, P. Sangaré, G. Ducournau, C. Gaquière, and J. Mateos, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 073509 (2014).
- [66] B. G. Vasallo, J. F. Millithaler, I. Iñiguez-de-la-Torre, T. González, G. Ducournau, C. Gaquière, and J. Mateos, *Semicond. Sci. Technol.* **29**, 115032 (2014).
- [67] K. Y. Xu, G. Wang, and A. M. Song, *J. Comput. Electron.* **6**, 59 (2007).
- [68] A.K. Baraskar, M.A. Wistey, V. Jain, U. Singiseti, G. Burek, B.J. Thibeault, Y.J. Lee, A.C. Gossard, and M.J.W. Rodwell, *J. Vac. Sci. Technol. B* **27**, 2036 (2009).
- [69] J. A. Bean, A. Weeks, and G. D. Boreman, *IEEE J. Quantum Electron.* **47**, 126 (2011).
- [70] M. Dagenais, K. Choi, F. Yesilkoy, A. N. Chryssis, and M. C. Peckerar, in *Solar spectrum rectification using nano-antennas and tunneling diodes: Proceedings of the XII Conference on Optoelectronic Integrated Circuits, San Francisco, California, USA, January 23 2010*. edited by L. A Eldada and E.-H. Lee (SPIE 7605, 2010), pp. 76050E1 - 76050E12.

- [71] I. Iñiguez-de-la-Torre, H. Rodilla, J. Mateos, D. Pardo, A. M. Song, and T. González, *J. Phys.: Conf. Ser.* **193**, 012082 (2009).
- [72] K. Y. Xu, X. F. Lu, A. M. Song, and G. Wang, *J. Appl. Phys.* **103**, 113708 (2008).
- [73] A. Westlund, P. Sangaré, G. Ducournau, I. Iñiguez-de-la-Torre, P.-Å Nilsson, C. Gaquière, L. Desplanque, X. Wallart, J.F. Millithaler, T. González, J. Mateos, and J. Grahn, *Solid-State Electronics* **104**, 79 (2015).
- [74] M. Bareiss, P. M. Krenz, G. P. Szakmany, B. N. Tiwari, D. Kalblein, A. O. Orlov, G. H. Bernstein, G. Scarpa, B. Fabel, U. Zschieschang, H. Klauk, W. Porod, and P. Lugli, *IEEE Trans. Nanotechnol.* **12**, 1144 (2013).
- [75] L. Olmon, and M. B. Raschke, *Nanotechnology* **23**, 444001 (2012).
- [76] L. Mescia and A. Massaro, *Adv. Mater. Sci. Eng.* **2014**, 252879 (2014).
- [77] N. Shinohara, *IEICE Electron. Express* **10**, 20132009 (2013).
- [78] C. Fumeaux, J. Alda, and G. D. Boreman, *Opt. Lett.* **24**, 1629 (1999).
- [79] Y. Pan, C. V. Powell, A. M. Song, and C. Balocco, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 253901 (2014).
- [80] H. Yasuda and I. Hosako, *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 1632 (2008).
- [81] I. Hosako, *Journal of NICT* **51**, 87 (2004).
- [82] B. Zhang, T. He, J. Shen, Y. Hou, Y. Hu, M. Zang, T. Chen, S. Feng, F. Teng, and L. Qin, *Opt. Lett.* **39**, 6110 (2014).
- [83] C.A. Balanis, *Antenna Theory: Analysis and Design*, John Wiley & Sons, Inc., USA (1996).
- [84] A. Sanchez, C. F. Davis, K. C. Liu, and A. Javan, *J. Appl. Phys.* **49**, 5270 (1978).
- [85] G. A. E. Vandenbosch and Z. Ma, *Nano Energy* **1**, 494 (2012).

Productos generados.

Publicaciones en revistas dentro del JCR.

5. I.E. Cortes-Mestizo, E. Briones, C.M. Yee-Rendón, L. Zamora Peredo, L.I. Espinosa-Vega, R. Droopad, and V.H. Méndez-García. *Optical spectroscopy analysis of the near surface depletion layer in AlGaAs/GaAs heterostructures grown by MBE*. Journal of Crystal Growth, 2016. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2017.04.015>
4. Edgar Briones, Irving E. Cortes-Mestizo, Joel Briones, Ravindranath Droopad, Leticia I. Espinosa-Vega, Heber Vilchis, and Víctor H. Méndez-García. *Efficiency of broadband terahertz rectennas based on self-switching nanodiodes*. Journal of photonics for energy, 2016. <http://dx.doi.org/10.1117/1.JPE.7.025001>
3. Irving Eduardo Cortes-Mestizo, Leticia Ithsmel Espinosa-Vega, José Ángel Espinoza-Figueroa, Alejandro Cisneros-de-la-Rosa, Eric Eugenio-López, Víctor Hugo Méndez-García, Edgar Briones, Joel Briones, Luis Zamora-Peredo, Ravindranath Droopad, Cristo Yee-Rendon. *Determination of the depletion layer width and effects on the formation of double-2DEG in AlGaAs/GaAs heterostructures*. Journal of Vacuum Science & Technology B, 2016. <http://dx.doi.org/10.1116/1.4942898>
2. Irving Eduardo Cortes-Mestizo, Edgar Briones, Joel Briones, Ravindranath Droopad, Manuel Pérez-Caro, Stefan McMurtry, Michel Hehn, François Montaigne, and Víctor Hugo Méndez-García. *Study of InAlAs/InGaAs self-switching diodes for energy harvesting applications*. Japanese Journal of Applied Physics, 2015. <http://dx.doi.org/10.7567/JJAP.55.014304>
1. Irving Cortes-Mestizo, Víctor H. Méndez-García, Joel Briones, Manuel Pérez-Caro, Ravi Droopad, Stefan McMurtry, Michel Hehn, François Montaigne, and Edgar Briones. *Terahertz harvesting with shape-optimized InAlAs/InGaAs self-switching nanodiodes*. AIP Advances, 2015. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4936792>

