



CENTRO DE INVESTIGACIONES  
EN ÓPTICA, A.C.

CENTRO DE INVESTIGACIONES EN  
ÓPTICA, A.C.

TESIS DE MAESTRÍA

---

# Espectroscopía de segundo armónico por reflexión en Silicio estresado

---

*Autor:*

Lic. Oscar Rodolfo  
Muñiz Sánchez

*Supervisor:*

Dr. Ramón Carriles  
Jaimes

*Versión Definitiva. Incluye cambios sugeridos por revisores.*

20 de abril de 2017





*«THE BEST STORY one can tell is often the story about one's personal experience and involvement. In my case, it is the story of surface nonlinear optics.»*

Y. R. Shen



CENTRO DE INVESTIGACIONES EN ÓPTICA, A.C.

## *Resumen*

Maestría en Ciencias (Óptica)

### **Espectroscopía de segundo armónico por reflexión en Silicio estresado**

por Lic. Oscar Rodolfo Muñiz Sánchez

En esta tesis se presenta el diseño y elaboración de un sistema óptico típico capaz de realizar espectroscopia de la generación de segundo armónico por reflexión considerando su anisotropía rotacional, en un amplio rango de longitudes de onda. Por medio de dicho sistema se obtuvo la respuesta de una muestra de Silicio estresado con orientación cristalina (001) y ángulo 'miscut' de 5 grados hacia (110) con longitudes de onda en el rango de 700-790 nm, en la combinación de polarización  $S_{in}$ - $P_{out}$  a un ángulo de incidencia de 45 grados, se observó una resonancia típica del Silicio que confirma la funcionalidad del sistema óptico y la sugerencia de una dependencia por parte del estrés en las mediciones.



## *Agradecimientos*

Gracias a mi asesor Dr. Ramón Jaimes Carriles por darme su confianza en este proyecto de investigación, un profundo respeto y admiración deja en mí la invaluable formación experimental que me ha transmitido. Al Centro de Investigación en Óptica por brindarme recursos suficiente para mi desarrollo profesional y a toda su comunidad que ha dejado una huella permanente en mí. A mis seres queridos por su apoyo y comprensión . . .



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Marco Teórico</b>	<b>5</b>
2.1. Superficies de silicio . . . . .	5
2.1.1. Superficie 'vicinal' . . . . .	6
2.1.2. Superficie estresada . . . . .	7
2.2. Optica no lineal . . . . .	9
2.2.1. Polarización . . . . .	10
2.2.2. Ecuaciones de Maxwell . . . . .	14
2.2.3. Respuesta del medio . . . . .	15
2.2.4. Generación de segundo armónico SHG . . . . .	16
2.2.5. Anisotropía e isotropía rotacional en la polarización [14] . . . . .	19
2.2.6. Generación de segundo armónico por reflexión .	20
2.2.7. Espectroscopia de segundo armónico por reflexión (RSH) . . . . .	22
<b>3. Experimento</b>	<b>25</b>
3.1. Muestra . . . . .	25
3.2. Arreglo experimental . . . . .	26
<b>4. Resultados</b>	<b>33</b>
<b>5. Conclusiones</b>	<b>45</b>

<b>A. Estructura diamante</b>	<b>47</b>
<b>B. Detección</b>	<b>49</b>
<b>Modo compuerta</b> . . . . .	<b>50</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>53</b>

# Índice de figuras

2.1. Estructura tetraédrica formada por los orbitales híbridos entre átomos de silicio, . . . . .	6
2.2. Celda unitaria que contiene 4 estructuras tetraédricas . .	7
2.3. Arreglo de átomos en la orientación (001) del cristal de silicio. La escala de grises indica la capa donde se localiza el átomo en cuestión y $a$ la constante de red [8] . . . . .	8
2.4. Geometría de dos planos que corresponden a dos caras del cristal $\pi$ y $\pi'$ cuyos vectores normales forman un ángulo miscut $\alpha$ . . . . .	9
2.5. Imagen de la sección transversal de una capa de Si estresado aproximadamente de 10 nm crecido sobre SiGe [10].	10
2.6. Dos moléculas con distribución de carga $\rho_j$ y $\rho_i$ que generen un campo eléctrico en el punto $P$ . . . . .	11
2.7. Volumen que contiene un conjunto de moléculas que generen campos eléctricos, que al ser promediados, pueden asociarse a un solo campo para dicho volumen. . . . .	12
2.8. Plano de incidencia en $(x, z)$ del sistema coordenado $(x, y, z)$ . Rotación de la muestra por un ángulo $\phi$ en torno al eje $z$ .	19
2.9. $I_{sp}^{\Omega}$ debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión en un muestra de silicio (100) con ángulo miscut de 5 grados orientado hacia (110) reportadas en [15] a 765 nm con configuración $s_{in}$ - $p_{out}$ . .	21

2.10. Espectroscopia de SHG de Silicio 100 con oxido nativo (circulos abiertos), Si amorfo (círculos sólidos), resonancias individuales (lineas segmentadas), superposición de resonancias (linea sólida)	23
2.11. Espectroscopía de una muestra de Silicio (001) con miscut de 10 grados orientados hacia (110), las dos con sustrato de dióxido de silicio. [18]	24
3.1. Película delgada estresada de 10 nm con un miscut de 5 grados hacia (110) crecida $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ (001) de 200 nm sobre un sustrato de Si. A la izquierda la ilustración de la capa sobre el sustrato a un ángulo de $\theta = 5$ grados y a la derecha una imagen obtenida por un microscopio electrónico de transmisión TEM [19].	26
3.2. Arreglo experimental	27
3.3. Ensayo hecho en el laboratorio para evaluar la operación del sistema óptico con GaAs (100) y Si (100) en contraste con los medidos en [20] y [5]	28
3.4. Arreglo experimental	31
4.1. $I_{sp}^{\Omega}$ debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra S a 700 nm en la configuración $s_{in}\text{-}p_{out}$	34
4.2. $I_{sp}^{\Omega}$ debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra S a 710 nm en la configuración $s_{in}\text{-}p_{out}$	34
4.3. $I_{sp}^{\Omega}$ debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra S a 720 nm en la configuración $s_{in}\text{-}p_{out}$	35

4.4. $I_{sp}^{\Omega}$ debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra $S$ a 730 nm en la configuración $s_{in}$ - $p_{out}$ . . . . .	35
4.5. $I_{sp}^{\Omega}$ debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra $S$ a 740 nm en la configuración $s_{in}$ - $p_{out}$ . . . . .	36
4.6. $I_{sp}^{\Omega}$ debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra $S$ a 750 nm en la configuración $s_{in}$ - $p_{out}$ . . . . .	37
4.7. $I_{sp}^{\Omega}$ debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra $S$ a 760 nm en la configuración $s_{in}$ - $p_{out}$ . . . . .	37
4.8. $I_{sp}^{\Omega}$ debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra $S$ a 770 nm en la configuración $s_{in}$ - $p_{out}$ . . . . .	38
4.9. $I_{sp}^{\Omega}$ debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra $S$ a 780 nm en la configuración $s_{in}$ - $p_{out}$ . . . . .	38
4.10. $I_{sp}^{\Omega}$ debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra $S$ a 790 nm en la configuración $s_{in}$ - $p_{out}$ . . . . .	39
4.11. Espectroscopía de segundo armónico por reflexión considerando la anisotropía rotacional del SH de la muestra $S$ en la configuración $s_{in}$ - $p_{out}$ . . . . .	40
4.12. Coeficiente de Fourier $a_0$ estimado según (2.29) en función de la longitud de onda incidente . . . . .	40
4.13. Coeficiente de Fourier $a_1$ estimado según (2.29) en función de la longitud de onda incidente . . . . .	41

4.14. Coeficiente de Fourier $a_2$ estimado según (2.29) en función de la longitud de onda incidente . . . . .	41
4.15. Coeficiente de Fourier $a_3$ estimado según (2.29) en función de la longitud de onda incidente . . . . .	42
4.16. Coeficiente de Fourier $a_4$ estimado según (2.29) en función de la longitud de onda incidente . . . . .	42
4.17. Resonancia obtenida por la espectroscopía de segundo armónico por reflexión, en la configuración $s_{in}$ - $p_{out}$ . . . . .	43
4.18. Espectroscopía de segundo armónico por reflexión considerando la anisotropía rotacional del SH de la muestra $S$ en la configuración $p_{in}$ - $p_{out}$ . . . . .	43
A.1. Secuencia de la celda unitaria cúbica del Silicio. La celda se rota para obtener diferentes orientaciones que incluyen las direcciones cristalográficas (001),(111),(110) con fondo azul respectivamente . . . . .	48
B.1. Sección transversal de un tubo fotomultiplicador con forma de jaula circular que ilustra las trayectorias de los electrones. 0.- fotocátodo. 1-9.- Dínodos. 10.- Ánodo . . . . .	49
B.2. circuito eléctrico para convertir la señal de corriente en voltaje . . . . .	50
B.3. Etapas básicas del sistema de conteo: 1.-Fotones incidentes. 2.-Transductor(señal de luz-señal eléctrica). 3.- Discriminador de pulsos 4.- Acondicionamiento de señal digital. 5.-Cuentas . . . . .	51

- B.4. La primera señal vista de arriba hacia abajo es el disparador que está sincronizado con los pulsos del láser; la segunda es la compuerta que aparece sincronizada con el disparador con un cierto retraso; la tercera es la señal del PMT que puede o no coincidir con la compuerta; y la cuarta son las cuentas Sincronización de la compuerta y los pulsos generados por el PMT. La sincronización del contador de fotones con el láser permite minimizar el ruido 52
- B.5. La señal de la compuerta (señal azul) con la del fotomultiplicador (señal amarilla); Imagen que ilustra la sincronización . . . . . 52



# Índice de cuadros

3.1. Componentes del sistema óptico. La posición de los elementos están ilustrados en la figura 3.4 . . . . .	29
3.2. Componentes del sistema óptico. La posición de los elementos están ilustrados en la figura 3.4 . . . . .	30



# Capítulo 1

## Introducción

El silicio es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre después del oxígeno y en la tecnología es casi omnipresente. La evolución de la informática y la electrónica ha tenido un gran impacto social, tecnológico y económico. Dicho progreso es consecuencia directa de las dimensiones de los transistores, los cuales conforman a la mayoría de los dispositivos electrónicos y cuya materia prima es el silicio. La visión que ha planteado la famosa *ley de Moore* de duplicar el número de componentes por circuito integrado [1] motiva a la industria de los microprocesadores a la miniaturización continua de los transistores. La investigación científica ha abierto diferentes líneas para mantener dicha tendencia. La posibilidad de que la *ley Moore* llegue a su fin por los límites físicos que implican las dimensiones a las que se está a punto de llegar motiva a los científicos a seguir líneas de investigación y encontrar soluciones. Una alternativa es aumentar la movilidad de portadores de carga del silicio y así mejorar la potencia de procesamiento de la información. Se ha encontrado que superficies de silicio estresado tienen mayor movilidad de portadores de carga en comparación a aquellas que

no lo están [2]; asimismo, las propiedades ópticas no lineales del Si estresado se ven modificadas, abriendo la posibilidad de su uso en optoelectrónica. Por lo anterior es de suma importancia caracterizar dichas propiedades.

La Óptica es la rama de la física que estudia las propiedades de la luz y su interacción con la materia. A mediados del siglo XIX James Clerk Maxwell formula la teoría clásica de la radiación electromagnética por medio de sus célebres ecuaciones y con las cuales explica la naturaleza eléctrica y magnética de la luz. Desde entonces la Óptica no había sido tan revolucionaria en el ámbito científico sino hasta la invención del láser. Dicho acontecimiento dio origen, entre muchos otros, al estudio de la Óptica no lineal. Por primera vez Franken en 1961 observó segundo armónico (SH), es decir el doblado de la frecuencia de la luz, en cristales de cuarzo utilizando un láser de rubí[3]. A partir de 1962 N. Bloembergen propone un formalismo teórico para la generación de segundo armónico (SHG) y otros fenómenos no lineales [4]. En 1983, contrario a lo que N. Bloembergen afirmaba, Heinz y Shen de la Universidad de California en Berkeley observaron una fuerte correlación entre el segundo armónico por reflexión (RSH) y el desplazamiento angular de una muestra de silicio alrededor de la normal a su superficie [5]. En 1986 Sipe de la Universidad de Toronto en Canada, desarrolló una teoría fenomenológica que explica la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico (RA-SHG) en medios centrosimétricos considerando su estructura cristalográfica en la superficie y bulto [6].

El proyecto de investigación sustentado en esta tesis, es la obtención de la repuesta óptica no lineal de superficies de silicio estresado, por medio de espectroscopia de segundo armónico por reflexión (RSH-S),

---

considerando la RA-SHG; dicha técnica no es invasiva y puede usarse para examinar la naturaleza de la estructura cristalográfica y electrónica de las superficies *in situ*, además de no requerir alto vacío para su ejecución. El RA-SHG puede complementar a otras técnicas cristalográficas como la Reflection High Energy Electron Diffraction (RHEED).



# Capítulo 2

## Marco Teórico

La espectroscopia de segundo armónico por reflexión está fundamentada en el campo de la interacción luz-materia. Diversas disciplinas están inmersas como la óptica no lineal, la cristalografía, física de semiconductores, etc. Existen varios modelos, que explican los fenómenos que ocurren en torno al segundo armónico por reflexión.

En este capítulo se desarrollan en su mayoría conceptos semiclásicos básicos que permitan abordar el experimento realizado en la presente tesis.

### 2.1. Superficies de silicio

El silicio es un material semiconductor, sólido a temperatura ambiente, con una presencia de casi 28 por ciento en la corteza terrestre, se presenta de forma natural como dióxido de silicio y otros compuestos. Su estructura puede ser amorfa, policristalina o monocristalina; esta última con simetría  $Fd\bar{3}m$ , para fines de este trabajo la centrosimetría (es la simetría que tiene un cristal por el hecho de poseer un centro de inversión) va a ser la principal característica. Su número atómico es 14 y tiene configuración electrónica  $[Ne] 3s^2 3p^2$  que puede pasar por medio de una combinación lineal de orbitales atómicos [7] a la configuración

$[Ne] 3s^1 3p^3$  esta última facilita la capacidad de formar enlaces covalentes con átomos vecinos y así dar lugar a una estructura tetraédrica como se observa en la Figura 2.1. Los átomos se enlazan de modo que forman unidades llamadas celdas unitarias como en la Figura 2.2, que al repetirse periódicamente por traslación dan lugar a la red cristalina.

