

CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DE ESTUDIOS AVANZADOS  
DEL INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

UNIDAD ZACATENCO

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA ELÉCTRICA

SECCIÓN DE ELECTRÓNICA DEL ESTADO SÓLIDO

Comparación de métodos de análisis no-exponencial aplicados a transitorios  
capacitivos en semiconductores

T E S I S

Que presenta

ING. ANGEL DANIEL SÁNCHEZ CASTRO

Para obtener el grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

EN LA ESPECIALIDAD DE

ELECTRÓNICA DEL ESTADO SÓLIDO

Director de la Tesis:

DR. ALEJANDRO AVILA GARCÍA

Ciudad de México

Febrero, 2018

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca otorgada para la realización de mis estudios académicos a nivel maestría.

Agradezco el valioso apoyo y paciencia de mi director de tesis, el Dr. Alejandro Avila García, así como del Dr. Rodolfo Quintero Romo, pues con sus opiniones y críticas constructivas, este trabajo reúne la experiencia conjunta y la visión que le dieron una parte vital a su contenido y forma. Además, agradezco el apoyo y facilidades otorgadas por el CINVESTAV-IPN Unidad Zacatenco, en especial del personal que labora en la Sección de Electrónica del Estado Sólido. Principalmente, agradezco el enorme apoyo y comprensión de mis padres, familia y amigos.

## Contenido

|  |    |
|--|----|
| CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN .....   | 1  |
| 1.1 GENERALIDADES.....   | 1  |
| 1.1.1 IMPORTANCIA DE CARACTERIZAR A LOS ESTADOS PROFUNDOS .....                  | 3  |
| 1.1.2 OBSERVACIÓN DE LOS ESTADOS PROFUNDOS .....                                 | 5  |
| 1.1.3 TÉCNICAS DE CARACTERIZACIÓN .....  | 10 |
| 1.1.4 PROBLEMAS MAL PLANTEADOS .....   | 16 |
| 1.2 ANTECEDENTES .....   | 18 |
| 1.3 JUSTIFICACIÓN .....  | 21 |
| 1.4 APORTACIONES DEL ESTUDIO .....   | 22 |
| 1.5 HIPÓTESIS.....   | 22 |
| 1.6 OBJETIVOS.....   | 22 |
| 1.6.1 OBJETIVO GENERAL .....   | 22 |
| 1.6.2 OBJETIVOS PARTICULARES .....   | 22 |
| CAPÍTULO 2: TEORÍA .....   | 24 |
| 2.1 NIVELES PROFUNDOS EN MATERIALES SEMICONDUCTORES.....                         | 24 |
| 2.1.1 INTRODUCCIÓN .....   | 24 |
| 2.1.2 ESTADÍSTICA DE GENERACIÓN-RECOMBINACIÓN.....                               | 24 |
| 2.1.3 PROCESOS DE GENERACIÓN Y RECOMBINACIÓN .....                               | 26 |
| 2.2 TRANSITORIOS CAPACITIVOS .....   | 28 |
| 2.2.1 INTRODUCCIÓN .....   | 28 |
| 2.2.2 MEDICIONES DE CAPACITANCIA.....  | 37 |
| 2.3 DETALLES SOBRE PROBLEMAS INVERSOS.....                                       | 45 |
| 2.4 SISTEMAS DE VENTANAS DE RAZONES (FILTROS ANALÓGICOS) MÁS USADOS EN DLTS..... | 47 |
| 2.4.1. INTRODUCCIÓN .....  | 47 |
| 2.4.2 BOX-CAR .....  | 48 |
| 2.4.3 LOCK-IN .....  | 49 |

|  |     |
|--|-----|
| 2.5 LIMITACIONES DE LA TÉCNICA DLTS.....   | 50  |
| 2.6 LAPLACE-DLTS .....   | 51  |
| 2.7 MÉTODOS DE ANÁLISIS NO-EXPONENCIAL.....  | 52  |
| 2.7.1 INTRODUCCIÓN .....   | 52  |
| 2.7.2 EL MÉTODO DE PRONY .....   | 52  |
| 2.7.3 TRANSFORMADA DE LAPLACE.....   | 55  |
| 2.7.4 AJUSTE NO LINEAL CON NonlinearModelFit .....   | 60  |
| 2.8 RUIDO EN DISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES .....  | 63  |
| 2.8.1 INTRODUCCIÓN .....   | 63  |
| 2.8.2 RUIDO TÉRMICO .....  | 64  |
| 2.8.3 RUIDO SHOT .....   | 64  |
| 2.8.4 RUIDO DE GENERACIÓN-RECOMBINACIÓN .....  | 64  |
| 2.8.5 RUIDO $1/f$ .....  | 65  |
| CAPÍTULO 3: DESARROLLO, RESULTADOS Y DISCUSIÓN .....   | 66  |
| 3.1 PROBLEMA DIRECTO: DESARROLLO Y OBTENCIÓN DE LOS TRANSITORIOS<br>CAPACITIVOS MONO Y MULTI-EXPONENCIALES ..... | 66  |
| 3.1.1 DISCUSIÓN DE RESULTADOS .....  | 73  |
| 3.2 PROBLEMA DIRECTO: DESARROLLO Y OBTENCIÓN DE LOS ESPECTROS DLTS....   | 75  |
| 3.2.1 DIODOS SCHOTTKY DE Ge TIPO-N .....   | 75  |
| 3.2.2 DIODOS SCHOTTKY DE GaAs TIPO-N.....  | 79  |
| 3.2.3 UNIONES $n + -p$ DE GaN.....   | 83  |
| 3.3 PROBLEMA INVERSO .....   | 89  |
| 3.3.1 DESARROLLO .....   | 89  |
| 3.3.2 RESULTADOS DEL PROBLEMA INVERSO.....   | 93  |
| 3.3.3 DISCUSIÓN DE RESULTADOS DE LOS TRANSITORIOS EXPONENCIALES .....  | 107 |
| 3.3.4 DISCUSIÓN DE RESULTADOS DE LOS TRANSITORIOS NO-EXPONENCIALES<br>.....                                      | 109 |
| CAPÍTULO 4: CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO.....   | 111 |
| 4.1 CONCLUSIONES .....   | 111 |

|   |     |
|---|-----|
| 4.2 TRABAJO FUTURO .....  | 112 |
| Trabajos citados .....  | 113 |
| Apéndice A: Programa en Mathcad que simula transitorios capacitivos como resultado de la emisión térmica de huecos en el diodo Schottky de Ge tipo-n. ....  | 117 |
| Apéndice B: Código fuente del programa en Mathematica que contiene los algoritmos del análisis no-exponencial, así como la simulación del ruido blanco y su correspondiente filtrado en el transitorio del defecto Hp(0.15) del diodo Schottky de Ge tipo-n. .... | 118 |
| Apéndice C: Diagrama de flujo general del sistema propuesto de caracterización de niveles profundos de energía en semiconductores .....   | 135 |

## Resumen

La teoría sobre los niveles profundos de energía introducidos en la banda prohibida de un semiconductor y sus técnicas de caracterización, principalmente la Espectroscopía de Transitorios de Niveles Profundos (DLTS – Deep Level Transient Spectroscopy) aplicada a transitorios capacitivos digitalizados, así como sus limitaciones, son los temas básicos que se revisan en este trabajo. Entre estas limitaciones, surge la no-exponencialidad en este tipo de transitorios, para lo cual se explican brevemente algunas de sus causas. Sólo una de estas causas es considerada en la simulación de dichos transitorios, a los cuales se les añade una fuente de ruido simulada; además éstos son analizados mediante algunos métodos de análisis exponencial y no-exponencial: Prony, NonlinearModelFit (perteneciente al software Mathematica® de Wolfram) y Laplace-Padé. Tales métodos permiten determinar parámetros característicos del transitorio, es decir: amplitud(es), constante(s) de decaimiento y la línea de base. Finalmente, se comparan los resultados obtenidos con los métodos estudiados bajo distintas condiciones: número de componentes exponenciales, nivel de ruido en la señal, la línea de base y tiempo de cómputo. El objetivo de dicha comparación es elegir el o los métodos(s) más adecuado(s) para ser implementado(s) en un sistema experimental de caracterización de dispositivos semiconductores.

## **Abstract**

The theory about Deep energy levels introduced into the band gap of a semiconductor material and its characterization techniques, mainly Deep Level Transient Spectroscopy (DLTS) applied to digitized capacitance transients, as well as its limitations, are the basic topics reviewed in this work. Among these limitations, arises the non-exponentiality in this kind of transients, for which some of its causes are explained briefly. Only one of these causes is considered in the simulation of such transients, and one simulated source of noise is added to them; also, these transients are analyzed by some exponential and non-exponential methods, such as: Prony, NonlinearModelFit (which belongs to Wolfram Mathematica software) and Laplace-Padé. Such methods allow the determination of characteristic parameters of the transient, i.e.: amplitude(s), decay constant(s) and the base-line. Finally, the results obtained by the studied methods are compared under different circumstances: exponential component number, noise level of the signal, base-line and computing time. El goal of such comparison is to choose the most appropriate method(s) to be implemented in an experimental system for the characterization of semiconductor devices.



## CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN

### 1.1 GENERALIDADES

Todos los semiconductores tienen defectos puntuales y/o estructurales, éstos son introducidos de forma intencional o involuntaria, lo que produce una perturbación en la periodicidad del cristal, influyendo a su vez en el comportamiento de los dispositivos electrónicos. De acuerdo con P. Blood (Blood, y otros, 1992), los defectos pueden clasificarse de dos formas:

1. Poco profundos o superficiales, los cuales se consideran como impurezas hidrogénicas sustitucionales en las cuales el electrón se encuentra débilmente ligado por un potencial de Coulomb, lo que introduce un nivel de energía cercano a alguna de las bandas de energía del material.
2. Profundos<sup>1</sup>, en los cuales el potencial de la impureza se encuentra fuertemente localizado, ocasionando que las funciones de onda decaigan rápidamente, y en consecuencia se dice que los electrones se encuentran fuertemente ligados, dando como resultado un nivel de energía más alejado de los bordes de las bandas de energía.

Los niveles profundos afectan a diferentes parámetros relacionados con los dispositivos electrónicos, por ejemplo: éstos niveles determinan los tiempos de vida de recombinación y generación, los cuales a su vez controlan las corrientes de portadores en las uniones y así como los tiempos de actualización en las memorias dinámicas de acceso aleatorio. Entonces resulta importante tener la capacidad de determinar tanto el tipo, como la concentración de defectos en los dispositivos, por lo que el control de estos niveles en los dispositivos se

---

<sup>1</sup> Se les conoce también como centros de generación-recombinación (G-R), impurezas de nivel profundo, defectos profundos, estados localizados o simplemente trampas.

vuelve un proceso muy importante durante su fabricación. Ejemplos del impacto de tales niveles en los dispositivos (McGuire, 1989):

- Transistores de Efecto de Campo (FETs) hechos de GaAs, en los cuales se presentan variaciones en el voltaje de umbral y bucles en las características de Corriente-Voltaje (I-V). También, a mayores frecuencias, los niveles profundos pueden ser fuentes de ruido y ocasionar inestabilidades en las características de operación.
- Transistores Bipolares con trampas en la región de Base, en los cuales los estados rápidos degradan el tiempo de vida de los portadores que recorren esta región, pues incrementan la recombinación en la misma y en consecuencia disminuyen la ganancia de estos dispositivos.
- Dispositivos ópticos, en los cuales se presentan efectos perjudiciales al convertirse en centros de recombinación no radiativos, extinguiendo una salida óptica y ocasionando una degradación a largo plazo del dispositivo.

Los parámetros que caracterizan a estos niveles de energía son:

- Energía de activación ( $\Delta E$ ): es la diferencia de energía entre el borde de alguna de las bandas y la posición del nivel profundo ( $E_T$ ), es decir,  $E_c - E_T$  para una trampa de electrones o bien  $E_T - E_v$  para el caso de los huecos.
- Sección transversal de captura ( $\sigma$ ): representa a la probabilidad de captura de un portador en un área del material.
- Concentración y distribución espacial dentro del semiconductor ( $N_T$ ): indica la densidad por unidad de volumen de los defectos presentes en el material.

Dentro del material semiconductor, los niveles profundos pueden actuar de dos maneras posibles:

- Cuando se introduce un exceso de portadores en el dispositivo, estos niveles energéticos sirven como centros de recombinación.
- Si la densidad de los portadores es inferior a sus valores en equilibrio dentro del dispositivo, funcionan como centros de generación.