Presentaciones en congresos internacionales.

11. I.E. Cortes-Mestizo, E. Briones, A. Belio-Manzano, L.I. Espinosa-Vega, and V.H. Méndez-García. *W-Shape nanodiode controlled by surface states for THz detection*, 42 International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves, Cancún, México, Octubre-Septiembre 2017.
10. Irving Eduardo Cortes-Mestizo, Edgar Briones, Christian Mercado, Leticia Ithsmel Espinosa-Vega, Alfredo BelioManzano, Víctor Hugo Méndez-García. *Design of logic gates through surface states engineering*, X International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, Ciudad Juarez, México, Septiembre 2017.

9. **I. E. Cortes-Mestizo**, R. Droopad, C. M. Yee-Rendón, J. A. Espinoza-Figueroa, V. H. Méndez-García. *Optical spectroscopy analysis of embedded layers in AlGaAs/GaAs heterostructures grown by MBE*, 19th International Conference on Molecular Beam Epitaxy, Montpellier, Francia, Septiembre 2016.
8. **Irving Eduardo Cortes Mestizo**, Christian A. Mercado, Edgar Briones, Víctor-Hugo Méndez. *Surface states based field-effect transistor analyzed by TCAD-simulations*, IX International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, Mazatlán, México, Septiembre 2016.
7. **Irving Eduardo Cortes Mestizo**, Jose Ángel Espinoza Figueroa, Eric Eugenio Lopez, Christian A. Mercado, Edgar Briones, Víctor Hugo Méndez García. *A novel W-Shape nanodiode controlled by surface states*, IX International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, Mazatlán, México, Septiembre 2016
6. **I. E. Cortes-Mestizo**, J. Briones, R. Droopad, M. Pérez-Caro, C.M. Yee-Rendón, E. Briones, V. H. Méndez-García. *Photoreflectance analysis of AlGaAs/GaAs heterostructures with double 2DEG*, The 31st North American Conference on Molecular Beam Epitaxy, Cancun, Mexico, Octubre 2015.
5. **I. E. Cortes-Mestizo**, L. I. Espinosa-Vega, J. Briones, R. Droopad, M. Pérez-Caro, C.M. Yee-Rendón, E. Briones, V.H. Méndez-García. *Depletion layer width effects on AlGaAs/GaAs single and double 2DEG heterostructures*, The 31st North American Conference on Molecular Beam Epitaxy, Cancun, Mexico, Octubre 2015.
4. **I. E. Cortes-Mestizo**, E. Briones, V.H. Méndez García, *Thermal energy harvesting with MBE-grown high-mobility asymmetric nanochannels*, The 31st North American Conference on Molecular Beam Epitaxy, Cancun, Mexico, Octubre 2015.
3. **Irving Eduardo Cortes Mestizo**, Joel Briones, Edgar Briones, Víctor Hugo Méndez García. *Silicon-on-insulator Self-Switching Diode analyzed by TCAD-simulations*, VIII International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, Puebla, Mexico, Septiembre 2015.
2. **Irving Eduardo Cortes Mestizo**, Leticia Espinosa Vega, Joel Briones, Ravindranath Droopad, Manuel Perez Caro, Cristo Manuel Yee Rendón, Edgar Briones, Víctor Hugo Méndez García. *Optical and electrical characterization of surface states effects of AlGaAs/GaAs heterostructures grown by MBE*, VIII International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, Puebla, Mexico, Septiembre 2015.
1. **Irving Eduardo Cortes Mestizo**, Edgar Briones, Joel Briones, Víctor Hugo Méndez García. *InGaAs-based self-switching diode analyzed by TCAD- simulations in DC injection mode*, VII International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum. Ensenada, Mexico, Octubre 2014.

Presentaciones en congresos nacionales.

2. **I. E. Cortes-Mestizo**, A. Belio-Manzano, J. Briones, E. Briones, V.H. Méndez-García. *Recolección de energía térmica mediante nanocanales asimétricos de alta movilidad electrónica crecidos por MBE*, Primera Reunión Mexicana de Ciencia y Tecnología de Terahertz, León, Guanajuato, México. Octubre 2015.
1. **I. E. Cortes-Mestizo**, A. Belio-Manzano, J. Briones, E. Briones, V.H. Méndez-García. *Rectificación THz a través de diodos autoconmutantes basados en heteroestructuras 2DEG*, Primera Reunión Mexicana de Ciencia y Tecnología de Terahertz, León, Guanajuato, México. Octubre 2015.