

CENTRO DE INVESTIGACIONES
EN ÓPTICA, A.C.

ESTUDIO DE LA DINÁMICA DE
PORTADORES DE CARGA EN MATERIALES
SEMICONDUCTORES PARA
OPTOELECTRÓNICA DE THz



DOCTORADO EN CIENCIAS (ÓPTICA)

Asesor:

Dr. Enrique Castro Camus

Estudiante:

M.C.O. Sofía Carolina Corzo García

Diciembre de 2016

León, Guanajuato, México

Resumen

En esta tesis se analiza de manera teórica, la dinámica de portadores de carga en antenas fotoconductoras (PCA) diseñadas para emitir radiación de THz. Para llevar a cabo este análisis se utiliza una simulación de Monte Carlo en tres dimensiones. Se simularon PCA de Arseniuro de Galio crecido a bajas temperaturas LT-GaAs (cuyo tiempo de vida de portadores de carga es de aproximadamente 250 fs) y Arseniuro de Galio semi-aislante SI-GaAs (cuyo tiempo de vida de portadores de carga es de aproximadamente 10 ns), obteniendo un tamaño de *gap* para la PCA con el cual el tiempo de tránsito de los portadores de carga a través de éste, es el parámetro determinante en la duración del pulso de THz emitido en lugar del tiempo de vida de los portadores de carga.

También se simuló la emisión de THz en campo cercano en Arseniuro de Indio Galio (InGaAs) sin la presencia de un campo eléctrico externo. Para esta simulación se usó la simulación de Monte-Carlo antes mencionada en combinación con una simulación electromagnética con el método de Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo FDTD. Con los resultados obtenidos de estas simulaciones se demuestra que la contribución de la radiación de THz debida a la fotocorriente generada en el plano de la superficie del semiconductor no es despreciable (como se consideraba normalmente). Los resultados teóricos obtenidos se validaron comparándolos con resultados experimentales publicados previamente.

Dedico este trabajo a mi esposo Fernando y a mi hija
Emily que son mi luz, mi hogar y mi motivación.

Con un agradecimiento especial a Dios y a mis padres
Febe y Edgar

Lista de Publicaciones.

Artículos.

- S.C. Corzo-Garcia, M. Alfaro, E. Castro-Camus. *Transit time enhanced bandwidth in nanostructured terahertz emitters*. Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves Volume 35, Issue 12, September 2014, Pages 987-992
- A.I. Hernandez-Serrano, S.C. Corzo-Garcia, E. Garcia-Sanchez M. Alfaro, E. Castro-Camus. *Quality control of leather by terahertz time-domain spectroscopy*. Applied Optics Volume 53, Issue 33, November 2014, Pages 7872-7876
- S.C. Corzo-Garcia, A.I. Hernandez-Serrano, E. Castro-Camus, O. Mitrofanov. *Monte Carlo simulation of near-field terahertz emission from semiconductors*. Phys. Rev. B Volume 94, Issue 4, July 2016, Pages 045301

Trabajos en conferencias y presentaciones.

- S.C. Corzo-Garcia, E. Castro-Camus. *Dinámica de portadores en nanobarras de Bi_2S_3* , V Congreso Nacional de Ciencia e Ingeniería en Materiales, Villahermosa Tabasco, México, 03–07 Marzo 2014.

Agradecimientos.

Al CONACyT por el soporte económico brindado.

A mi asesor de tesis Dr. Enrique Castro-Camus por la dirección en la realización de este proyecto.

A mi compañero Arturo Hernández-Serrano que desarrolló el código FDTD.

A los Dres. Michael Johnston (Oxford, Reino Unido), James Lloyd-Hughes (Warwick, Reino Unido) y Enrique Castro-Camus que desarrollaron el código para la simulación de Monte-Carlo.

Al Dr. Oleg Mitrofanov (Londres, Reino Unido) por la colaboración con los resultados experimentales cotejados en el capítulo 5.

Índice general

1. Introducción.	1
1.1. Objetivo.	2
1.1.1. Objetivos particulares.	2
1.2. Hipótesis.	2
2. Radiación electromagnética a frecuencias en Terahertz.	4
2.1. Emisión y detección de radiación en THz.	8
2.2. Antenas fotoconductoras (PCA).	10
2.3. Emisión de superficie.	14
3. Simulaciones de la emisión de THz en semiconductores por los métodos de: Monte-Carlo y Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo.	17
3.1. Simulación de Monte-Carlo de la emisión de THz en una PCA.	17
3.2. Método de Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD) para la emisión de THz de semiconductores.	26
4. Influencia del tamaño del <i>gap</i> de una PCA en su ancho de banda.	30
4.1. Parámetros de simulación.	31
4.2. Resultados de la simulación.	33
5. Simulación de la emisión de THz en campo cercano de InGaAs.	40
5.1. Experimento de Mueckstein <i>et al.</i>	41
5.2. Simulación de Monte-Carlo.	44
5.2.1. Modificaciones y parámetros.	44
5.2.2. Resultados.	46
5.3. Ecuación de continuidad electromagnética	47
5.4. Simulación FDTD.	48
5.4.1. Parámetros.	49
5.4.2. Resultados.	50
6. Conclusiones.	59
6.1. Trabajo futuro.	60

A. Parámetros de GaAs e InGaAs.	62
B. Ejemplo de archivo de entrada de parámetros a la simulación Monte-Carlo	63
. Bibliografía.	75

Capítulo 1

Introducción.

El estudio de la radiación electromagnética en la región de frecuencias de Terahertz (THz) tomó relevancia en 1984 con el desarrollo de los láseres de pulsos ultracortos y las antenas fotoconductoras capaces de emitir y detectar dicha radiación [1]. Desde entonces diversos grupos de investigación alrededor del mundo han contribuido en el mejoramiento y desarrollo de dispositivos emisores y receptores de THz [2], así como en el desarrollo de aplicaciones de esta radiación en diferentes áreas del conocimiento [3], que van desde aplicaciones médicas hasta como parte de procesos industriales, pasando por la captura de imágenes de seguridad y con fines de conservación de arte, entre otras.

Actualmente, uno de los materiales más utilizados para la fabricación de antenas fotoconductoras es el Arseniuro de Galio crecido a bajas temperaturas LT-GaAs. Esto se debe a que el tiempo de vida de los portadores de carga en este material es muy corto, de aproximadamente 250 fs [4], comparado por ejemplo con el de Arseniuro de Galio semi-aislante que es de aproximadamente 10 ns [5]. Sin embargo el proceso de crecimiento de LT-GaAs es más costoso que el de SI-GaAs, además de que algunas de sus propiedades no son repeti-

bles entre muestras, por lo que sería deseable poder reemplazarlo en las PCA por SI-GaAs.

1.1. Objetivo.

Mejorar conceptos básicos del funcionamiento de emisores de THz basados en materiales semiconductores, mediante el estudio de la dinámica de portadores dentro de este tipo de materiales.

1.1.1. Objetivos particulares.

Simular la dinámica de portadores en antenas fotoconductoras emisoras de THz de LT-GaAs y SI-GaAs con diferentes tamaños de *gap*, para conocer la contribución del tiempo de tránsito de los portadores de carga en el ancho de banda del pulso de THz emitido.

Simular la dinámica de portadores y emisión de THz de superficie en InGaAs fotoexcitado con un gradiente en la iluminación, para conocer la contribución de las corrientes laterales en la emisión de THz en campo cercano.

1.2. Hipótesis.

La contribución de esta tesis se puede dividir en la comprobación de dos hipótesis que dan respuesta a los objetivos particulares.

- Hipótesis 1: El tiempo de tránsito de los portadores de carga fotoexcitados a través de un *gap* del orden de 100 nm, de una antena fotoconductoras emisora de THz, es el factor dominante en la duración del pulso de THz emitido.

- Hipótesis 2: La emisión de THz en campo cercano de una superficie de InGaAs, fotoexcitada con un gradiente en la iluminación, está conformada por las contribuciones debidas tanto a la corriente paralela como a la perpendicular a la superficie del semiconductor y no solamente a la generada debido a la corriente perpendicular, como lo sugiere el modelo comunmente aceptado en el estudio de ésta emisión.

Capítulo 2

Radiación electromagnética a frecuencias en Terahertz.

Para propósitos de este trabajo la región del espectro electromagnético comprendida entre las frecuencias 0.3 THz y 10 THz (que corresponden a longitudes de onda entre 1 mm y 30 μm) será llamada radiación en Terahertz (THz).

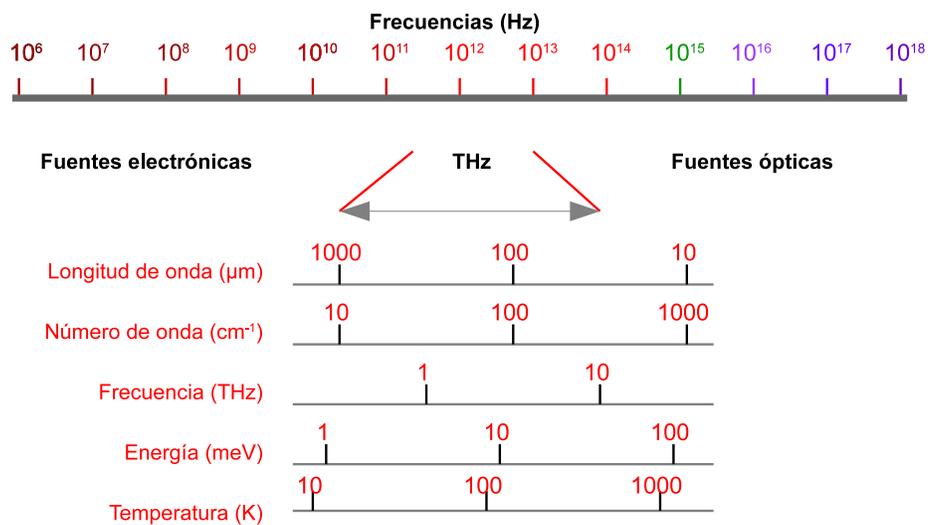


Figura 2.1: Frecuencias del espectro electromagnético y región de THz representada en diferentes unidades [6].

En la figura 2.1 se muestra la banda de THz dentro del espectro electromagnético y su equivalencia en diversas unidades [6].

Antes de 1984 no existía la tecnología para emitir y detectar radiación en THz. En ese año se desarrollaron antenas fotoconductoras que excitadas por láseres de pulsos ultracortos, cuyos pulsos ópticos con duración de picosegundos [1] permitieron la generación y detección de pulsos de banda ancha que cubren esta región del espectro. Desde entonces se ha hecho investigación para mejorar estos dispositivos [2,7,8], se han desarrollado otro tipo de fuentes y detectores [9,10] y se han descubierto muchas aplicaciones en diversas áreas [3].

El hecho de que el acceso a esta región del espectro se haya logrado hace apenas tres décadas, está asociado con que su generación y detección son incompatibles con la tecnología comúnmente utilizada para emitir radiación ya sea por medios ópticos o electrónicos [11]. La región de THz está situada justo en la brecha entre la capacidad de ambas tecnologías (figura 2.1), ya que en esta brecha hay frecuencias más altas que las máximas generadas por dispositivos electrónicos (limitados por la velocidad de los *switches* electrónicos) y frecuencias inaccesibles para los dispositivos ópticos (limitados por las energías de transición de electrones y átomos emisores) [12].

Una característica a resaltar de la radiación en THz es que es fuertemente absorbida por el agua [13], esto abre la posibilidad de realizar estudios en diversas áreas donde el monitoreo de cantidades de hidratación sea un factor determinante del proceso a estudiar. Sin embargo ésta misma característica constituye una de las principales limitaciones o retos para el desarrollo experimental de la espectroscopía en THz, ya que, por ejemplo para hacer estudios en condiciones ambientales normales, se encuentra presente vapor de agua contenido en el aire, el cual atenúa la señal de THz [14] aun en au-

sencia de una muestra. En la figura 2.2a se muestra la atenuación de los THz al propagarse en aire y en la figura 2.2b se observan franjas de absorción de agua en frecuencias características.

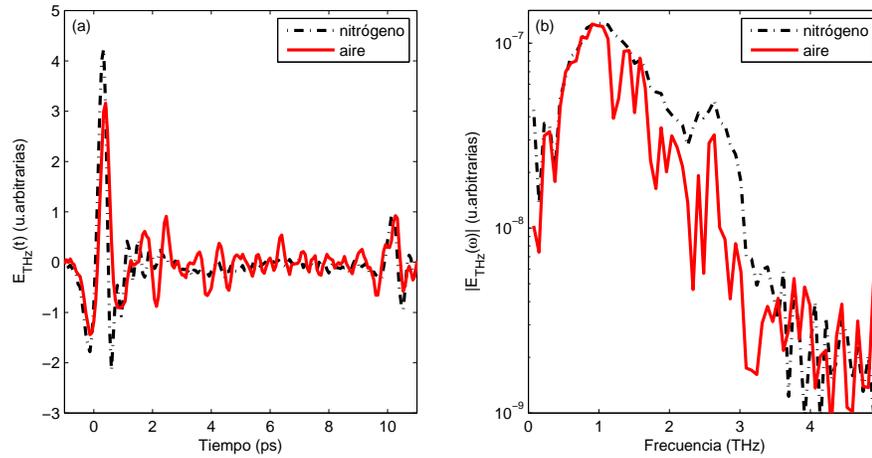


Figura 2.2: La línea continua (roja) muestra un pulso de THz en función del tiempo (a) y en función de la frecuencia (b) propagado en aire y la línea punteada (negra) muestra un pulso de THz en función del tiempo (a) y en función de la frecuencia (b) propagado en un ambiente en el que se reemplazó el aire por nitrógeno. Ambos pulsos se generaron en el mismo espectrómetro bajo igualdad de condiciones, con una distancia de 40 cm entre el emisor y el detector.

Las aplicaciones de la radiación en THz se extienden a diversas áreas del conocimiento. A continuación se enumeran como ejemplo algunas de ellas:

- Estudios no destructivos en plantas vivas, donde utilizando espectroscopía en THz en el dominio del tiempo (THz-TDS) se ha monitoreado el proceso de deshidratación de sus hojas [15] bajo diferentes condiciones, estudio que entre otras cosas permite conocer la resistencia de la planta a las sequías. Esto cobra relevancia debido al cambio de las condiciones climáticas de nuestro planeta [16].
- Identificación de químicos explosivos, venenosos o ilícitos (con huellas espectrales en esta región) mediante su reconocimiento en imágenes de

THz [17,18]. La toma de estas imágenes se pretenden implementar para mejorar la seguridad, por ejemplo, en aeropuertos.

- Obtención de la conductividad de semiconductores tanto en bulto como en nanoestructuras. Mediante experimentos TDS de Bombeo Óptico-Prueba en THz, es posible monitorear en el tiempo la dinámica de portadores en materiales semiconductores fotoexcitados [19–22]. Conocer la conductividad de semiconductores nanoestructurados, por ejemplo nanoalambres permite el desarrollo de novedosos dispositivos electrónicos [23] y celdas solares más eficientes [24].
- Estudio de la estructura y funcionamiento de proteínas dentro de su esfera de solvatación (que es como se encuentran en organismos vivos) [25,26].
- Monitoreo de cantidades de hidratación en distintos materiales con fines de control de calidad en la industria del papel [27] y curtido de pieles [28].
- Identificación de materiales extraños en alimentos grasos como cacahuete y chocolate [29], y alimentos deshidratados en polvo [30].
- En diferentes partes del proceso en la industria del plástico [31,32] para determinar los contenidos de aditivos y de la industria farmacéutica [33,34] para monitorear las concentraciones de ciertas sustancias en pastillas.
- Identificación no invasiva de capas pictóricas en obras arte [35,36]; Entre otras.

2.1. Emisión y detección de radiación en THz.

Existen diversos tipos de fuentes de THz, dentro de ellas una rama se basa en láseres pulsados [37, 38]. De manera general este tipo de emisores de THz transforman pulsos ópticos ultracortos (con duración de decenas de femtosegundos) en pulsos de THz (con duración de unos cuantos picosegundos). Los semiconductores son materiales en los que se puede realizar esta conversión. Dentro del semiconductor se pueden fotoexcitar portadores de carga, los cuales al ser acelerados por un campo eléctrico (interno o aplicado de manera externa) presente dentro del material generan THz [39].

Las antenas fotoconductoras (PCA) son dispositivos que se basan en procesos fotoconductoros para emitir y detectar THz [1, 2, 40] y entran dentro de las que usan un campo eléctrico aplicado de manera externa. Éstas tienen como sustrato un material semiconductor sobre el que se depositan contactos metálicos que se utilizan para aplicar un campo eléctrico externo, el semiconductor es excitado por un pulso óptico ultracorto para generar un pulso de THz. Estos dispositivos pueden ser usados también como detectores, si en vez de aplicar un voltaje externo entre los contactos, se usa el campo eléctrico de THz para acelerar las cargas generadas por el pulso óptico ultracorto.

Por otra parte, sin necesidad de aplicar un campo eléctrico externo, la emisión de THz de un material semiconductor se puede presentar debido a un dipolo transitorio el cual se debe a la presencia de un campo eléctrico cerca de la superficie del semiconductor. Este campo eléctrico se ha atribuido principalmente a dos mecanismos: el campo de superficie y el efecto *photo-Dember* [37].

Para generar y detectar pulsos de THz, se utiliza como base un arre-

glo experimental como el que se muestra en la figura 2.3. Un haz de pulsos ultracortos proveniente de un láser de femtosegundos es dividido en dos caminos mediante un divisor de haz, uno de estos caminos será utilizado para la generación de THz y el otro para la detección. A partir de este momento llamaremos bombeo al camino de generación y prueba al camino de detección.

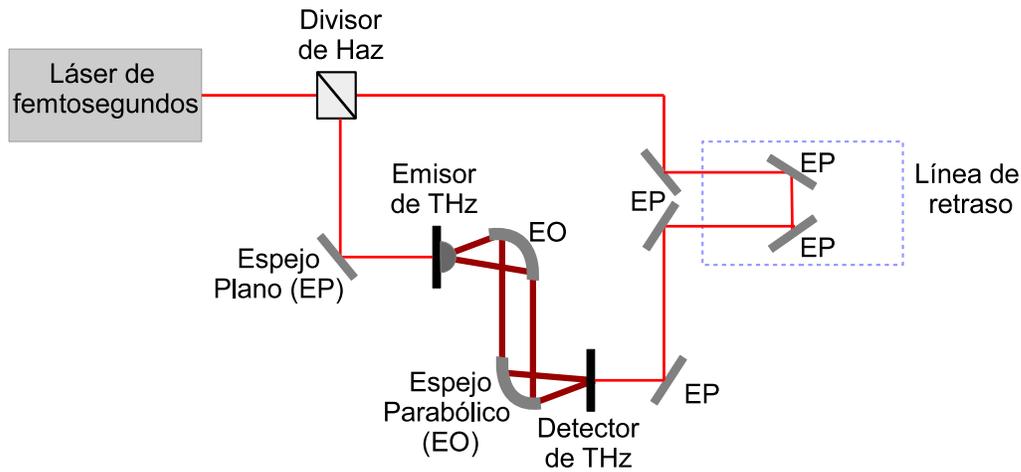


Figura 2.3: Esquema general del arreglo experimental usado para la generación y detección de pulsos de THz.