A menudo, para semiconductores monocristalinos como el Si, Ge y GaAs, dichos niveles son impurezas metálicas, aunque también pueden ser imperfecciones en el cristal, por ejemplo: dislocaciones, fallas de apilamiento, precipitados, vacancias o impurezas intersticiales, etc. En el caso del Si y del GaAs, los niveles profundos se encuentran más allá de 0.05 eV de los bordes de las bandas de energía y éstos no pueden ser ionizados a temperatura ambiente (Blood, y otros, 1992). Por otro lado, en semiconductores como el GaAs y el InP, la presencia de estos niveles aumenta la resistividad del sustrato, lo que da lugar a sustratos que son semi-aislantes. Finalmente, en el caso de semiconductores amorfos, o policristalinos, estos defectos se deben principalmente a imperfecciones estructurales.

### 1.1.1 IMPORTANCIA DE CARACTERIZAR A LOS ESTADOS PROFUNDOS

La mayoría de los estudios sobre los niveles profundos son motivados por el hecho de que algunas propiedades de los materiales, tales como el tiempo de vida de recombinación de los portadores minoritarios, puede ser controlado por muy pequeñas concentraciones de estos centros, lo cual tiene un significado práctico debido a que éste determina:

- Almacenamiento de portadores minoritarios y tiempos de conmutación.
- Eficiencia luminiscente de los diodos emisores de luz (LED).

- Corriente de umbral de los láseres.
- Excesos de corriente<sup>2</sup> (Roy, 2004) en uniones y fotodetectores.

Si las densidades de estos niveles de energía son inferiores por muchos órdenes de magnitud respecto a las de los niveles poco profundos, la concentración de los portadores libres, así como la posición del nivel de Fermi son controlados únicamente por los niveles poco profundos. En la práctica, es muy común que ocurra esta situación (Blood, y otros, 1992).

El estudio de los estados profundos requiere de técnicas de medición que sean sensibles a bajas concentraciones de éstos con relación a concentraciones mucho mayores de impurezas superficiales y que éstas revelen información concerniente a los procesos de recombinación en dichos centros. Estas técnicas se basan en la observación de los fenómenos transitorios relacionados a la captura y emisión de los portadores sólo en los estados profundos. La constante de tiempo de decaimiento del transitorio ( $\tau$ ) proporciona información acerca de la razón de ocurrencia de la emisión, mientras que la amplitud del transitorio provee la información para determinar su concentración (Blood, y otros, 1992).

Al utilizar la región de deserción de una unión metal-semiconductor (barrera Schottky) o una unión P-N, es posible separar los procesos de emisión y captura. El resultado importante de este análisis es que, para pequeñas concentraciones de trampas, la capacitancia y la corriente del dispositivo manifiestan transitorios

---

<sup>2</sup> En un diodo de túnel ideal (aquel en donde no exista un estado en la banda prohibida), la corriente debe caer a cero cuando se aplica una polarización directa, sin embargo, en los diodos de túnel reales fluye una corriente finita bajo esa polarización. Puesto que la corriente observada representa un exceso respecto a la corriente esperada, es por esto que se le denomina exceso de corriente.

exponenciales como respuesta a un estímulo externo, como un pulso de voltaje o iluminación (debida al fenómeno de la fotoconductividad), con constantes de tiempo iguales al recíproco de la razón de emisión, es decir  $\tau = 1/e$  (Blood, y otros, 1992). La razón de emisión representa la frecuencia a la cual son emitidos los portadores desde un nivel profundo hacia la banda de energía de la cual provienen.

El método DLTS (Deep Level Transient Spectroscopy) que más adelante se describirá, muestra resultados en una forma espectroscópica, que pueden ser usados para clasificar a los niveles profundos por medio de la “firma de la trampa”, en la forma de una gráfica de Arrhenius de la razón de emisión como función de la temperatura. Sin embargo, la información de dicha firma no es suficiente para identificar completamente al nivel profundo, ni para una especificación de sus propiedades de recombinación, por lo que es necesario realizar una medición de las secciones transversales de captura, las cuales *determinan las razones de captura de los portadores* (Blood, y otros, 1992).

### 1.1.2 OBSERVACIÓN DE LOS ESTADOS PROFUNDOS

#### 1.1.2.1 TÉCNICAS DE MEDICIÓN DE TRANSPORTE DE PORTADORES

Este tipo de técnicas se desarrolló antes de las técnicas de deserción, las cuales se describirán más adelante. En este ámbito, la mayoría de los métodos empleados para el estudio de los estados profundos se limitó al volumen en materiales altamente resistivos, en donde el estado profundo se consideraba como el centro que controla las propiedades del sólido. Tales materiales pueden ser estudiados empleando alguna de las técnicas de medición de transporte de portadores. En ellas se emplea una variación de la temperatura con el propósito de controlar la ionización térmica del nivel profundo y, en consecuencia, alterar

la densidad de portadores libres. Como ejemplos de este tipo de técnicas, se tiene:

- Medición de la dependencia con la temperatura del coeficiente de Hall, lo cual proporciona la energía de activación térmica y la densidad de los estados profundos, además de que es capaz de resolver más de un nivel de energía que se encuentre ampliamente separado en comparación al voltaje térmico ( $kT$ ).
- Corriente térmicamente estimulada (TSC o Thermally Stimulated Current), en donde la muestra es iluminada a baja temperatura, con el propósito de llenar las trampas con electrones, por lo que se mide la conductividad de campo bajo ( $\sigma = ne\mu$ ) conforme la temperatura aumenta, y en consecuencia pueden observarse picos en la corriente dado que el transitorio aumenta la densidad de corriente en la banda de conducción, debido a la emisión térmica de los portadores atrapados.
- Fotoconductividad y fotoluminiscencia, en las cuales se relaciona a los portadores de carga con una emisión óptica desde las trampas en lugar de una emisión térmica.
- Capacitancia térmicamente estimulada (TSCAP), la cual es análoga a la técnica TSC, sin embargo, en ésta se hace un monitoreo de la capacitancia de la zona de deserción.

#### **1.1.2.2 TÉCNICAS DE MEDICIÓN EN REGIONES DE DESERCIÓN**

Uno de los primeros en estudiar a los niveles profundos en regiones de deserción fue R. Williams (Williams, 1966), quien se dio cuenta que la región de deserción de una unión metal-semiconductor es de alta resistividad, pues se encuentra libre de portadores. En dicha región, la emisión térmica se puede observar directamente con una gran sensibilidad mediante un fenómeno

transitorio. La ventaja de una medición de este tipo es que los portadores no se recombinan ni son re-atrapados. De manera general (Schroder, 2006), este tipo de técnicas incluyen mediciones de transitorios de:

1. Capacitancia con un voltaje constante aplicado.
2. Corriente.
3. Voltaje con capacitancia constante.

Este tipo de técnicas en conjunción a una elección adecuada de un estímulo externo<sup>3</sup>, permite controlar el proceso de llenado de las trampas dentro del semiconductor, y por lo tanto controlar la respuesta transitoria. Las ventajas que ofrecen estas técnicas son (Blood, y otros, 1992):

1. Los transitorios de carga en los estados profundos dentro de la región de deserción pueden ser monitoreados al medir la capacitancia de la región de deserción o bien, midiendo la corriente del diodo.
2. Las mediciones de capacitancia o de corriente poseen una sensibilidad muy alta, por lo que se pueden obtener de forma relativamente sencilla valores de  $(N_T/N_B \approx 10^{-4})$ , donde  $N_T$  es la densidad volumétrica de los defectos profundos (es decir, la concentración de los defectos dentro del material) y  $N_B$  representa a la concentración de impurezas de base por unidad de volumen (aceptores o donadores).
3. Generalmente, la respuesta de una trampa se determina por más de un proceso.
4. El llenado de una trampa con portadores mayoritarios se logra al reducir la polarización inversa, con el propósito de reinsertarlos dentro de la región de observación.

---

<sup>3</sup> Temperatura, iluminación o polarización.

5. Al controlar la polarización durante el llenado de las trampas y su posterior emisión, la extensión de la región de observación puede modificarse a discreción, y esto conlleva a que la profundidad de la distribución (densidad volumétrica) de las trampas pueda determinarse.

Por ejemplo, un transitorio capacitivo para un material semiconductor ocurre de la siguiente forma: suponga que una muestra tipo-n (cuyo nivel de Fermi  $E_F$  se encuentra más próximo a la banda de conducción) contiene un nivel profundo de energía  $E_T$ . La muestra puede encontrarse en equilibrio térmico o bajo una polarización cercana o igual a 0 V y en consecuencia, los electrones libres son capturados por el nivel profundo en la región donde  $E_T < E_F$ ; posteriormente, si la muestra se polariza inversamente, los electrones atrapados son emitidos hacia la banda de conducción y son barridos fuera de la zona de deserción debido al intenso campo eléctrico en la zona donde el nivel de la trampa se encuentra sobre el nivel de Fermi ( $E_T > E_F$ ).

Una alternativa al caso anterior en el que se mantiene el voltaje constante es el de un transitorio de voltaje que se manifiesta al mantener el ancho de la región de deserción constante durante la emisión de los portadores. Esto se logra a través de un circuito de retroalimentación que ajusta la polarización aplicada, logrando así una capacitancia constante.

La tabla 1.1 ilustra una comparación entre las distintas variables que pueden observarse en el régimen transitorio.



| Capacitancia  | Corriente  | Voltaje  |
|---|--|--|
| Permite distinguir emisión de portadores mayoritarios y minoritarios. | No existe distinción entre emisión de mayoritarios y minoritarios.   | Existe distinción entre los defectos atrapa mayoritarios y minoritarios. |
| Puede efectuarse en un amplio rango de temperaturas.                  | Difícil de medir a bajas temperaturas.   |  |
| Son más sencillos de interpretar.                                     | Resultan más complicados en su interpretación debido a las corrientes de: emisión ( $I_e$ ), desplazamiento ( $I_d$ ) y de fuga en la unión ( $I_l$ ).<br><br>La expresión para representar $I(t)$ no necesariamente es exponencial. |  |
| Apropiados para estudiar uniones, ya sea metal-semiconductor o p-n.   | Son la mejor opción para dispositivos de geometría pequeña (MOSFETs y MESFETs), dado que su capacitancia es pequeña e incluso el cambio en la capacitancia es menor, por lo que esta es difícil de medir.                            |  |

Tabla 1.1 Comparación entre los distintos tipos de fenómenos transitorios medibles (Schroder, 2006) y (Blood, y otros, 1992).

### 1.1.2.3 MEDICIÓN EN REGIONES DE DESERCIÓN

En un experimento transitorio en una región de deserción para una trampa de portadores mayoritarios, por ejemplo, en un semiconductor tipo-n, ocurre lo siguiente:

1. Cuando la muestra no se polariza de forma inversa, los centros de atrapamiento se encuentran ocupados por electrones. En este caso, se

dice que dentro del material existe una razón de captura de electrones mayor a su razón de emisión, es decir  $c_n > e_n$ . Puede entenderse a la razón de captura de los electrones, como la frecuencia a la cual éstos son capturados por el nivel profundo. El término  $e_n$  se refiere a la razón de emisión de los electrones.

2. Una vez que la muestra se polariza inversamente con un voltaje  $V_r$ , las trampas se vacían de electrones para una distancia  $x_d$  desde la superficie, la cual representa el ancho de la zona de deserción. Es decir, se detiene el proceso de captura de los electrones y luego ocurre su emisión térmica.
3. Posterior a la emisión de los electrones, éstos son inmediatamente arrastrados hacia el exterior de la zona de deserción debido al campo eléctrico existente.
4. Aumenta la densidad de carga espacial positiva, que implica un aumento en la capacitancia a una polarización fija, la cual se consigue por una pequeña reducción en el ancho de la zona de deserción.
5. Si se elimina la polarización inversa, las trampas que se encuentren vacías pueden ser ocupadas nuevamente mediante la captura de electrones.

### 1.1.3 TÉCNICAS DE CARACTERIZACIÓN

#### 1.1.3.1 ESTIMULACIÓN TÉRMICA (CAPACITANCIA Y CORRIENTE)

Antes de que surgiera la técnica DLTS, las técnicas TSCAP y TSC fueron empleadas para caracterizar los estados profundos en los semiconductores. Al principio, ambas técnicas se emplearon en materiales aislantes, pero cuando se descubrió que la Región de Carga Espacial (RCE) de un material es una región

altamente resistiva, éstas técnicas se adaptaron a materiales semiconductores con una resistividad menor. Las ventajas de estas técnicas respecto a DLTS, son:

- Simplicidad en el equipo empleado.
- Permiten un barrido rápido de la muestra, con el propósito de estudiar el rango completo de las trampas que están contenidas en ésta.
- Trabaja bien para concentraciones de defectos ( $N_T$ ) mayores o iguales al diez por ciento de la densidad de impurezas donadoras de nivel poco profundo ( $N_D$ ), es decir  $N_T \geq 0.1N_D$  y energías de activación  $\Delta E \geq 0.3$  eV.
- TSC puede emplearse en materiales altamente resistivos, en donde es difícil realizar mediciones de DLTS.