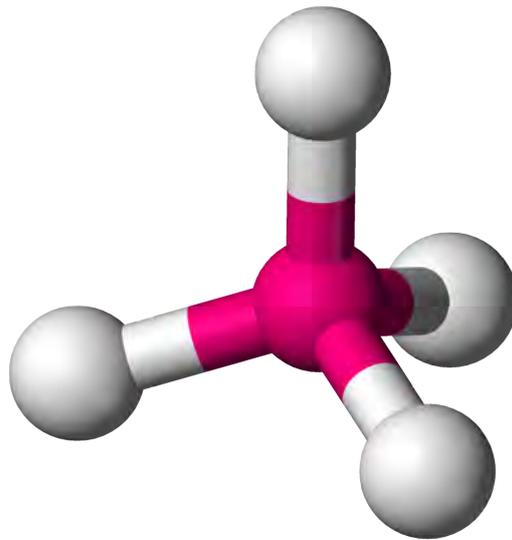


FIGURA 2.1: Estructura tetraédrica formada por los orbitales híbridos entre átomos de silicio,

### 2.1.1. Superficie 'vicinal'

Los cristales monocristalinos presentan orientaciones particulares como (001), (110) y (111) ilustrados en el apéndice A, siendo la orientación (001) ilustrada en la Figura 2.3 la más usada en electrónica. Cuando la orientación del cristal se desvía desde una de las caras hacia otra en particular decimos que la superficie de la nueva orientación es una superficie *vicinal*, la cual genera anisotropía en el cristal contribuyendo sustancialmente en la generación de segundo armónico por reflexión RSH. La figura 2.4 ilustra la localización espacial de dos caras diferentes del

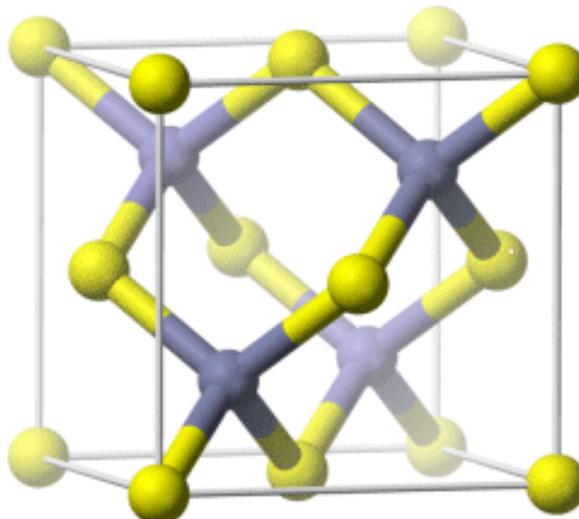


FIGURA 2.2: Celda unitaria que contiene 4 estructuras tetraédricas

crystal siendo  $\pi$  la principal y  $\pi'$  la vicinal, ambos con vectores normales  $\mathbf{n}$  y  $\mathbf{n}'$  respectivamente, el ángulo  $\alpha$  entre los dos vectores normales es llamado *misct*. Se ha observado que este tipo de orientaciones permiten anular defectos por *Dominio Anti-fase*<sup>1</sup> además de ventajas tecnológicas en el diseño de transistores heterobipolares útiles para dispositivos electrónicos ultrarrápidos [9].

### 2.1.2. Superficie estresada

Se dice que un cristal está libre de estrés si únicamente las fuerzas internas que actúan entre sus puntos son aquellas necesarias para darle forma en ausencia de fuerzas externas; en otras palabras, se dice que el cuerpo está libre de estrés si a nivel atómico existen solo fuerzas que mantienen a los átomos en una configuración dada. Por lo tanto un

<sup>1</sup>El Dominio Anti-fase es una falla que se presenta en la estructuras cristalina debido a traslaciones de átomos que toman lugares que no corresponden a una red sin imperfecciones.

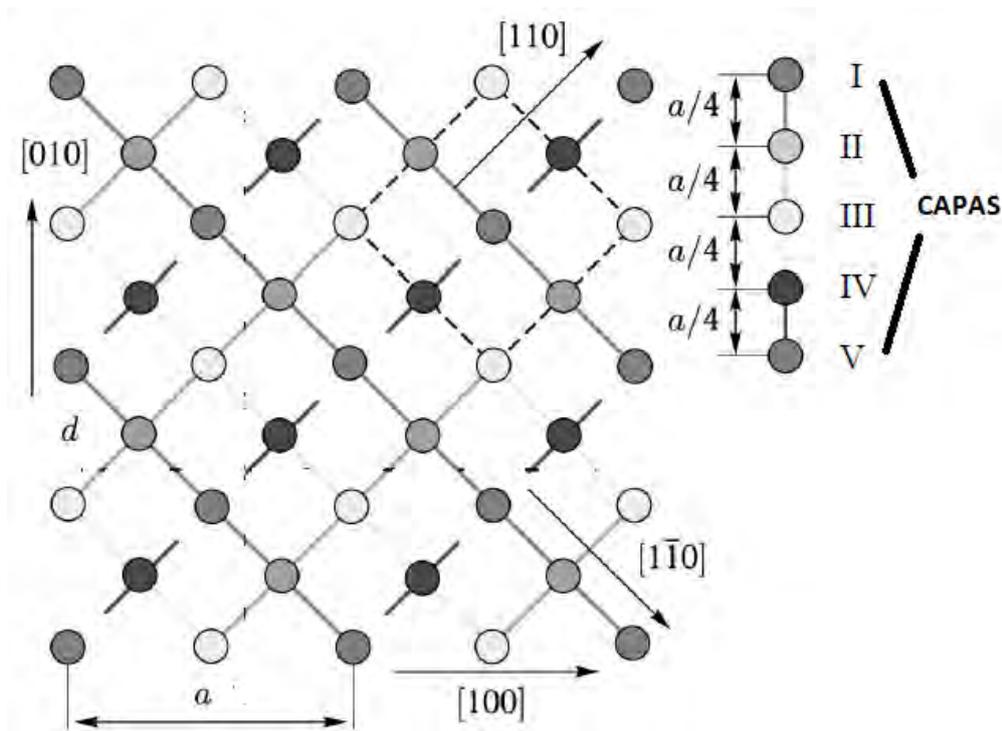


FIGURA 2.3: Arreglo de átomos en la orientación (001) del cristal de silicio. La escala de grises indica la capa donde se localiza el átomo en cuestión y  $a$  la constante de red [8]

cuerpo libre de estrés es un cuerpo en el cuál todos los átomos están ordenados en sus posiciones interatómicas de equilibrio. En teoría de elasticidad el término *cuerpo estresado* es reservado para el estado de un cuerpo en el cuál las fuerzas que actúan sobre él cambian la posición de equilibrio de sus átomos; el cuerpo ha sufrido una deformación. [8]

Una de las técnicas para mejorar la corriente eléctrica en los dispositivos CMOS (semiconductor complementario de óxido metálico) de pequeñas dimensiones es la utilización de silicio bajo estrés mecánico. La figura 2.5 muestra una película de silicio estresado sobre una heteroestructura de silicio como sustrato de un microscopio electrónico por transmisión (TEM) [10].

El estrés induce cambios en la estructura de bandas del silicio que a su vez determinan la masa efectiva  $m^*$  de sus portadores de carga [2]; la



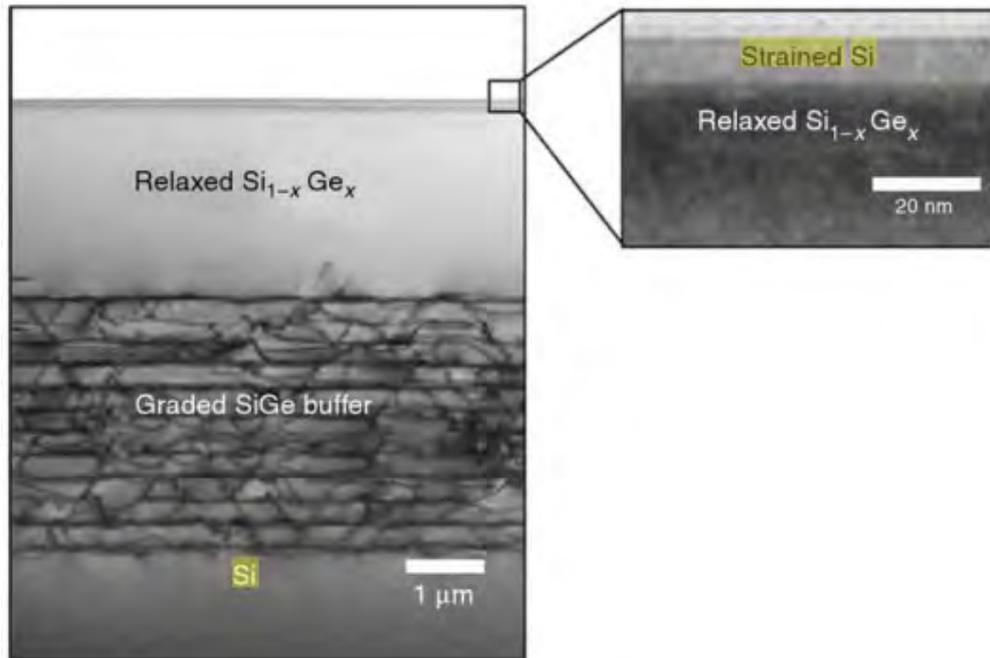


FIGURA 2.5: Imagen de la sección transversal de una capa de Si estresado aproximadamente de 10 nm crecido sobre SiGe [10].

cristalina del silicio. La densidad de polarización es la propiedad física que permite observar dichos fenómenos ópticos no lineales.

### 2.2.1. Polarización

El campo eléctrico  $\mathbf{E}_j(\mathbf{r})$  generado en un punto  $\mathbf{r}$  por parte de una distribución de carga  $\rho_j(\mathbf{r}')$  de una molécula  $j$  ilustrado en la figura 2.6 es

$$\mathbf{E}_j(\mathbf{r}) = -\nabla_j \left\{ \int \frac{\rho_j(\mathbf{r}') dV'}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{r}'\|} \right\}. \quad (2.2)$$

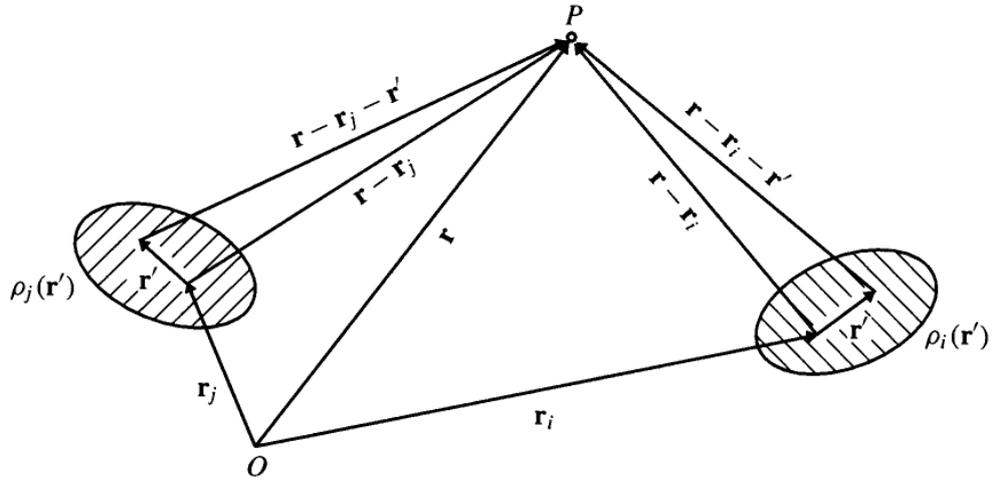


FIGURA 2.6: Dos moléculas con distribución de carga  $\rho_j$  y  $\rho_i$  que generan un campo eléctrico en el punto  $P$

Por medio de la expansión multipolar es posible expresar la ecuación (2.2) como

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_j(\mathbf{r}) &\approx -\nabla \int \rho_j(\mathbf{r}') \left[ \frac{1}{\|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\|} + \mathbf{r}' \cdot \nabla_j \frac{1}{\|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\|} + \mathbf{r}'\mathbf{r}' : \nabla_j \nabla_j \frac{1}{2\|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\|} \right] dV' \\ &\approx -\nabla \left[ \frac{q_j}{\|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\|} + \mathbf{p}_j \cdot \nabla_j \frac{1}{\|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\|} + \vec{\mathbf{Q}}_j : \nabla_j \nabla_j \frac{1}{\|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\|} \right] dV' \end{aligned} \quad (2.3)$$

donde

$$\begin{aligned} q_j &= \int \rho_j(\mathbf{r}') dV', \\ \mathbf{p}_j &= \int \rho_j(\mathbf{r}') \mathbf{r}' dV', \\ \vec{\mathbf{Q}}_j &= \frac{1}{2} \int \rho_j(\mathbf{r}') \mathbf{r}'\mathbf{r}' dV', \end{aligned} \quad (2.4)$$

son la carga total, el momento dipolar y el momento cuadrupolar de la molécula  $j$  respectivamente.

La distribución de momentos dipolares para todas las moléculas puede escribirse como

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r}) &= \sum_j q_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \\ \boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}) &= \sum_j \mathbf{p}_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \\ \vec{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{r}) &= \sum_j \vec{\mathbf{Q}}_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j),\end{aligned}\quad (2.5)$$

donde  $\boldsymbol{\pi}$  es llamada *densidad de polarización*. El campo eléctrico generado por todas las moléculas puede expresarse como  $\mathbf{E} = \sum \mathbf{E}_j$  que resulta en

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) \approx -\nabla \int_{dV''} \left[ \frac{\rho(\mathbf{r}'')}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}''\|} + \boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}'') \cdot \nabla'' \frac{1}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}''\|} + \vec{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{r}'') : \nabla'' \nabla'' \frac{1}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}''\|} \right] \quad (2.6)$$

El campo eléctrico promedio de un conjunto de moléculas se asocia al volumen que las contiene como se muestra en la figura 2.7, calculando el promedio respecto al volumen de la ecuación (2.6)

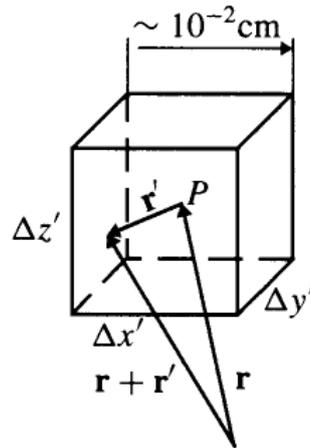


FIGURA 2.7: Volumen que contiene un conjunto de moléculas que generan campos eléctricos, que al ser promediados, pueden asociarse a un solo campo para dicho volumen.