Después de la separación del haz de bombeo y el de prueba en el divisor de haz, el bombeo es enfocado sobre el emisor y la radiación en THz que emite es llevada y enfocada hacia el detector mediante el uso de espejos parabólicos. El haz de prueba se hace pasar por una línea de retraso óptico variable antes de ser enviado al detector donde se hacen coincidir el haz de prueba y el de THz. El detector solamente es capaz de detectar el pulso de THz cuando está presente simultáneamente con él, un pulso ultracorto; esta detección es proporcional al campo eléctrico de THz presente, por lo que variando el retraso entre ambos pulsos la señal detectada también varía. Ya que el pulso óptico es mucho más corto (temporalmente) que el de THz, me-

diante la línea de retraso se puede muestrear el campo eléctrico de THz. Este arreglo experimental permite la detección directa del campo eléctrico con su información de amplitud y fase, a diferencia de la detección de intensidad en la cual está presente solo la información de amplitud.

Del arreglo experimental que se acaba de describir se obtiene directamente el campo eléctrico de THz como una función del tiempo de retraso entre el pulso de bombeo y el de prueba, sin embargo si se le aplica Transformada de Fourier también se obtiene el campo eléctrico de THz en función de la frecuencia [6]

$$E(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} E(t) \exp(-i\omega t) dt. \quad (2.1)$$

2.2. Antenas fotoconductoras (PCA).

Desde su desarrollo en 1984, los dispositivos optoelectrónicos para trabajar en la región de THz han evolucionado [2, 41, 42], sin embargo existen aspectos de estos dispositivos que aún pueden ser mejorados, por ejemplo, sería deseable sustituir el LT-GaAs, que es el semiconductor más utilizado para la construcción de PCA, por SI-GaAs ya que su proceso de crecimiento es menos costoso que el de LT-GaAs, además de que algunas de las propiedades de este último no son repetibles entre muestras. En este trabajo nos enfocamos en el mejoramiento de PCA mediante el estudio de la dinámica de portadores de carga en el material semiconductor sobre el que se construyen.

Una PCA está formada por un sustrato de un material semiconductor, sobre el cual son depositados electrodos que pueden ser de diferentes metales y diferentes geometrías [43]. En el espacio entre los electrodos (*gap* de la PCA) se enfoca el pulso de bombeo cuya energía por fotón es mayor o igual

a la energía del *bandgap* del semiconductor para generar pares electrón-hueco. Entre los electrodos se aplica un voltaje externo, el cual genera un campo eléctrico que acelera las cargas fotogeneradas (separando los electrones (e-) de los huecos (h+)) como se ve en la figura 2.4), la fotogeneración y aceleración de estas cargas produce una corriente eléctrica transitoria entre los contactos de la PCA, esta fotocorriente emite un pulso de radiación electromagnética el cual está descrito en el campo lejano por

$$E_{THz} \propto \frac{dI_{PC}(t)}{dt}, \quad (2.2)$$

donde E_{THz} es el campo eléctrico de THz emitido e I_{PC} es la corriente transitoria fotogenerada en el *gap* de la antena [44, 45]. Después de ser excitadas y aceleradas, estas cargas regresan a un estado de equilibrio dentro de la estructura de bandas del semiconductor en una escala de tiempo de picosegundos [45].

Un pulso de THz puede considerarse como un ciclo compuesto por mitades con diferente polaridad. El comportamiento de la primera mitad se debe a la aceleración de las cargas fotogeneradas, mientras que el comportamiento de la segunda está relacionada con la desaceleración de las mismas a lo largo del semiconductor [46].

En el arreglo experimental que se esquematiza en la figura 2.3 tanto el emisor como el detector son PCA. Para usar una PCA como detector no se aplica un campo eléctrico externo entre los contactos [47], sino que es necesario que un pulso de THz incidente coincida en el detector con el pulso óptico de prueba, ya que es el campo eléctrico de THz el que produce la aceleración de las cargas fotogeneradas por el pulso óptico, generando una fotocorriente la cual es filtrada a una frecuencia (introducida en la PCA

emisora debido al encendido y apagado del voltaje externo aplicado entre los contactos) para amplificarla y detectarla con la ayuda de un amplificador *Lock-in* [45].

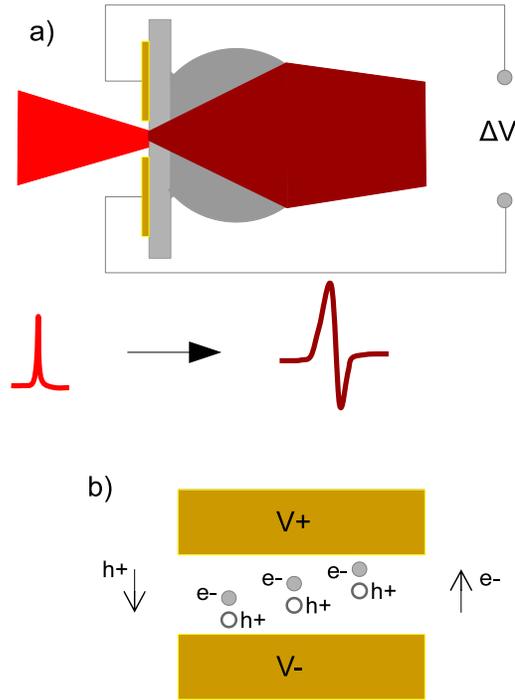


Figura 2.4: a) Esquema de una PCA funcionando como emisor. Se muestra como se hace incidir por la izquierda sobre el *gap* un pulso óptico ultracorto enfocado y se emite por la derecha un pulso de THz. En amarillo se muestran los contactos metálicos entre los que se aplica el voltaje externo, se muestra también una lente de silicio sobre la cual está montada la PCA, lo cual se usa para reducir la divergencia del pulso emitido. b) Esquema de la creación de pares electrón-hueco y la dirección de su aceleración debido al voltaje externo aplicado.

Como ya se mencionó anteriormente el pulso óptico es mucho más corto que el pulso de THz, esto permite que, con la ayuda de la línea de retraso, se pueda mapear el pulso más largo variando el momento en el que coinciden ambos pulsos en el detector. Para variar controladamente este momento de traslape se usa una línea de retraso como la que se esquematizó en la figura 2.3, la cual consiste en un par de espejos montados sobre una plataforma de desplazamiento lineal (mientras menor sea el paso de la plataforma, mayor

es la resolución con la que se puede mapear el pulso de THz).

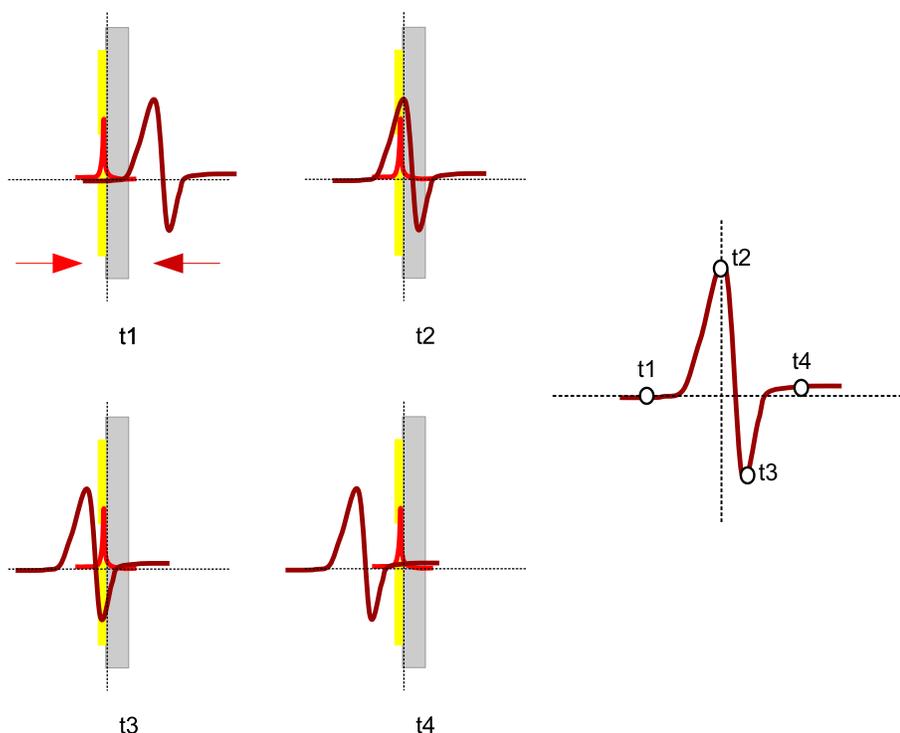


Figura 2.5: Proceso de mapeo del pulso de THz por el pulso óptico para la detección en una PCA. t1 El pulso óptico llega al detector antes que el pulso de THz. t2 El pulso óptico se traslapa con el pulso de THz en el máximo positivo. t3 El pulso óptico se traslapa con el pulso de THz en el máximo negativo. t4 El pulso óptico llega después que el pulso de THz.

Si al variar esta línea de retraso el pulso óptico llega antes o después que el de THz no hay aceleración de cargas, por lo que no se genera fotocorriente y la lectura en el *Lock-in* es cero (o muy baja igual al nivel de ruido). Cuando ambos pulsos coinciden temporalmente en alguna parte de la primera mitad del ciclo de THz, la fotocorriente generada va en una dirección (que en este momento llamaremos arbitrariamente positiva), dando como resultado una lectura positiva en el *Lock-in* cuya amplitud depende de la intensidad del campo eléctrico de THz al momento del traslape. Cuando ambos pulsos coinciden en alguna parte de la segunda mitad del ciclo de THz la fotocorriente generada va en la dirección contraria, produciendo una lectura negativa en

el *Lock-in*. Así que variando el tiempo de retraso entre los pulsos se puede muestrear el pulso completo de THz como se muestra en la figura 2.5 [12].

2.3. Emisión de superficie.

Como se mencionó anteriormente cerca de la superficie de un semiconductor se presenta un campo eléctrico, el cual también sirve para acelerar las cargas fotogeneradas por un pulso óptico [48]. Este campo eléctrico inherente a la presencia de una interfase aire-semiconductor (superficie del semiconductor) se atribuye a dos mecanismos:

- El campo de superficie (figura 2.6a). Éste se forma en la zona de agotamiento (*depletion region*) de un semiconductor, la cual se origina cuando producto del *Fermi-level pinning* se flexionan las bandas cerca de la superficie. Cuando un pulso óptico fotogenera pares electrón-hueco en el semiconductor, este campo de superficie acelera las cargas fotogeneradas en direcciones opuestas, creando una *drift current* en dirección normal a la superficie del semiconductor. La amplitud del campo de THz radiado en campo lejano es proporcional a la derivada temporal de la corriente [37, 39].
- El campo *photo-Dember* (figura 2.6b). Éste es causado por la diferencia de movilidad entre electrones y huecos. Cuando un pulso óptico fotogenera pares electrón-hueco en el semiconductor, el campo *photo-Dember* acelera las cargas fotogeneradas, sin embargo ya que los electrones tienen mayor movilidad que los huecos, se crea una *diffusion current* por el hecho de que los electrones se difunden hacia el bulto del semiconductor más rápido que los huecos. La *diffusion current* en promedio

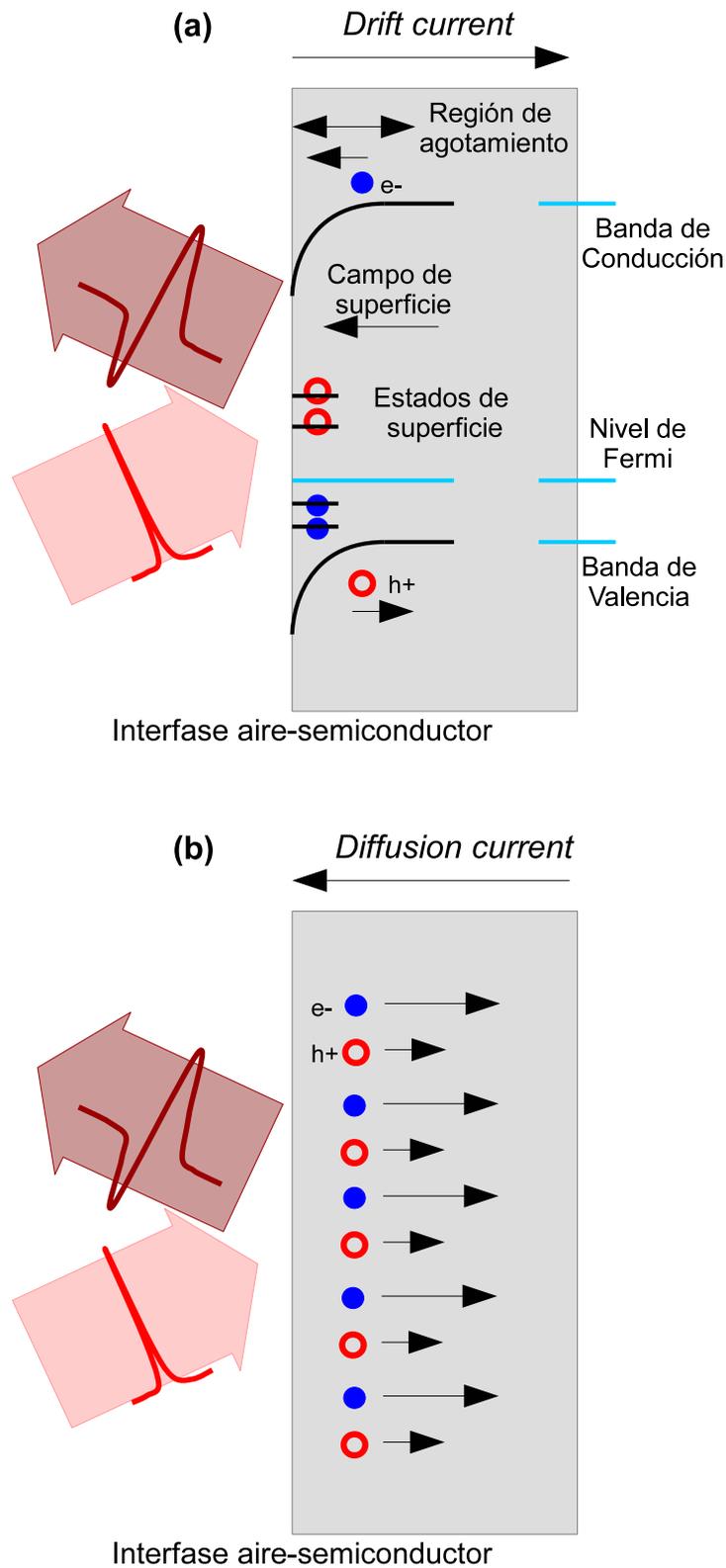


Figura 2.6: Emisión de THz debida a: (a) Efecto del campo de superficie (*drift current*) y (b) Efecto *photo-Dember* (*diffusion current*) [39].

solo tiene una componente perpendicular a la superficie (portadores alejándose de la superficie), sin embargo, también puede presentarse en dirección paralela a la superficie (portadores difundiéndose a lo largo de la superficie) y en este caso se denomina efecto *photo-Dember* lateral [49]. La amplitud del campo de THz radiado en campo lejano es proporcional a la derivada temporal de la corriente [37, 39].

Para semiconductores con *bandgap* amplio (como GaAs) el proceso que domina la generación de THz es el producido por el campo de superficie [48, 50], mientras que en semiconductores con un *bandgap* estrecho (como InAs) el proceso que domina la generación de THz es el producido por el campo *photo-Dember* [51, 52].

Una vez explicados los mecanismos para generar THz tanto en PCA como en la superficie de un semiconductor, en el siguiente capítulo se explicará la herramienta computacional que se usa en esta tesis para analizar la dinámica de portadores dentro de un semiconductor.

Capítulo 3

Simulaciones de la emisión de THz en semiconductores por los métodos de: Monte-Carlo y Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo.

3.1. Simulación de Monte-Carlo de la emisión de THz en una PCA.

En esta sección se describe un modelo de Monte-Carlo en tres dimensiones de la dinámica de portadores de carga en el material semiconductor de una PCA [50]. Este modelo se utilizó para obtener los resultados que se presentarán en capítulos posteriores. En las referencias [50, 53, 54] se pueden consultar más detalles de este algoritmo de simulación.

Cabe señalar que el algoritmo fue diseñado originalmente por el Prof. Michael Johnston (Universidad de Oxford) y posteriormente modificado por el Dr. James LLoyd-Hughes (Universidad de Warwick) y el Dr. Enrique Castro-Camus (CIO).

El método Monte-Carlo es una herramienta desarrollada hace alrededor de 60 años [55], la cual permite resolver problemas que contengan en alguna parte de su desarrollo procesos estocásticos. Este método consiste en la aplicación combinada de soluciones deterministas y estocásticas en el tratamiento de un problema, en el cual mediante el uso de números aleatorios se determinan las probabilidades que permiten simular la parte no determinista del problema a resolver [55, 56]. Se llama Monte Carlo haciendo referencia al casino (con el mismo nombre) ya que los juegos de azar son generadores simples de números aleatorios.

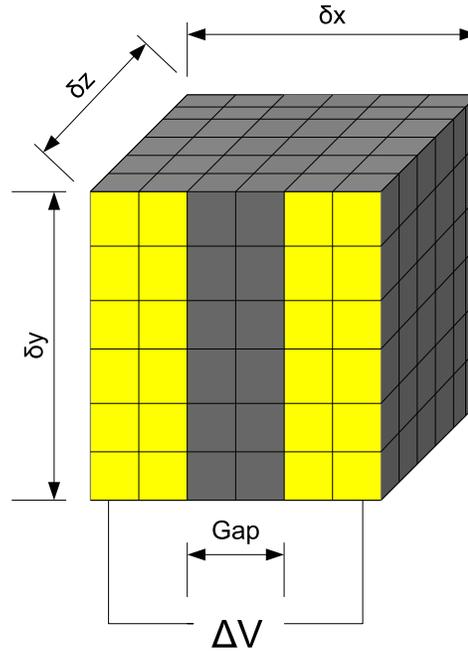


Figura 3.1: Representación gráfica de la geometría de la PCA, los contactos y las divisiones usada para la simulación. [46].

Utilizar el método de Monte-Carlo nos permite obtener una simulación de la dinámica de portadores semi-clásica, en la cual se incluyen las probabilidades cuánticas de que cada partícula simulada se desvíe de su trayectoria. El movimiento de los portadores de carga puede ser alterado por mecanismos de *scattering*, los cuales además de desviar su trayectoria modifican su energía, así que por cada paso de tiempo en nuestra simulación se incluye las probabilidades cuánticas de que ocurran los mecanismos de *scattering* que consideramos en este estudio, las cuales son evaluadas utilizando una función generadora de números pseudo-aleatorios.