Estas técnicas presentan la desventaja de que la información obtenida es más limitada y más difícil de interpretar en comparación a DLTS. La limitación de la información se refiere a que estas técnicas se encontraron restringidas a constantes de tiempo relativamente grandes, debido a la respuesta lenta del aparato de grabación, lo que en consecuencia requiere que la temperatura de la muestra se mantenga estable para cada medición. Aunado a esta situación, para caracterizar completamente a una muestra, se requiere medir en un intervalo amplio de temperaturas, con el propósito de buscar niveles de energía posicionados entre el borde de alguna de las bandas y la mitad del ancho de banda prohibida (Blood, y otros, 1992). El proceso de medición de las técnicas de estimulación térmica incluye los siguientes pasos:

1. Se enfría el dispositivo, por lo que las trampas pueden llenarse de dos maneras posibles:
  - a. Con portadores mayoritarios a una polarización de cero.

- b. Con portadores minoritarios, por medio de una inyección óptica o bien polarizando directamente a la unión.
2. El dispositivo se polariza inversamente.
  3. Calentamiento de la muestra a una razón constante.
  4. La capacitancia o la corriente en estado estacionario se miden como función de la temperatura.

| TSC  | TSCAP  |
|--|--|
| Los picos obtenidos dependen de la razón de calentamiento de la muestra.   | Los picos obtenidos son independientes de la razón de calentamiento.   |
| Es influenciada por las corrientes de fuga, pues éstas aumentan rápidamente en forma proporcional a la temperatura (Blood, y otros, 1992) <sup>4</sup> . | No hay una influencia por las corrientes de fuga (pero el tamaño de ésta debe permitir la medición de la capacitancia).    |
| No hay una discriminación entre trampas de portadores mayoritarios y minoritarios.   | Permite discriminar entre trampas de portadores mayoritarios y minoritarios, debido al cambio de signo de la capacitancia. |
| La emisión de los portadores provenientes de las trampas es observada a través de los picos de corriente.  | Los portadores emitidos se observan mediante escalones en la capacitancia.   |
| El área bajo la curva permite obtener la densidad de las trampas.  | La altura del escalón de la curva TSCAP es el medio para obtener la densidad de los centros de atrapamiento.               |

Tabla 1.2 Comparación entre TSC y TSCAP.

<sup>4</sup> Aunque la adición de la corriente de fuga generalmente no presente problemas (puesto que permanece constante a menos que sea lo suficientemente grande como para ocultar el transitorio de corriente) (Sch061), la influencia de dicha corriente en las técnicas de medición de transitorios de corriente hace que éstas sean menos populares que las mediciones de los transitorios de capacitancia (Blood, y otros, 1992).

### 1.1.3.2 DLTS

La técnica de Espectroscopía de Transitorios de Niveles Profundos (Deep Level Transient Spectroscopy) concebida por David Lang en 1974 (Lang, 1974), supera las limitaciones a las cuales están propensas las técnicas TSC y TSCAP. En DLTS, el diodo a analizar se somete a una polarización cercana a cero  $V_f$ , la cual se mantiene por un periodo  $t_f$  durante el cual se llenan las trampas con portadores mayoritarios. Posteriormente se aplica una polarización inversa  $V_r$  con el fin de vaciar las trampas de portadores (electrones) a una razón de emisión  $e_n$ , y mediante un medidor de capacitancia conectado a la muestra, se tiene como salida un transitorio de capacitancia exponencial. El proceso de llenado y vaciado de las trampas es periódico a un tiempo  $t_r$ . A medida que el diodo se calienta lentamente (barrido térmico), se obtiene una serie de transitorios de emisión de portadores que son registrados nuevamente por el medidor de capacitancia y son procesados mediante alguno de los siguientes filtros: Box-Car, Lock-In o Correlator exponencial. Este procesamiento genera un espectro en función de la temperatura, tal que los picos se relacionan a trampas de portadores mayoritarios o de minoritarios. Dicho espectro representa la llamada señal DLTS, cuyo análisis permite extraer los parámetros de los niveles profundos en cuestión.

Lo esencial de esta técnica es proveer, con el filtro analógico empleado, una “ventana de razones”, la cual entrega un máximo en la salida cuando la constante de tiempo  $\tau$  del transitorio bajo proceso es igual a la constante de tiempo preestablecida  $\tau_{ref}$  (Blood, y otros, 1992) por el equipo de filtrado. Dicho máximo determina la altura del pico correspondiente en el espectro DLTS y con ella es posible calcular la concentración de defectos presentes en el semiconductor. Al modificar el valor de la ventana de razones y repetir el

barrido en temperatura, se puede obtener una serie de espectros DLTS los cuales sirven para construir una gráfica de Arrhenius para cada máximo o mínimo en el espectro, con la cual es posible obtener el valor de la sección eficaz de captura y la energía de activación de cada defecto, a través del valor de la ordenada al origen y de la pendiente de cada recta resultante, respectivamente.

Originalmente, DLTS realizaba el procesamiento de señales de forma analógica. Es decir, las señales se analizan en tiempo real conforme la temperatura va en ascenso o descenso. Además, es posible promediar varios transitorios por medio de los filtros antes mencionados, con el fin de mejorar la razón señal-ruido (SNR) los cuales producen una salida de voltaje directo. La salida del filtro se obtiene al multiplicar la señal de salida del capacitómetro (el transitorio capacitivo) por una función de pesado dependiente del tiempo, la cual es característica del tipo de filtro analógico a utilizar.

En la actualidad es posible digitalizar los transitorios en una serie de tiempo, lo cual no impide llevar a cabo una aproximación del proceso de filtrado antes descrito, con la posibilidad de extender el análisis mediante diversos procedimientos numéricos disponibles. Algunos de estos son: el método de Prony, ajuste por mínimos cuadrados, el método de Laplace-Padé o algún método regularizado de la transformada de Laplace, entre otros.

#### 1.1.3.2.1 TRANSITORIOS NO EXPONENCIALES

En la técnica convencional de DLTS se asume que la forma del transitorio es exponencial, lo cual se considera como el caso ideal, sin embargo, puede presentarse la situación de tener un transitorio que no lo sea (no-exponencial).

Cuando se trata de un caso no ideal, las relaciones convencionales entre el espectro de DLTS, la concentración de niveles profundos y la razón de emisión térmica requieren un análisis más detallado. La manera de comprobar la exponencialidad de un transitorio es a través de la técnica de múltiple compuerta, en la cual se usan más de dos compuertas para muestrear al transitorio y con un solo barrido térmico, es posible establecer diferencias entre las distintas combinaciones de estas señales para producir espectros DLTS a valores diferentes de  $\tau_{ref}$ . En otras circunstancias, es posible que las condiciones experimentales se ajusten con el propósito de obtener un transitorio más satisfactorio. Algunas de las causas que producen transitorios no-exponenciales (Blood, y otros, 1992) son:

- I. Cuando la concentración de trampas ( $N_T$ ) sea similar al nivel de impurificación de base ( $N_B$ ), debido a que se presenta un cambio significativo en el “volumen de observación” durante el periodo de observación, es decir que el ancho de la zona de carga se mueve de forma significativa debido a la gran cantidad de defectos. Esto puede corroborarse al analizar la solución a la ecuación de Poisson.
- II. En el caso de existir una dependencia de la razón de emisión térmica con respecto al campo eléctrico ( $\mathcal{E}$ ), entonces la razón de emisión de los electrones  $e_n$  varía con la posición a través de la RCE. Esta alteración se debe a la variación espacial del campo eléctrico, es decir, puesto que el campo eléctrico es función de la posición y la razón de emisión es función del campo eléctrico, se deduce que la razón de emisión térmica es función de la posición.
- III. Cuando el valor de la razón de emisión de los electrones  $e_n$  en una trampa específica depende del ambiente local en el cristal, por ejemplo, en una aleación semiconductor, donde existe una variación estadística

en las especies vecinas más cercanas, lo que conduce a una distribución de los valores de dicho parámetro a través de la muestra.

- IV. Uniones graduadas.
  - V. Niveles de impurificación no uniformes.
  - VI. Niveles de energía cercanos entre sí dentro de la banda prohibida, dando como resultado una distribución cuasi-continua de estados localizados.
- En este trabajo de tesis, se utiliza esta causa para efectos de simular los transitorios de capacitancia, lo cual se verá a detalle más adelante.

#### 1.1.4 PROBLEMAS MAL PLANTEADOS

De acuerdo con Hansen (Hansen, 2010), existen dos clases de problemas: directos e inversos. En los problemas directos se obtiene un resultado a partir de un sistema y la entrada a este mismo, mientras que en los inversos (también conocidos como mal planteados) se determina ya sea la entrada o el sistema a partir de la salida.

En este trabajo, se resuelven ambos tipos de problemas. La solución al problema directo consiste en simular los transitorios de capacitancia a partir de los parámetros reportados por los autores de los estudios en combinación a los modelos físicos existentes. El problema inverso se resuelve al aplicar algunos de los distintos métodos numéricos de análisis no-exponencial a los transitorios simulados (a los cuales se les añade una componente de ruido blanco para efectos más realistas), con el propósito de determinar los valores de las amplitudes, razones de emisión y el desplazamiento de la línea de base (en caso de existir) que produjeron el transitorio capacitivo. Es decir, de la solución al problema directo se puede calcular el valor de los parámetros que producen al transitorio ideal (sin ruido), y con la solución al problema inverso, es posible



comparar entre otras cosas, la precisión de los valores obtenidos por cada uno de los métodos cuando el transitorio está formado por una o más componentes exponenciales.

El término de problema mal planteado fue acuñado por Hadamard a principios del siglo XX, quien trabajó en problemas de física matemática. Él definió un problema como bien planteado si cumple con las tres condiciones siguientes:

1. Existencia de alguna solución.
2. Unicidad de la solución.
3. Estabilidad.

La primera condición establece que el problema debe tener al menos una solución, la segunda hace referencia a que la solución al problema debe de ser única. Por último, la tercera condición se refiere a que la solución debe depender continuamente de los datos. Cuando un problema viola al menos alguna de ellas se considera como mal planteado.

Bajo la condición de existencia se pueden formular de forma sencilla problemas que no tengan una solución, sin embargo, el problema puede reformularse ligeramente con el propósito de cumplir dicha condición (por ejemplo, empleando el método de mínimos cuadrados). La condición de unicidad puede cumplirse al reformular el problema mediante la elección cuidadosa de requisitos y su posterior incorporación a la solución.

Por último, la existencia de perturbaciones arbitrariamente pequeñas en los datos puede producir perturbaciones arbitrariamente grandes en la solución, lo que conlleva al incumplimiento de la condición de estabilidad. Para que ésta se

cumpla, el problema debe reformularse de tal forma que la solución al nuevo problema sea menos sensible a dichas perturbaciones, mediante dos maneras posibles:

1. Estabilización.
2. Regularización.

En el capítulo 2 se hablará con más detalle sobre cómo garantizar que esta última condición se cumpla. Entonces, la clave para convertir a un problema mal planteado en uno bien planteado es la reformulación del problema en términos de la(s) condición(es) que se desee cumplir.

## 1.2 ANTECEDENTES

En 1999, Andrei A. Istratov y Oleg G. Vyvenko, publicaron el artículo “Exponential analysis in physical phenomena” (Istratov, y otros, 1999). En él, se hace una revisión de los diferentes métodos de análisis exponencial y no-exponencial. Ellos clasificaron a los métodos de la siguiente manera:

1. Análisis mono exponencial.
2. Análisis multiexponencial.
3. Métodos espectroscópicos para el análisis de decaimientos no-exponenciales.

En este trabajo de tesis, se emplearon algunos de los métodos expuestos por Istratov y Vivenko, los cuales son:

1. Método de Prony.
2. Aproximación por funciones racionales (Laplace-Padé).

Estos son métodos algebraicos basados en una ecuación que contempla tanto a la señal  $f(t)$ , como a las constantes de tiempo y las amplitudes del decaimiento. Ellos manifiestan que el procedimiento estándar para realizar una comparación de los distintos algoritmos de análisis es que éstos sean aplicados a uno o más conjuntos de datos experimentales o simulados (éstos últimos son usados en este trabajo), con el propósito de comparar la exactitud de la solución, la sensibilidad al ruido respecto a los datos de entrada, y el tiempo necesario para obtener las soluciones.

Así mismo, mencionan que diferentes métodos de ajuste han sido aplicados a datos simulados u obtenidos experimentalmente por varios investigadores. Además, afirman que dada la naturaleza del mal planteamiento de un problema que involucra varias componentes exponenciales, los resultados que se obtienen son menos concluyentes, pues se debe recordar que este tipo de problemas pueden tener una o más soluciones, o inclusive ninguna, a diferencia de los problemas bien planteados, dado que en éstos el procedimiento de comparación de los distintos métodos funciona correctamente.