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}) \rangle &\approx \frac{1}{\Delta V'} \int \mathbf{E}(\mathbf{r} + \mathbf{r}') dV', \\
&\approx -\nabla \int \left[ \frac{\rho(\mathbf{r}')}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|} + \mathcal{P}(\mathbf{r}') \cdot \nabla' \frac{1}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|} + \vec{\Theta}(\mathbf{r}') : \nabla' \nabla' \frac{1}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|} \right] \\
&\quad dV'
\end{aligned} \tag{2.7}$$

donde

$$\mathcal{P}(\mathbf{r}') = N(\mathbf{r}') \langle \mathbf{p}(\mathbf{r}') \rangle, \quad (\text{Densidad de polarización dipolar})$$

$$\vec{\Theta}(\mathbf{r}') = N(\mathbf{r}') \langle \vec{\mathbf{Q}}(\mathbf{r}') \rangle, \quad (\text{Densidad de polarización cuadrupolar}), \tag{2.8}$$

$N(\mathbf{r}')$  es el número de moléculas por unidad de volumen y  $\langle \mathbf{p}(\mathbf{r}') \rangle, \langle \vec{\mathbf{Q}}(\mathbf{r}') \rangle$  son los momentos dipolar y cuadrupolar promedio por molécula respectivamente.

Si aplicamos la divergencia a la ecuación (2.7) y usamos la relación

$$\nabla^2 \frac{1}{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|} = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{2.9}$$

obtenemos

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \rho(\mathbf{r}) - \nabla \cdot \left( \mathcal{P} - \nabla \cdot \vec{\Theta} \right), \\
\rho(\mathbf{r}) &= \nabla \cdot \left[ \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathcal{P} - \nabla \cdot \vec{\Theta} \right]
\end{aligned} \tag{2.10}$$

donde hemos renombrado la variable  $\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}) \rangle$  por  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  asumiendo que el desarrollo ya está en un contexto macroscópico.

El momento dipolar de un dipolo eléctrico al estar inmerso en un campo eléctrico externo tiende a tener la dirección de dicho campo; en

general la densidad de polarización  $\mathbf{P}$  definida como

$$\mathbf{P} = \mathcal{P} - \nabla \cdot \vec{\Theta} \quad (2.11)$$

depende del campo eléctrico  $\mathbf{E}$

### 2.2.2. Ecuaciones de Maxwell

Una forma en la que la materia puede estar sometida a un campo eléctrico externo es por medio de la interacción luz-materia. Las ecuaciones de Maxwell en (2.12) unifican la electricidad y el magnetismo y dan lugar a una ecuación de onda que explica la naturaleza electromagnética de la luz.

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}_f = \nabla \times \mathbf{H}, \quad (\text{Ley de Ampere})$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}, \quad (\text{Ley de Faraday})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (\text{Ley de Gauss para el campo magnético})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_f. \quad (\text{Ley de Gauss para el campo eléctrico}) \quad (2.12)$$

Las cantidades vectoriales  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{D}$  y  $\mathbf{B}$  son los campos magnético, corriente de desplazamiento, e inducción magnética respectivamente; la densidad de carga y de corriente,  $\rho_f$ ,  $\mathbf{J}_f$ , respectivamente, pueden verse como las fuentes de estos campos. Para cada material los campos interaccionan de manera diferente según las ecuaciones constitutivas (2.13) que le correspondan

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (2.13)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \mathbf{M},$$

donde  $\mathbf{M}$  es la magnetización del material. Cuando los campos electromagnéticos están presentes en la zona donde hay cambio de medio las ecuaciones (2.12) llevan a las condiciones de frontera (2.14)

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_2) &= 0, \\ \hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) &= \sigma, \\ \hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_2) &= \mathbf{J}_s, \\ \hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{B}_1 - \mathbf{B}_2) &= 0,\end{aligned}\tag{2.14}$$

donde  $\hat{\mathbf{n}}$  es el vector normal a la superficie,  $\sigma$  y  $\mathbf{J}$  la densidad de carga y de corriente superficial respectivamente [11]. Combinando (2.12) y (2.13) se obtiene (2.15) y en un medio sin efectos magnéticos, corrientes libres y densidad de carga nula, es decir, si  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{J}_f$ ,  $\rho_f$  son cero, entonces (2.15) se escribe como la ecuación (2.16)

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t} (\mu_0 \mathbf{J}_f + \nabla \times \mathbf{M})\tag{2.15}$$

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}.\tag{2.16}$$

La ecuación (2.16) es una ecuación diferencial parcial de segundo orden no homogénea llamada ecuación de onda, cuya linealidad dependerá de la densidad de polarización.

### 2.2.3. Respuesta del medio

La densidad de polarización en presencia de campos eléctricos de gran magnitud contiene términos no lineales de diferentes órdenes que pueden expresarse como un desarrollo en serie

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \mathbf{P}^{(1)} + \mathbf{P}^{(2)} + \mathbf{P}^{(3)} + \dots \\ &= \mathbf{P}^{(1)} + \mathbf{P}^{(NL)}.\end{aligned}\quad (2.17)$$

La componente  $i$  de orden  $n$  de la densidad de polarización en (2.17) puede escribirse como

$$\begin{aligned}P_i^{(n)}(\mathbf{r}, t) &\propto \int_{-\infty}^{\infty} G_{ij_1\dots j_n}^{(n)}(\mathbf{r}_1, t_1; \dots; \mathbf{r}_n, t_n; \mathbf{r}, t) E_{j_1}(\mathbf{r}_1, t_1) \dots \\ &\quad \times E_{j_n}(\mathbf{r}_n, t_n) d\mathbf{r}_1 dt_1 \dots d\mathbf{r}_n dt_n,\end{aligned}\quad (2.18)$$

$G_{ij_1\dots j_n}^{(n)}$  es la *respuesta* del medio cuando  $n$  ondas monocromáticas interactúan con él. La densidad de polarización en un punto dado  $(\mathbf{r}, t)$  depende de los alrededores y la historia del medio; para el caso particular donde  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n$ ,  $\omega = \omega_1 + \dots + \omega_n$ , la transformada de Fourier en ambos lados de la ecuación (2.18) resulta en

$$P_i^{(n)}(\mathbf{k}, \omega) = \chi_{ij_1\dots j_n}^{(n)}(\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n, \omega = \omega_1 + \dots + \omega_n) E_{j_1}(\mathbf{k}_1, \omega_1) \dots E_{j_n}(\mathbf{k}_n, \omega_n)\quad (2.19)$$

$\chi_{ij_1\dots j_n}^{(n)}$  es llamado *tensor de susceptibilidad*. [12]

## 2.2.4. Generación de segundo armónico SHG

Combinando las ecuaciones (2.16) y (2.17) llegamos a

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon_0 \mu_0 \epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}^{NL}}{\partial t^2}.\quad (2.20)$$

La densidad de polarización no lineal  $\mathbf{P}^{NL}$  en (2.20) puede verse como un tipo de fuente de radiación generada por el propio medio a causa de la radiación incidente  $\mathbf{E}$ . Fue la aparición del láser la clave para comenzar a ver fenómenos no lineales. La primera observación de un

fenómeno no lineal fue reportado por Franken, al hacer incidir un haz láser de 694.2 nm sobre un cristal de cuarzo, midiendo la longitud de la luz y de la onda generada a 347.1 nm.

Una solución de la ecuación (2.20) considerando el término de segundo orden según la ecuación (2.19), puede obtenerse por medio de la teoría de mezclado de tres ondas monocromáticas con frecuencias  $\omega_1, \omega_2$  y  $\omega_3$ . Un caso particular donde el medio no es centrosimétrico,  $\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$  y  $\omega_2 = \omega_1 = \omega$ , lleva a un conjunto de ecuaciones acopladas que implican: la generación de ondas con el doble de la frecuencia de las ondas incidentes y la relación de proporcionalidad

$$I^{(\Omega)} \propto (I^{(\omega)})^2 \quad (2.21)$$

donde  $I^{(\Omega)}$  y  $I^{(\omega)}$  son las intensidades de la onda generada e incidente respectivamente. Este fenómeno es llamado propiamente generación de segundo armónico (SHG).

Sin embargo la generación de segundo armónico no se da en cualquier medio no lineal, dicho medio no debe poseer *simetría de inversión*, la restricción hace que solo 21 de las 32 clases de cristales den lugar a la generación de segundo armónico. La inversión puede expresarse como un operador que actúa sobre un tensor o vector que representan alguna propiedad física del material.

Por ejemplo si el material tiene una simetría  $\mathbf{Q}$  entonces se cumple para el tensor de susceptibilidad, del término dipolar, que  $\chi_{ijk} = Q_{li}Q_{mj}Q_{nk}\chi_{lmn}$ ; si la simetría es de inversión entonces

$$\begin{aligned}
\chi_{ijk} &= (-\delta_{li})(-\delta_{mj})(-\delta_{nk})\chi_{ijk} \\
\chi_{ijk} &= -\chi_{lmn} \\
\chi_{ijk} &= 0.
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Por lo tanto la susceptibilidad de segundo orden en cristales centrosimétricos es nula y no es posible generar segundo armónico por parte del término dipolar.

Las componentes de la densidad de polarización de orden dos según la ecuación (2.11), tomando en cuenta un material centrosimétrico implica

$$\begin{aligned}
P_i^{(2)} &= \mathcal{P}_i^{(2)} - \frac{\partial}{\partial x_j} \Theta_{ij}^{(2)} \\
&= \mathcal{P}_i^{(2)} + \xi_{ijkl} \frac{\partial}{\partial x_j} E_k E_l \\
&= \chi_{ijkl} E_j \frac{\partial}{\partial x_k} E_l
\end{aligned} \tag{2.23}$$

donde  $\mathcal{P}_i^{(2)} = \chi_{ijk} E_j E_k$  según (2.19), y de manera análoga el término de la parte cuadrupolar  $\Theta_{ij} = -\xi_{ijkl} E_k E_l$ .

Las simetrías que corresponden a cristales de clase  $m3m$  permiten la reducción de los elementos del tensor de susceptibilidad de tal manera que la contribución cuadrupolar puede expresarse como [13]

$$\begin{aligned}
P_i^{(2)} &= \chi_{ijkl} E_j \frac{\partial}{\partial x_k} E_l \\
&= (\delta - \beta - 2\gamma) \left( E_i \frac{\partial}{\partial x_i} + E_j \frac{\partial}{\partial x_j} \right) E_i + \beta E_i \left( \frac{\partial}{\partial x_i} E_i + \frac{\partial}{\partial x_j} E_j \right) \\
&\quad + \gamma \frac{\partial}{\partial x_i} (\|\mathbf{E}\|^2) + \zeta E_i \frac{\partial}{\partial x_i} E_i.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

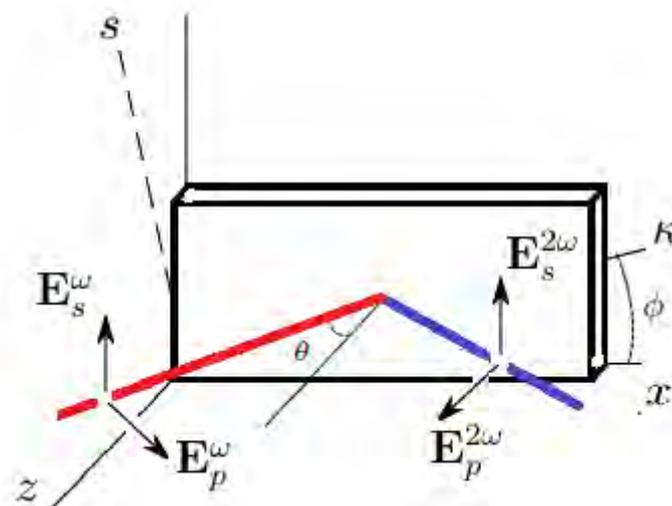


FIGURA 2.8: Plano de incidencia en  $(x, z)$  del sistema coordenado  $(x, y, z)$ . Rotación de la muestra por un ángulo  $\phi$  en torno al eje  $z$ .

### 2.2.5. Anisotropía e isotropía rotacional en la polarización [14]

H. W. K. Tom, T. F. Heinz, y Y. R. Shen, todos ellos de la Universidad de California en Berkeley, demostraron que la generación de segundo armónico dependía en gran medida de la estructura del cristal y de la rotación de la muestra alrededor del vector normal a la superficie; o dicho de otra forma, a las caras del cristal y al ángulo que gira uno de los ejes cristalográficos respecto a uno de los ejes del sistema del laboratorio. La geometría del plano de incidencia y la rotación de la muestra se aprecia en la figura 2.8 donde  $\mathbf{E}^\omega = \mathbf{E}_s^\omega + \mathbf{E}_p^\omega$  es la onda plana monocromática incidente a la muestra con vector de onda  $\mathbf{k}^\omega$ , y  $\mathbf{E}^{2\omega} = \mathbf{E}_s^{2\omega} + \mathbf{E}_p^{2\omega}$  la onda monocromática de segundo armónico generada por el medio con vector de onda  $\mathbf{k}^{2\omega}$ ,  $s$  y  $p$  son polarizaciones paralelo y perpendicular al plano de incidencia respectivamente.