Antes de iniciar la simulación se definen el material y las dimensiones de la PCA a simular, todos los parámetros para definir esto se introducen al código mediante un archivo de entrada con extensión `.inp` (ejemplo en el apéndice B). El volumen total definido se divide en pequeños prismas rectangulares (figura 3.1) y el tiempo total de simulación se divide en intervalos de 1 fs (este valor puede ser modificado).

En síntesis la simulación que utilizamos funciona de la siguiente manera:

- Se define la densidad de carga (ρ) en el semiconductor con las posiciones de los portadores de carga (generados por los dopantes del semiconductor y fotogenerados por un pulso óptico).
- Se calcula el potencial eléctrico (Φ) resolviendo numéricamente la ecuación de Poisson.
- Con este potencial eléctrico se calcula el campo eléctrico (E) responsable del desplazamiento (r) de los portadores de carga durante un intervalo de tiempo.

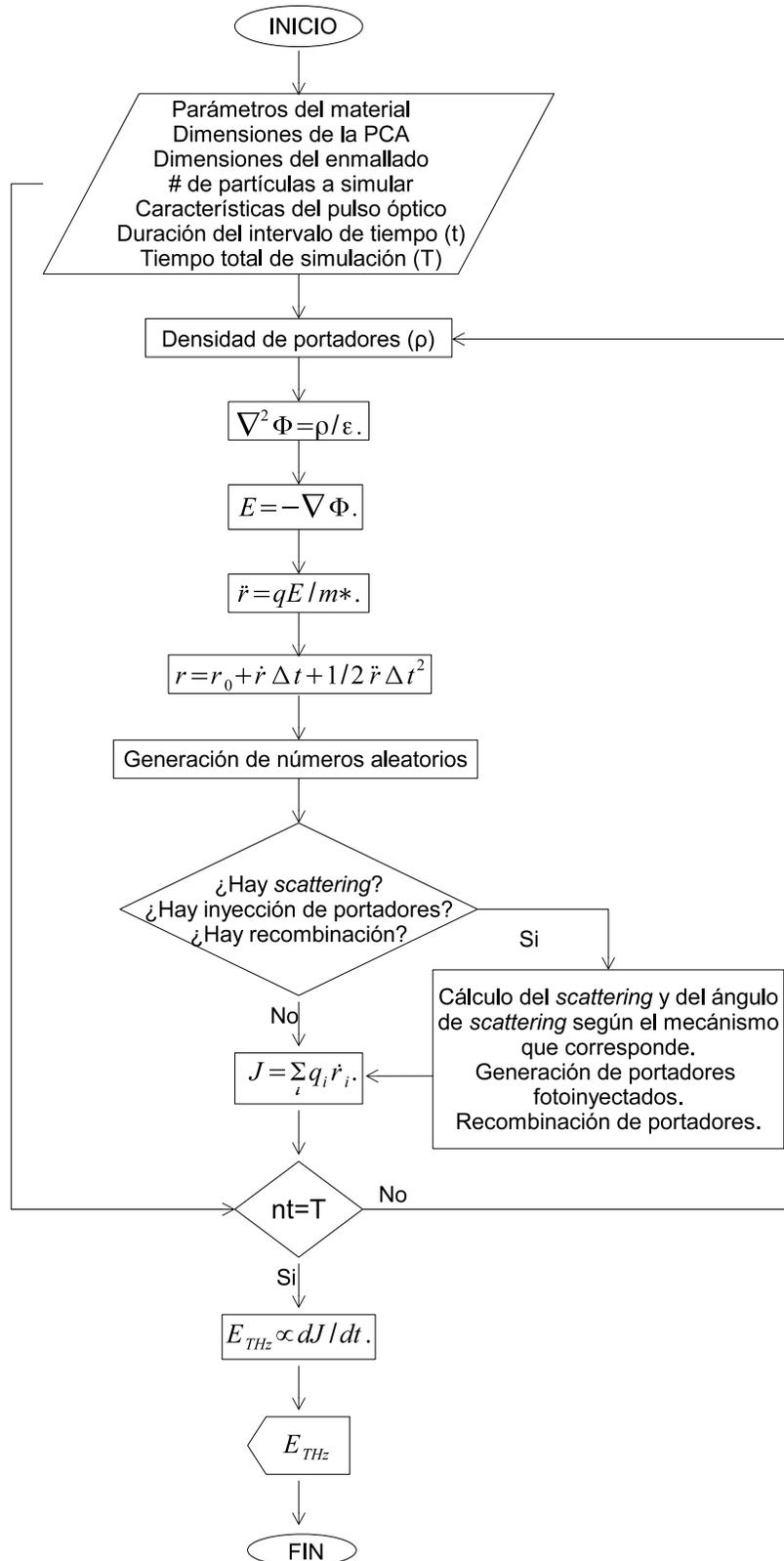


Figura 3.2: Diagrama de flujo de la simulación de Monte-Carlo.

- Después de obtener este desplazamiento se calculan las probabilidades de que cada partícula simulada sufra algún mecanismo de *scattering*, en cuyo caso se calcula su nueva posición y energía.
- Se determina si existe inyección de portadores por un pulso óptico y si alguno de los portadores existente se recombinó.
- Con las nuevas posiciones (después del *scattering*, fotoinyección y recombinación) de los portadores se actualiza la densidad de carga y se repite este proceso de cálculos durante todo el tiempo que se desee simular.

El proceso de la simulación se muestra en el diagrama de flujo mostrado en la figura 3.2 y se explica con más detalle a continuación.

La simulación comienza picosegundos antes de la llegada del pulso óptico, en ese momento los portadores disponibles se deben a la densidad de dopantes del material, la posición inicial de estos portadores se determina mediante la generación de números aleatorios y su velocidad inicial es tal que tienen una distribución de energías dada por la función estadística de Maxwell-Boltzmann. Con esta posición se determina ρ , la cual se utiliza para calcular el potencial eléctrico Φ mediante la solución de la ecuación de Poisson [57]

$$\nabla^2\Phi = \frac{\rho}{\epsilon}. \quad (3.1)$$

Para resolver la ecuación de Poisson se utiliza el método de diferencias finitas con condiciones de frontera de Neumann para todas las caras del cubo, excepto por las zonas de los contactos de la PCA, donde para uno de ellos se fija $V = 0$ y para el otro se fija el valor del voltaje definido entre contactos por

el usuario como se muestra en la figura 3.3. Para optimizar la convergencia a la solución de este proceso se utiliza la aceleración de *Chebyshev* [58].

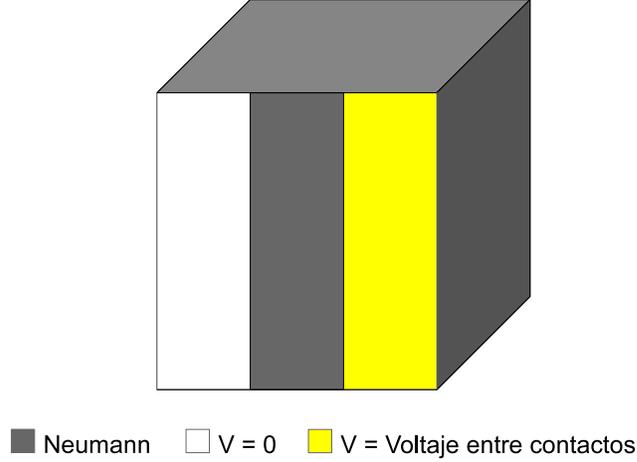


Figura 3.3: Representación de la distribución de las condiciones de frontera para la simulación [53].

El potencial eléctrico inicial se calcula de las condiciones de entrada de la simulación (densidad de dopantes del semiconductor, voltaje externo aplicado entre los contactos de la antena y condiciones en la frontera); Con Φ inicial se calcula el campo eléctrico que acelera las cargas

$$E = -\nabla\Phi \quad (3.2)$$

y que produce el primer desplazamiento. Dentro de cada una de las particiones de volumen durante cada intervalo de tiempo E se considera constante. El desplazamiento de los portadores se calcula [53] con

$$r = r_0 + \dot{r}\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{r}\Delta t^2, \quad (3.3)$$

donde:

$$\ddot{r} = \frac{qE}{m^*}. \quad (3.4)$$

El desplazamiento que se calcula con la ecuación 3.3 supone movimiento libre del portador en un intervalo de tiempo, sin embargo para hacer la simulación más realista, antes de calcular el siguiente desplazamiento de cada portador se determina para cada uno de ellos si fue objeto de algún mecanismo de *scattering*. Para determinar esto se utilizan nuevamente números aleatorios y la probabilidad cuántica de que los mecanismos ocurran. Para los portadores que sí se desvían se calcula el ángulo y la energía perdida o ganada por causa del *scattering* [50]. Una vez calculado el *scattering* de determina si existe fotoinyección de portadores, en cuyo caso sus posiciones se determinan con números aleatorios con una distribución gaussiana que corresponde con las características del pulso óptico de excitación, y a demás se determina si existe recombinación de portadores. Después de cada paso de tiempo se actualiza la posición de los portadores y se calculan nuevamente ρ , Φ , E y \ddot{r} . Este proceso se repite durante todo el tiempo a simular.

Los mecanismos de *scattering* incluidos en esta simulación son: la emisión y absorción de fonones ópticos longitudinales entre los valles L, Γ y X, emisión y absorción de fonones ópticos transversales entre los valles L, Γ y X; interacciones de portadores entre sí y con impurezas cargadas del semiconductor [50].

Para calcular la emisión y absorción de fonones, se supone que el semiconductor tiene una estructura de bandas parabólica, sin embargo para aproximar un comportamiento más realista de los portadores se incluyen dos valles laterales (L y X) y la existencia de huecos pesados [59] como se esquematiza en la figura 3.4.

Picosegundos después de iniciada la simulación llega un pulso óptico centrado en 800 nm y con duración de 60 fs, el cual genera pares electrón-hueco, estos nuevos portadores de carga son ubicados en el volumen de la simula-

ción utilizando números aleatorios en una distribución gaussiana en x y y y exponencial en z .

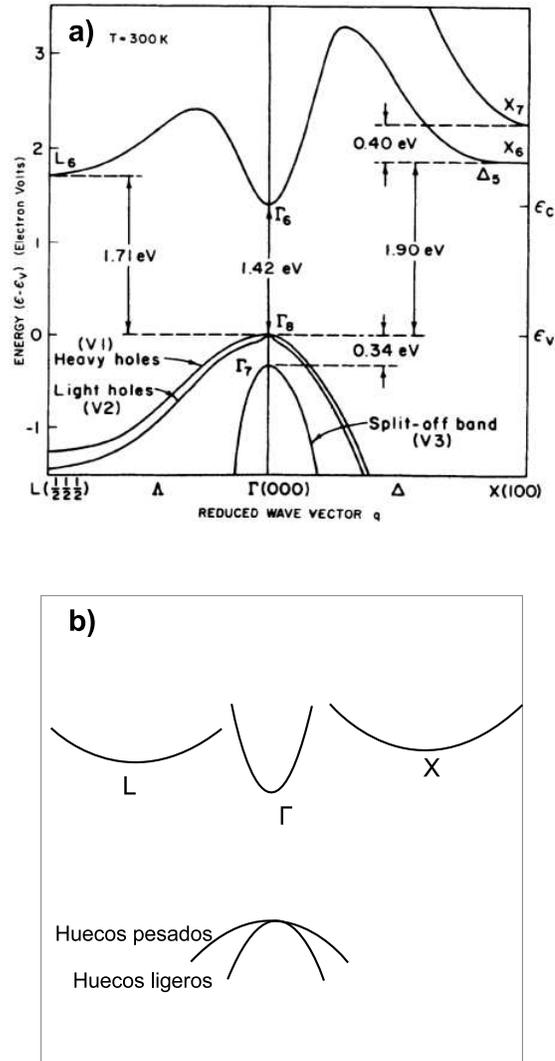


Figura 3.4: a) Estructura de bandas con energías de transición entre valles para GaAs tomada de [5], b) esquema de estructura de bandas para GaAs simplificado, considerando bandas parabólicas con dos valles laterales también parabólicos [59].

Como ya se mencionó en el capítulo anterior, el campo eléctrico de THz emitido por la PCA es producto de la corriente eléctrica transitoria generada en la antena. En la simulación se utiliza el vector \mathbf{J} como término fuente para la solución de las ecuaciones de Maxwell, donde usando la aproximación en

campo lejano se calcula la emisión de campo eléctrico de THz (E_{THz}) [3] con

$$E_{THz} \propto \frac{dJ}{dt}. \quad (3.5)$$

Al finalizar el tiempo de simulación se generan varios archivos de salida, en los que no solo se recupera la emisión de THz, sino que se tiene el registro completo de la densidad de carga y potencial eléctrico para cada paso de tiempo en tres cortes principales (uno del plano xy en $z = 0$, otro del plano xz a la altura media de y y el tercero de del plano yz a la altura media de x) que se muestran en la figura 3.5, así como la tasa de ocurrencia de cada mecanismo de *scattering* a lo largo del tiempo de simulación. Conocer esta información adicional a la emisión de THz permite entender mejor el proceso de emisión y las variables que influyen en mayor y menor escala.

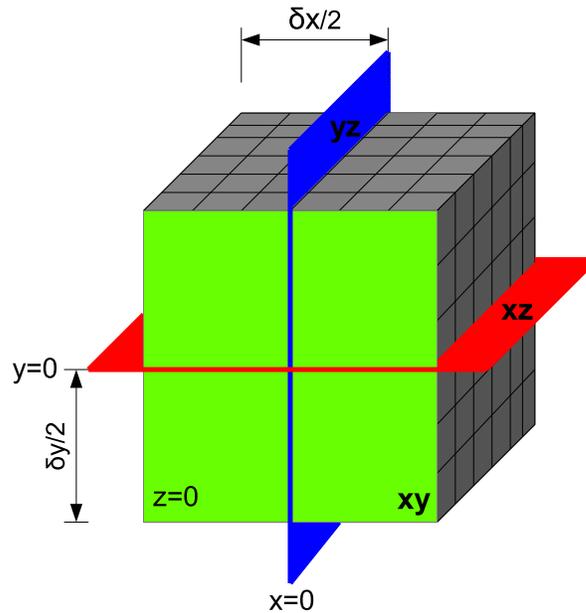


Figura 3.5: Cortes de los que se guarda la densidad de carga y potencial eléctrico cada paso de tiempo. Corte xy en $z = 0$ color verde, corte xz en $y = \delta y/2$ color rojo y corte yz en $x = \delta x/2$ color azul

En el capítulo 4 se utiliza la simulación descrita para comparar la emisión en THz de PCA de diferentes materiales y con diferentes tamaños de *gap*. Sin embargo, para las simulaciones que se presentan en el capítulo 5, se modificó la distribución espacial del pulso óptico de excitación para simular una excitación con bordes abruptos, también las condiciones de frontera para la solución de la ecuación de Poisson y en lugar de utilizar la aproximación de campo lejano para el cálculo de la emisión de THz, se toman como dato de salida la densidad de portadores de carga, con los que posteriormente se calcula la emisión de THz en campo cercano.

3.2. Método de Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD) para la emisión de THz de semiconductores.

El método de Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD) es una herramienta numérica que permite resolver problemas electromagnéticos mediante la solución de las ecuaciones de Maxwell, esta herramienta fué desarrollada hace 50 años por Kane S. Yee [60] y desde entonces, gracias al desarrollo de computadoras cada vez más poderosas se ha mejorado y ampliado para aplicarse a diversos problemas [61].

Para implementar el FDTD es necesario:

- Definir una malla sobre el volumen total a simular (número y dimensiones de las celdas y en base a ellas se calcula el diferencial de tiempo) en el espacio-tiempo [62].
- Especificar el material (permeabilidad, permitividad y conductividad).

- Determinar la fuente para la solución de las ecuaciones de Maxwell (Onda o campo incidente o densidad de corriente).
- Discretizar la forma diferencial de las ecuaciones de Maxwell.
- Imponer condiciones de frontera [63]. Si se va a simular solo una parte de un material o bien un sistema considerado infinito es necesario que estas condiciones sean absorbentes y se modelan por capas perfectamente empataadas (PML) [64].

En el grupo se cuenta con el método FDTD implementado en MATLAB, el cual fue implementado por mi compañero Arturo Hernandez. Para el estudio presentado en el capítulo 5 utilizamos esa rutina, la cual fue adaptada para calcular la emisión de THz en campo cercano de un semiconductor fotoexcitado. El proceso de la simulación se muestra en el diagrama de flujo de la figura 3.6

Para hacer este cálculo nos basamos en los resultados de la dinámica de portadores obtenidos con la simulación de Monte-Carlo descrita en la sección anterior (3.1). La simulación de Monte-Carlo se utiliza para analizar la emisión de THz en su aproximación en campo lejano, sin embargo, como ya se mencionó permite obtener muchos más parámetros de la dinámica de portadores en un semiconductor fotoexcitado. En este caso se tomo la evolución temporal de la densidad de portadores para calcular la densidad de corriente (J).

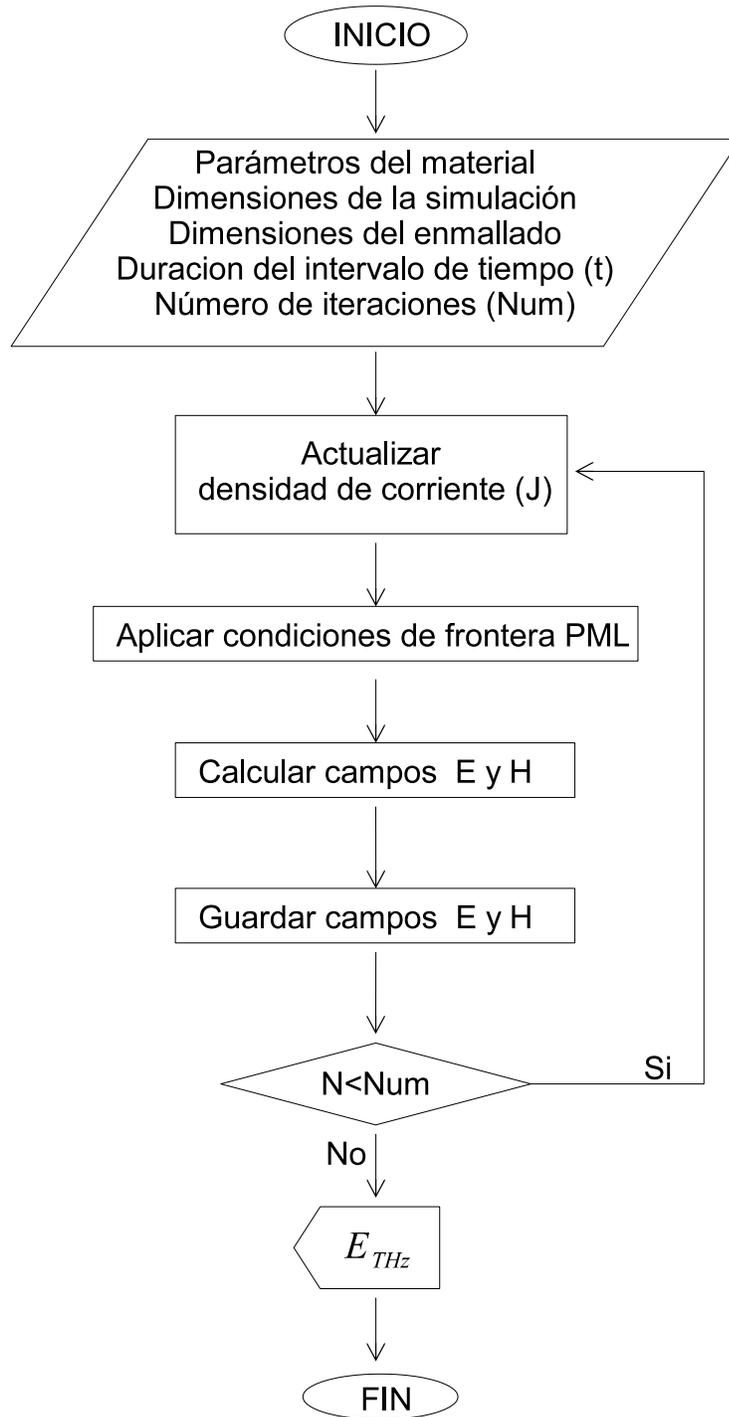


Figura 3.6: Diagrama de flujo del FDTD.