El problema de la recuperación de los parámetros causantes de los fenómenos transitorios (problema inverso) se considera como mal planteado, porque no se cumple con las condiciones de unicidad y estabilidad. El incumplimiento a la condición de unicidad se debe a que los métodos de análisis no-exponencial pueden producir más de una solución al problema, mientras que la condición de estabilidad no se cumple debido a la presencia del ruido inherente en los dispositivos que se estudian, lo cual se ve reflejado en los transitorios.

Analizar los transitorios de capacitancia se considera como un problema inverso, puesto que a partir del conjunto de datos (salida) y del sistema que los registró (software en el caso de simulación o hardware como instrumento de medición experimental), se requiere obtener el valor de los parámetros que originaron dicho fenómeno (entrada). Dada la causa de la no-exponencialidad abordada en este trabajo, y tomando en cuenta que si la densidad de un solo defecto es mucho menor a la densidad de los dopantes en el material produce un transitorio exponencial, se infiere que los transitorios que aquí se analizan están conformados por una suma de exponenciales.

Por otro lado, en palabras de los autores, una comparación exhaustiva de los métodos de análisis no-exponencial se considerará así siempre y cuando (Istratov, y otros, 1999):

1. Todos los métodos sean probados usando los mismos datos de entrada.
2. Las pruebas incluyan transitorios con un número variado de componentes de decaimiento, proporción de las amplitudes y razones de decaimiento de los componentes, nivel de ruido, desplazamiento de la línea de base, relación entre el tiempo de adquisición del decaimiento y la constante de tiempo de decaimiento  $T/\tau$ , y en caso de aplicar, una aproximación inicial para realizar el ajuste.

Sin embargo, como lo especifican los autores y por tratarse solamente de un artículo de revisión, la comparación exhaustiva va más allá del alcance de éste. Por otro lado, declaran que los requisitos para un análisis exhaustivo no son cumplidos por las fuentes bibliográficas, pues al analizarlas, encontraron que los distintos autores presentaron resultados contradictorios, puesto que fueron

empleados conjuntos de transitorios completamente diferentes para probar los métodos analíticos.

Por otra parte, y a pesar de las discrepancias encontradas en la literatura en relación al rendimiento que presentan los distintos métodos, los autores de este artículo concluyeron que, respecto al límite de resolución presente en todos los métodos que se discutieron (determinado por la Relación Señal-Ruido en los transitorios de entrada), casi todos estos métodos son capaces de alcanzar el límite de resolución fundamental, lo cual implica que la resolución del método no es un criterio para preferir uno sobre otro.

### 1.3 JUSTIFICACIÓN

Las referencias consultadas exponen los métodos de análisis aplicados a datos simulados o experimentales en sus respectivos campos de estudio, en nuestro caso se analizan valores simulados de capacitancia en función del tiempo. Como se mencionó anteriormente, la desventaja principal del DLTS convencional es su dificultad para analizar transitorios capacitivos no-exponenciales. Con los resultados proporcionados por DLTS o alguna de las técnicas antes mencionadas para estudiar la presencia de niveles profundos en los semiconductores, se pueden proponer cambios en los procesos de fabricación de este tipo de materiales y/o dispositivos para el uso al que estén destinados. Por lo tanto, los resultados del estudio de los métodos numéricos de análisis no-exponencial tratados en este trabajo pueden servir como referencia para el diseño de un sistema experimental de caracterización de niveles profundos en semiconductores, el cual supere los resultados obtenidos por el método de DLTS convencional.

#### 1.4 APORTACIONES DEL ESTUDIO

El estudio del desempeño de algunos de los diferentes métodos de análisis mono y multi-exponencial bajo distintas condiciones, como son: ruido, número de componentes exponenciales y desempeño a nivel computacional, permitirá compararlos para su uso tanto en la caracterización de semiconductores con defectos como en otras áreas, como son: medicina, bioquímica, química, electroquímica, biología, biofísica, geofísica, óptica, ingeniería y fisiología (Ise69)

#### 1.5 HIPÓTESIS

La comparación entre distintos algoritmos de análisis no-exponencial bajo diversas condiciones permitirá seleccionar alguno(s) de ellos para ser usado(s) convenientemente en el diseño de un montaje experimental basado en el análisis de transitorios capacitivos y/o señal DLTS resultante para caracterizar niveles profundos en semiconductores.

#### 1.6 OBJETIVOS

##### 1.6.1 OBJETIVO GENERAL

Determinar el (los) mejor(es) método(s) de análisis no-exponencial para que en un trabajo futuro pueda(n) ser usado(s) en el software para ser implementado en un sistema de caracterización de niveles profundos de energía en materiales semiconductores.

##### 1.6.2 OBJETIVOS PARTICULARES

1. Obtener el conocimiento teórico relacionado con los defectos profundos en semiconductores y sus manifestaciones eléctricas mediante los modelos que describen los fenómenos transitorios de capacitancia.

2. Conocer los distintos métodos de caracterización de los niveles profundos, principalmente DLTS.
3. Solución del problema directo consistente en calcular los transitorios producidos por uno o más niveles profundos, conociendo sus parámetros característicos.
4. A partir de los transitorios, realizar la simulación de la señal DLTS que tradicionalmente se obtiene usando los filtros analógicos más comunes: Box-Car y Lock-In.
5. Solución del problema inverso mediante los diferentes métodos estudiados. Ésta consiste en extraer los valores de las amplitudes, razones de emisión, y la línea de base que caracterizan a un transitorio, ya sea exponencial o no-exponencial.

## CAPÍTULO 2: TEORÍA

### 2.1 NIVELES PROFUNDOS EN MATERIALES SEMICONDUCTORES

#### 2.1.1 INTRODUCCIÓN

A diferencia de los niveles de energía superficiales, los cuales se encuentran próximos ya sea a la banda de valencia o a la banda de conducción en un material semiconductor, los niveles profundos son niveles de energía de estados localizados<sup>5</sup>, los cuales se encuentran más allá de las proximidades del borde de cualquiera de estas bandas de energía. Contrario a un nivel superficial, un nivel profundo se distingue por el hecho de que el electrón se encuentra fuertemente ligado, es decir que para poder desprender a dicho electrón del centro de atrapamiento se necesita una mayor energía.

Durante el proceso de fabricación de un dispositivo semiconductor, los niveles profundos pueden producirse de las dos formas siguientes:

1. Intencional.
  - Impurezas (por ejemplo, Au y Pt en Si).
2. No-intencional.
  - Impurezas (por ejemplo, O, Fe y Na en Si).
  - Vacancias y divacancias.
  - Fallas de apilamiento.
  - Dislocaciones de borde.
  - Precipitados.
  - Defectos Frenkel.

#### 2.1.2 ESTADÍSTICA DE GENERACIÓN-RECOMBINACIÓN

---

<sup>5</sup> Son aquellos estados en donde las funciones de onda decaen rápidamente (Jaros, 1982)



La interacción entre los defectos y el semiconductor ocurre a través de procesos de captura y emisión de portadores que se presentan entre las bandas y el nivel profundo. Tales procesos se ilustran en la Figura 2.1. El proceso (a), en el cual un nivel profundo captura un electrón proveniente de la banda de conducción es caracterizado por una razón de captura de electrón  $c_n$ . Luego de capturar al electrón, puede ocurrir el evento (b) que representa la emisión del electrón de regreso a la banda de conducción, el cual es caracterizado por su razón de emisión  $e_n$ ; una alternativa es que podría ocurrir el proceso (c) en el cual dicho nivel puede capturar un hueco que provenga de la banda de valencia y se caracteriza por la razón de captura de huecos  $c_p$ , posteriormente puede ocurrir la emisión de éste de vuelta a la banda de valencia, evento denotado como (d) y caracterizado por una razón de emisión de huecos, o bien puede suceder que el nivel profundo capture a un electrón, es decir ocurre el proceso (a). Más adelante se hablará detalladamente sobre las razones de captura y emisión.

Cuando ocurre la captura de un electrón seguida de la captura de un hueco (procesos (a) y (c), respectivamente), se dice que se produce un evento de recombinación. Análogamente, al ocurrir la emisión de un electrón después de la emisión de un hueco (procesos (b) y (d), respectivamente) se produce un evento de generación. Nótese que en cada uno de estos eventos participan ambas bandas; si lo anterior ocurre con una frecuencia alta, se dice que el nivel profundo actúa como centro de G-R.

Sin embargo, puede ocurrir un tercer evento denominado atrapamiento en donde sólo uno de los portadores de carga es *capturado por el nivel profundo y después de permanecer allí un cierto tiempo es emitido hacia la banda de la cual*

proviene, por lo cual sólo participa el nivel profundo y una de las dos bandas. Por esta razón dicho nivel se conoce como una trampa.

Con frecuencia, los defectos localizados en energías cercanas a la mitad del ancho de banda prohibida actúan como centros de G-R, mientras que aquellos cuyas energías se encuentran cerca de alguno de los bordes de las bandas, se comportan como trampas. Se dice que la razón de emisión de los electrones para los centros de G-R que se encuentran en la mitad superior del ancho de banda prohibida es mayor que la de los huecos. De forma similar, para los centros de G-R que se encuentren en la mitad inferior de la banda prohibida, la razón de emisión de los huecos es mayor que la de los electrones. Para la mayor parte de los centros de G-R, sólo un tipo de razón de emisión es la que domina, por lo tanto, la otra puede despreciarse (Schroder, 2006).

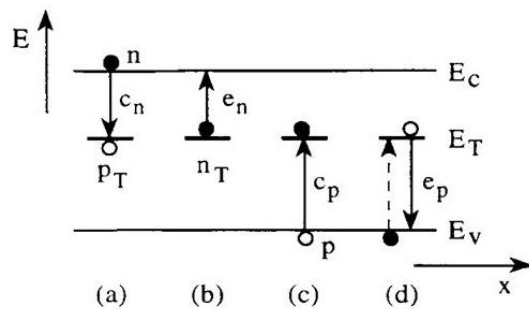


Figura 2.1 Diagrama de bandas para un semiconductor con niveles profundos de energía. (a) captura de electrón. (b) emisión de electrón. (c) captura de hueco. (d) emisión de hueco.

### 2.1.3 PROCESOS DE GENERACIÓN Y RECOMBINACIÓN

Bajo la condición de equilibrio térmico, se cumple:

$$np = n_i^2, \quad (2.1)$$

donde  $n_i$  es la concentración intrínseca,  $n$  es la densidad de electrones libres y  $p$  es la densidad de huecos. La gran mayoría de los dispositivos semiconductores funcionan bajo la condición de inyección de portadores, ya sea por medio de una excitación óptica o mediante polarización directa. Es decir, cuando se introduce un exceso de portadores al semiconductor, se altera la condición de equilibrio en el material, por lo que la relación anterior no se cumple, de forma que:

$$np > n_i^2. \quad (2.2)$$

La recombinación es el fenómeno que restaura el equilibrio cuando hay un exceso de portadores (por inyección en el dispositivo) y se caracteriza porque la captura domina sobre su emisión. Cuando ésta ocurre, la energía que se libera puede presentarse como un fotón emitido (recombinación radiativa) o bien, en forma de calor disipado hacia la red cristalina<sup>6</sup> (recombinación no radiativa). Es decir, la recombinación puede ser directa o indirecta. El primer tipo de recombinación también es conocido como recombinación banda a banda, y generalmente está presente en los semiconductores de banda directa (por ejemplo, en el GaAs), mientras que la recombinación indirecta se efectúa en semiconductores con banda indirecta, tales como el Si y Ge.

Por otro lado, cuando existe una deficiencia de portadores dentro del semiconductor, debida a la extracción de éstos luego de aplicar una polarización

---

<sup>6</sup> Dado que casi siempre el nivel profundo está acoplado firmemente a la red cristalina, la energía y la magnitud del momento que al principio pertenecieron a ambos portadores, pueden convertirse en vibraciones de la red cristalina (fonones).

inversa al material, la relación expresada en (2.1) tampoco se cumple, y en su lugar, es válida:

$$np < n_i^2. \quad (2.3)$$

Entonces, para restaurar la concentración de portadores a sus valores en equilibrio y lograr con ello que se cumpla la relación expresada en (2.1), éstos tienen que ser generados. Este fenómeno de generación se caracteriza porque la emisión de los portadores domina sobre su captura.

## 2.2 TRANSITORIOS CAPACITIVOS

### 2.2.1 INTRODUCCIÓN

En este apartado, se describe a los centros profundos con sus densidades, razones de captura y de emisión. Un nivel profundo puede encontrarse en uno de dos estados de ocupación:

1. Por un electrón.
2. Por un hueco (o bien desocupado por un electrón).

Por ejemplo, cuando este centro es un donador, al capturar un electrón se considera como neutro y al ocuparse con un hueco éste se carga positivamente. Análogamente, cuando el centro es un aceptor, al ocuparse por un electrón se encuentra cargado negativamente, mientras que, si es ocupado por un hueco, queda neutro eléctricamente.