Si se considera una onda plana y un medio homogéneo libre de cargas, entonces los dos primeros términos de la ecuación (2.24) se hacen cero, siendo el tercero y cuarto término partes isotrópica y anisotrópica respectivamente. La parte anisotrópica puede escribirse como

$$P_i^{(2)ani} = \Gamma_{ijkl}^{ani} E_j \frac{\partial}{\partial x_k} E_l \quad (2.25)$$

donde  $\Gamma_{ijkl}^{ani} = \delta_{ijkl}\zeta$ . Si realizamos un cambio al sistema de coordenadas  $(s, \kappa, z)$ , entonces, la parte anisotrópica de la densidad de polarización en el nuevo sistema según la geometría de la figura 2.8 es

$$P'_\alpha{}^{(2)ani} = i\zeta M_{\alpha\beta\eta}^{ani} E'_\beta E'_\eta \quad (2.26)$$

donde  $M_{\alpha\beta\eta}^{ani}$  es simplemente un nuevo tensor en el nuevo sistema coordenado que resulta de la transformación de coordenadas y simplificación de (2.26). Mientras que la parte isotrópica de la ecuación (2.24) es invariante ante transformación de coordenadas.

$$P_i^{(2)iso} = \gamma \frac{\partial}{\partial x_i} (\|\mathbf{E}\|^2) \quad (2.27)$$

### 2.2.6. Generación de segundo armónico por reflexión

A diferencia del bulto la centrosimetría en la superficie no existe debido al cambio de medio. La contribución de términos multipolares podrían estar con mayor presencia debido a que la componente normal del campo eléctrico sufre una discontinuidad y el gradiente incrementaría. Puede establecerse una densidad de polarización efectiva de superficie

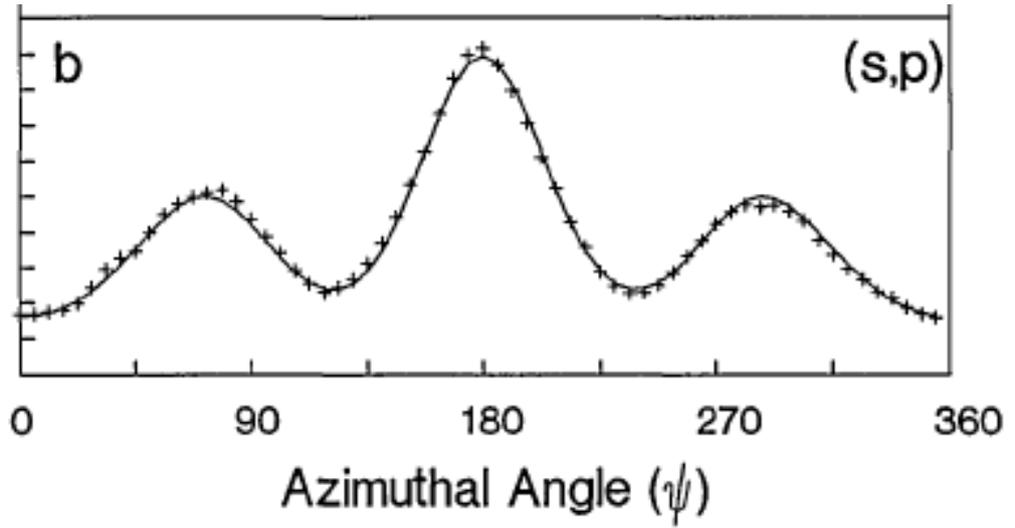


FIGURA 2.9:  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión en un muestra de silicio (100) con ángulo miscut de 5 grados orientado hacia (110) reportadas en [15] a 765 nm con configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$ .

por medio de la ecuación

$$P_i^{(2)sup} = \Delta_{ijk} E_j E_k \delta(z - z_0) \quad (2.28)$$

donde  $z_0$  es el plano que localiza a la superficie de la muestra

y  $\Delta_{ijk}$  es un tensor con cierta simetría según la superficie.

La SHG por superficie es obtenido de manera análoga al bulto, es decir, se asocia una respuesta similar a la parte dipolar del bulto [16],[6]. Finalmente la intensidad total por parte del bulto y la superficie se pueden modelar por medio de las siguientes ecuaciones [14]

$$\begin{aligned} I_{h,p}^{\Omega} &\propto \left[ \sum_{n=0}^4 a_n \cos(n\phi) \|\mathbf{E}^{\omega}\|^2 \right]^2 \\ I_{h,s}^{\Omega} &\propto \left[ \sum_{n=0}^4 a_n \sin(n\phi) \|\mathbf{E}^{\omega}\|^2 \right]^2 \end{aligned} \quad (2.29)$$

Donde  $I_{h,p}^{\Omega}$  es la intensidad de segundo armónico por reflexión en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$  o  $p_{in}$ - $p_{out}$  y  $I_{h,s}$  como  $s_{in}$ - $s_{out}$  o  $p_{in}$ - $s_{out}$ ; está expresión ya considera las contribuciones de la densidad de polarización por parte del bulto y la superficie. Un ejemplo es el de la figura 2.9 que muestra la  $I_{s,p}^{\Omega}$  de la generación de segundo armónico por reflexión en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$  para una muestra de silicio en (100) con un ángulo miscut de 5 grados hacia (110).

### 2.2.7. Espectroscopia de segundo armónico por reflexión (RSH)

Una de las técnicas que nos proporciona información sobre la interacción entre materia y energía es la *espectroscopía*. Hay diversas maneras en las que la materia y la energía interactúan, por ejemplo: absorción, emisión, esparcimiento inelástico, RSH, etc. La espectroscopía de RSH ha sido posible principalmente por el uso de láseres pulsados ultracortos y amplificadores ópticos paramétricos (OPA). La forma del espectro permite conocer parte de la estructura electrónica de la materia por medio del análisis de resonancias. Las resonancias en SH aparecen cuando la señal fundamental o el SH se aproximan a alguna frecuencia de resonancia del medio; el espectro puede expresarse como una superposición de resonancias conforme a la ecuación

$$I(2\omega) \propto \sum_{n=1}^3 \frac{f_k e^{i\phi_n}}{2\omega - \omega_n + i\Gamma} \quad (2.30)$$

tal como lo muestra la figura 2.10 [17]

Las ecuaciones (2.30) y (2.29) pueden modelar la espectroscopía de segundo armónico por reflexión.

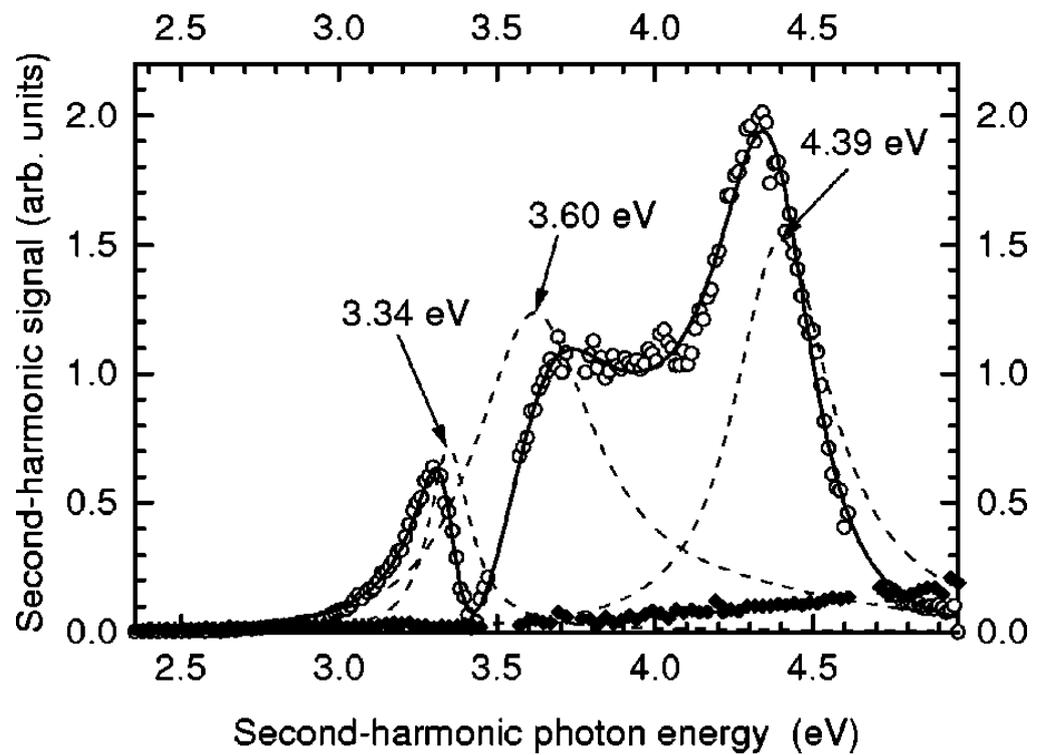


FIGURA 2.10: Espectroscopia de SHG de Silicio 100 con oxido nativo (círculos abiertos), Si amorfo (círculos sólidos), resonancias individuales (lineas segmentadas), superposición de resonancias (linea sólida) [2.10](#)

Una simulación de espectroscopía de segundo armónico por reflexión en una superficie vicinal de Si-SiO<sub>2</sub> a ángulos miscut de diferentes valores hacia (110), fueron comparados con resultados experimentales tal como se muestra en la figura [2.11](#) [[18](#)].

Los resultados de la figura [2.11](#) serán usados de referencia en los resultados de la Tesis.

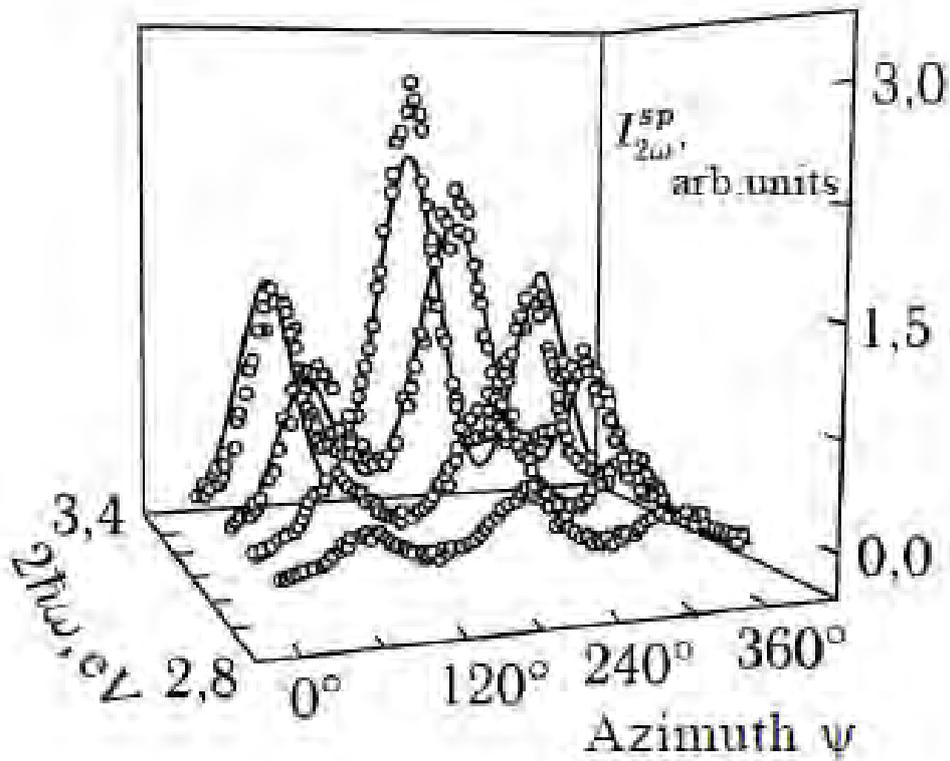


FIGURA 2.11: Espectroscopía de una muestra de Silicio (001) con miscut de 10 grados orientados hacia (110), las dos con sustrato de dióxido de silicio. [18]

## Capítulo 3

# Experimento

### 3.1. Muestra

Tratando de mejorar el crecimiento de una muestra de silicio en la cuál se espera una masa efectiva de huecos baja, se han hecho investigaciones en el crecimiento de heteroestructuras de  $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$  Si(100) por la técnica *Molecular beam epitaxy*. Se ha observado que la correcta formación de la red cristalina deformada por el estrés depende fuertemente de la temperatura del sustrato; el monitoreo de la formación de la heteroestructura es relevante siendo la técnica de RA-SHG una opción preferible a las ya utilizadas como la *Reflection high-energy electron diffraction* RHEED puesto que esta última utiliza bombardeo de electrones que dañan la muestra. Una muestra sin estrés de  $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$  ( $x = 0,018$ ) fue crecida sobre un sustrato de Si(001) con tasas de flujo de disilano ( $\text{Si}_2\text{H}_6$ ) y trimetilsilano ( $\text{C}_3\text{H}_9\text{Si}$ ) a 3.5 y 1.0 centímetros cúbicos por minuto, respectivamente. La temperatura del sustrato fue constante a 550 grados centígrados hasta completar el crecimiento del  $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$  ( $x = 0,018$ ) con una película de silicio estresado a un ángulo miscut de 5 grados hacia (110), la representación de la muestra puede verse en la imagen tomada por TEM que se muestra en la figura 3.1 [19]

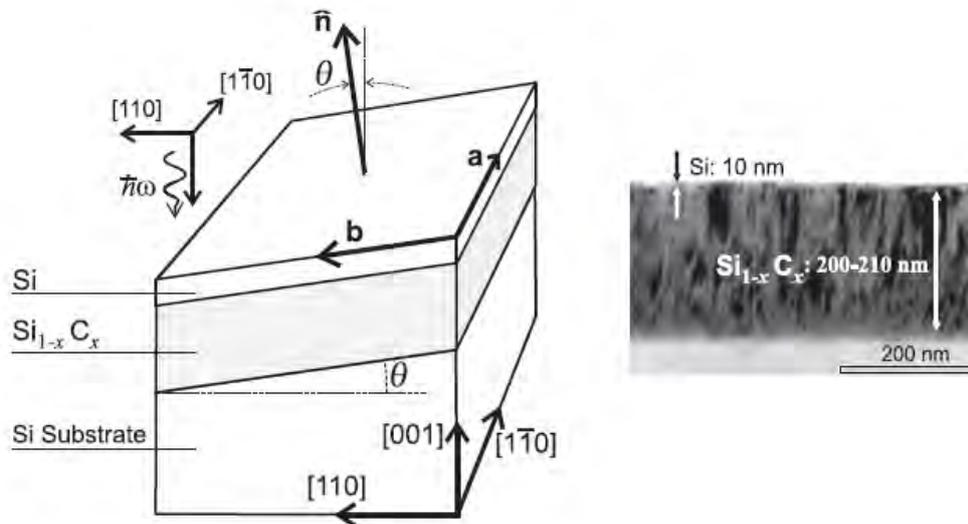


FIGURA 3.1: Película delgada estresada de 10 nm con un miscut de 5 grados hacia (110) crecida  $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$  (001) de 200 nm sobre un sustrato de Si. A la izquierda la ilustración de la capa sobre el sustrato a un ángulo de  $\theta = 5$  grados y a la derecha una imagen obtenida por un microscopio electrónico de transmisión TEM [19].

### 3.2. Arreglo experimental

El experimento realizado se puede apreciar en el esquema de la figura 3.2. Una fuente láser de zafiro dopado con titanio (L) genera pulsos ultracortos de 50 fs a 800 nm con polarización p que viajan hacia un amplificador óptico paramétrico (AP) que sintoniza la longitud de onda.