Mediante el método FDTD obtenemos la emisión de THz en campo cercano del semiconductor en estudio usando \mathbf{J} como término fuente para la solución de las ecuaciones rotacionales de Maxwell [65]

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (3.6)$$

y

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mu_0 \mathbf{J} \quad (3.7)$$

Capítulo 4

Influencia del tamaño del *gap* de una PCA en su ancho de banda.

En este capítulo se compara la emisión de THz de cuatro PCA utilizando el modelo Monte-Carlo que se describió en la sección 3.1. Las PCA que se simularon son producto de las combinaciones entre dos geometrías y dos materiales diferentes (SI-GaAs y LT-GaAs), y con los resultados se demuestra teóricamente que el tiempo de tránsito de los portadores de carga a lo largo de un *gap* de 100 nm , en una antena de SI-GaAs, es lo suficientemente corto para obtener una emisión de THz con un ancho de banda comparable al obtenido utilizando una antena similar de LT-GaAs. Poder utilizar SI-GaAs en lugar de LT-GaAs reduciría los costos de producción de PCA, además de que abre la posibilidad de producción en serie de dispositivos fotoconductivos en la región de THz.

4.1. Parámetros de simulación.

El material semiconductor que se utilizó para las simulaciones fue GaAs (los parámetros que se usaron son conocidos [54, 66, 67] y se incluyen en el apéndice A) con dos tiempos de recombinación τ diferentes.

Parámetro	SI-GaAs	LT-GaAs
τ	10 ns	250 fs

Estos dos materiales se combinaron con dos diferentes geometrías, los parámetros de forma y tamaño de las PCA y pulsos de excitación simulados se presentan en la siguiente tabla y hacen referencia a la figura 4.1:

Parámetro	Geometría 1	Geometría 2
$\delta x(\mu m)$	30	10
$\delta y(\mu m)$	30	10
$\delta z(\mu m)$	10	10
Núm. de partículas	500000	500000
Longitud de <i>gap</i>	10 μm	100 nm
ΔV	30 V	3 mV
Duración del pulso (fs)	60	60
λ del pulso (nm)	800	800
FWHM σ del pulso	5 μm	50 nm
Potencia del pulso (μW)	10	0.255

En la geometría 1 el volumen de simulación se dividió en las direcciones x y z en 200 partes y en la dirección y en 300 partes, dando como resultado 12 millones de particiones de $0.15 \times 0.10 \times 0.05 \mu m$. El voltaje externo aplicado de $30 V$, produce un campo eléctrico a lo largo del *gap* $E_{aplicado} = 30 kV/cm$.

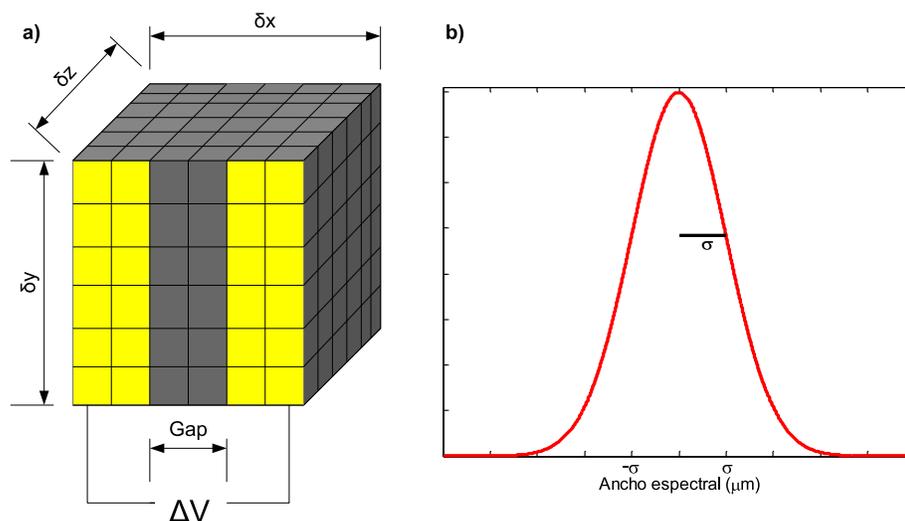


Figura 4.1: a) Representación gráfica del volumen y divisiones de la simulación [46], b) Representación espacial del pulso de excitación.

En la geometría 2 el volumen de simulación se dividió en las direcciones x y z en 200 partes y en la dirección y en 300 partes, dando como resultado 12 millones de particiones de $0.05 \times 0.033 \times 0.05 \mu m$. El voltaje externo aplicado de $3 mV$, produce un campo eléctrico a lo largo del *gap* $E_{aplicado} = 30 kV/cm$ que es igual para ambas geometrías.

Las cuatro combinaciones que resultan de los dos materiales y las dos geometrías son: SI-GaAs ($10 ns$) con *gap* de $10 \mu m$, SI-GaAs($10 ns$) con *gap* de $100 nm$, LT-GaAs ($250 fs$) con *gap* de $10 \mu m$ y LT-GaAs ($250 fs$) con *gap* de $100 nm$.

4.2. Resultados de la simulación.

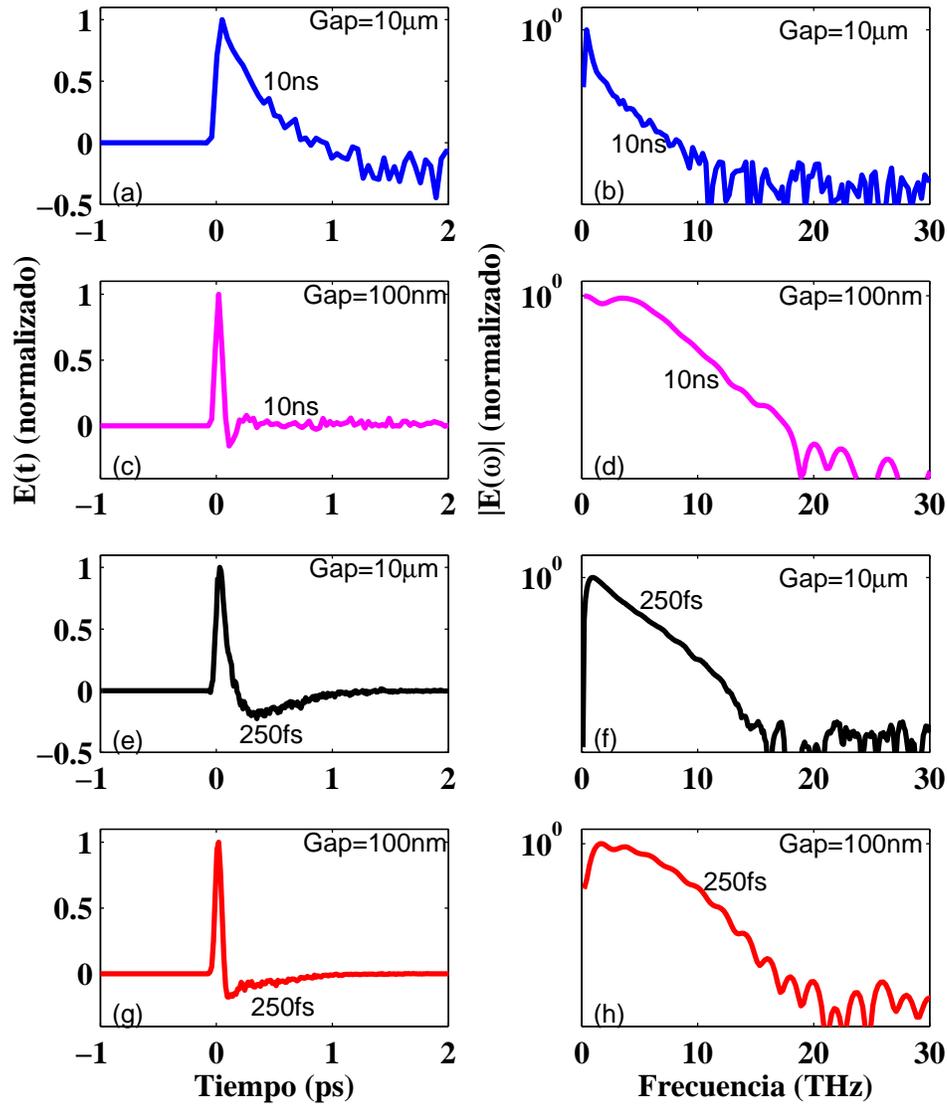


Figura 4.2: (a), (c), (e) y (g) Campo eléctrico de THz en función del tiempo emitido por la PCA. (b), (d), (f) y (h) Campo eléctrico de THz en función de la frecuencia (correspondiente a los mostrados en a, c, e, g) emitido por la PCA. Líneas color azul (paneles (a) y (b) PCA de SI-GaAs con $gap = 10 \mu m$, líneas color magenta (paneles (c) y (d) PCA de SI-GaAs con $gap = 100 nm$, líneas color negro (paneles (e) y (f) PCA de LT-GaAs con $gap = 10 \mu m$ y líneas color rojo (paneles g y h) PCA de LT-GaAs con $gap = 100 nm$.

Los resultados de la emisión de THz de las cuatro simulaciones que se realizaron se muestran en la figura 4.2, donde los paneles (a) y (b) corresponden a una PCA de SI-GaAs con un *gap* de $10\ \mu m$, los paneles (c) y (d) corresponden a una PCA de SI-GaAs con un *gap* de $100\ nm$, los paneles (e) y (f) corresponden a una PCA de LT-GaAs con un *gap* de $10\ \mu m$ y los paneles (g) y (h) corresponden a una PCA de LT-GaAs con un *gap* de $100\ nm$. En los paneles de la izquierda podemos observar la evolución temporal del campo eléctrico de THz emitido por las PCA, mientras que en los paneles de la derecha podemos ver el espectro correspondiente en frecuencia, el cual es obtenido mediante la transformada de Fourier de los campos eléctricos en función del tiempo.

Para aplicaciones de espectroscopía es deseable que los pulsos de THz sean de banda ancha. Ya que sabemos que mientras más corto (en tiempo) es un pulso mayor es su ancho de banda (en frecuencia), para reducir la duración de los pulsos vamos a analizar la contribución de dos factores de la PCA, el tiempo de vida de los portadores (τ) en el material semiconductor, y el tiempo de tránsito de los portadores de carga excitados hacia los contactos (relacionado con el tamaño del *gap*).

En la figura 4.3a) se compara el ancho de banda del pulso de THz emitido por PCA de GaAs con dos τ diferentes $\tau = 10\ ns$ (SI-GaAs) línea de color azul y $\tau = 250\ fs$ (LT-GaAs) línea de color negro pero manteniendo el mismo tamaño de *gap* = $10\ \mu m$, y se observa como el ancho a altura media (FWHM *Full Width Half Maximum*) es mayor con el τ más corto. En la figura 4.3b) se compara el ancho de banda del pulso de THz emitido por PCA con dos tamaños de *gap* diferentes, *gap* = $10\ \mu m$ línea color azul y *gap* = $100\ nm$ línea color magenta, pero ahora manteniendo el τ sin modificar ($\tau = 10\ ns$ SI-GaAs), y se observa como el FWHM es considerablemente mayor con el

gap más pequeño. Con estas dos comparaciones mostramos que el aumento en el ancho de banda del pulso de THz emitido depende del tiempo de vida de los portadores en el semiconductor y del tiempo de tránsito de estos a lo largo del *gap* de la PCA.

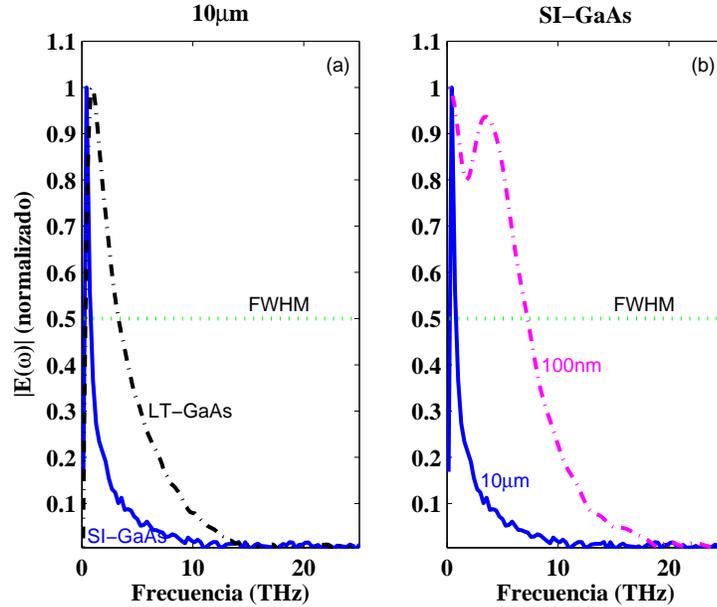


Figura 4.3: Campo eléctrico de THz en función de la frecuencia emitido por: (a) Línea continua (azul) PCA de SI-GaAs con $gap = 10 \mu m$ y línea punto-guión (negra) PCA de LT-GaAs con $gap = 10 \mu m$, (b) línea continua (azul) PCA de SI-GaAs con $gap = 10 \mu m$ y línea punto-guión (magenta) PCA de SI-GaAs con $gap = 100 nm$. La línea punteada (verde) está situada a la mitad de la altura como referencia para comparar FWHM.

El tiempo de tránsito de los portadores de carga a lo largo del *gap* de la PCA está determinado por la distancia entre los contactos y la velocidad de los portadores. Para demostrar que el factor determinante para el ancho del pulso emitido en la figura 4.3b) es el tiempo de tránsito, en las siguientes tres figuras se presenta la contribución de estos dos factores.

En las figuras 4.4 y 4.5 se muestra cómo se va formando el dipolo responsable de la emisión de THz a lo largo del tiempo, para las PCA de SI-GaAs con $gap = 100 nm$ (figura 4.4) y con $gap = 10 \mu m$ (figura 4.5).

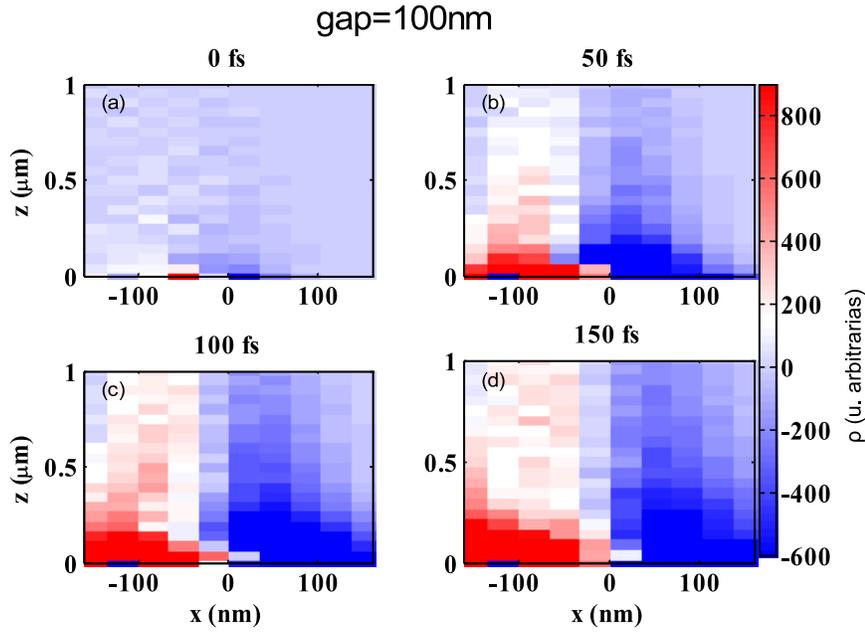


Figura 4.4: Densidad de portadores de carga (rojo con carga positiva y azul con carga negativa) en PCA de SI-GaAs $gap = 100 \text{ nm}$ (a) al momento de la llegada del pulso óptico de excitación, (b) 50 fs después de la excitación, (c) 100 fs después de la excitación y (d) 150 fs después de la excitación.

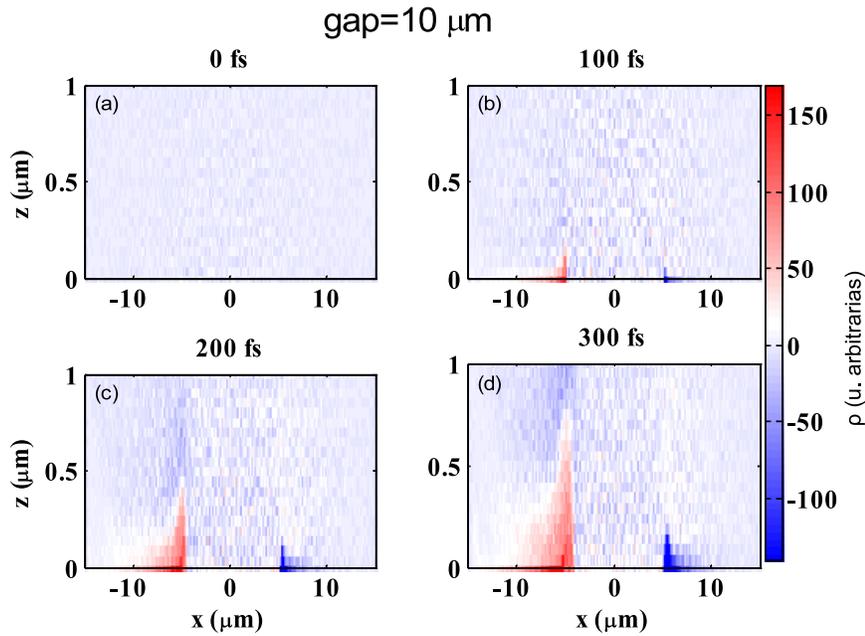


Figura 4.5: Densidad de portadores de carga (rojo con carga positiva y azul con carga negativa) en PCA de SI-GaAs $gap = 10 \mu\text{m}$ (a) al momento de la llegada del pulso óptico de excitación, (b) 100 fs después de la excitación, (c) 200 fs después de la excitación y (d) 300 fs después de la excitación.