Las densidades de centros que se encuentran ocupados por electrones ( $n_T$ ) y huecos<sup>7</sup> ( $p_T$ ) deben sumar la densidad total ( $N_T$ ):

---

<sup>7</sup> También puede decirse que el nivel profundo en cuestión se encuentra desocupado.

$$N_T = n_T + p_T. \quad (2.4)$$

La generación-recombinación de los portadores de carga, la densidad de dichos portadores en sus respectivas bandas de energía, así como la densidad de centros ocupados por electrones o huecos, son dependientes del tiempo. De aquí en adelante, se analizará el caso de la captura y emisión de electrones, tomando en cuenta que en el caso de los huecos las expresiones resultantes son análogas. La captura de electrones disminuye la densidad de éstos en la banda de conducción, mientras que el proceso de emisión incrementa su densidad en la misma banda. Por lo anterior se establece que la razón de cambio de los electrones libres (que interactúan con el nivel profundo) con respecto al tiempo, se expresa como:

$$\left. \frac{dn}{dt} \right|_{G-R} = e_n n_T - c_n p_T. \quad (2.5)$$

El incremento de electrones libres que se expresa en el primer término de la ecuación anterior<sup>8</sup> depende de la razón de emisión y de los defectos ocupados  $n_T$ . La razón de emisión de electrones  $e_n$  representa a los electrones que son emitidos por segundo desde los centros de G-R que se encuentran ocupados por ellos, sus unidades son  $\frac{1}{s}$ . En cambio, la disminución expresada en el segundo término depende de la rapidez con que los electrones son capturados, de la concentración de estos en la banda de conducción y de los defectos ocupados por huecos (o desocupados por electrones). La razón de captura de

---

<sup>8</sup> Para el proceso de emisión no se considera a la densidad de electrones libres ( $n$ ), pues no se necesita.

electrones  $c_n$ , representa la frecuencia a la cual dichos portadores son capturados, tal que sus unidades son  $\frac{1}{s}$  y que está dada por:

$$c_n = \sigma_n v_n n, \quad (2.6)$$

donde  $\sigma_n$  representa la sección transversal de captura de los electrones,  $v_n$  es la velocidad térmica de estos portadores y  $n$  es la densidad de electrones en la banda de conducción, de forma que sus unidades son:  $cm^2$ ,  $\frac{cm}{s}$  y  $cm^{-3}$ , respectivamente. Así pues, el coeficiente de captura de los electrones, cuyas unidades son  $\frac{cm^3}{s}$ , se define

$$\frac{c_n}{n} = \sigma_n v_n. \quad (2.7)$$

De acuerdo a (Schroder, 2006), resulta de mayor utilidad modificar esta perspectiva, a manera de que los electrones permanezcan inmóviles, mientras que los centros de G-R sean los que se muevan a una velocidad  $v_n$ , luego, estos centros son los que barren un volumen por unidad de tiempo, es decir que los electrones que se encuentren en este volumen tienen una mayor probabilidad de ser capturados. De las expresiones (2.6) y (2.7) se deduce que la razón de captura de los huecos, así como su coeficiente de captura están dados por:

$$c_p = \sigma_p v_p p \quad (2.8)$$

$$\frac{c_p}{p} = \sigma_p v_p, \quad (2.9)$$

donde  $\sigma_p$  representa la sección transversal de captura de los huecos,  $v_p$  es la velocidad térmica de estos portadores y  $p$  es la densidad de huecos en la banda de valencia. Las unidades y el significado físico de estos parámetros son similares al caso de los electrones. De manera análoga, la razón de cambio de los huecos en la banda de valencia respecto al tiempo debida a la interacción con el defecto se expresa como:

$$\left. \frac{dp}{dt} \right|_{G-R} = e_p p_T - c_p n_T. \quad (2.10)$$

La generación de pares electrón-hueco a través del centro de G-R se produce reiterativamente de la siguiente manera: El nivel de energía del defecto se encuentra inicialmente desocupado por un electrón; en seguida se ocupa por un electrón proveniente de la banda de valencia, lo cual equivale a una emisión de un hueco; a continuación, el electrón en el defecto pasa a la banda de conducción, lo cual constituye la emisión del electrón. El resultado final es un par electrón-hueco en las bandas respectivas, teniendo al nivel  $E_T$  del centro como un intermediario en el proceso de transición electrónica.

Si los procesos de cambio expresados en (2.5) y (2.10) se realizan en condiciones de equilibrio térmico, se garantiza el cumplimiento del principio del balance detallado, el cual establece que la velocidad de generación de portadores es igual a la velocidad de recombinación de éstos. De forma general, este principio establece que, bajo la condición de equilibrio térmico cualquier proceso microscópico dado y su proceso inverso, debe producirse a la misma velocidad (McKelvey, 1980).

Respecto a las secciones transversales de captura, éstas presentan una variación amplia, la cual depende del estado de la carga del centro de G-R, es decir, si éste se encuentra cargado de forma positiva, negativa o neutra (Schroder, 2006). Por ejemplo:

1. Cuando un centro de G-R tiene carga negativa o repulsiva, su sección transversal de captura es más pequeña que la de un centro que posee una carga neutra o positiva (atractiva).
2. Las secciones transversales de captura que son neutras son del orden de  $10^{-15} \text{cm}^2$ , pues es aproximadamente el tamaño físico del átomo (Schroder, 2006).

Cuando un portador es capturado o emitido, la ocupación del centro de G-R se modifica, por lo que su razón de cambio (la cual es el resultado de combinar las ecuaciones anteriores) se expresa:

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{dn_T}{dt} \right|_{G-R} &= \frac{dp}{dt} - \frac{dn}{dt} \\
 &= (e_p p_T - c_p n_T) - (e_n n_T - c_n p_T) \\
 &= e_p p_T - c_p n_T - e_n n_T + c_n p_T \quad . \quad (2.11) \\
 &= (c_n + e_p) p_T - (c_p + e_n) n_T \\
 &= (c_n + e_p)(N_T - n_T) - (c_p + e_n) n_T
 \end{aligned}$$

La ecuación anterior es no lineal, en donde las variables  $n$  y  $p$  (implícitas en  $c_n$  y  $c_p$ ) son dependientes del tiempo, y para que ésta pueda resolverse de forma sencilla se debe linealizar, para lo cual se toma en cuenta lo siguiente (Schroder, 2006):

1. Cuando se trata de una unión, ya sea P-N o metal-semiconductor, si ésta se encuentra polarizada inversamente, en su región de carga espacial las



concentraciones de ambos tipos de portadores son pequeñas y por lo tanto éstas pueden despreciarse.

2. En las regiones cuasi neutras, las concentraciones de electrones y huecos son razonablemente constantes.

Al resolver la ecuación anterior en la zona de carga, usando ambas razones se tiene

$$n_T(t) = n_T(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) + \frac{(e_p+c_n)N_T}{e_n+c_n+e_p+c_p} \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right), \quad (2.12)$$

donde  $n_T(0)$  representa a la densidad de centros de G-R ocupados por electrones cuando  $t = 0$  y  $\tau = 1/(e_n + c_n + e_p + c_p)$ . Esta última ecuación es difícil de resolver por lo siguiente:

1. Tanto las razones de captura como de emisión son desconocidas.
2. Las concentraciones de electrones y huecos presentan una variación respecto al tiempo y a la posición dentro de un dispositivo.

Para permitir una interpretación de los datos, se deben efectuar algunas simplificaciones experimentales. Por ejemplo, cuando se tiene un substrato tipo-n, tanto la concentración de huecos como los coeficientes de captura de éstos se pueden despreciar, por lo que dicha ecuación se aproxima como

$$n_T(t) = n_T(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) + \frac{(e_p+c_n)N_T}{e_n+c_n+e_p} \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right)\right), \quad (2.13)$$

en donde  $\tau_1 = 1/(e_n + c_n + e_p)$ . Al considerar la expresión anterior, y suponiendo que se trate de una unión metal-semiconductor de tipo-n con una polarización cercana a 0 V y  $n$  electrones móviles, puede decirse que la captura de éstos domina sobre su emisión (dado que  $E_T < E_F$ ), por lo que la densidad total de centros de G-R ocupados por electrones en estado estacionario es

$$n_T \approx N_T. \quad (2.14)$$

Esta aproximación se debe tanto al tipo de substrato, como al proceso de captura, el cual refleja que el centro de G-R se encuentra mayormente ocupado por electrones. Ahora bien, cuando el dispositivo pasa de una polarización cercana a cero a una polarización inversa, los electrones son emitidos desde tales centros ya que ahora el nivel de la trampa está sobre el nivel de Fermi ( $E_T > E_F$ ) para un tiempo  $t > 0$ . Es decir que, bajo una polarización inversa el fenómeno de emisión domina sobre la captura, puesto que los electrones emitidos son barridos rápidamente de la región de carga espacial a causa del intenso campo eléctrico, y en consecuencia disminuye la probabilidad de que estos portadores sean atrapados nuevamente.

Sin embargo, cerca del borde de la región de carga espacial, la densidad de electrones libres disminuye hacia el interior de ésta desde la región cuasi-neutra, incluso bajo una polarización inversa. Lo anterior implica que el término  $c_n$  en dicha ecuación no sea despreciable en el límite de ambas regiones, por lo que la emisión de electrones compite con su correspondiente captura. Además, si la densidad de electrones libres no es espacialmente homogénea, es decir que  $n = n(x)$ , entonces se considera que  $\tau$  no es constante y en consecuencia la dependencia del tiempo de  $n(t)$  puede ser no-exponencial.

Del análisis anterior se deduce que al tomar en cuenta solamente a los centros de G-R que se encuentran en la mitad superior de la banda prohibida y dentro de la zona de carga espacial, de forma que  $e_n \gg e_p$ , tanto el término  $e_p$  como  $c_n$  son despreciables en la expresión (2.13), es decir:

$$\begin{aligned} e_p &\approx 0 \\ c_n &\approx 0' \end{aligned} \quad (2.15)$$

por lo que (2.13) se convierte en

$$n_T(t) = n_T(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right), \quad (2.16)$$

y en consecuencia  $\tau_1$  puede reescribirse como

$$\tau_1 \equiv \tau_n = 1/e_n \quad (2.17)$$

con

$$e_n = \sigma_n v_n N_c \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right), \quad (2.18)$$

en donde:

$$v_n = \sqrt{\frac{3kT}{m_n^*}}$$

(2.19)

$N_c$  es la densidad efectiva de estados en la banda de conducción, y se expresa

$$N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} M_C. \quad (2.20)$$

Además,  $\Delta E$  es la energía de activación del nivel profundo y para el caso de una trampa de electrones, está dada por

$$\Delta E = E_c - E_T, \quad (2.21)$$

donde:

$k$  es la constante de Boltzmann.

$T$  es la temperatura absoluta.

$m_n^*$  representa a la masa efectiva del electrón.

$h$  es la constante de Planck.

$M_c$  es el número de mínimos equivalente en la banda de conducción.

$E_c$  representa el borde inferior de la banda de conducción.

Entonces durante el periodo de emisión inicial y empleando la aproximación de Boltzmann, la expresión (2.16) se simplifica a:

$$\begin{aligned} n_T(t) &= n_T(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau_n}\right) \\ n_T(t) &\approx N_T \exp\left(-\frac{t}{\tau_n}\right). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Por otro lado, bajo la condición de equilibrio térmico, la ocupación de los niveles profundos puede definirse mediante la estadística de Fermi-Dirac (Kittel, y otros, 1980). Ahora bien, para un nivel profundo con una degeneración  $g_0$  cuando se encuentra vacío de electrones y  $g_1$  cuando se encuentra ocupado por un electrón, la ocupación está dada por (Blood, y otros, 1992):

$$\frac{n_T}{N_T} = \left\{ 1 + \frac{g_0}{g_1} \exp\left(\frac{E_T - E_F}{kT}\right) \right\}^{-1}. \quad (2.23)$$

### 2.2.2 MEDICIONES DE CAPACITANCIA

Con estas mediciones se analizan los procesos de captura y emisión de portadores de carga dentro de un material semiconductor para el estudio de niveles profundos. En este trabajo se simula la capacitancia de algunos dispositivos semiconductores hechos de distintos materiales con base en los parámetros reportados por diversos autores. De forma general, la capacitancia para cualquier dispositivo puede determinarse a partir de (Sze, 1969):

$$C = \frac{\epsilon_s}{W} A, \quad (2.24)$$

donde:

$\epsilon_s$  representa a la permitividad del semiconductor.

$W$  es el ancho de la zona de deserción.

$A$  denota el área del dispositivo.