Sintonizado el haz fundamental, este pasa por un divisor de haz (BS), dirigiéndose uno de ellos hacia un cristal de cuarzo (MR) y otro hacia la muestra (S). El primero de los dos haces divididos se dirige al cuarzo, es filtrado por (R2) y enfocado por la lente (L2) hacia el cristal (MR), el cristal genera SHG detectado por el fotomultiplicador (P2) previamente filtrado por un filtro (B2), esta señal sirve como referencia para descartar las posibles variaciones de la fuente debido a fluctuaciones

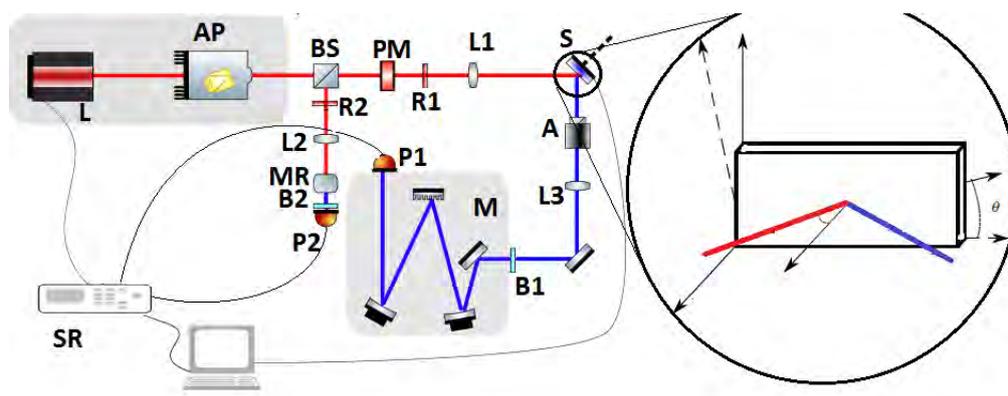


FIGURA 3.2: Arreglo experimental

(normalización). El segundo haz que se dirige hacia la muestra (**S**) puede tener cualquier polarización debido a la presencia de una placa de media onda (**PM**), la cual selecciona la polarización **s** o **p** en particular. El haz es previamente filtrado por un filtro (**R1**) que quita señales de SH posiblemente generadas en algún elemento óptico anterior y es enfocado hacia la muestra (**S**) por una lente (**L1**) incrementando la intensidad de la señal fundamental.

La muestra (**S**) gira por medio de una montura rotacional en torno al vector normal a su superficie y así obtener RSH debido a la anisotropía rotacional de la polarización, el segundo armónico generado se selecciona en la dirección de polarización **p** o **s** por medio de un analizador (**A**). Por medio de un filtro (**B1**) se quita la mayor parte del haz fundamental y se introduce el SH por medio de una lente (**L3**) a un monocromador (**M**) que separa el SH de la señal remanente del haz fundamental. La señal de SH, es detectada por un fotomultiplicador (**P1**). Los fotomultiplicadores están conectados a un contador de fotones (**SR**) puesto en modo de compuerta explicado en el apéndice **B** cuyas cuentas son adquiridas por medio de un software que graba la información de la posición angular de la montura rotacional y el número de cuentas correspondiente.

Los elementos ópticos son mencionado en detalle en las tablas 3.1 y 3.2.

Se procedió a hacer un par de ensayos con Si (100) y GaAs (100) para reproducir resultados similares a los de la literatura, estos datos son mostrados en la figura (3.2); se puede valorar al sistema óptico como funcional

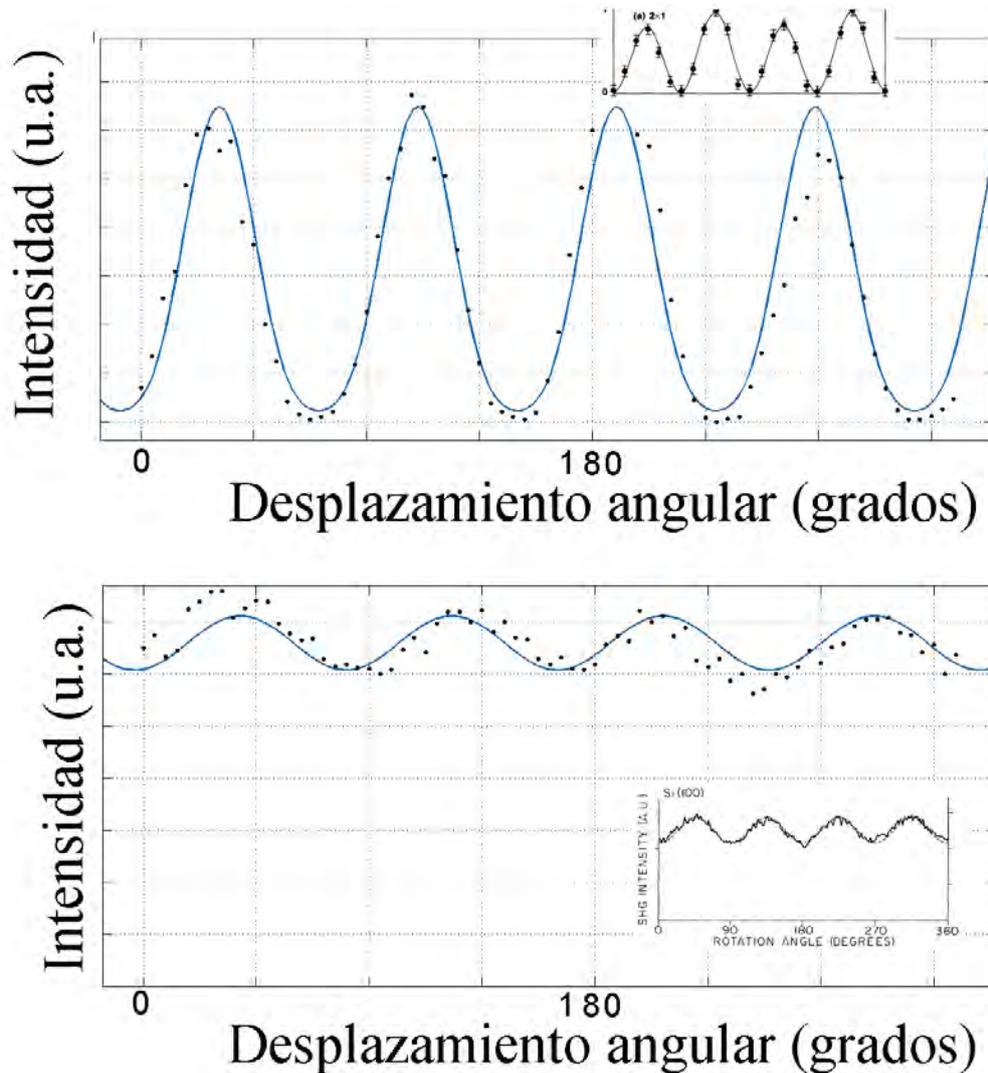
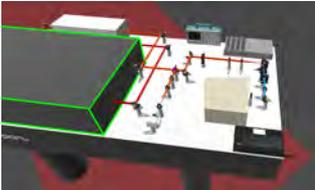
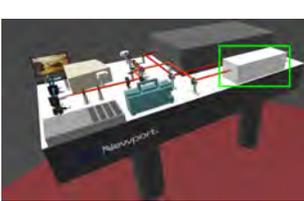
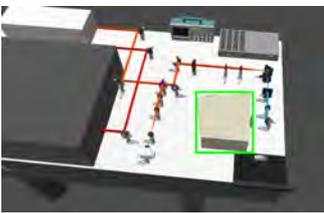
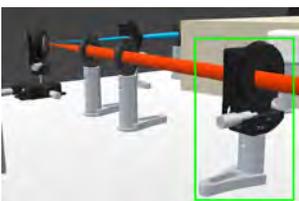
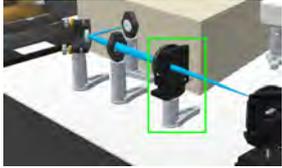
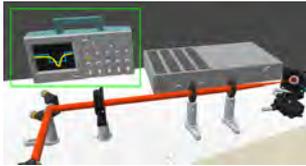
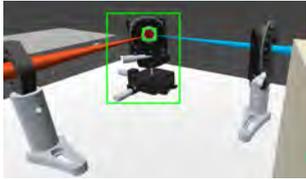
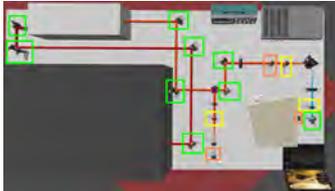


FIGURA 3.3: Ensayo hecho en el laboratorio para evaluar la operación del sistema óptico con GaAs (100) y Si (100) en contraste con los medidos en [20] y [5]

Componente	Ubicación	Características
<b>L</b> 		<p>Sistema amplificador Tita- nio:Safiro</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Energía del pulso = 3.2 mJ a 800 nm</li> <li>■ Ancho del pulso = 50 fs</li> <li>■ tasa de repetición 1 kHz</li> </ul>
<b>AP</b> 		<p>(OPA) Amplificador óptico paramétrico</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Sintonización en el rango (250-2600) nm</li> </ul>
<b>M</b> 		<p>Monocromador</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Longitudes de onda 200-1350 nm</li> <li>■ 1200 lineas/mm</li> </ul>
<b>P1,P2</b> 		<p>Fotomultiplicador</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Respuesta espectral 185-760 nm</li> <li>■ Sensitividad <math>12 \times 10^5</math></li> </ul>
<b>PM</b> 		<p>Placa de media onda</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ 690-1200 nm</li> </ul>

CUADRO 3.1: Componentes del sistema óptico. La posición de los elementos están ilustrados en la figura 3.4

Componente	Ubicación	Características
<b>A</b> 		Polarizador Glan-Taylor
<b>SR</b> 		Contador de fotones SR400
		Osciloscopio
		Monturas móviles marca ZABER
<b>L1,L2,L3,B1,B2, R1,R2</b>		lentes, espejos y filtros

CUADRO 3.2: Componentes del sistema óptico. La posición de los elementos están ilustrados en la figura 3.4

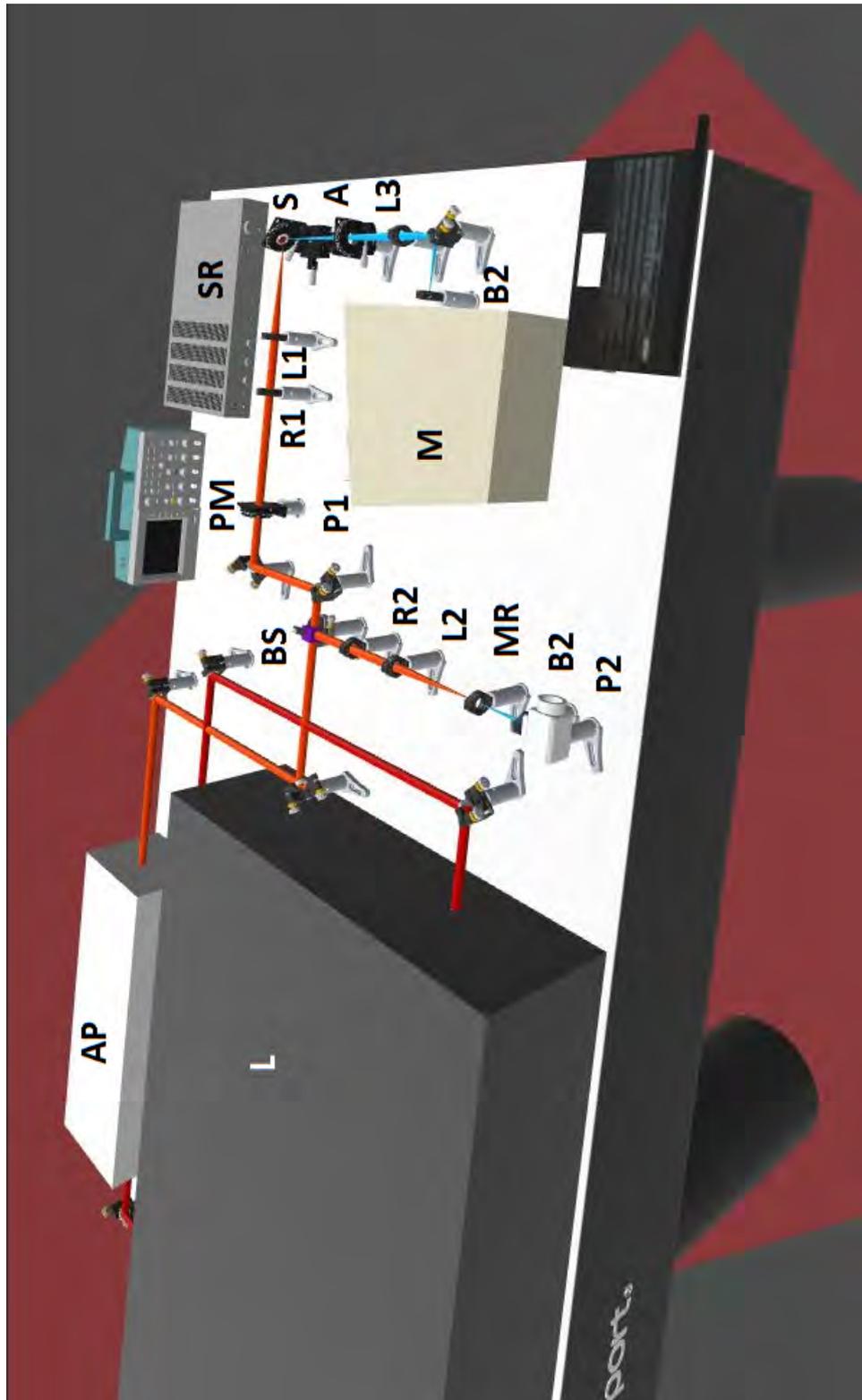


FIGURA 3.4: Arreglo experimental



# Capítulo 4

## Resultados

Las figuras de 4.1-4.10 corresponden a la intensidad de segundo armónico debido a su anisotropía rotacional para longitudes de onda 700 nm a 790 nm; la espectroscopía en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$  se muestra en la figura 4.11.

La anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico es consistente en cierto grado con los artículos citados más no iguales. Al no haberse encontrado espectroscopía o datos específicos de la muestra  $S$  podemos mencionar algunas cosas notables si comparamos con las figuras 2.9 y 2.11: los tres máximos y tres mínimos de la intensidad debido a ARSHG se conservan en los casos de 700nm hasta 750nm; el ajuste sugiere puntos de inflexión en lugar de mínimos conforme la longitud aumenta desde 760 nm hasta 790 nm.