En estas figuras se grafica la densidad de carga en el corte xz a diferentes tiempos después de la excitación. Podemos observar en la figura 4.4 que en la PCA con *gap* pequeño el dipolo se forma y mantiene estable en los primeros 100 fs , mientras que en la PCA con *gap* grande (figura 4.5) el dipolo aun continúa formándose después de 200 fs .

Para demostrar que el efecto que se observa en las PCA con *gap* pequeño es producido por el tiempo de tránsito de los portadores a través del *gap*, analizamos la contribución de la velocidad de los portadores mediante su dependencia con el voltaje externo aplicado.

Lo que produce la aceleración de los portadores es el voltaje externo aplicado, así que consideramos como aproximación que la velocidad de los portadores es proporcional al campo eléctrico aplicado entre los contactos de la PCA, de tal forma que se espera que si el ancho de banda depende de la velocidad de los portadores (tiempo de tránsito), entonces si se aumenta el campo eléctrico aplicado también debe aumentar el ancho de banda del pulso emitido. Adicional a las cuatro simulaciones que ya se presentaron, se corrieron una serie de simulaciones con los mismos materiales y tamaños de *gap* anteriores, pero variando el campo eléctrico aplicado entre los contactos de 10 kV/cm a 40 kV/cm en pasos de 5 kV/cm .

En la figura 4.6 se muestra en mapas de color la evolución del espectro de THz emitido, por las PCA con *gap* de 100 nm de (a)LT-GaAs y (b)SI-GaAs, respecto al $E_{aplicado}$. En el eje y de arriba hacia abajo se representa el aumento en el $E_{aplicado}$. La línea punteada amarilla representa aproximadamente el corte a partir del cual lo que se grafica es ruido, para ambos materiales se puede observar que esta línea tiene una pendiente negativa lo cual corresponde a un aumento en el ancho de banda emitido a medida que el $E_{aplicado}$ aumenta.

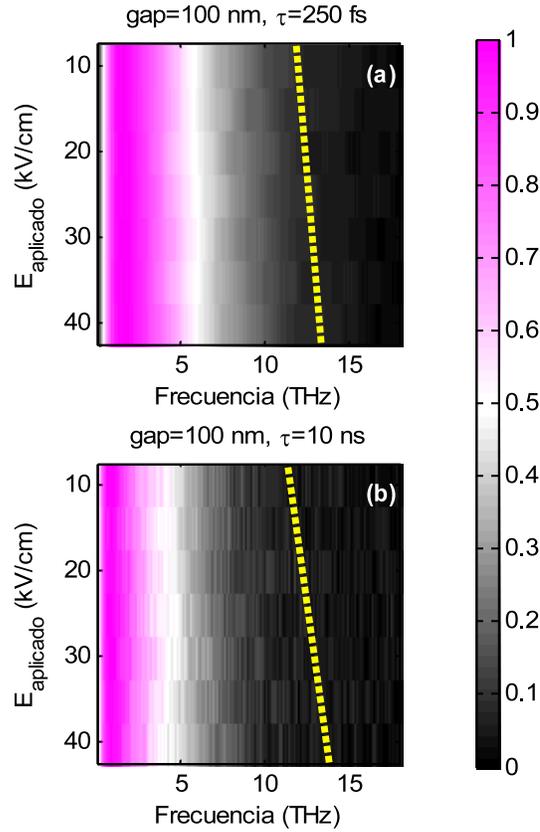


Figura 4.6: Evolución del espectro de THz en función del campo eléctrico aplicado para las PCA $gap = 100\text{ nm}$ a) LT-GaAs y b) SI-GaAs. La línea punteada amarilla muestra aproximadamente donde acaba la señal de THz.

En la figura 4.7 se muestran las curvas de la evolución del FWHM, del pulso de THz emitido, respecto al campo eléctrico aplicado para una PCA de SI-GaAs con un $gap = 10\ \mu\text{m}$ línea azul, para una PCA se LT-GaAs con un $gap = 10\ \mu\text{m}$ línea negra, para una PCA se SI-GaAs con un $gap = 100\ \text{nm}$ línea magenta y para una PCA se LT-GaAs con un $gap = 100\ \text{nm}$ línea roja. Podemos observar como las líneas azul y negra (que corresponden a PCA con gap grande) no presentan aumento en el ancho de banda relacionado al aumento en el campo eléctrico aplicado, mientras que en concordancia con lo observado en la figura 4.6, en las líneas magenta y roja (que corresponden

a las PCA con *gap* pequeño) sí se observa este aumento el cual está más marcado en la PCA de SI-GaAs.

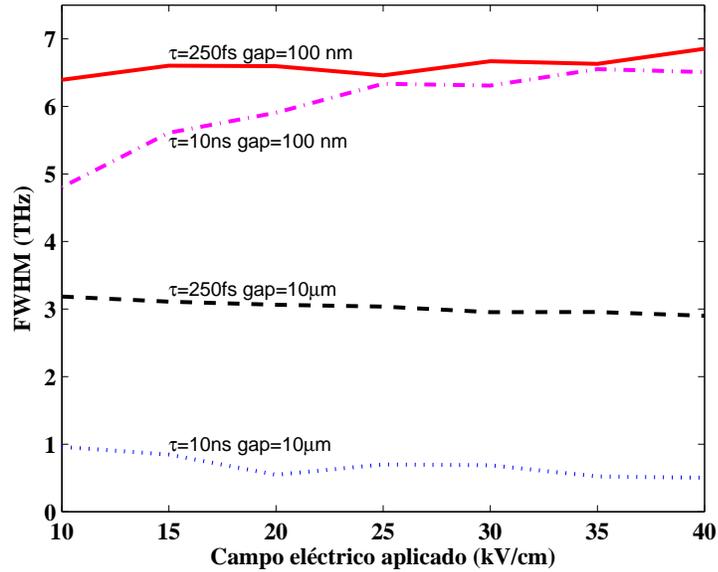


Figura 4.7: FWHM del pulso de THz emitido en función al campo eléctrico aplicado para PCA con *gap* = 10 μm SI-GaAs (línea punteada azul) y LT-GaAs (línea de guiones negra), y con *gap* = 100 nm SI-GaAs (línea punto-guion magenta) y LT-GaAs (línea continua roja).

Con los resultados de las simulaciones mostrados en este capítulo podemos concluir que cuando se aplican voltajes grandes, en las PCA con *gap* grande (10 μm) el factor dominante en el aumento del FWHM del pulso emitido es el tiempo de vida de los portadores de carga (ya que no se observa aumento en el FWHM al aumentar el campo eléctrico aplicado), mientras que en las PCA con *gap* pequeño (100 nm) el factor dominante es el tiempo de tránsito de los portadores a través del *gap*. De esta manera demostramos teóricamente que un *gap* de 100 nm es lo suficientemente pequeño para sustituir LT-GaAs por SI-GaAs con una emisión de THz con un ancho de banda comparable.

Capítulo 5

Simulación de la emisión de THz en campo cercano de InGaAs.

En este capítulo se simula la emisión de THz en la superficie de InGaAs. Utilizando el modelo de Monte-Carlo (descrito en la sección 3.1) se simula la dinámica de portadores después de fotoexcitar una superficie de InGaAs con un pulso de 800 nm (con distribución espacial gaussiana en una dimensión y en forma de escalón en la otra). Posteriormente con el método de FDTD (sección 3.2) se analiza la emisión de THz en campo cercano producto de esta dinámica de portadores. Como resultado de esta simulación obtuvimos que tanto la fotocorriente paralela como la normal a la superficie del semiconductor toman parte en la emisión de THz. Además encontramos que la emisión está dominada por el movimiento balístico de los portadores posterior a la fotoexcitación.

La emisión de THz de superficie en semiconductores sin un voltaje externo aplicado, era asociada únicamente con la fotocorriente cuyo vector de

dirección es perpendicular a la superficie del semiconductor (efecto *photo-Dember* y campo de superficie) considerando despreciable la contribución de la fotocorriente cuyo vector de dirección es paralelo a la superficie (efecto *photo-Dember lateral* [49]) [51, 68–70]. Sin embargo en experimentos recientes se ha detectado la emisión de THz debido a la fotocorriente paralela a la superficie, como los resultados reportados en las referencias [69, 71, 72] donde se aplicó fotoexcitación con bordes pronunciados (cubriendo la mitad del *spot* del pulso de excitación o mediante máscaras metálicas sobre el semiconductor). La dinámica de portadores que produce esta emisión de THz aún no está completamente entendida, por lo que en este trabajo hacemos la simulación computacional para reproducir los resultados del experimento presentado en la referencia [72].

5.1. Experimento de Mueckstein *et al.*

El experimento que Mueckstein *et al.* realizaron consistió en fotoexcitar una superficie de Arseniuro de Galio Indio con dopantes de hierro (Fe:InGaAs) a incidencia normal con un haz de pulsos (centrados a 800 nm) con un diámetro grande (FWHM=85 mm), el cual hicieron pasar a través de una apertura estrecha (de distancia variable d de 100 a 400 μm) como se ilustra en la figura 5.1a. Con esto crearon un región de excitación en forma de franja (doble escalon con bordes abruptos). La superficie de Fe:InGaAs fue crecida sobre un sustrato de InP de 30 μm de espesor y por el otro lado fijada a una placa de zafiro transparente.

La emisión de THz en campo cercano producto de esta fotexcitación la detectaron con un dispositivo como el que se esquematiza en la figura 5.1b. Éste consiste en una pieza de GaAs, a la cual se le crece sobre una de sus

caras una capa de LT-GaAs en la cual se depositan una PCA y sobre la otra cara se deposita un película metálica a la que se le deja una abertura cuadrada ($a=10\ \mu\text{m}$) por la que entra el campo eléctrico de THz [73].

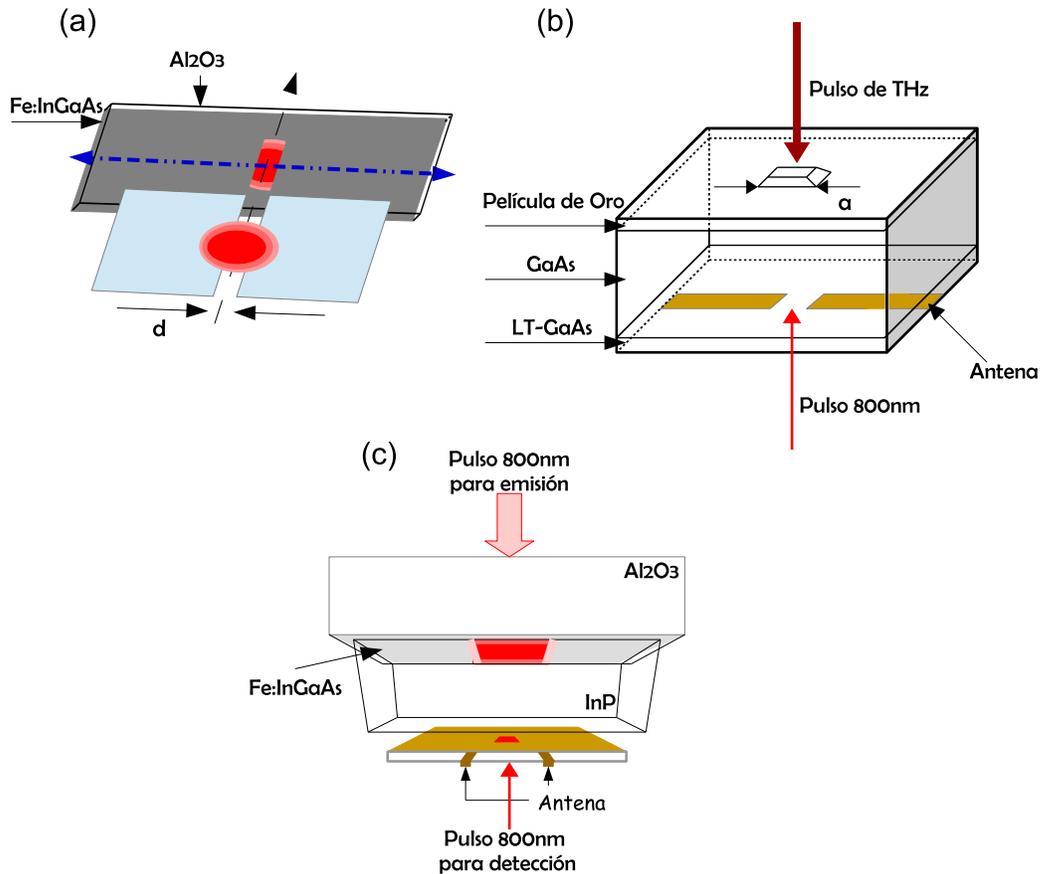


Figura 5.1: (a) Ilustración de la manera en la que se obtiene la forma de doble escalón para la excitación, la línea azul punteada muestra la dirección en la que se desliza la abertura que genera el doble escalón para mapear espacialmente la señal de THz en el experimento [72]. (b) Esquema del detector con apertura para campo cercano que se emplea en el experimento [73]. (c) Esquema del ensamble de emisión y detección del experimento [72].

Para generar mapas en el espacio-tiempo de los pulsos de THz generados deslizaron la franja de excitación respecto de la posición del detector (sobre la dirección de la línea azul punteada de la figura 5.1a) y registraron la evolución temporal del pulso para cada posición.

La apertura del detector permite detectar las componentes paralela y perpendicular a la superficie del campo eléctrico en la región de campo cercano con resolución espacial mucho menor a la longitud de onda. Para entender el efecto de la dirección de la fotocorriente en el mapa obtenido por el detector de campo cercano, también hicieron el experimento con una región de excitación sin los bordes abruptos, en la cual la radiación de THz se deba únicamente a la fotocorriente normal a la superficie [72].

Considerando que la emisión de THz, en la superficie fotoexcitada con un gradiente en la iluminación, es producto de dos dipolos (paralelo y perpendicular a la superficie); al realizar el experimento esperaban que la radiación del dipolo orientado en el plano de la superficie se acoplara dentro del detector de una manera más eficiente si el dipolo estaba alineado con el centro de la apertura. Por otra parte la radiación del dipolo orientado perpendicular a la superficie se acoplaría mejor dentro del detector solo si el dipolo estuviera posicionado a la izquierda o a la derecha del centro de la apertura. Por lo tanto esperaban rasgos diferentes de las dos direcciones ortogonales de las fotocorrientes [72].

El hecho de utilizar este detector y la manera en la que adquirieron los datos significa que, las señales (S_y y S_z) que se detectan son derivadas del campo eléctrico de THz emitido, en el caso de la componente E_y es la derivada temporal [74] y en el caso de la componente E_z se detecta una derivada espacial [75].

Para entender mejor los resultados experimentales que obtuvieron, además en el artículo presentan resultados de una simulación numérica obtenida con el software comercial (CST Microwave Studio). En ella simulan el campo radiado y el campo detectado por el detector de campo cercano generados para dos diferentes distribuciones de fotocorrientes ideales (normal y paralela a la

superficie). En el caso de la corriente normal, la amplitud de la corriente es constante dentro de la región iluminada y disminuye suavemente a cero, de manera similar a la medición experimental del perfil de intensidad que realizan para el experimento. Para la fotocorriente en el plano, asumieron que la amplitud de la corriente varía a lo largo del eje x siguiendo una función gaussiana con FWHM de $40 \mu m$. Sin embargo un modelo riguroso del proceso de emisión está fuera del alcance de su estudio [72].

Las conclusiones a las que Mueckstein *et al.* llegan son: Los resultados experimentales muestran una correlación directa entre la onda emitida y las regiones de con un gradiente en la densidad de portadores de carga fotoexcitados en el plano de la superficie; La radiación de THz generada de esta configuración tiene contribución tanto de la fotocorriente normal a la superficie, como de la paralela a ésta; Los resultados sugieren que el modelo comúnmente aceptado que liga el proceso de generación de pulsos de THz con la fotocorriente transiente normal a la superficie necesita ser redefinido y sugieren que el efecto *foto-Dember* lateral es el que lidera la generación de pulsos de THz en semiconductores como Fe:InGaAs, InGaAs y SI-GaAs; La excitación óptica de InGaAs a incidencia normal produce una onda de THz con amplitud similar a la obtenida al ángulo óptimo de excitación [72].

5.2. Simulación de Monte-Carlo.

5.2.1. Modificaciones y parámetros.

En el capítulo 3 se describe la simulación de Monte-Carlo que utilizamos tanto en el capítulo 4 como en éste. Sin embargo en este capítulo removimos los contactos metálicos de la superficie del semiconductor (figura 5.2a) y

modificamos la geometría del haz de excitación para que tenga forma de un doble escalón cuadrado, con caídas abruptas en los bordes (5.2b).

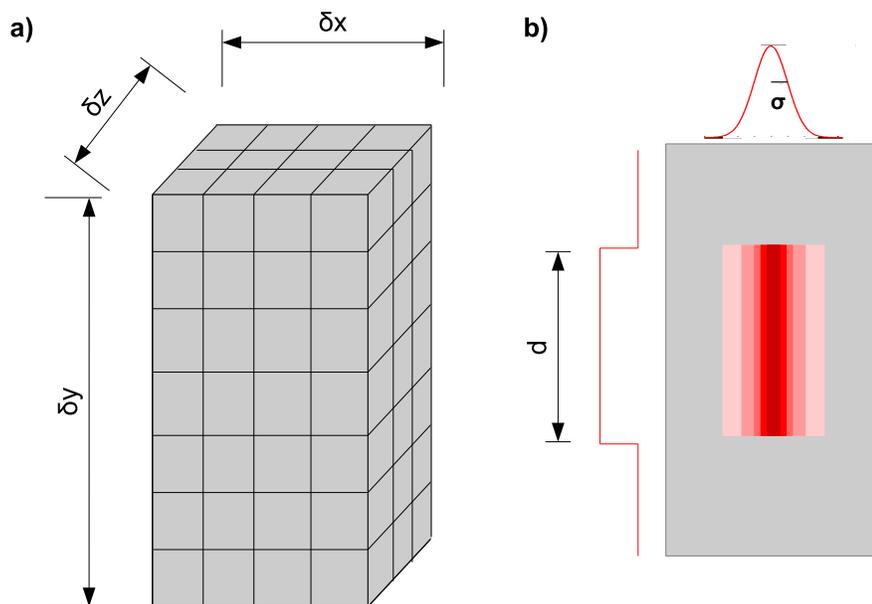


Figura 5.2: a) Representación gráfica del volumen y divisiones de la simulación [46], b) Representación espacial del pulso de excitación.