Los análisis del diodo Schottky y la unión P-N abrupta permiten obtener los tamaños de las regiones de vaciamiento correspondientes, mostradas en la tabla 2.1.

| Dispositivo | Expresión |
|-------------|-----------|
|-------------|-----------|

|                                      |  |
|--------------------------------------|--|
| Diodo Schottky tipo-n<br>(Sze, 1969) | $W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{qn} (V_{bi} - V - V_{th})}$ (2.25)  |
| Unión P-N abrupta<br>(Sze, 2002)     | $W = x_n + x_p$ (2.26)<br>$x_n = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s [V_{bi} - V] p_p}{qn_n [p_p + n_n]}}$<br>$x_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s [V_{bi} - V] n_n}{qp_p [p_p + n_n]}}$ |

Tabla 2.1 Expresiones matemáticas para calcular el ancho de la zona de carga para dos tipos de dispositivos.

De la tabla anterior, se determina que:

$q$  representa la carga del electrón.

$V$  es la polarización aplicada a la muestra.

$x_n$  es la longitud de la zona de deserción en la región tipo-n.

$x_p$  representa la longitud de la zona de vaciamiento en la región tipo-p.

$p_p$  es la concentración de huecos en la región tipo-p del material.

$n_n$  es la densidad de electrones libres en la región tipo-n.

$V_{th}$  denota el voltaje térmico, el cual está definido por:

$$V_{th} = \frac{kT}{q} \quad (2.27)$$

$V_{bi}$  es el potencial de contacto interno en la unión, expresado como:

$$V_{bi} = \varphi_m - \varphi_s, \quad (2.28)$$

Donde:

$\varphi_m$  representa la función de trabajo del metal.

$\varphi_s$  es la función de trabajo del semiconductor, la cual está dada por

$$\varphi_s = \chi_s + E_g - E_F, \quad (2.29)$$

a su vez:

$\chi_s$  es la afinidad electrónica del semiconductor.

$E_g$  representa al ancho de banda prohibida en el semiconductor.

Finalmente, la densidad de electrones libres se expresa

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right). \quad (2.30)$$

Usando la expresión (2.24) y los valores de la zona de vaciamiento de cada dispositivo en la tabla 2.1, se pueden verificar las expresiones de la tabla 2.2.

| Dispositivo                                   | Expresión  |
|---|--|
| Unión Metal-Semiconductor<br>(Schroder, 2006) | $C = A \sqrt{\frac{q\epsilon_s}{2}} \sqrt{\frac{N_{scr}}{V_{bi} - V - V_{th}}} \quad (2.31)$ |
| Unión P-N abrupta<br>(Sze, 1969)              | $C = A \sqrt{\frac{q\epsilon_s N_B}{2(V_{bi} \pm V)}} \quad (2.32)$                          |

Tabla 2.2 Expresiones matemáticas para calcular la capacitancia para dos tipos de dispositivos.

De la tabla 2.2, el parámetro  $N_{scr}$  es la densidad neta de impurezas ionizadas positivamente dentro de la región de carga espacial y  $N_B$  representa la concentración de impurezas (aceptoras o donadoras) del lado menos impurificado. Debe recordarse que en la práctica se observa solamente la región

menos impurificada de una unión P-N, pues en esta es donde se extiende mayormente la región de deserción.

Para un diodo Schottky que contenga impurezas de nivel profundo de tipo aceptor, éstas se encuentran cargadas negativamente (ocupadas por electrones), mientras que las impurezas poco profundas de los donadores (simbolizadas como  $N_D$ ) dentro de la región de carga espacial se encuentran cargadas positivamente, es decir

$$N_{scr} = N_D^+ - n_T^- \quad (2.33)$$

Cuando los niveles profundos de tipo aceptor se encuentran ocupados por huecos, entonces son neutros, por lo cual:

$$N_{scr} = N_D^+ \quad (2.34)$$

Sin embargo, si existen donadores de nivel profundo que se encuentren ocupados por huecos, éstos se cargan positivamente, de forma que

$$N_{scr} = N_D^+ + p_T^+ \quad (2.35)$$

En cambio, si están ocupados por electrones, nuevamente

$$N_{scr} = N_D^+$$

Existen dos tipos de mediciones de capacitancia para estudiar los niveles profundos:



1. En estado estacionario, es decir para  $t = 0$  y  $t = \infty$ .
2. Transitoriamente, esto es, medir su dependencia con el tiempo (método empleado en este trabajo)

### 2.2.2.1 TRANSITORIOS DE CAPACITANCIA EN DIODOS TIPO-N

Suponga un diodo Schottky con niveles donadores de tipo superficial ionizados en la región de carga espacial (cargados positivamente), así como la existencia de niveles profundos de tipo aceptor ocupados por electrones (cargados negativamente). En esta situación, al combinar las expresiones (2.31) y (2.33), es posible calcular el transitorio capacitivo de forma que:

$$\begin{aligned}
 C &= A \sqrt{\frac{q\epsilon_s}{2} \left( \frac{N_{scr}}{V_{bi}-V-V_{th}} \right)} \\
 &= A \sqrt{\frac{q\epsilon_s}{2} \left( \frac{N_D^+ - n_T^-}{V_{bi}-V-V_{th}} \right)} \\
 &= A \sqrt{\frac{q\epsilon_s}{2(V_{bi}-V-V_{th})} [N_D^+ - n_T^-]}. \tag{2.36} \\
 &= A \sqrt{\frac{q\epsilon_s N_D^+}{2(V_{bi}-V-V_{th})} \left[ 1 - \frac{n_T^-}{N_D^+} \right]} \\
 &= A \sqrt{\frac{q\epsilon_s N_D^+}{2(V_{bi}-V-V_{th})}} \sqrt{1 - \frac{n_T^-}{N_D^+}}
 \end{aligned}$$

Al tomar en cuenta el desarrollo anterior y combinarlo con la aproximación de Boltzmann expresada en (2.22), el transitorio de capacitancia para este caso se expresa:

$$C(t) = C_0 \sqrt{1 - \frac{n_T^-}{N_D^+} \exp\left(-\frac{t}{\tau_n}\right)}, \tag{2.37}$$

donde:

$$C_0 = A \sqrt{\frac{q \epsilon_s N_D^+}{2(V_{bi} - V - V_{th})}} \quad (2.38)$$

En la expresión anterior,  $C_0$  es la capacitancia del dispositivo polarizado inversamente y sin centros de atrapamiento. Se hace notar que en esta medición debe suponerse que la densidad de centros de atrapamiento es solamente una pequeña fracción de la densidad de impurezas en la región de carga espacial, es decir:

$$N_T \ll N_D. \quad (2.39)$$

Al emplear una expansión de primer orden para la raíz cuadrada en (2.37), se obtiene:

$$C(t, T) \approx C_0 \left[ 1 - \frac{N_T}{2N_D} \exp\left(-\frac{t}{\tau_n}\right) \right]. \quad (2.40)$$

De la expresión anterior se observa de forma explícita que el transitorio capacitivo además depende de la densidad de trampas ( $N_T$ ), mientras que implícitamente depende de la sección eficaz de captura ( $\sigma$ ) y de la energía de activación del defecto ( $\Delta E$ ). La manera más precisa de calcular un transitorio capacitivo, es mediante la estadística de Fermi-Dirac, pues tanto la concentración de portadores libres como la de impurezas ionizadas, además de la densidad de trampas ocupadas y la constante de tiempo de emisión, son función de la temperatura. En resumen, el transitorio es función del tiempo, la temperatura y los parámetros característicos del defecto. Tomando en cuenta que (2.23) puede expresarse en términos de (2.4), con:

$$\frac{g_0}{g_1} \approx 1, \quad (2.41)$$

entonces puede deducirse

$$n_T(T) = N_T \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_T - E_F}{kT}\right) \right]^{-1}, \quad (2.42)$$

por lo que (2.40) puede expresarse como:

$$C(t, T) \approx C_0 \left[ 1 - \frac{n_T(T)}{2n(T)} \exp\left(-\frac{t}{\tau_n(T)}\right) \right]. \quad (2.43)$$

En las expresiones (2.40) y (2.43),  $\tau_n$  representa la constante de tiempo del decaimiento para una trampa de electrones y está definida por:

$$\tau_n = \frac{1}{e_n}. \quad (2.44)$$

Para calcular un transitorio capacitivo no-exponencial mediante la estadística de Fermi-Dirac, considérense las expresiones siguientes:

$$C(t, T) = C_0(T) - \left( \sum_{i=1}^n \frac{n_{T_i}(T)}{2n(T)} C_0(T) e^{-\left(\frac{t}{\tau_{n_i}(T)}\right)} \right), \quad (2.45)$$

$$\tau_{n_i}(T) = \frac{1}{e_{n_i}(T)} = \sigma_{n_i} v_n(T) N_c(T) e^{-\frac{\Delta E_{T_i}}{kT}}, \quad (2.46)$$

$$C(t, T) = C_0(T) + \left( \sum_{j=1}^m \frac{n_{T_j}(T)}{2n(T)} C_0(T) e^{-\left(\frac{t}{\tau_{p_j}(T)}\right)} \right), \quad (2.47)$$

$$\tau_{p_j}(T) = \frac{1}{e_{p_j}(T)} = \sigma_{p_j} v_p(T) N_v(T) e^{-\frac{\Delta E_{T_j}}{kT}}, \quad (2.48)$$

de estas, (2.45) y (2.47) corresponden a un transitorio de portadores mayoritarios y minoritarios desde las trampas en una muestra tipo-n, respectivamente. Además, en estas expresiones se infiere que el subíndice  $i$  representa al  $i$ -ésimo parámetro que caracteriza al  $i$ -ésimo transitorio exponencial (lo cual es aplicable para el subíndice  $j$ ), mientras que en (2.47) y (2.48) cada subíndice  $p$  representa a un parámetro característico de los huecos. Así mismo, si se desea calcular un transitorio de capacitancia para una unión P-N mediante la aproximación de Boltzmann, se puede utilizar lo expresado en (2.40), o bien, si se desea emplear la estadística de Fermi-Dirac, se puede emplear ya sea a (2.43), (2.45) o (2.47), según sea el caso, salvo que el valor de  $C_0$  debe calcularse en términos del ancho de la zona de carga para este tipo de diodo, es decir, se debe sustituir en las expresiones antes mencionadas el valor de  $W$  descrito en (2.26).

Ya sea que se trate de una unión P-N o metal-semiconductor, el ancho de la región de carga espacial se altera de forma transitoria en presencia de una emisión de electrones desde las trampas. Al medir el transitorio de capacitancia, lo que se detecta es la variación de  $W$  con respecto al tiempo, en conclusión, la emisión de dichos portadores produce el transitorio capacitivo, lo cual puede observarse en la figura 2.2.

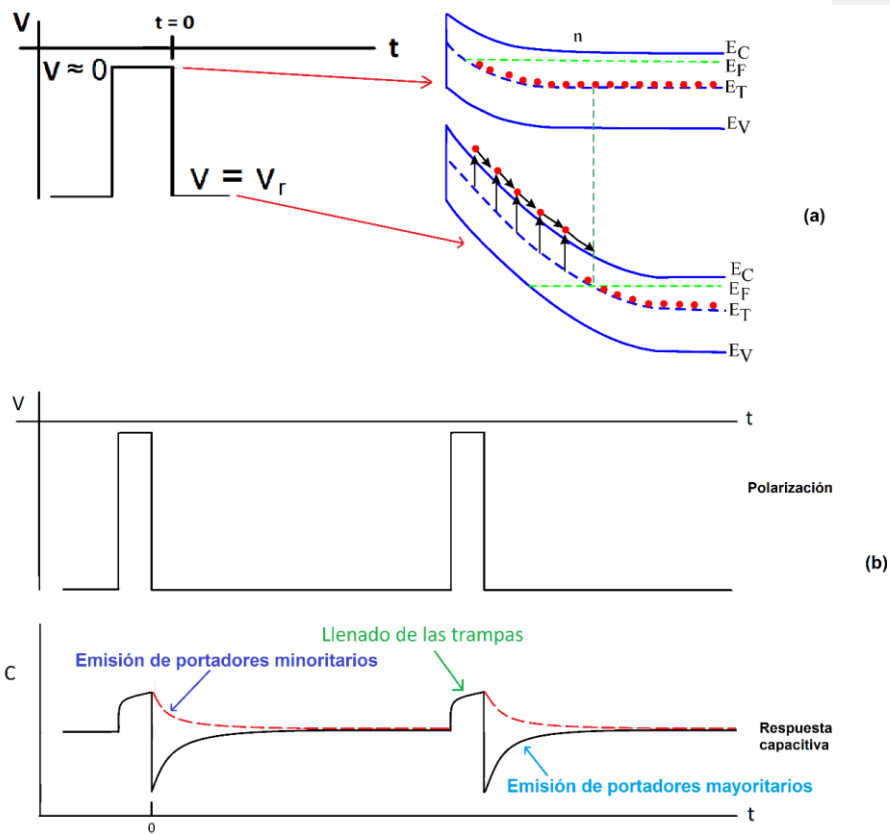


Figura 2.2. (a) Diagrama de bandas de energía de un semiconductor tipo-n que muestra la captura y emisión de electrones como resultado de la polarización aplicada. (b) Formas del transitorio de capacitancia observado para portadores mayoritarios y minoritarios, bajo el efecto de una señal periódica de llenado-vaciado.