La figura (4.1) muestra las mediciones de la intensidad de segundo armónico  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 700 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

La figura (4.2) muestra las mediciones de la intensidad de segundo armónico  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de

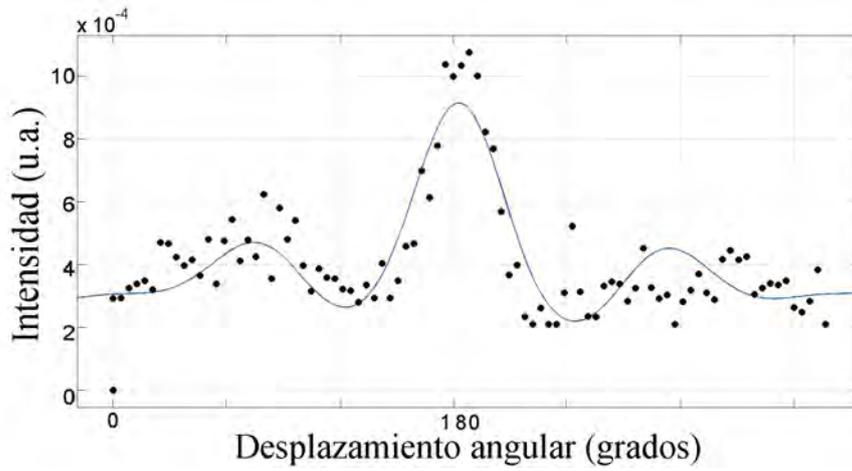


FIGURA 4.1:  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 700 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

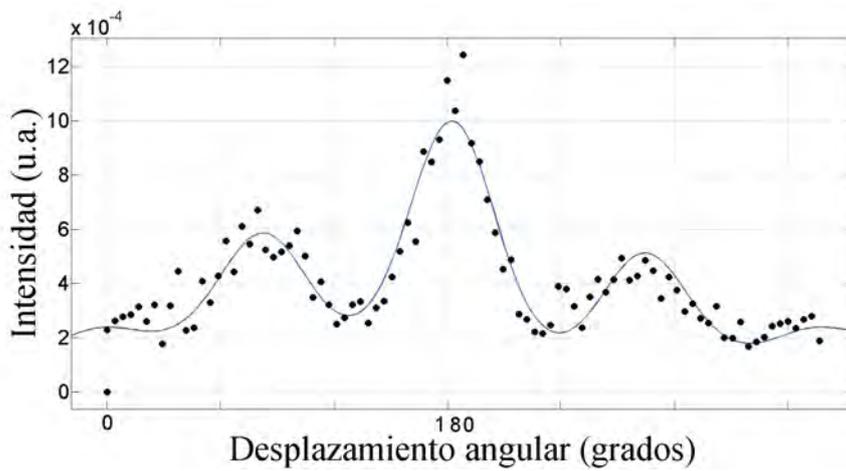


FIGURA 4.2:  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 710 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

segundo armónico por reflexión de la muestra *S* a 710 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

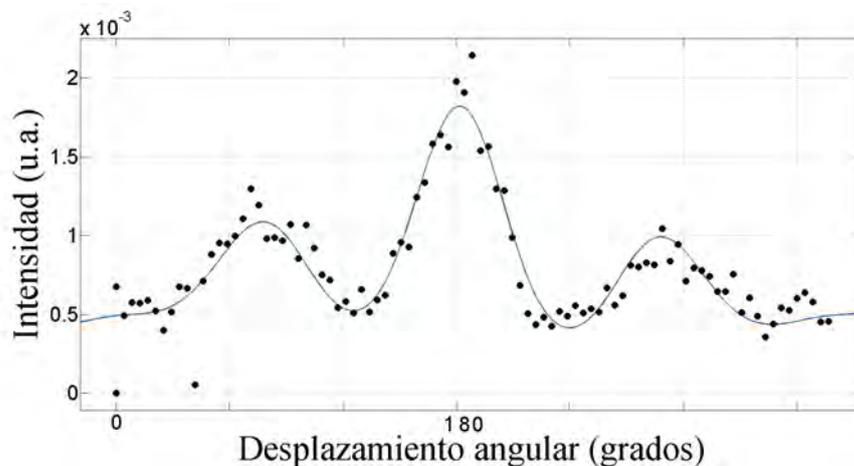


FIGURA 4.3:  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra *S* a 720 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

La figura (4.3) muestra las mediciones de la intensidad de segundo armónico  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra *S* a 720 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

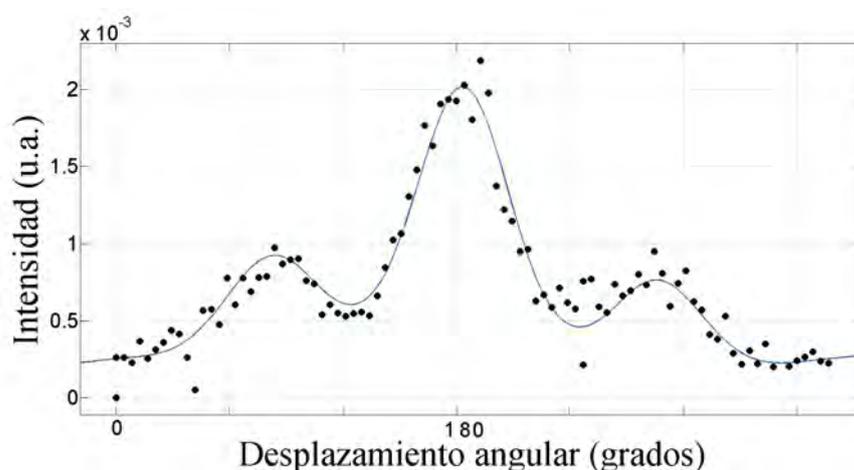


FIGURA 4.4:  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra *S* a 730 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

La figura (4.4) muestra las mediciones de la intensidad de segundo armónico  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 730 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

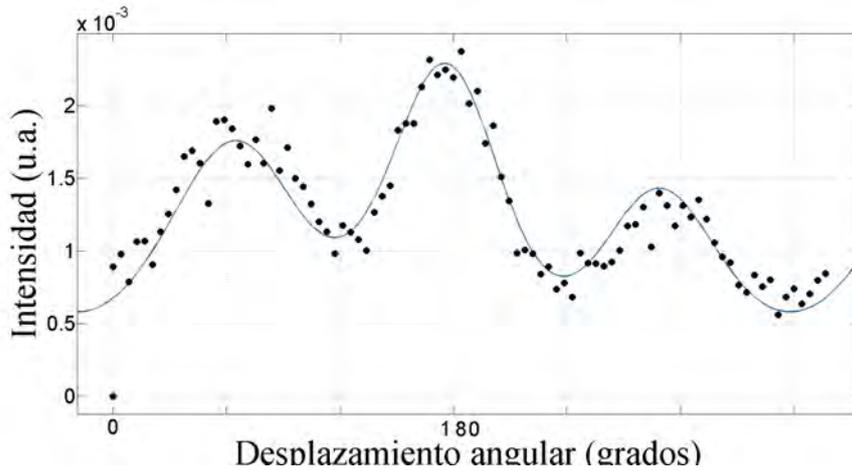


FIGURA 4.5:  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 740 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

La figura (4.5) muestra las mediciones de la intensidad de segundo armónico  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 740 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

La figura (4.6) muestra las mediciones de la intensidad de segundo armónico  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 750 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

La figura (4.7) muestra las mediciones de la intensidad de segundo armónico  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 760 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

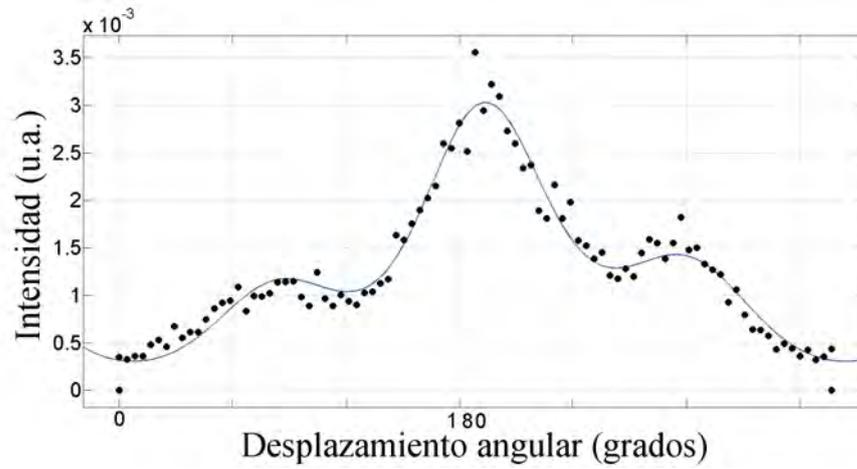


FIGURA 4.6:  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra *S* a 750 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

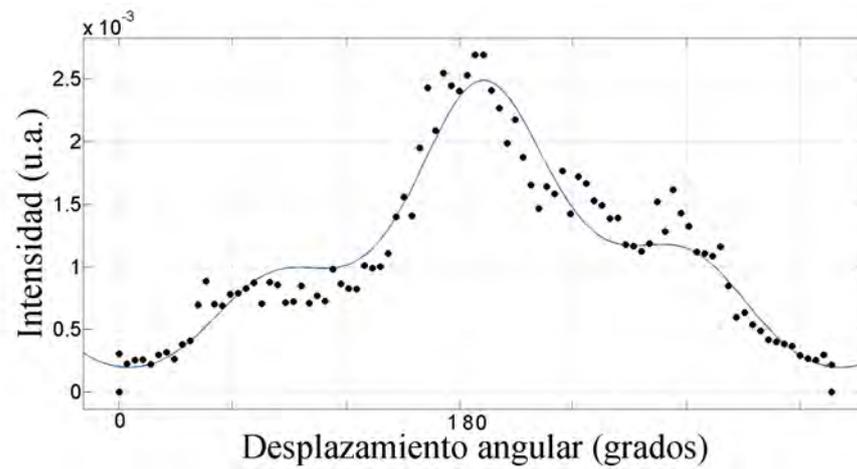


FIGURA 4.7:  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra *S* a 760 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

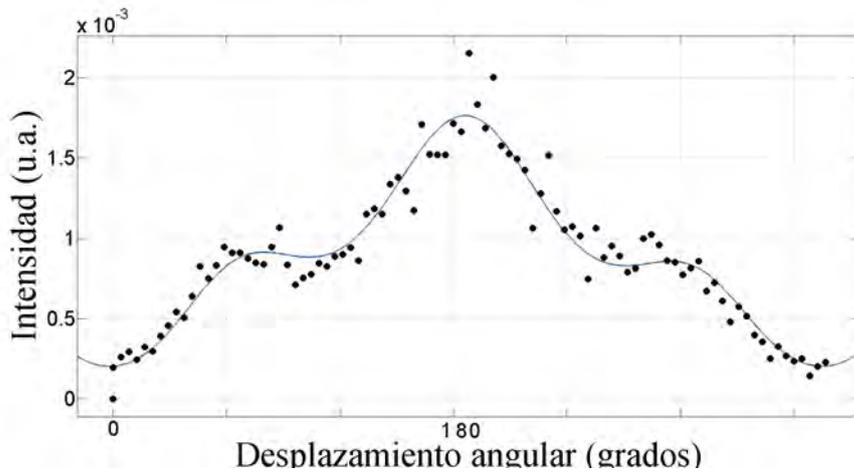


FIGURA 4.8:  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 770 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

La figura (4.8) muestra las mediciones de la intensidad de segundo armónico  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 770 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

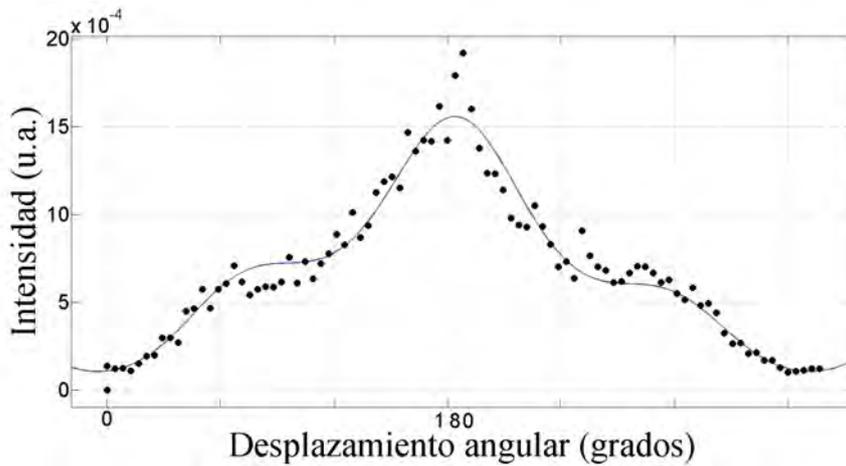


FIGURA 4.9:  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 780 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

La figura (4.9) muestra las mediciones de la intensidad de segundo armónico  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de

segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 780 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

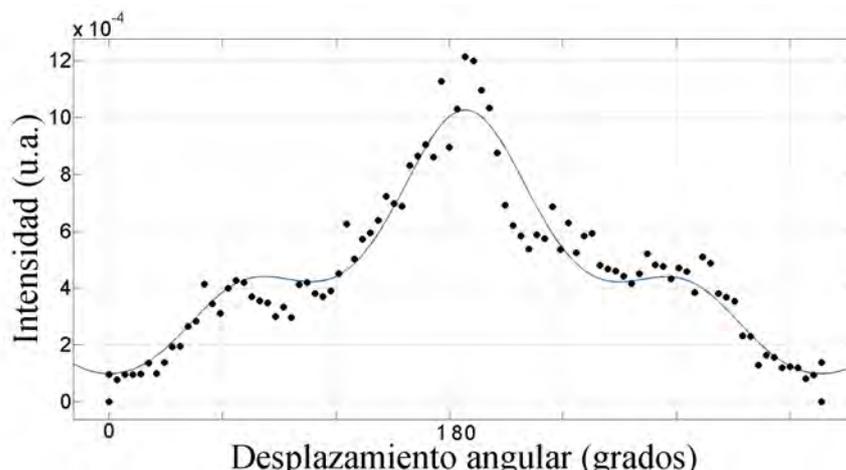


FIGURA 4.10:  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 790 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

La figura (4.10) muestra las mediciones de la intensidad de segundo armónico  $I_{sp}^{\Omega}$  debido a la anisotropía rotacional de la generación de segundo armónico por reflexión de la muestra  $S$  a 790 nm en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$

La espectroscopía de segundo armónico por reflexión considerando la anisotropía rotacional del SH de la muestra  $S$  en la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$  se muestra en la figura 4.11

Las figuras de 4.12-4.16 corresponden a los 5 coeficientes de Fourier de la ecuación (2.29) en función de la longitud de onda

En la figura 4.17 se encuentra el ajuste según la ecuación (2.30), estimando así un valor de resonancia de 3.314 eV.