El material semiconductor que se utilizó para las simulaciones fue InGaAs (los parámetros del material se incluyen en el apéndice A). Los parámetros de forma y tamaño del semiconductor y pulso de excitación simulados se presentan en la siguiente tabla y hacen referencia a la figura 5.2:

Parámetro	
$\delta x(\mu m)$	150
$\delta y(\mu m)$	300
$\delta z(\mu m)$	30
Núm. de partículas	10,000,000
Duración del pulso (fs)	50
λ del pulso (nm)	800
Potencia del pulso (mW)	2.5

El volumen total de simulación se dividió en la dirección x en 150 partes, en la dirección y en 300 partes y en la dirección z en 40 partes, dando como resultado 1'800,000 particiones de $1 \times 1 \times 0.75 \mu m$. El pulso óptico simulado para generar los pares electrón hueco, es un pulso con distribución gaussiana en la dirección x ($\sigma = 30 \mu m$) y con una distribución en forma de escalón con una longitud $d = 200 \mu m$ (figura 5.2b).

5.2.2. Resultados.

De la simulación de Monte-Carlo se obtiene la radiación de THz en campo lejano y se registra la densidad de carga en cada paso de tiempo, para posteriormente analizar la emisión de THz en campo cercano que es la que se busca en este estudio.

En la figura 5.3 se muestra la densidad de carga(ρ) en los cortes xy y yz 50 fs (figura 5.3 (a),(b) y (c)) antes de la llegada del pulso de excitación y 10 fs (figura 5.3 (d),(e) y (f)) y 50 fs (5.3 (g),(h) e (i)) después de la llegada del pulso de excitación. En las subfiguras 5.3 (b),(c),(e),(f),(h),(i) (que corresponden al plano yz donde el perfil de excitación tiene forma de escalón) se puede observar la formación del dipolo en el tiempo debido a las fotocorrientes (figura 5.3 flechas rojas y azules) normales a la superficie del semiconductor y del dipolo debido a las fotocorrientes (figura 5.3 flechas rojas y azules) paralelas a la superficie del semiconductor, este último se presenta justo en los bordes del pulso de excitación.

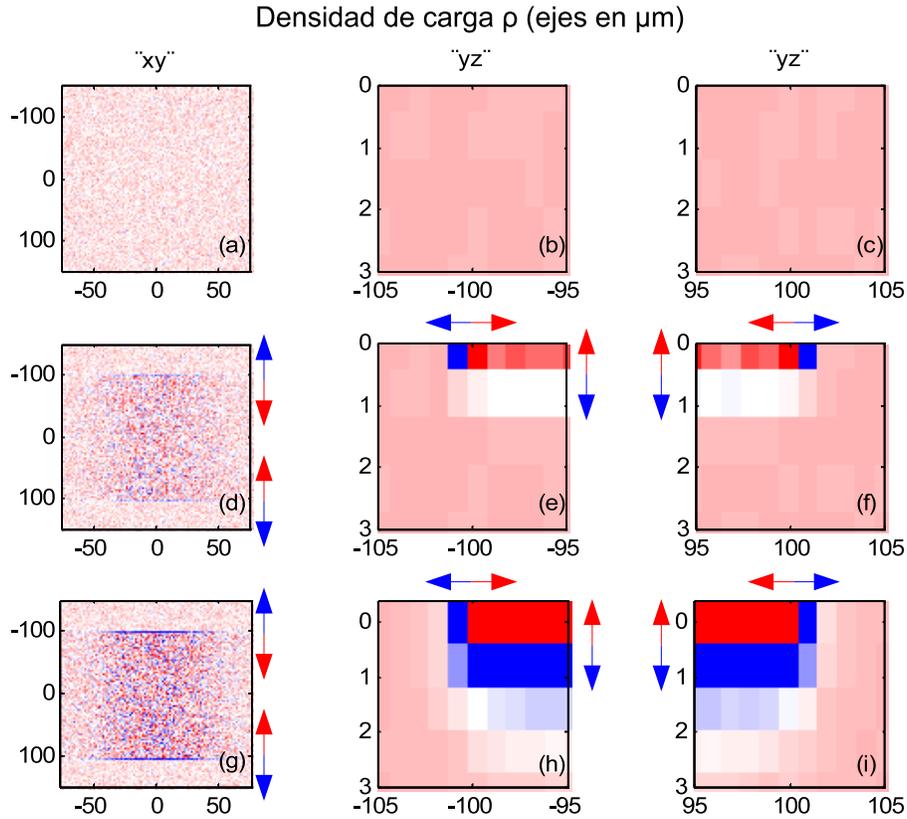


Figura 5.3: Densidad de portadores de carga (ρ) en diferentes tiempos y cortes. Los paneles de arriba a 50 fs antes de la llegada del pulso de excitación. Los paneles de en medio a 10 fs después de la llegada del pulso de excitación. Los paneles de abajo a 50 fs después de la llegada del pulso de excitación. (a), (d) y (g) Corresponden al corte xy . (b), (e) y (h) corresponden al borde izquierdo de la excitación en el corte yz . (c), (f) y (i) Corresponden al borde derecho de la excitación en el corte yz . Las flechas rojas y azules muestran la dirección de las fotocorrientes.

5.3. Ecuación de continuidad electromagnética

Para el estudio de emisión de THz en campo cercano se tomó como dato de salida de la simulación de Monte-Carlo la evolución temporal de la densidad de carga (ρ) en el corte yz (figura 3.5). Para convertir ρ en densidad de

corriente (\mathbf{J}), se usó la ecuación de continuidad electromagnética [65]

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (5.1)$$

Se aplicó el rotacional a la ecuación 5.1 y se obtuvo la ecuación 5.2. Para obtener la densidad de corriente (\mathbf{J}) es necesario resolver la ecuación de Poisson en cada intervalo de tiempo

$$\nabla^2 J = \nabla \times \left(-\frac{\partial \rho}{\partial t}\right). \quad (5.2)$$

La ecuación 5.2 se resolvió en su forma discreta [76] en dos dimensiones (ecuaciones 5.3 y 5.4) usando el método de diferencias finitas.

$$\frac{\partial^2 J}{\partial y^2} = \frac{J_{j+1,k} - 2J_{j,k} + J_{j-1,k}}{h^2} \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial^2 J}{\partial z^2} = \frac{J_{j,k+1} - 2J_{j,k} + J_{j,k-1}}{h^2} \quad (5.4)$$

donde $h = \Delta y = \Delta z$.

5.4. Simulación FDTD.

Una vez obtenida la densidad de corriente (\mathbf{J}). Ésta se usó como entrada en la rutina FDTD, para la obtención de los campos emitidos de THz (B_{THz} y E_{THz}) en campo cercano.

Los resultados de las simulaciones se compararon con resultados experimentales reportados en la referencia [72]. Para poder comparar los resultados del experimento con nuestras simulaciones, posterior al cálculo con FDTD de los campos de THz emitidos se calcula la derivada temporal de la compo-

nente en E_y y la derivada espacial de la componente E_z . Estimamos la señal de campo cercano detectado directamente de los campos E_y y E_z simulados mediante las siguientes expresiones [77]:

$$S_y(t, y) \propto a \frac{n}{c} \frac{\partial E_y(t, y)}{\partial t}, \quad (5.5)$$

$$S_z(t, y) \propto a \frac{\partial E_z(t, y)}{\partial y}, \quad (5.6)$$

donde a es el tamaño de la apertura del detector experimental, c es la velocidad de la luz y n es el índice de refracción del medio de propagación (aire).

5.4.1. Parámetros.

En la figura 5.3 se graficaron las ρ de los tres cortes principales en tres tiempos distintos. Las J que se calcularon para usar como datos de entrada en el FDTD son las que provienen de las ρ del corte yz de cada femtosegundo desde 50 fs antes de la llegada del pulso de excitación hasta 1.5 ps después de la llegada del pulso.

Los valores constantes utilizados en el FDTD son:

Parámetro	
c (m/s)	2.9979×10^8
μ_0	1.2566×10^{-6}
ϵ_0	8.8543×10^{-12}
dy (μm)	1
dz (μm)	0.75
dt (fs)	2

Los valores constantes utilizados en el cálculo de las derivadas espacial y temporal de las componentes del campo de THz emitido:

Parámetro	
dy (μm)	1
dt ($f s$)	2
a (μm)	10
c (m/s)	3×10^8
n	1

5.4.2. Resultados.

Los resultados teóricos obtenidos de estas simulaciones se compararon con resultados experimentales que se habían obtenido anteriormente y que no habían sido completamente entendidos. Para hacer estas comparaciones no se utilizaron parámetros de ajuste a fin de reproducir los resultados experimentales. En las gráficas los campos se presentan en unidades arbitrarias, sin embargo estas unidades arbitrarias son consistentes para todos los campos eléctricos reportados en este capítulo (es decir son las mismas unidades arbitrarias). Lo mismo se hizo con las unidades arbitrarias usadas para las señales las cuales también son consistentes entre sí.

En la figura 5.4 se muestran los resultados de la simulación FDTD de la componente E_y del campo de THz emitido a una distancia de $30 \mu m$ entre la superficie de InGaAs y el detector. Se observa el campo E_y producido por cada una de las componentes de J (J_y fig. 5.4 b y J_z fig. 5.4 c) y la resultante de ambas componentes (J fig. 5.4 a)

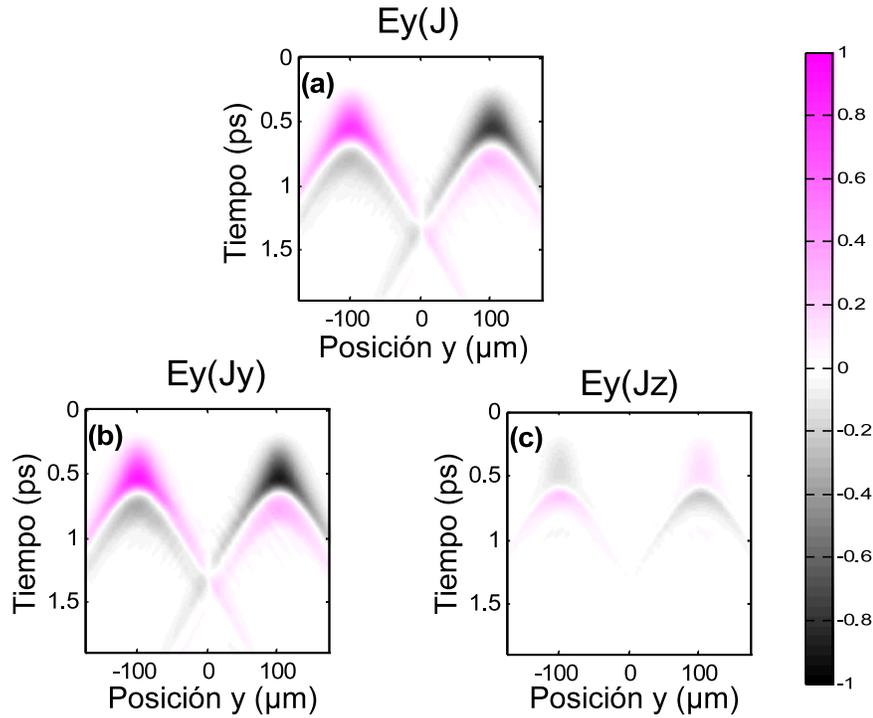


Figura 5.4: Campo eléctrico obtenido de la simulación por FDTD como función del tiempo y la posición. a) Es la componente E_y producida por la J completa. b) Es la componente E_y producida únicamente por la componente J_y . c) Es la componente E_y producida únicamente por la componente J_z .

En la figura 5.5 se muestran los resultados de la simulación FDTD de la componente E_z del campo de THz emitido a una distancia de $30 \mu\text{m}$ entre la superficie de InGaAs y el detector. Se observa el campo E_z producido por cada una de las componentes de J (J_y fig. 5.5 b y J_z fig. 5.5 c) y la resultante de ambas componentes (J fig. 5.5 a)

Como se esperaba, el campo eléctrico con polarización paralela a la superficie es producido mayormente por la fotocorriente paralela a la superficie (fig. 5.4 b), y el campo eléctrico con polarización normal a la superficie es producido mayormente por la fotocorriente normal a la superficie también (fig. 5.5 c), sin embargo en las figuras 5.4 c y 5.5 b se ve que hay una contribución relativamente pequeña pero diferente de cero de términos cruzados.

Tanto la corriente paralela como la normal a la superficie producen campos de THz con amplitudes comparables.

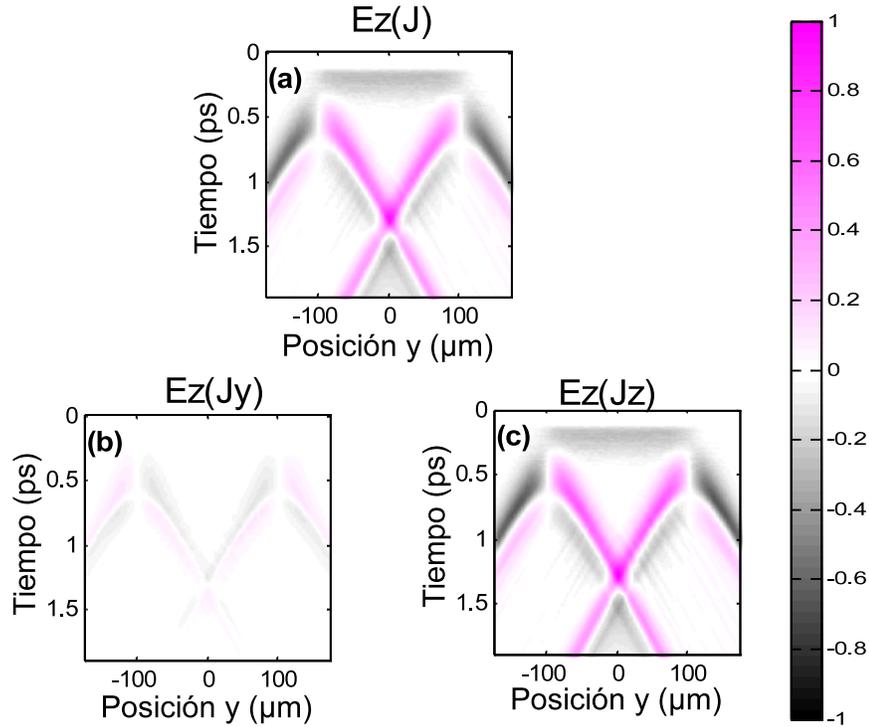


Figura 5.5: Campo eléctrico obtenido de la simulación por FDTD como función del tiempo y la posición. a) Es la componente E_z producida por la J completa. b) Es la componente E_z producida únicamente por la componente J_y . c) Es la componente E_z producida únicamente por la componente J_z .

Para poder hacer la comparación de las simulaciones con los resultados experimentales, se usaron los resultados del FDTD para resolver las ecuaciones 5.5 y 5.5 y así obtener las componentes S_y y S_z de la señal S que fue la que se comparó con la señal detectada experimentalmente. S se calcula en función de la posición del detector para InGaAs iluminado por una franja de luz de $200 \mu\text{m}$ de ancho a incidencia normal. En la figura 5.6 (a) y (b) se muestran las señales S_y y S_z respectivamente, aunque los mapas de color de S_y y S_z son similares, pueden distinguirse algunas diferencias como que: en

la señal detectada debido al campo S_z las “v” invertidas son más largas y varían más lento en el tiempo comparado con las de S_y .

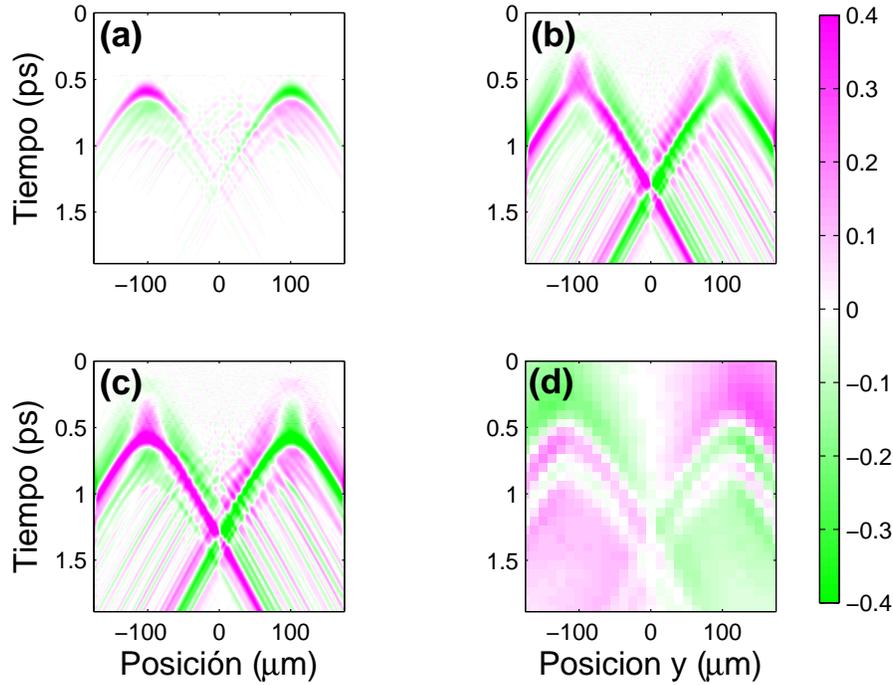


Figura 5.6: Mapa de color de la señal (simulada y experimental) como función del tiempo y la posición. a) Es la componente S_y producida únicamente por la corriente J_y . b) Es la componente S_z producida por la componente J_z . c) Es la señal producida por la corriente completa J . d) Es el resultado experimental

En la figura 5.6 (c) se grafica la resultante de estas dos componentes $S = S_y + S_z$ y en la figura 5.6 (d) se muestran los resultados experimentales, se puede observar en los mapas de color que la simulación numérica de la señal detectada concuerda notablemente con la señal experimental.

Después de comparar las señales emitidas (simulación y experimento) en el área completa del corte yz (fig. 5.6), seleccionamos la posición en y donde la señal es más fuerte ($y = 99 \mu m$), que es cerca de uno de los bordes de la excitación óptica y graficamos la forma de onda a través del tiempo (fig. 5.7a) y sus respectivos espectros en frecuencia (fig. 5.7b). Hicimos esto para las dos componentes de la señal S_y (línea continua verde) y S_z (línea punteada

roja) a fin de analizar sus contribuciones en la señal total S . Las formas de onda muestran más claramente que la componente S_z varía más lento en el tiempo comparada con la componente S_y . Debido a este comportamiento se observa que el pico espectral se encuentra a una frecuencia diferente para cada componente, $0.26 THz$ en el caso de S_z y $0.38 THz$ en el caso de S_y .