### 2.3 DETALLES SOBRE PROBLEMAS INVERSOS

En el capítulo 1 se habló sobre el cumplimiento de la condición de estabilidad en el contexto de los problemas inversos mediante una estabilización o

regularización del problema. El objetivo que se pretende al implementar cualquiera de estas dos estrategias, es que la solución al problema se vuelva más estable y regular. Para el caso de un sistema lineal de ecuaciones, de la forma:

$$Ax = b, \quad (2.49)$$

en el cual no exista un vector  $x$  tal que satisfaga a dicho sistema y suponiendo que su solución se obtenga mediante el método de mínimos cuadrados, la violación a la condición de estabilidad puede deberse a que la matriz de coeficientes  $A$  se encuentre mal condicionada. En estas circunstancias, es bien conocido que, si existen ligeras perturbaciones en el lado derecho de la expresión anterior, esto puede ocasionar que se produzcan perturbaciones significativas en la solución. Además, se sabe que, aunque existan residuos pequeños en las soluciones que se obtengan por el método mínimos cuadrados, esto no implica que la solución perturbada sea cercana a la solución exacta (Hansen, 2010).

Por ejemplo, una forma de determinar la condición de un sistema lineal de ecuaciones radica en escalar a la matriz  $[A]$ , de forma que el elemento mayor en cada fila sea 1, y posteriormente calcular a su matriz inversa  $[A]^{-1}$ . Un sistema mal condicionado se caracteriza porque los elementos de  $[A]^{-1}$  son varios órdenes de magnitud mayores que los elementos de la matriz escalada original. Se debe recordar, que una manera de verificar la validez de una solución  $[x]$ , es sustituir dicha solución en las ecuaciones originales y observar si existe una correspondencia con las constantes originales del lado derecho del sistema, es decir:

$$[R] = [b] - [A]\{\hat{x}\}, \quad (2.50)$$

donde  $[R]$  representa al residuo existente entre las constantes del lado derecho y los valores calculados con la solución  $\{\hat{x}\}$ . Se puede concluir que si  $[R]$  es pequeño, los valores de  $\{\hat{x}\}$  son apropiados. Sin embargo, la verificación de una solución por sustitución puede ser falaz, pues en casos donde los elementos de  $[A]^{-1}$  son grandes, se puede considerar que una pequeña divergencia en el residuo  $[R]$  del lado derecho, posiblemente corresponda a un gran error en el valor calculado de las incógnitas  $[X] - \{\hat{x}\}$  (Chapra, y otros, 2003). El argumento anterior, es aplicable al método de Prony, el cual se detallará posteriormente.

## 2.4 SISTEMAS DE VENTANAS DE RAZONES (FILTROS ANALÓGICOS) MÁS USADOS EN DLTS

### 2.4.1. INTRODUCCIÓN

En §1.1.3.2 se habló sobre la importancia de la ventana de razones en la técnica DLTS, de forma que esta permite extraer la señal original del ruido, de una forma automatizada. La ventana de razones puede entenderse como un intervalo de frecuencias dentro del cual se observa una respuesta del filtro al transitorio (debido a que la razón de emisión se encuentra dentro de dicho intervalo), produciendo una respuesta de cierta magnitud en el aparato de medición. Esta ventana de razones depende del filtro específico y de los parámetros asociados. La expresión general para la señal de salida es:

$$S = \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} f(t)w(t)dt, \quad (2.51)$$

donde:

$S$  representa la señal de salida, la cual depende de la temperatura.

$t_0$  es el tiempo de integración.

$f(t)$  es el transitorio registrado (señal original).

$w(t)$  es la función de pesado.

Posteriormente, el producto de dicha operación es filtrado (promediado) por un filtro lineal, el cual puede ser un integrador o un filtro pasa-bajas. Debido a dicha operación, DLTS es considerada como una técnica de correlación y entonces puede decirse que el sistema con la ventana de razones es un sistema correlador, por lo que a la señal de salida se le conoce como señal del correlador. De lo anterior, resulta claro que este sistema depende de la función de pesado y del método de filtrado. Existen distintos tipos de filtros, pero en este apartado solamente se tratarán dos, el Box-Car y el Lock-In.

#### 2.4.2 BOX-CAR

La función de pesado que corresponde a este tipo de filtro se representa como:

$$w(t) = \delta(t - t_1) - \delta(t - t_2), \quad (2.52)$$

entonces, el análisis de transitorios capacitivos con este filtro consiste en muestrear la señal mediante una función Delta de Dirac (representada por  $\delta$ ) a dos tiempos,  $t = t_1$  y  $t = t_2$ , de forma que la capacitancia en el tiempo  $t_2$  es restada de la capacitancia en  $t_1$ . La ventaja de este sistema es que no se satura tan fácilmente como el de Lock-In. En la expresión (2.51), para este filtro  $t_0 = t_1 - t_2$ . Por lo tanto, la función que describe a este sistema correlador se expresa (Schroder, 2006):



$$S = C(t_1, T) - C(t_2, T). \quad (2.53)$$

Al diferenciar la expresión (2.53) con respecto a la constante de tiempo ( $\tau$ ) e igualar a cero el resultado, se resuelve para obtener el valor de ( $\tau$ ) donde se producen máximos o mínimos:

$$\tau_{max} = \frac{t_2 - t_1}{\ln(t_2/t_1)}. \quad (2.54)$$

#### 2.4.3 LOCK-IN

Un amplificador Lock-In se caracteriza porque su función de pesado presenta una forma cuadrada de magnitud unitaria. Dicha función se asemeja a la del Box-Car, excepto que es más ancha, lo cual aumenta el valor de la relación señal ruido (SNR – Signal to Noise Ratio) de acuerdo a cálculos efectuados por (Miller, y otros, 1975) dado que usa la señal completa, aunque el instrumento se satura fácilmente, debido a que el tiempo de integración es mayor. No obstante, la sensibilidad a esta saturación puede disminuirse precediendo la función de pesado por medio de un filtro de banda estrecha (Schroder, 2006). Otra ventaja de la utilización de este sistema es que su instrumentación se encuentra comercialmente disponible (Kimerling, 1976), lo que lo convierte en un instrumento estándar de laboratorio, a diferencia del Box-Car.

Dentro de los parámetros de interés para este sistema, se encuentra el periodo que determina la constante de tiempo de referencia ( $t_0$ ), la frecuencia del amplificador Lock-In ( $f_0$ ), el tiempo de llenado de las trampas ( $t_f$ ), el retardo de recuperación del instrumento ( $t_d$ ) y el tiempo de retraso de la fase con respecto al pulso de voltaje ( $t_\theta$ ). De acuerdo con estos parámetros, la señal DLTS para este filtro está definida de la forma:

$$S = \frac{A_0}{t_0} \left\{ \int_{t_d}^{t_0/2} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) dt - \int_{t_0/2}^{t_0-t_f} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) dt - \exp\left(-\frac{t_0-t_f}{\tau}\right) \int_{t_0-t_f}^{t_0} dt + \exp\left(-\frac{t_0-t_f}{\tau}\right) \int_0^{t_d} dt \right\}. \quad (2.55)$$

En la expresión anterior, se considera que no existe un retraso de fase, es decir que  $t_\theta = 0$ , por lo que al resolverla resulta:

$$S = \frac{A_0 \tau}{t_0} \left\{ \exp\left(-\frac{t_d}{\tau}\right) + \left[1 + \frac{t_d-t_f}{\tau}\right] \exp\left(-\frac{t_0-t_f}{\tau}\right) - 2\exp\left(-\frac{t_0}{2\tau}\right) \right\}, \quad (2.56)$$

por lo que, en su forma más simple, es decir, cuando  $t_d = t_f = 0$ , un filtro Lock-In es descrito mediante la función (Blood, y otros, 1992):

$$S(\tau) = \frac{A_0 \tau}{t_0} \left\{ 1 - e^{-\left(\frac{t_0}{2\tau}\right)^2} \right\}, \quad (2.57)$$

donde  $A_0 = g\Delta C_0$ , siendo  $g$  la ganancia del amplificador Lock-In y  $\Delta C_0$  la amplitud del transitorio. Además,  $\tau$  la constante de decaimiento, la cual depende de la temperatura.

## 2.5 LIMITACIONES DE LA TÉCNICA DLTS

En §1.1.3.2 se mencionó que DLTS originalmente analiza transitorios exponenciales, en consecuencia, cada uno de los picos del espectro corresponde a un transitorio de este tipo. Sin embargo, como se mencionó en §1.1.3.2.1, en la práctica existen transitorios que son no-exponenciales, lo que resulta en una interpretación errónea de los parámetros característicos de un defecto particular. Existen dos indicios para determinar la presencia de transitorios no-exponenciales en un espectro DLTS: la presencia de picos que abarquen un rango de temperatura muy amplio o que la forma de alguno de

ellos incluya un “hombro” (y esto no precisamente por el ruido inherente en la medición); los picos que posean alguna de estas características corresponden a más de un defecto, aunque también es posible que la anchura del pico se deba a efectos en la instrumentación y que ésta se atribuya simplemente a un solo defecto como manifiesta (Schroder, 2006).

Por otra parte, Dobaczewski (Dobaczewski, y otros, 1994) afirma que en la técnica convencional, la resolución de la constante de tiempo es muy pobre para analizar la estructura fina en el proceso de emisión debido al filtrado utilizado y no a causa del barrido térmico, es decir que no importa que una medición DLTS se realice en un amplio rango de temperatura, pues la resolución de los picos del espectro siempre estará limitada por cualquiera de los filtros analógicos utilizados. También manifiesta que cualquier variación de la constante de tiempo presente en la emisión del defecto conlleva a un ensanchamiento del pico, de forma que esta estructura es prácticamente imposible de resolver, a menos que las constantes de tiempo estén bien separadas.

## 2.6 LAPLACE-DLTS

Para superar los problemas de resolución, Dobaczewski concibió la técnica Laplace DLTS o L-DLTS, la cual se basa en la Transformada de Laplace. Esta resulta en un espectro que muestra picos en forma de una función Delta de Dirac (como se aborda detalladamente en §2.7.3) para transitorios exponenciales y no-exponenciales, o bien es un espectro amplio sin estructura fina para una distribución continua de estados localizados. Además, no se necesita suponer *a priori* sobre la forma funcional del espectro, sino más bien

que todos los decaimientos exponenciales varían en la misma dirección (Dobaczewski, y otros, 1994).

Para usar Laplace-DLTS es necesario digitalizar los transitorios observados, los cuales tienen ruido proveniente de fuentes como variaciones de temperatura, fluctuaciones  $1/f$ , entre otras. Además, puesto que un alto nivel de ruido es indeseable para efectuar el análisis numérico con este método, resulta necesario obtener varios transitorios y promediarlos con el propósito de aumentar el valor de la SNR (Dobaczewski, y otros, 2004). El incremento del valor de la SNR conlleva al aumento de resolución en aproximadamente un orden de magnitud respecto a DLTS convencional, lo que se traduce como una limitante para casos en donde la densidad de defectos es de  $5 \times 10^{-4}$  a  $5 \times 10^{-2}$  de la densidad de impurezas donadoras o aceptoras poco profundas según (Schroder, 2006).

## 2.7 MÉTODOS DE ANÁLISIS NO-EXPONENCIAL

### 2.7.1 INTRODUCCIÓN

Los métodos que a continuación se exponen, son utilizados en el análisis de los transitorios obtenidos de forma experimental o simulada. Se debe recordar que uno de los objetivos de este trabajo es determinar los valores de los parámetros que originaron al transitorio de capacitancia, es decir, se debe resolver el problema inverso.

### 2.7.2 EL MÉTODO DE PRONY

En ciertas situaciones, es deseable determinar una aproximación de la forma (Hildebrand, 1974)





$\alpha$ 's si  $N = 2n$ , o de forma aproximada por el método de mínimos cuadrados cuando  $N > 2n$ .

Posteriormente a la determinación de las  $\alpha$ 's, las  $n$   $\mu$ 's son encontradas como las raíces de (2.61), las cuales pueden ser reales o imaginarias. Entonces, las ecuaciones expresadas en (2.60) se vuelven lineales en las  $n$   $C$ 's con coeficientes conocidos. Finalmente, las  $C$ 's pueden ser determinadas a partir de la primera de estas  $n$  ecuaciones, o preferentemente, al aplicar el método de mínimos cuadrados al conjunto completo. Así, la no-linealidad del sistema es concentrada en la ecuación algebraica (2.61).