Se reporta también por medio de la figura 4.18 la espectroscopía de segundo armónico por reflexión considerando la anisotropía rotacional del SH de la muestra  $S$  en la configuración  $p_{in}$ - $p_{out}$ , que no fue analizada por la gran presencia de ruido

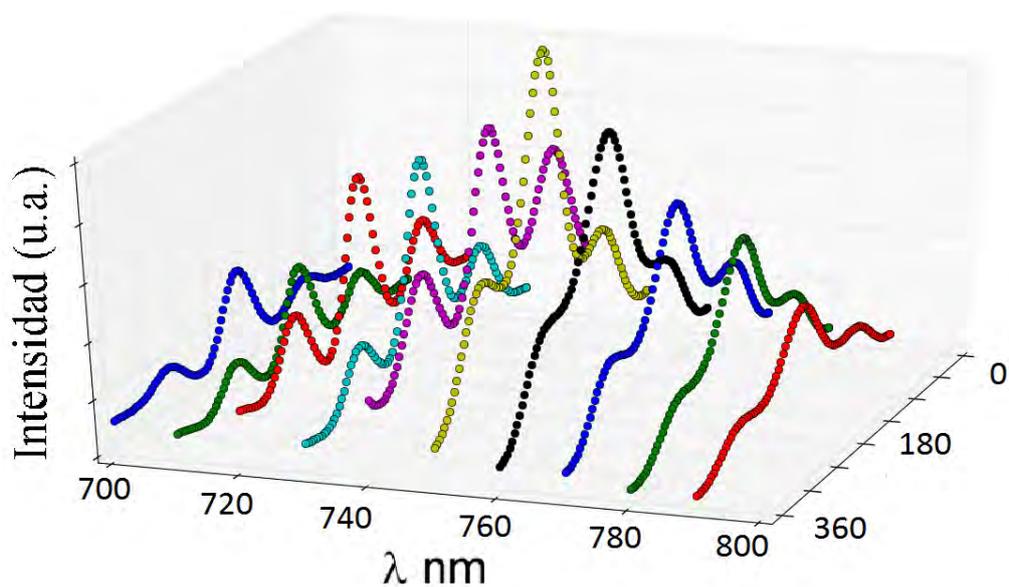


FIGURA 4.11: Espectroscopía de segundo armónico por reflexión considerando la anisotropía rotacional del SH de la muestra  $S$  en la configuración  $S_{in-P_{out}}$

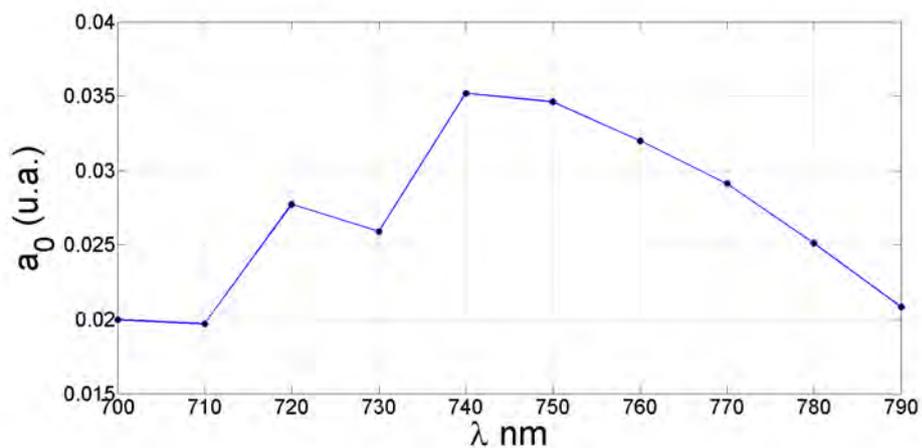


FIGURA 4.12: Coeficiente de Fourier  $a_0$  estimado según (2.29) en función de la longitud de onda incidente

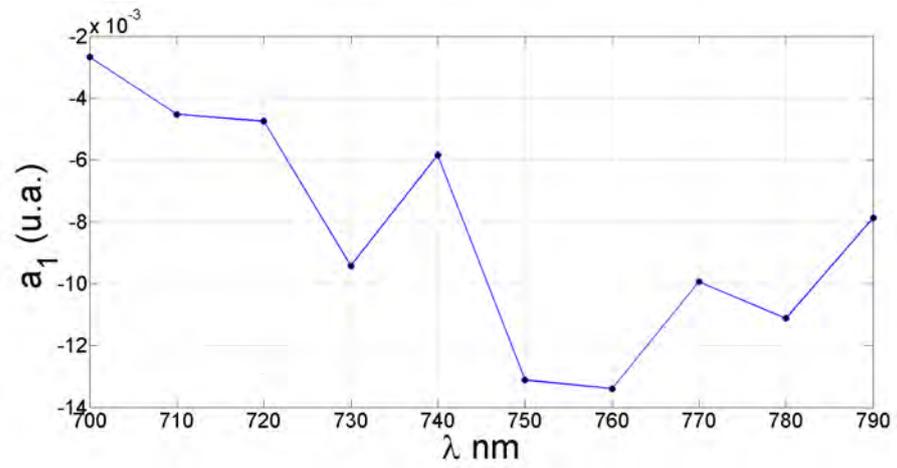


FIGURA 4.13: Coeficiente de Fourier  $a_1$  estimado según (2.29) en función de la longitud de onda incidente

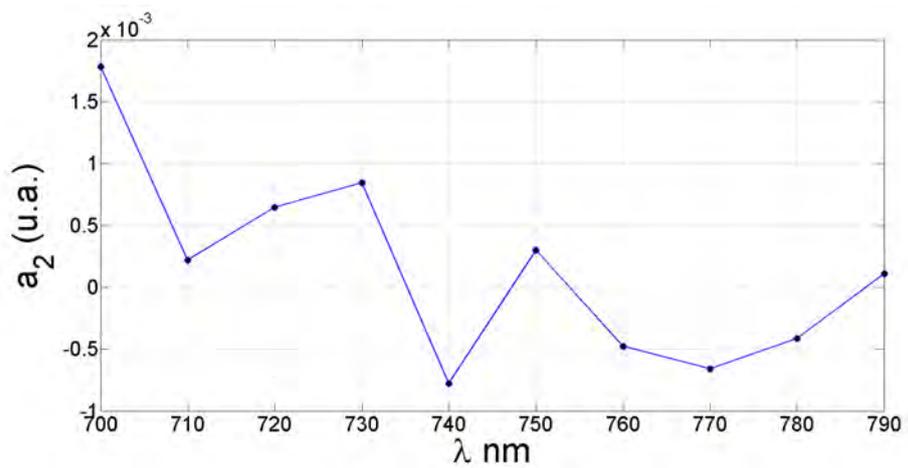


FIGURA 4.14: Coeficiente de Fourier  $a_2$  estimado según (2.29) en función de la longitud de onda incidente

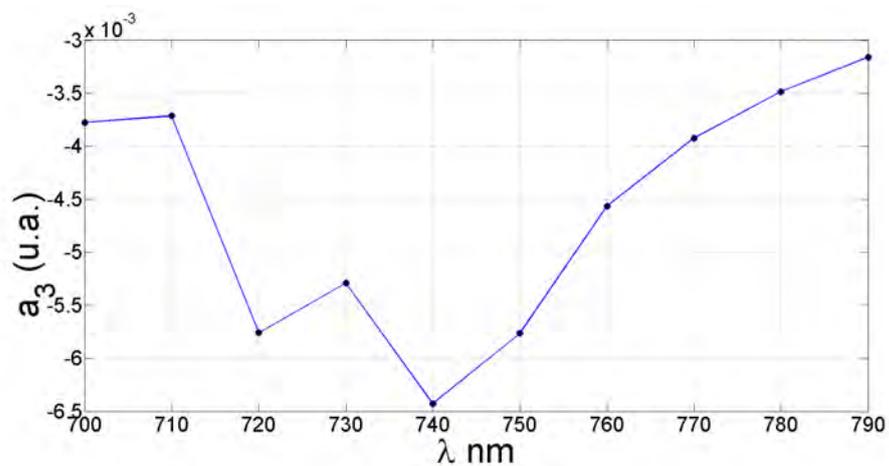


FIGURA 4.15: Coeficiente de Fourier  $a_3$  estimado según (2.29) en función de la longitud de onda incidente

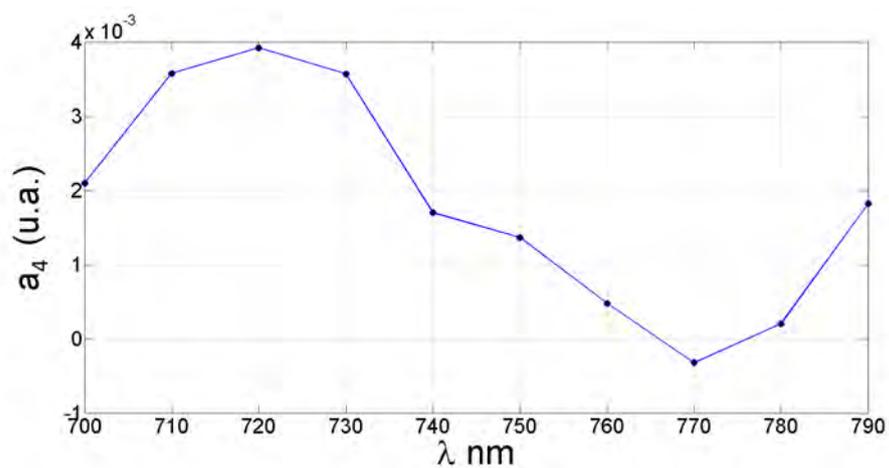


FIGURA 4.16: Coeficiente de Fourier  $a_4$  estimado según (2.29) en función de la longitud de onda incidente

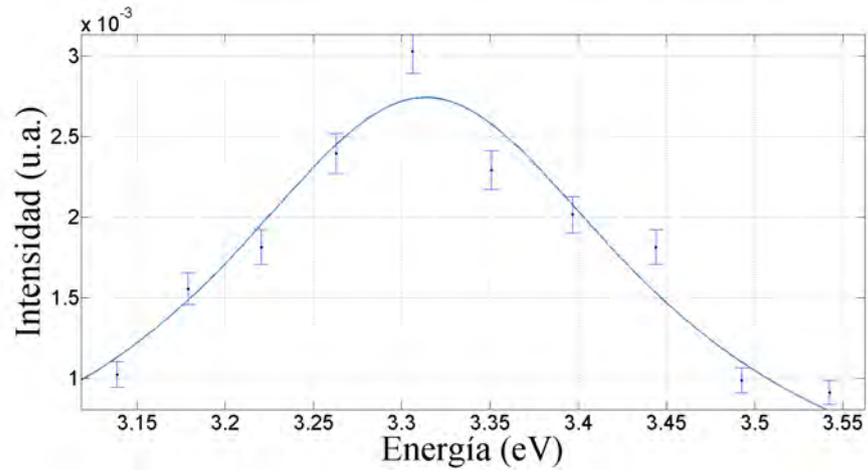


FIGURA 4.17: Resonancia obtenida por la espectroscopía de segundo armónico por reflexión, en la configuración  $s_{in}-p_{out}$

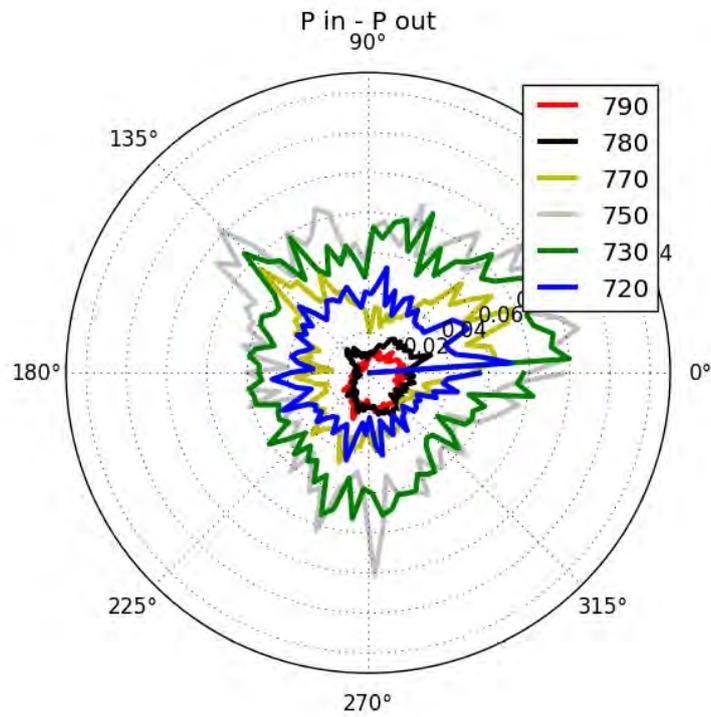


FIGURA 4.18: Espectroscopía de segundo armónico por reflexión considerando la anisotropía rotacional del SH de la muestra S en la configuración  $p_{in}-p_{out}$



## Capítulo 5

### Conclusiones

El sistema óptico es operativo y funcional para realizar espectroscopía de segundo armónico por reflexión puesto que los resultados son congruentes con los reportados en la literatura citada para la configuración  $s_{in}$ - $p_{out}$ . El ajuste de la espectroscopía propone una frecuencia de resonancia de 3.314 eV en un intervalo de (3.296, 3.331) cual es cercano y menor al reportado en [17] posiblemente debido al estrés. Las espectroscopías de segundo armónico para las demás configuraciones  $p_{in}$ - $p_{out}$ ,  $p_{in}$ - $s_{out}$ ,  $s_{in}$ - $s_{out}$  pueden ser obtenidas con la continua optimización del sistema óptico. Los valores del coeficiente  $a_0$  son mayores al de los demás coeficientes por venir del bulto [21].

Se cuenta con una muestra idéntica pero sin la capa de silicio estresada; la espectroscopía de segundo armónico por reflexión para dicha muestra y su contraste con la espectroscopía realizada en este trabajo de tesis queda como trabajo a futuro.



# Apéndice A

## Estructura diamante

La generación de segundo armónico por reflexión en las superficies de Silicio depende de la orientación con la que se presenta el cristal; En este apéndice se encuentran una secuencia de 48 imágenes que muestran de izquierda a derecha y de arriba a abajo, la rotación de una celda unitaria de silicio vista en la figura 2.2 [22].