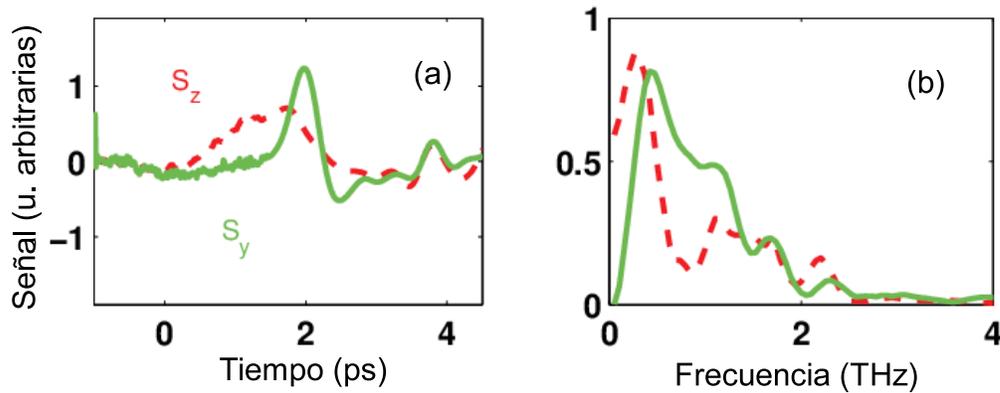


Figura 5.7: a) Evolución temporal de la forma (en uno de los bordes de la excitación óptica $y = 99 \mu m$) de las componentes de la señal simuladas S_y (línea continua verde) y S_z (línea punteada roja). b) Componentes de la señal como función de la frecuencia que corresponden a las curvas graficadas en a) respectivamente.

En la región entre $0.5 THz$ y $0.9 THz$ se observa una caída relativamente rápida de la amplitud del campo emitido debido a la corriente normal a la superficie (S_z). Sin embargo, tras presentar un mínimo en $0.9 THz$ sube y se mantiene en la región de $1 THz$ a $2 THz$, donde cae nuevamente. Mientras que la amplitud del campo emitido debido a la corriente paralela a la superficie (S_y) tiene una contribución despreciable para frecuencias menores a $0.2 THz$, sin embargo, a frecuencias entre $0.6 THz$ y $1.5 THz$ esta componente presenta la contribución dominante y en la región entre $2 THz$ y $4 THz$ nuevamente se encuentra por debajo de la amplitud de S_z , aunque cabe señalar que ambas componentes desaparecen eventualmente alrededor

de $2.5 THz$. De estos comportamientos podemos concluir que: la contribución dominante a bajas ($300 GHz$) frecuencias de la señal total emitida proviene de la corriente normal a la superficie (J_z), mientras que en la región intermedia, entre $0.6 THz$ y $1.5 THz$ domina la contribución de la corriente paralela a la superficie (J_y) y a altas ($1.5 THz$) frecuencias la señal es producto de la combinación de ambas corrientes.

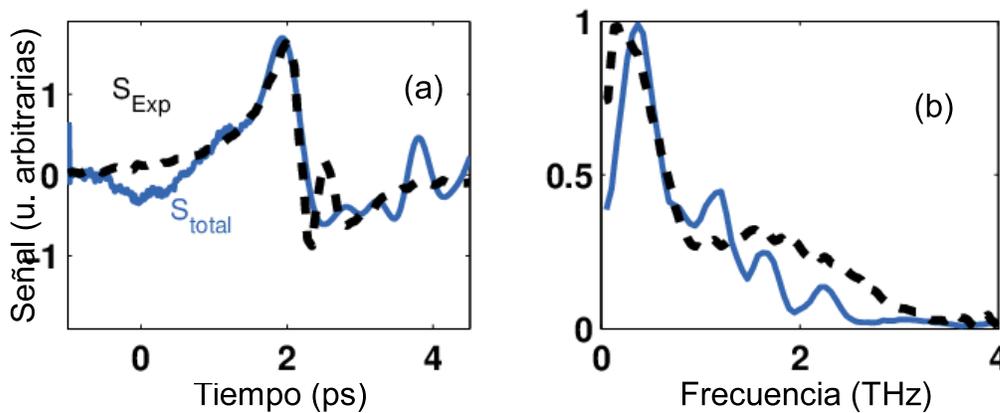


Figura 5.8: a) Evolución temporal de la forma (en uno de los bordes de la excitación óptica $y = 99 \mu m$) de la señal total S_{total} (línea continua azul) y de la señal experimental S_{Exp} (línea punteada negra). b) Señal como función de la frecuencia que corresponden a las curvas graficadas en a) respectivamente.

En la figura 5.8 se muestra con línea continua azul, la forma de onda simulada de la señal producto de la J completa ($S = S_y + S_z$) y se compara con la forma de onda de la señal detectada experimentalmente (S_{Exp}), la cual se presenta con una línea punteada negra. La duración y forma en general de los pulsos (fig. 5.8a), tanto como su espectro (fig. 5.8b), son similares. A pesar de que el espectro simulado muestra claras ondulaciones mientras que el espectro experimental es liso, los dos espectros muestran su máximo en la región de $300 GHz$ seguido por una caída rápida en la región de $500 GHz$ y en la región de $1 THz$ a $2 THz$ un incremento.

En los mapas de color de la figura 5.9 se muestra la evolución temporal

de los espectros de las formas de onda (espectrogramas). Estos se obtuvieron aplicando a las formas de onda en función del tiempo un filtro gaussiano de 0.8 ps FWHM (elegido de una duración más corta que el pulso de THz para poder analizar contribuciones por secciones, pero lo suficientemente larga para no introducir ruido) y calculando su transformada de Fourier. Los dos primeros mapas de color son los espectrogramas de las componentes de la señal simulada S_y y S_z (5.9a y b) respectivamente y el tercero corresponde al de la señal producida por la corriente J completa S_{total} (5.9a y b).

Analizando la evolución de los espectros notamos que el pico principal del espectro debajo de $1 THz$ es causado por la aceleración inicial de los portadores en ambas direcciones (y y z), la cual cualitativamente no depende mucho de las condiciones precisas de la dinámica de portadores. Por otro lado lo que produce el incremento moderado en la señal en la región entre 1 y $4 THz$ son oscilaciones más sutiles que provienen desde el momento de la excitación ($t=0$) en adelante, estas oscilaciones son más susceptibles a las condiciones del movimiento de los portadores, particularmente a la densidad de portadores. Como el FDTD fue alimentado por la información de un solo corte bidimensional (yz en $x = 0$) los cálculos presentados corresponden a una densidad de portadores específica, mientras que la medición experimental incluye la contribución de la radiación emitida en diferentes posiciones de x , las cuales tienen diferentes densidades de portadores. Tras realizar simulaciones para varios valores de densidad de portadores inyectados, concluimos que esta es la razón por la cual mientras que la simulación presenta ondulaciones el experimento muestra una distribución ancha y continua entre $1 THz$ y $2.5 THz$.

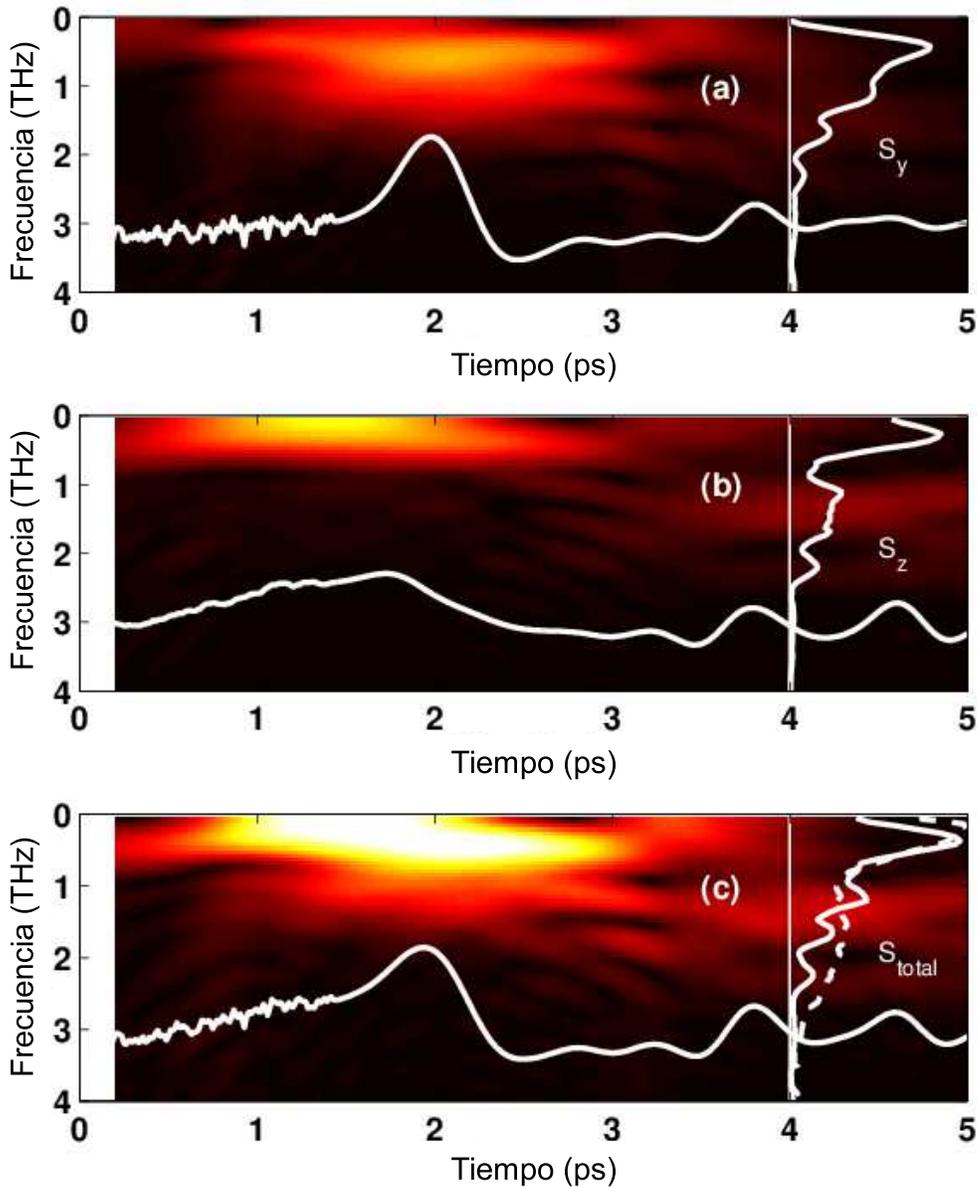


Figura 5.9: Espectrogramas de la forma de onda de a) la componente S_y , b) la componente S_z y c) la señal completa (S_{total}). Las líneas blancas en la parte inferior de cada espectrograma son de la forma de onda correspondiente, las cuales se graficaron como referencia, mientras que las que están hacia el lado derecho son del espectro de la forma de onda completa graficada en la parte inferior. La línea blanca punteada en c) corresponde al espectro de la señal experimental.

Adicional a las simulaciones ya mencionadas se repitieron los casos simulados pero sin considerar el *scattering* producto de las colisiones portador-portador, las cuales arrojaron resultados con diferencias marginales en el espectro al compararlas con las que sí consideran este mecanismo de *scattering*. Esto sugiere que la mayor contribución en la formación del dipolo responsable de la emisión de THz, proviene de la velocidad con la que se fotoinyectan inicialmente los portadores y de su posterior transporte balístico no del difusivo.

Capítulo 6

Conclusiones.

En el capítulo 2 se hizo una breve introducción a la radiación en THz, los métodos para su emisión y detección [2] y algunas de sus aplicaciones [3]. En el capítulo 3 se explicaron los métodos de simulación que se utilizaron para la obtención de los resultados presentados en esta tesis.

En el capítulo 4 se presentaron resultados teóricos de PCA de SI-GaAs y LT-GaAs, donde haciendo el *gap* de una PCA de SI-GaAs lo suficientemente pequeño ($\sim 100\text{ nm}$) se obtiene una emisión de THz comparable con la obtenida por la misma PCA hecha de LT-GaAs, demostrando que, en distancias de *gap* de ese orden de magnitud el tiempo de tránsito de los portadores de carga es el mecanismo dominante que limita la duración de la emisión de THz [46], por encima del tiempo de vida de los portadores de carga en el semiconductor, que es la mayor diferencia entre estos dos materiales.

Demostrar que el tiempo de tránsito de los portadores a través del *gap* de una PCA de SI-GaAs del orden de $\sim 100\text{ nm}$, permite emitir pulsos de THz con un ancho de banda comparable al emitido por una PCA de LT-GaAs, potencialmente permite reducir los costos y tiempos de fabricación de las PCA emisoras de THz.

En el capítulo 5, mediante la simulación Monte-Carlo de la dinámica de portadores y de la emisión electromagnética FDTD de THz, se demuestra que la contribución de la fotocorriente generada en el plano de la superficie de InGaAs [78] en la emisión de THz, cuando la excitación presenta un borde, no es despreciable. Encontramos que las componentes de bajas (300 GHz) frecuencias del espectro radiado son causadas por la fotocorriente normal a la superficie, mientras que las componentes a frecuencias intermedias ($0.6\text{--}1.5\text{ THz}$) tienen una contribución más significativa de la fotocorriente en el plano de la superficie del semiconductor y que las altas frecuencias (1.5 THz) son una combinación de las contribuciones de ambas fotocorrientes.

De manera adicional, al comparar los resultados de las simulaciones considerando el *scattering* debido a las colisiones entre portadores y sin considerar dicho *scattering* se presentan indicios de que la radiación de THz en la superficie de InGaAs es producto del movimiento balístico de los portadores y no del difusivo.

La simulación numérica muestra que: la radiación de THz proviene de dipolos transitorio que se forman, tanto en dirección perpendicular como paralela a la superficie del semiconductor, inmediatamente después de la excitación óptica y que estos son causado por las diferentes velocidades iniciales de electrones y huecos fotoexcitados.

6.1. Trabajo futuro.

El trabajo presentado en esta tesis corresponde a resultados teóricos de simulaciones computacionales. Por tal motivo como trabajo futuro existe el reto de aplicar los descubrimientos obtenidos a trabajo experimental que

resulte en aplicaciones prácticas en mejora e innovación de la optoelectrónica de THz.

Actualmente se ha trabajado mucho en el desarrollo de PCA con contactos nanoestructurados en diferentes geometrías que han mejorado la emisión de THz de LT-GaAs [79–81]. Sin embargo los resultados presentados en el capítulo 4 abren la puerta al estudio de este tipo de nanoestructuras en antenas de SI-GaAs, lo que potencialmente bajaría el costo y tiempo de producción de dichos dispositivos.

Respecto a los resultados presentados en el capítulo 5, existe el reto de comprobar con más simulaciones que el movimiento de los portadores responsable de la generación de THz de superficie es el balístico y no el difusivo. Además en la práctica buscar el aprovechamiento de la emisión de THz de las corrientes laterales aun en campo lejano, encontrando un ángulo adecuado de excitación y emisión.

Apéndice A

Parámetros de GaAs e InGaAs.

Parámetros utilizados en las simulaciones de Monte-Carlo [54, 66, 67]

Parámetro	<i>GaAs</i>	<i>In_{0.53}Ga_{0.47}As</i>
Valle Γ <i>Bandgap</i> E_{Γ} (eV)	1.42	0.74
Valle L espacio $E_{L-\Gamma}$ (eV)	0.29	0.46
Valle χ espacio $E_{\chi-\Gamma}$ (eV)	0.48	0.59
Masa efectiva valle Γ (m_{Γ}^*)	0.063	0.041
Masa efectiva valle L (m_L^*)	0.85	0.29
Masa efectiva valle χ (m_{χ}^*)	0.85	0.68
Masa efectiva huecos pesados (m_{hh}^*)	0.51	0.363
Energía LO fonón valle Γ (meV)	36	34
Energía TO fonón valle L (meV)	30	30
Velocidad del sonido (ms^{-1})	5240	4253
Densidad de masa (kgm^{-3})	5360	5500
Constantes dieléctricas: estática, de alta frecuencia ($\epsilon_s, \epsilon_{\infty}$)	12.95, 10.89	13.82, 11.6
Coefficiente de absorción α (μm^{-1}) [$\lambda = 800 nm$]	1.2	3.85

Apéndice B

Ejemplo de archivo de entrada de parámetros a la simulación Monte-Carlo

```
/* Environmental parameters _____*/  
bfield= 0.000000e + 000; /* in Tesla */  
temperature= 3.000000e + 002; /* in Kelvin */  
/* Laser parameters _____*/  
wavelength= 8.000000e+002; /* laser wavelength in nm */  
laserPulseWidth= 5.000000e-014; /* laser pulse width (in s) */  
sigmax= 5.000000e-008; /* (m) excitation spot sigma */  
/* of gaussian */  
/* (sigma=FWHM/2) in TM orientat*/  
sigmay= 5.000000e-008; /* (m) excitation spot sigma*/  
/* of gaussian */  
/* (sigma=FWHM/2) in TE orientat*/  
reprate= 7.500000e+007; /* Hz */
```

```
laserpower= 2.550000e-007; /* Watts */
/* Emitter parameters _____*/
Vpcs= 3.000000e-001 /* 0=surface field only, i= for PCS*/
yoffset= -1.000000e-007; /* laser spot offset (usually 0)*/
/* Receiver parameters _____*/
/* Simulation setup _____*/
t0= 4.000000e-012; /* time offset of pulse (in s) */
maxTime= 1.000000e-011; /* maximum time */
dt= 1.000000e-015; /* width of time slice */
NPARTICLES= 500000 /* number of particles calculated*/
THICKNESS= 1.000000e-005 /* depth of simulation volume */
XWIDTH= 1.000000e-005 /* excitation area */
YWIDTH= 1.000000e-005 /* excitation area */
xgrid= 200; /* Grid for Laplace solution */
ygrid= 300;
zgrid= 200; /* (z= growth direction) */
seed= 0 /* integer to seed random number gen.*/
poissonEPS= 3.000000e-002 /* required precision and */
poissonMAXITS= 5000 /* maximum number of iterations */
/* for poisson eqn solution */
/* Scattering mechanisms to include _____*/
ScatterHoles= 1 /* switch to turn on Hole scattering*/
phononScattering= 1
acousticScattering= 1
impurityScattering= 1
ehScattering= 1 /* 1= includes electron-hole scat*/
includeLvalley= 1 /* 1= include scattering into L Valley*/
```

```

includeXvalley= 1 /* 1= include scattering into X Valley*/
AsVacScattering= 0 /* 1= include arsenic ion vacancy scattering*/
nitrogenScattering= 0 /* 1= include alloy scattering in GaAsN [not im-
plemented] */
/* other things to include (or not) _____*/
includeLifetime= 1 /* 1= include finite carrier lifetime */
withEd= 1 /* 0= surface depletion field ignored */
/* 1= depletion field included */
withholes= 1 /* 0= ignore holes */
withelectrons= 1 /* 0= ignore electrons */
includeNonParabolic= 0 /* 1= include non-parabolic bands [not fully
implemented]*/
highDoping= 0 /* 1= include high-doping level momentum scatt. [not
fully implemented]*/
/* Simulation output options _____*/
followelectron= 0 /* to print out position of a */
/* specific electron */
print interval= 5.000000e-014; /* at what interval to print out*/
smooth= 0.000000e+000;
debug= 0 /* higher for more comments, = 0 for just time step*/
/* Sample parameters _____*/
GaAs= 0 /* ignore the following if GaAs=1*/
material= 3 /* 1=GaAs, 2=InAs, 3=InGaAs, 4=InP*/
alloy fraction= 9.900000e-001 /* alloy fraction x for  $In_{1-x}Ga_xAs$  */
/* — bandstructure parameters _____*/
Bandgap Energy= 1.420000e+000 /* eV */
Loffset= 2.900000e-001 /* (eV) energyoffset of L from G*/