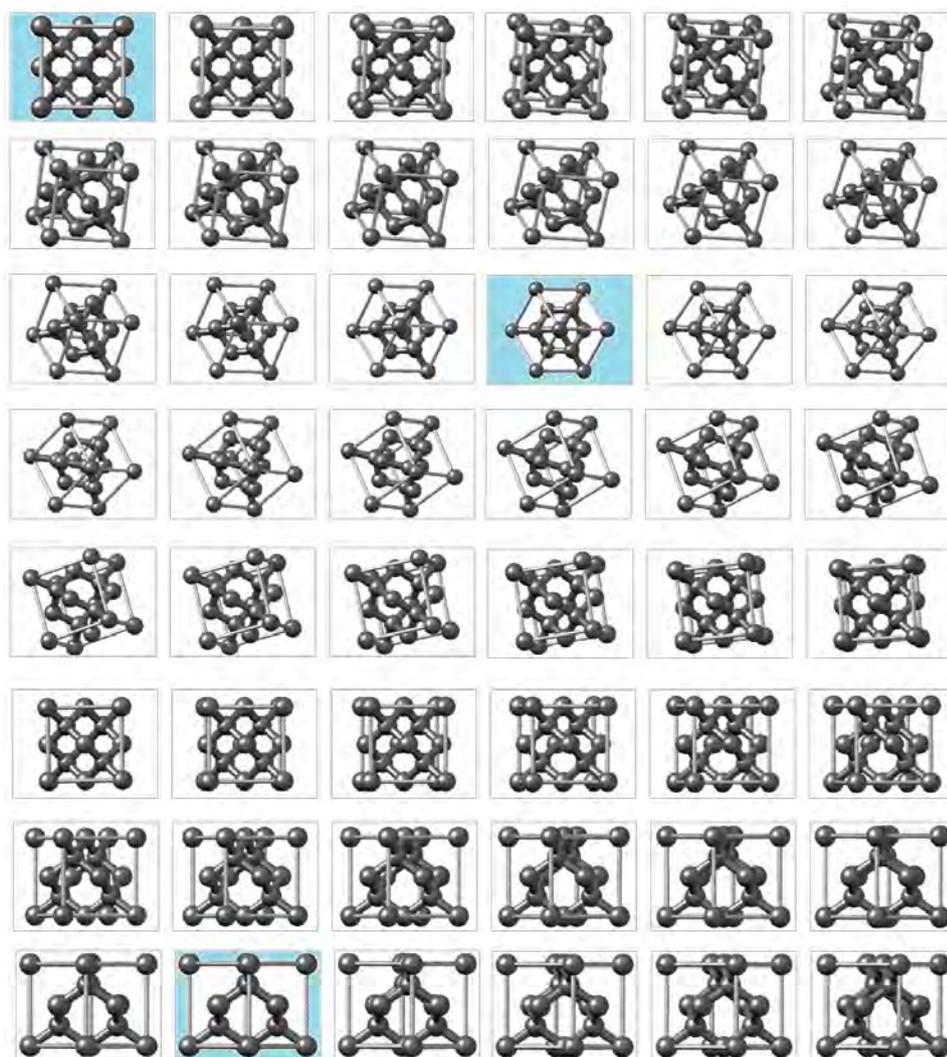


FIGURA A.1: Secuencia de la celda unitaria cúbica del Silicio. La celda se rota para obtener diferentes orientaciones que incluyen las direcciones cristalográficas (001),(111),(110) con fondo azul respectivamente

## Apéndice B

### Detección

Un tubo fotomultiplicador PMT transduce señales ópticas de intensidades bajas de unos cuantos fotones en señales eléctricas, el PMT es un tubo al vacío conformado por una ventana donde entra la luz, un fotocátodo, varios dínodos y un ánodo. Los fotones al entrar por la ventana excitan electrones del fotocátodo por *efecto fotoeléctrico*, los electrones al ser acelerados son dirigidos al primer dínodo para generar mas electrones por *emisión secundaria*, este último proceso se repite un número de veces igual al número de dínodos restantes hasta llegar finalmente al ánodo, el ánodo colecta los electrones y da lugar a una corriente eléctrica

B.1.

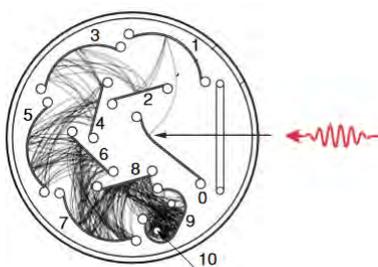


FIGURA B.1: Sección transversal de un tubo fotomultiplicador con forma de jaula circular que ilustra las trayectorias de los electrones. 0.- fotocátodo. 1-9.- Dínodos. 10.- Ánodo

La operación del PMT corresponde al de una fuente de corriente eléctrica que puede ser modelada de la forma  $i(t) = b_1 Q e^{-b_1 t}$ , el PMT es acoplado a un *circuito RC* en paralelo que convierte el pulso de corriente en un pulso de voltaje B.2 , resolviendo las ecuaciones diferenciales correspondientes al circuito, el voltaje es

$$V(t) = \frac{b_1 Q}{C(b_1 - b_2)} (e^{-b_2 t} - e^{-b_1 t}) \quad (\text{B.1})$$

donde  $R$  y  $C$  son la resistencia y capacitancia,  $b_1$  y  $b_2 = 1/RC$  constantes de decaimiento y  $Q$  la carga total colectada por el ánodo del PMT, el valor del tiempo de decaimiento del pulso es directamente proporcional a la resistencia.

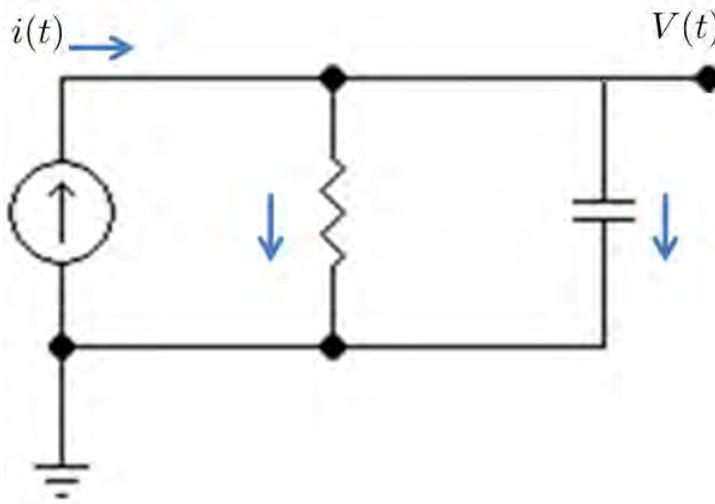


FIGURA B.2: circuito eléctrico para convertir la señal de corriente en voltaje

### Modo compuerta

El 'modo compuerta' es una técnica que permite medir la intensidad de luz por medio del conteo del número de fotones que inciden en un detector durante un intervalo de tiempo dado llamado *Periodo de conteo*.

Los fotones inciden en el fotomultiplicador el cual genera pulsos eléctricos que son acondicionados para considerarse como *cuentas*. Los pulsos eléctricos tienen una distribución de alturas según su origen, algunos son originados por fotones, otros por ruido intrínseco en el detector y el ambiente. Es posible seleccionar los pulsos idóneos al discriminarlos por sus alturas, además el Gate mode minimiza también el ruido manteniendo al detector en operación solamente cuando los pulsos del láser están presentes, por medio de un *disparador* y un *retraso* se sincroniza el pulso y el intervalo de tiempo en el cual el detector está en operación llamado *ancho de compuerta*. En el contador se ajustan un nivel mínimo (LLD) y uno máximo (ULD) que escogerán a los pulsos con alturas específicas; solo los pulsos que se encuentren dentro del ancho de compuerta y entre los niveles máximo y mínimo del contador serán contados digitalmente con protocolos como TTL o NIM, ver figuras B.4 y B.3 .

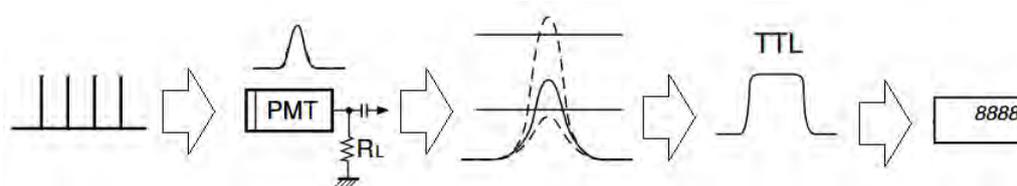


FIGURA B.3: Etapas básicas del sistema de conteo: 1.- Fotones incidentes. 2.- Transductor (señal de luz-señal eléctrica). 3.- Discriminador de pulsos 4.- Acondicionamiento de señal digital. 5.- Cuentas

En un osciloscopio se pueden visualizar las señales de la compuerta y el pulso del láser con el fin de sincronizarlas como se muestra en la figura B.5.

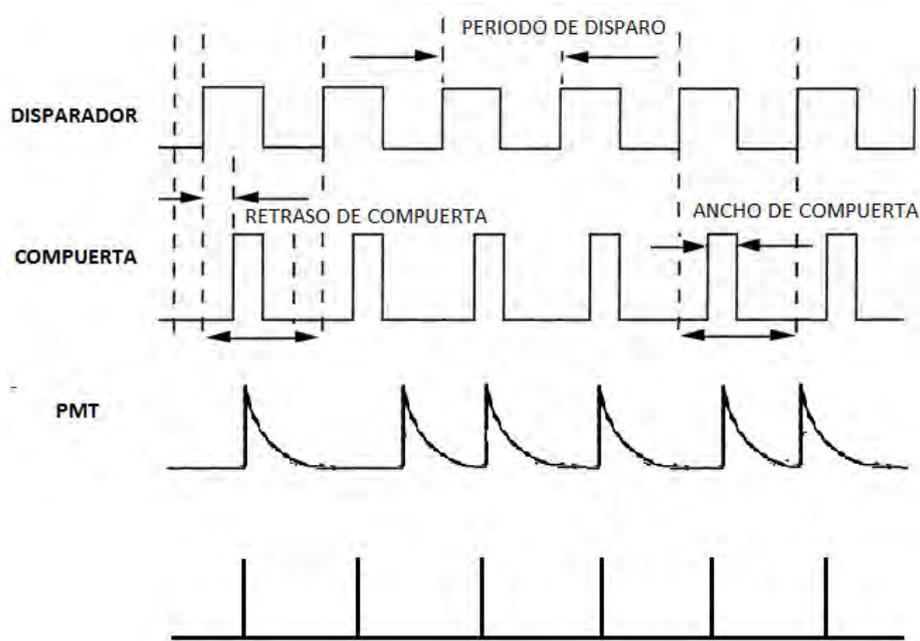


FIGURA B.4: La primera señal vista de arriba hacia abajo es el disparador que está sincronizado con los pulsos del láser; la segunda es la compuerta que aparece sincronizada con el disparador con un cierto retraso; la tercera es la señal del PMT que puede o no coincidir con la compuerta; y la cuarta son las cuentas Sincronización de la compuerta y los pulsos generados por el PMT. La sincronización del contador de fotones con el láser permite minimizar el ruido

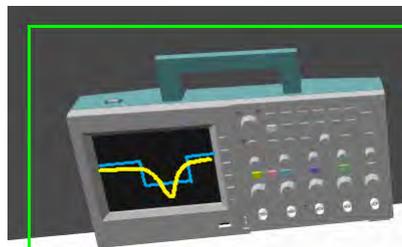


FIGURA B.5: La señal de la compuerta (señal azul) con la del fotomultiplicador (señal amarilla); Imagen que ilustra la sincronización

# Bibliografía

- [1] Gordon E. Moore. «Cramming more components onto integrated circuits». En: *Electronics* 38.8 (1965).
- [2] Tsutomu Tezuka Yoshihiko Moriyama Shu Nakaharai y Shin-ichi Takagi Tomohisa Mizuno Naoharu Sugiyama. «(110)-Surface Strained-SOI CMOS Devices». En: *IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES* 52.3 (mar. de 2005).
- [3] C. W. Peters P. A. Franken A. E. Hill y G. Weinreich. «Generation of Optical Harmonics». En: *PHYSICAL REVIEW LETTERS* 7.118 (1961).
- [4] J. Ducuing J. A. Armstrong N. Bloembergen y P. S. Pershan. «Interactions between Light Waves in a Nonlinear Dielectric». En: *PHYSICAL REVIEW* 127.1918 (1962).
- [5] T. F. Heinz H. W. K. Tom e Y. R. Shen. «Second-Harmonic Reflection from Silicon Surfaces and Its Relation to Structural Symmetry». En: *PHYSICAL REVIEW LETTERS* 51.21 (1983).
- [6] D.J. Moss y H. M. van Driel J.E. Sipe. «Phenomenological theory of optical second- and third-harmonic generation from cubic centrosymmetric crystals». En: *PHYSICAL REVIEW B* 35.3 (1987).
- [7] Donald A. McQuarrie. *Quantum Chemistry*. University Science Books, 2008.

- 
- [8] Ardéshir Guran Teodor M. Atanackovic. *Theory of Elasticity for Scientists and Engineers*. Birkhäuser Basel, 2000.
- [9] Y. Yamamoto<sup>1</sup> P. Zaumseil<sup>1</sup> A. Trampert M. A. Schubert B. Tillack<sup>1</sup> W. T. Masselink O. Skibitzki<sup>1</sup> F. Hatami y T. Schroeder. «GaP collector development for SiGe heterojunction bipolar transistor performance increase: A heterostructure growth study». En: *Journal of Applied Physics* 3.7 (mar. de 2012).
- [10] Robert Doering Yoshio Nishi. *Handbook of Semiconductor Manufacturing Technology*. CRC Press, Julio 9, 2007.
- [11] John David Jackson. *Classical electrodynamics*. Wiley.
- [12] K.E. Peiponen E.M. Vartiainen V. Lucarini J.J. Saarinen. *Kramers–Kronig Relations in Optical Materials Research*. Springer, 2005.
- [13] O. A. Aktsipetrov. *Second Order Non-linear Optics of Silicon and Silicon Nanostructures*. CISP, 2016.
- [14] C. Meyer Y. Makita D. J. Bottomley G. Lupke. «Exact separation of surface and bulk contributions to anisotropic second-harmonic generation from cubic centrosymmetric media». En: *OPTICS LETTERS* 20.5 (1995).
- [15] y H. M. van Driel G. Liipke D. J. Bottomley. «Second- and third-harmonic generation from cubic centrosymmetric crystals with vicinal faces: phenomenological theory and experiment». En: *J. Opt. Soc. Am. B* 11 (1994).
- [16] P. F. Brevet. *Surface second harmonic generation*. Presses polytechniques et universitaires romandes, 2016.
- [17] G. Erley y W. Daum. «Silicon interband transitions observed at Si<sub>100</sub>-SiO<sub>2</sub> interfaces». En: *PHYSICAL REVIEW B* 58.4 (1998).

- [18] Downer M. C. Mendoza B. S. Kwon J. «Second-harmonic and reflectance anisotropy spectroscopy of vicinal Si(001)/SiO<sub>2</sub> interfaces: Experiment and simplified microscopic model». En: *Physical Review B*. 74 (2006).
- [19] Junji Yamanakaa Chiaya Yamamotoa Kiyokazu Nakagawaa Noritaka Usamib Kentarou Sawanoc Yasuhiro Shirakic Keisuke Arimotoa Hiroshi Furukawaa. «Formation of compressively strained Si  $\backslash$ Si<sub>1-x</sub> C<sub>x</sub> heterostructures using gas-source molecular beam epitaxy». En: *ELSEVIER* 362 (2013).
- [20] Chikashi Yamada y Takahiro Kimura. «(110)-Surface Strained-SOI CMOS Devices». En: *PHYSICAL REVIEW LETTERS* 70.15 (1993).
- [21] D. J. Bottomley G. Lüpke y H. M. van Driel. «Second- and third-harmonic generation from cubic centrosymmetric crystals with vicinal faces: phenomenological theory and experiment». En: *Journal of the Optical Society of America B* 11 (1994), págs. 33-44.
- [22] Animación. <https://commons.wikimedia.org/wiki/Special:ListFiles/MarinaVladivostok>. Accessed: 2010-09-30.