```

```

Xoffset= 4.800000e-001 /* (eV) energyoffset of X from G*/
meff= 6.300000e-002 /* e- effective mass */
meffL= 8.500000e-001 /* m* of electron in L-valley */
meffX= 8.500000e-001 /* m* of electron in X-valley */
hhmeff= 5.100000e-001 /* hole effective mass */
Vpin= 5.000000e-001 /* fraction of bandgap corresponding to */
/* surface potential barrier */
/* -i not always known...*/
z2= 4.000000e+000; /* number of valleys */
betaG= 1
betaL= 4
betaX= 3
/* — bulk parameters —————*/
epsilonS= 1.295000e+001 /* low frequency dielectric constant */
epsilonI= 1.089000e+001 /* high frequency dielectric constant */
alpha= 1.200000e+006 /* m-1 */
ptype= 0 /* 1=p-type doping (0=n-type) */
doping density n= 1.000000e+013 /* (cm-3) */
rho= 5.360000e+003 /* density of sample kg/m3 */
sv= 5.240000e+003 /* speed of sound in sample m/s */
mobility= 1.000000e+004 /* (cm2/(Vs) [not used] */
/* — phonon parameters —————*/
Elo= 3.600000e-002 /* (eV) Gamma valley LO phonon energy */
EloL= 3.000000e-002 /* (eV) LO phonon energy in L */
Eacoustic= 8.000000e-003 /* (eV) TA or LA energy [not used] */
da= 7.000000e+000; /* (eV) acoustic (LA) deformation potential */
d12= 4.000000e+009; /* (eV) deform. pot G < - > L */

```

```
d13= 2.900000e+010; /* (eV) deform. pot G < - > X */
/* — defect parameters ————— */
tauc= 2.500000e-013 /* Recombination lifetime (s) */
taut= 1.000000e-007 /* Trapping lifetime (s) */
roht= 2.000000e+016 /* Trapping density (cm-3) */
nVac= 1.000000e+012 /* ion-implanted vacancy concentration (cm-3)
*/
Evac= 3.000000e-001 /* energy of vacancy defect states below CB maxi-
mum */
rWell= 3.000000e-009 /* radius of vacancy */
=====
```

Bibliografía

- [1] DH Auston, KP Cheung, and PR Smith. Picosecond photoconducting Hertzian dipoles. *Applied Physics Letters*, 45(3):284–286, 1984.
- [2] Kiyomi Sakai. *Terahertz optoelectronics*. Springer, 2005.
- [3] P Uhd Jepsen, David G Cooke, and Martin Koch. Terahertz spectroscopy and imaging—modern techniques and applications. *Laser & Photonics Reviews*, 5(1):124–166, 2011.
- [4] IS Gregory, C Baker, WR Tribe, MJ Evans, HE Beere, EH Linfield, AG Davies, and M Missous. High resistivity annealed low-temperature gaas with 100 fs lifetimes. *Applied physics letters*, 83(20):4199–4201, 2003.
- [5] Michael S Shur. *GaAs devices and circuits*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [6] Erik Bründermann, Heinz-Wilhelm Hübers, and Maurice FitzGerald Kimmitt. *Terahertz Techniques*. Springer, 2012.
- [7] A.P. DeFonzo and C.R. Lutz. Optoelectronic transmission and reception of ultrashort electrical pulses. *Applied Physics Letters*, 51(4):212–214, 1987.
- [8] P.R. Smith, D.H. Auston, and M.C. Nuss. Subpicosecond photoconducting dipole antennas. *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, 24(2):255–260, 1988.
- [9] A Rice, Y Jin, XF Ma, X-C Zhang, D Bliss, J Larkin, and M Alexander. Terahertz optical rectification from zinc-blende crystals. *Applied physics letters*, 64(11):1324–1326, 1994.
- [10] Q. Wu, TD Hewitt, and X.C. Zhang. Two-dimensional electro-optic imaging of THz beams. *Applied Physics Letters*, 69(8):1026–1028, 1996.
- [11] Robert J Trew. High-frequency solid-state electronic devices. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 52(5):638–649, 2005.

-
- [12] Susan L. Dexheimer. *Terahertz Spectroscopy: Principles and Applications*. 2007.
- [13] Jing Xu, Kevin W Plaxco, and S James Allen. Absorption spectra of liquid water and aqueous buffers between 0.3 and 3.72 thz. *Journal of chemical physics*, 124(3):36101–36101, 2006.
- [14] Martin Van Exter, Ch Fattinger, and D Grischkowsky. Terahertz time-domain spectroscopy of water vapor. *Optics letters*, 14(20):1128–1130, 1989.
- [15] E Castro-Camus, M Palomar, and AA Covarrubias. Leaf water dynamics of arabidopsis thaliana monitored in-vivo using terahertz time-domain spectroscopy. *Scientific reports*, 3, 2013.
- [16] Craig D Allen, Alison K Macalady, Haroun Chenchouni, Dominique Bachelet, Nate McDowell, Michel Vennetier, Thomas Kitzberger, Andreas Rigling, David D Breshears, EH Ted Hogg, et al. A global overview of drought and heat-induced tree mortality reveals emerging climate change risks for forests. *Forest Ecology and Management*, 259(4):660–684, 2010.
- [17] David A Zimdars, Jeffrey S White, G Stuk, A Chernovsky, G Fichter, and S Williamson. Security and non destructive evaluation application of high speed time domain terahertz imaging. In *Conference on Lasers and Electro-Optics*, page CMLL1. Optical Society of America, 2006.
- [18] Qian Song, Yuejin Zhao, Albert Redo-Sanchez, Cunlin Zhang, and Xiaohua Liu. Fast continuous terahertz wave imaging system for security. *Optics Communications*, 282(10):2019–2022, 2009.
- [19] KPH Lui and FA Hegmann. Fluence-and temperature-dependent studies of carrier dynamics in radiation-damaged silicon-on-sapphire and amorphous silicon. *Journal of Applied Physics*, 93:9012, 2003.
- [20] P. Parkinson, J. Lloyd-Hughes, Q. Gao, H.H. Tan, C. Jagadish, M.B. Johnston, and L.M. Herz. Transient terahertz conductivity of GaAs nanowires. *Nano Lett*, 7(7):2162–2165, 2007.
- [21] J Lloyd-Hughes. Generalized conductivity model for polar semiconductors at terahertz frequencies. *Applied Physics Letters*, 100(12):122103, 2012.
- [22] James Lloyd-Hughes and Tae-In Jeon. A review of the terahertz conductivity of bulk and nano-materials. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, 33(9):871–925, 2012.

- [23] Sanghyun Ju, Jianfeng Li, Jun Liu, Po-Chiang Chen, Young-geun Ha, Fumiaki Ishikawa, Hsiaokang Chang, Chongwu Zhou, Antonio Facchetti, David B Janes, et al. Transparent active matrix organic light-emitting diode displays driven by nanowire transistor circuitry. *Nano letters*, 8(4):997–1004, 2007.
- [24] Hyesung Park, Sehoon Chang, Joel Jean, Jayce J Cheng, Paulo T Araujo, Mingsheng Wang, Mounqi G Bawendi, Mildred S Dresselhaus, Vladimir Bulović, Jing Kong, et al. Graphene cathode-based zno nanowire hybrid solar cells. *Nano letters*, 13(1):233–239, 2012.
- [25] Andrea G Markelz. Terahertz dielectric sensitivity to biomolecular structure and function. *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of*, 14(1):180–190, 2008.
- [26] Benjamin Born, Seung Joong Kim, Simon Ebbinghaus, Martin Gruebele, and Martina Havenith. The terahertz dance of water with the proteins: the effect of protein flexibility on the dynamical hydration shell of ubiquitin. *Faraday discussions*, 141:161–173, 2009.
- [27] Payam Mousavi, Frank Haran, David Jez, Fadil Santosa, and John Steven Dodge. Simultaneous composition and thickness measurement of paper using terahertz time-domain spectroscopy. *Applied optics*, 48(33):6541–6546, 2009.
- [28] A. I. Hernandez-Serrano, S. C. Corzo-Garcia, E. Garcia-Sanchez, M. Alfaro, and E. Castro-Camus. Quality control of leather by terahertz time-domain spectroscopy. *Appl. Opt.*, 53(33):7872–7876, Nov 2014.
- [29] Christian Jördens and Martin Koch. Detection of foreign bodies in chocolate with pulsed terahertz spectroscopy. *Optical Engineering*, 47(3):037003–037003, 2008.
- [30] M Herrmann, M Tani, M Watanabe, and K Sakai. Terahertz imaging of objects in powders. *IEE Proceedings-Optoelectronics*, 149(3):116–120, 2002.
- [31] S Wietzke, C Jansen, F Rutz, DM Mittleman, and M Koch. Determination of additive content in polymeric compounds with terahertz time-domain spectroscopy. *Polymer Testing*, 26(5):614–618, 2007.
- [32] Christian Jansen, Steffen Wietzke, Ole Peters, Maik Scheller, Nico Vieweg, Mohammed Salhi, Norman Krumbholz, Christian Jördens, Thomas Hochrein, and Martin Koch. Terahertz imaging: applications and perspectives. *Applied optics*, 49(19):E48–E57, 2010.

- [33] Philip F Taday. Applications of terahertz spectroscopy to pharmaceutical sciences. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 362(1815):351–364, 2004.
- [34] Anthony J Fitzgerald, Bryan E Cole, and Philip F Taday. Nondestructive analysis of tablet coating thicknesses using terahertz pulsed imaging. *Journal of pharmaceutical sciences*, 94(1):177–183, 2005.
- [35] W Köhler, M Panzer, U Klotzsch, S Winner, M Helm, F Rutz, C Jördens, M Koch, and H Leitner. Non-destructive investigation of paintings with thz-radiation. In *European Conference of Non-Destructive Testing*, number P181, 2006.
- [36] Kaori Fukunaga, Yuichi Ogawa, Shin’ichiro Hayashi, and Iwao Hosako. Terahertz spectroscopy for art conservation. *IEICE Electronics Express*, 4(8):258–263, 2007.
- [37] RA Lewis. A review of terahertz sources. *Journal of Physics D Applied Physics*, 47, 2014.
- [38] Enrique Castro Camus. *Polarisation resolved terahertz time domain spectroscopy*. PhD thesis, University of Oxford, 2006.
- [39] Suranjana Sengupta. 2011.
- [40] AG Davies, EH Linfield, and MB Johnston. The development of terahertz sources and their applications. *Physics in Medicine and Biology*, 47:3679, 2002.
- [41] Peter H Siegel et al. Terahertz technology. *IEEE Transactions on microwave theory and techniques*, 50(3):910–928, 2002.
- [42] CW Berry, N Wang, MR Hashemi, M Unlu, and M Jarrahi. Significant performance enhancement in photoconductive terahertz optoelectronics by incorporating plasmonic contact electrodes. *Nature communications*, 4:1622, 2013.
- [43] FJ González and GD Boreman. Comparison of dipole, bowtie, spiral and log-periodic ir antennas. *Infrared Physics & Technology*, 46(5):418–428, 2005.
- [44] Lionel Duvillaret, Frédéric Garet, Jean-François Roux, and Jean-Louis Coutaz. Analytical modeling and optimization of terahertz time-domain spectroscopy experiments, using photoswitches as antennas. *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of*, 7(4):615–623, 2001.

- [45] Kai-Erik Peiponen, Axel Zeitler, and Makoto Kuwata-Gonokami. *Terahertz Spectroscopy and Imaging*, volume 171. Springer, 2012.
- [46] S. C. Corzo-Garcia, M Alfaro, and E Castro-Camus. Transit time enhanced bandwidth in nanostructured terahertz emitters. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, 35(12):987–992, 2014.
- [47] P Uhd Jepsen, Rune Hylsberg Jacobsen, and SR Keiding. Generation and detection of terahertz pulses from biased semiconductor antennas. *JOSA B*, 13(11):2424–2436, 1996.
- [48] JN Heyman, P Neocleous, D Hebert, PA Crowell, T Müller, and Karl Unterrainer. Terahertz emission from gaas and inas in a magnetic field. *Physical Review B*, 64(8):085202, 2001.
- [49] Gregor Klatt, Florian Hilser, Wenchao Qiao, Matthias Beck, Raphael Gebis, Albrecht Bartels, Klaus Huska, Ulrich Lemmer, Georg Bastian, Michael B Johnston, et al. Terahertz emission from lateral photo-dember currents. *Optics express*, 18(5):4939–4947, 2010.
- [50] MB Johnston, DM Whittaker, A Corchia, AG Davies, and EH Linfield. Simulation of terahertz generation at semiconductor surfaces. *Physical Review B*, 65(16):165301, 2002.
- [51] Kai Liu, Jingzhou Xu, Tao Yuan, and X-C Zhang. Terahertz radiation from inas induced by carrier diffusion and drift. *Physical Review B*, 73(15):155330, 2006.
- [52] Antanas Reklaitis. Crossover between surface field and photo-dember effect induced terahertz emission. *Journal of Applied Physics*, 109(8):083108, 2011.
- [53] E Castro-Camus, J Lloyd-Hughes, and MB Johnston. Three-dimensional carrier-dynamics simulation of terahertz emission from photoconductive switches. *Physical Review B*, 71(19):195301, 2005.
- [54] J Lloyd-Hughes, E Castro-Camus, and MB Johnston. Simulation and optimisation of terahertz emission from ingaas and inp photoconductive switches. *Solid state communications*, 136(11):595–600, 2005.
- [55] Nicholas Metropolis and Stanislaw Ulam. The monte carlo method. *Journal of the American statistical association*, 44(247):335–341, 1949.
- [56] Nicholas Metropolis, Arianna W Rosenbluth, Marshall N Rosenbluth, Augusta H Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, 21(6):1087–1092, 1953.

- [57] NO Matthew and O Sadiku. Elements of electromagnetics, 1995.
- [58] William H Press. *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge university press, 2007.
- [59] James Lloyd-Hughes. *Terahertz time-domain spectroscopy of carrier trapping in semiconductors*. PhD thesis, University of Oxford, 2006.
- [60] SY Kane. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *IEEE transaction on antennas and propagation*, 14, 302-307, 1966.
- [61] Kurt L Shlager and John B Schneider. A selective survey of the finite-difference time-domain literature. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, 37(4):39-57, 1995.
- [62] Karl S Kunz and Raymond J Luebbers. *The finite difference time domain method for electromagnetics*. CRC press, 1993.
- [63] Gerrit Mur. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations. *IEEE transactions on Electromagnetic Compatibility*, (4):377-382, 1981.
- [64] Jean-Pierre Berenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of computational physics*, 114(2):185-200, 1994.
- [65] Richard Fitzpatrick. *Maxwell's Equations and the Principles of Electromagnetism*. Jones & Bartlett Publishers, 2008.
- [66] K-H Goetz, D Bimberg, H Jürgensen, J Selders, AV Solomonov, GF Glinskii, and Mo Razeghi. Optical and crystallographic properties and impurity incorporation of GaInAsP grown by liquid phase epitaxy, vapor phase epitaxy, and metal organic chemical vapor deposition. *Journal of Applied Physics*, 54(8):4543-4552, 1983.
- [67] Thomas P Pearsall. *GaInAsP alloy semiconductors*. John Wiley & Sons, 1982.
- [68] X-C Zhang and DH Auston. Optoelectronic measurement of semiconductor surfaces and interfaces with femtosecond optics. *Journal of applied physics*, 71(1):326-338, 1992.
- [69] Antanas Reklaitis. Terahertz emission from InAs induced by photo-dember effect: Hydrodynamic analysis and monte carlo simulations. *Journal of Applied Physics*, 108(5):053102, 2010.

- [70] Ping Gu, Masahiko Tani, Shunsuke Kono, Kiyomi Sakai, and X-C Zhang. Study of terahertz radiation from insas and insb. *Journal of applied physics*, 91(9):5533–5537, 2002.
- [71] Mark E Barnes, Sam A Berry, P Gow, Duncan McBryde, Geoff J Daniell, Harvey E Beere, David A Ritchie, and Vasilis Apostolopoulos. Investigation of the role of the lateral photo-dember effect in the generation of terahertz radiation using a metallic mask on a semiconductor. *Optics express*, 21(14):16263–16272, 2013.
- [72] Raimund Mueckstein, Michele Natrella, Osama Hatem, Joshua R Freeman, Chris S Graham, Cyril C Renaud, Alwyn J Seeds, Edmund H Linfield, Paul J Cannard, Mike J Robertson, et al. Near-field analysis of terahertz pulse generation from photo-excited charge density gradients. *Terahertz Science and Technology, IEEE Transactions on*, 5(2):260–267, 2015.
- [73] Oleg Mitrofanov, Mark Lee, Julia WP Hsu, Igal Brener, Roey Harel, John F Federici, James D Wynn, Loren N Pfeiffer, and Ken W West. Collection-mode near-field imaging with 0.5-thz pulses. *IEEE JOURNAL ON SELECTED TOPICS IN QUANTUM ELECTRONICS*, 7(4):600–607, 2001.
- [74] Oleg Mitrofanov, LN Pfeiffer, and KW West. Generation of low-frequency components due to phase-amplitude modulation of subcycle far-infrared pulses in near-field diffraction. *Applied physics letters*, 81(9):1579–1581, 2002.
- [75] Michele Natrella, Oleg Mitrofanov, Raimund Mueckstein, Chris Graham, Cyril C Renaud, and Alwyn J Seeds. Modelling of surface waves on a thz antenna detected by a near-field probe. *Optics express*, 20(14):16023–16031, 2012.
- [76] FR Fonseca Fonseca, RE Martinez Martinez, and P Teherán. Solución de la ecuación de poisson-boltzmann usando diferencias finitas. *Revista Colombiana de Física*, 43(2):236, 2011.
- [77] Raimund Mueckstein and Oleg Mitrofanov. Imaging of terahertz surface plasmon waves excited on a gold surface by a focused beam. *Optics express*, 19(4):3212–3217, 2011.
- [78] S. C. Corzo-Garcia, A. I. Hernandez-Serrano, E. Castro-Camus, and O. Mitrofanov. Monte carlo simulation of near-field terahertz emission from semiconductors. *Phys. Rev. B*, 94:045301, Jul 2016.
- [79] S. H. Yang, M. R. Hashemi, C. W. Berry, and M. Jarrahi. 7.5photoconductive emitters with three-dimensional plasmonic contact electrodes.

IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology, 4(5):575–581, Sept 2014.

- [80] Barmak Heshmat, Hamid Pahlevaninezhad, Pang Yuanjie, Mostafa Masnadi-Shirazi, Ryan Burton Lewis, Thomas Tiedje, Reuven Gordon, and Thomas Edward Darcie. Nanoplasmonic terahertz photoconductive switch on gaas. *Nano Letters*, 12(12):6255–6259, 2012.
- [81] M. Jarrahi. Advanced photoconductive terahertz optoelectronics based on nano-antennas and nano-plasmonic light concentrators. *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, 5(3):391–397, May 2015.