## 2.7.3 TRANSFORMADA DE LAPLACE

### 2.7.3.1 INTRODUCCIÓN

La Transformada de Laplace (simbolizada con el operador  $\mathcal{L}$ ) es una transformada integral que transforma una función de una variable real, a otra en el dominio de otra variable, que es compleja. Dicha transformación puede efectuarse de forma directa o inversa. En el ámbito del procesamiento de señales, la utilidad de esta operación radica en cambiar una función en el dominio del tiempo al de la frecuencia o viceversa. La forma convencional de expresar a las transformadas directa e inversa respectivamente, es:

$$g(s) = \mathcal{L}\{f(t)\} = \int_0^{\infty} f(t)e^{-st} dt, \quad (2.63)$$

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}\{g(s)\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} g(s)e^{st} ds, \quad (2.64)$$

En nuestro caso,  $f(t)$  representa una función del tiempo que es el transitorio de capacitancia, el cual está definido a intervalos discretos en el tiempo  $t_0, t_1, t_2, \dots, t_{n-1}$ . La transformada  $g(s)$  es función de la frecuencia (conocida

también como función de densidad espectral) y  $e^{\pm st}$  se conoce como el kernel de la transformada. En nuestro problema con datos discretos, sabemos que la forma del transitorio a analizar es:

$$f(t) = \sum_{j=1}^n A_j e^{-\alpha_j t}, \quad (2.65)$$

donde las incógnitas son las  $A_j$  y las  $\alpha_j$ . Además, de las tablas de transformadas de Laplace sabemos que:

$$\mathcal{L}\{e^{at}\} = \frac{1}{s-a}, \quad (2.66)$$

$$\mathcal{L}\{A\delta(s - \alpha)\} = Ae^{-\alpha t}, \quad (2.67)$$

De las expresiones anteriores,  $f(t)$  representa el transitorio capacitivo (señal obtenida experimentalmente),  $s$  denota la frecuencia y  $t$  es el tiempo. Estas expresiones implican que existen dos maneras de obtener un resultado. En la primera, si aplicamos la transformada directa al transitorio, de acuerdo con (2.66) se obtiene una suma de funciones racionales. Estas pueden determinarse a partir de los datos aplicando el método de Laplace-Padé. En la segunda, si se aplica la transformada inversa, debemos obtener de acuerdo con (2.67) un conjunto de funciones delta de Dirac centradas en los puntos que corresponden a las razones de emisión buscadas. Puede usarse el software de dominio público llamado CONTIN (Provencher, 1982) para calcular la transformada inversa.

### 2.7.3.2 TRANSFORMADA INVERSA DE LAPLACE

Si bien la aproximación numérica de la transformada inversa de la expresión en (2.65) resuelve el problema en cuestión, esto no se logra de forma sencilla porque dicho problema se considera como mal planteado o mal condicionado.



En consecuencia, este no posee una solución exacta (debido a la presencia del ruido al efectuar la medición), como lo menciona Tin (Tin, 2012). Para resolver esta dificultad, se necesita emplear una técnica de regularización, por ejemplo (Kryzhniy, 2004), el software de dominio público CONTIN (usado por L-DLTS) implementa la regularización de Tikhonov para manejar datos experimentales con ruido (Provencher, 1982).

#### 2.7.3.2.1 INVERSIÓN NUMÉRICA DE LA TRANSFORMADA DE LAPLACE CON REGULARIZACIÓN POR EL MÉTODO DE KRYZHNIY

V. V. Kryzhniy (Kryzhniy, 2004) concibió un método para invertir numéricamente la Transformada de Laplace en donde considera relevante al kernel de dicha transformada. Aquí, la importancia del kernel es que su modificación (mediante un parámetro de regularización denotado como  $R$ ) conlleva a que la inversión numérica de la transformada se haga de forma regularizada:

$$g_R(s) = \int_0^{\infty} f(t)\Pi(R, st)dt, \quad (2.68)$$

en donde:  $g_R$  es la transformada inversa de Laplace regularizada y  $\Pi(R, \lambda u)$  es el kernel modificado. Además,  $f(t)$ ,  $s$  y  $t$  significan lo mismo que en §2.6.3.1. Respecto al kernel, este se define como:

$$\Pi(R, x) = \frac{-2}{\pi^2} \times \text{Im} \left[ \sin(\pi(a + iR))\Gamma(a - 1 + iR)x^{1-a-iR} {}_1F_2 \left( 1; \frac{2-a-iR}{2}, \frac{3-a-iR}{2}; \frac{x^2}{4} \right) \right], \quad (2.69)$$

tal que:

$a$  es un número real que en general cumple que  $a < 2$  y el autor usa  $a = 0$ .

$\Gamma(a - 1 + iR)$  es la función gama.

${}_1F_2\left(1; \frac{2-a-iR}{2}, \frac{3-a-iR}{2}; \frac{x^2}{4}\right)$  es la función hipergeométrica generalizada.

Según el autor del método, a medida que  $R \rightarrow \infty$ , la solución regularizada tiende a aproximarse a la solución exacta  $g(s)$ .

#### 2.7.3.4 TRANSFORMADA DIRECTA POR EL MÉTODO DE LAPLACE-PADÉ

De acuerdo con la ecuación (2.66), el cálculo analítico de la Transformada Directa de Laplace de la expresión (2.65) produce una función de la forma:

$$g(s) = \sum_{j=1}^n \frac{A_j}{s - \alpha_j}, \quad (2.70)$$

en la que los polos son las razones de emisión. El propósito del método de Laplace-Padé (Yeremian, y otros, 1987) es obtener una aproximación de la expresión anterior mediante la serie de Taylor y las aproximantes de Padé. La aproximante de Padé de una función de  $s$  es una función racional denotada como  $[L/M](s)$ , la cual se obtiene al dividir dos polinomios  $A_L(s)$  y  $B_M(s)$  de grado  $L$  y  $M$  respectivamente (Yeremian, y otros, 1987); si  $L = M$ , entonces a ésta se le llama aproximación de Padé diagonal de orden  $L^9$ . De manera general, la aproximante de Padé se expresa como:

$$\left[ \begin{matrix} L \\ M \end{matrix} \right] (s) = \frac{A_L(s)}{B_M(s)} = \frac{\sum_{t=0}^L a_t s^t}{\sum_{v=0}^M b_v s^v}. \quad (2.71)$$

<sup>9</sup> <https://reference.wolfram.com/language/tutorial/PadeApproximation.html>

La expansión en serie de Taylor alrededor de un valor  $s_0$ , conteniendo K términos, puede expresarse como:

$$g(s) \cong \sum_{j=0}^K c_j (s - s_0)^j \quad (2.72)$$

donde

$$c_j = \frac{1}{j!} \left( \frac{d^j g(s_0)}{ds^j} \right) \quad (2.73)$$

y su cálculo requiere de estimar las derivadas desde orden 0 hasta K, respecto a  $s$  de la integral en la ecuación (2.63). Las derivadas en (2.73) pueden calcularse numéricamente según la expresión (2.74)

$$\frac{d^j g(s)}{ds^j} = \int_0^{\infty} (-t)^j f(t) e^{-st} dt, \quad (2.74)$$

la serie de Taylor expresada en (2.72) es un polinomio en  $s$ , el cual puede representarse usando su aproximante de Padé. Finalmente, tal aproximante puede traducirse a una expansión en fracciones parciales.

Según sus autores (Yeramian, y otros, 1987), este método tiene como ventaja principal la determinación del número de componentes exponenciales sin suponerlos a priori. Además, puesto que la frecuencia (razón de emisión en nuestro caso) se trata solamente como un número real, afirman en consecuencia que el problema se vuelve difícil de resolver debido a que los exponentes y las amplitudes presentan una sensibilidad a cambios pequeños en los datos. Esta sensibilidad se debe a que las funciones exponenciales no forman

un conjunto ortogonal (Istratov, y otros, 1999). El argumento anterior implica que este problema se considera como mal planteado, pues se viola la condición de estabilidad.

#### 2.7.4 AJUSTE NO LINEAL CON `NonlinearModelFit`

Es una instrucción que pertenece a la herramienta Mathematica®. Según su manual, los siguientes métodos pueden ser usados por esta: Gradiente conjugado, Gradiente, Levenberg-Marquardt, Newton y Quasi-Newton. Los métodos anteriores son usados como una opción para el funcionamiento de dicha instrucción. Además, otra opción es `NMinimize`, la cual puede usar alguno de los métodos: Nelder-Mead, Differential Evolution, Simulated Annealing y Random Search. De forma predeterminada la opción es `Automatic`, es decir que Mathematica elige alguno o varios de estos métodos para realizar el ajuste no lineal dependiendo del problema específico.

Las derivadas contienen información sobre la rapidez de crecimiento y disminución de una función, mientras que las derivadas parciales proporcionan información respecto a las direcciones de más rápido crecimiento y disminución. Por otro lado, entiéndase a la optimización como el proceso de búsqueda de un máximo o mínimo de una función objetivo, la cual es una función real. A los métodos de Gradiente, Gradiente conjugado, Newton y Levenberg-Marquardt se les conoce como métodos de optimización no restringida con derivadas, pues utilizan a estas para encontrar un mínimo de forma eficiente.

Cuando una función es continuamente diferenciable y por lo tanto es posible evaluar su derivada, el problema puede expresarse como un problema de

localización de raíces y para ello se usa el método de Newton (mejor conocido como Newton-Raphson) (Sauer, 2013). En este método se utiliza a la primera derivada de dicha función, para encontrar el valor más aproximado de su raíz.

Por otra parte, el método del gradiente descendente (también llamado búsqueda del gradiente) tiene como idea fundamental la localización de un mínimo de una función mediante el desplazamiento en la dirección de la máxima inclinación a partir del punto actual. Este método converge más lentamente que el método de Newton debido a que el gradiente descendente es en realidad una minimización siguiendo la dirección de descenso y nuevamente sólo utiliza la información de la primera derivada (Sauer, 2013).

El método de gradiente conjugado es un algoritmo para encontrar el mínimo local más cercano de una función de  $m$  variables, el cual presupone que el gradiente de la función puede ser calculado. Las ideas detrás de los gradientes conjugados se basan en la generalización que se tiene sobre el producto interno (Sauer, 2013). Este método usa direcciones conjugadas en lugar del gradiente local para ir cuesta abajo (Black, y otros, 2003). El método de gradiente (gradiente descendente o descenso más empujado) es similar al de gradiente conjugado, aunque el método del gradiente tiene el grave inconveniente de requerir muchas iteraciones para funciones que tienen estructuras de valles altos y angostos, por lo que en este caso se emplea al método de gradiente conjugado (Weisstein, 2002).

Antes de describir el método de Levenberg-Marquardt debe mencionarse en qué consiste el método de Gauss-Newton, pues el primero es visto como una mezcla de este último con el método de Gradiente descendente. El método de

Gauss-Newton utiliza una matriz Hessiana (matriz de las segundas derivadas parciales) para resolver una raíz del gradiente del error cuadrático y una aplicación importante de este método es el ajuste de modelos que son no lineales en los coeficientes. Ahora bien, el método de Levenberg-Marquardt se utiliza para resolver problemas no lineales de mínimos cuadrados, en los que la matriz de coeficientes resulta estar mal condicionada (es decir que ésta tiene un número de condición grande), ya que este método utiliza un “término de regularización” para remediar en parte el problema de condicionamiento (Sauer, 2013).

Los métodos basados en el de Gauss-Newton se conocen como Quasi-Newton (Istratov, y otros, 1999). En el lenguaje Wolfram que utiliza Mathematica, se usan los métodos de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) y para sistemas grandes se usan los métodos limitados por memoria BFGS (métodos L-BFGS)<sup>10</sup>.

Los métodos que puede usar NMinimize pertenecen a la optimización estocástica, la cual se entiende como el proceso de maximizar o minimizar el valor de una función matemática o estadística, cuando uno o más de los parámetros de entrada están sujetos a la aleatoriedad (Rouse, y otros, 2012). Nelder-Mead es un método de búsqueda directa que trabaja moderadamente bien para problemas estocásticos (Weisstein, 2007), el cual se basa en evaluar una función en los vértices de un Simplex<sup>11</sup> (hipertetraedro y es llamado así debido a que representa el politopo más simple posible en cualquier espacio). El algoritmo Differential Evolution es un método de optimización de la

---

<sup>10</sup>

<https://reference.wolfram.com/language/tutorial/UnconstrainedOptimizationQuasiNewtonMethods.html>

<sup>11</sup> <https://mathworld.wolfram.com/Simplex.html>

estrategia de búsqueda directa paralela estocástica, el cual es bastante rápido y razonablemente robusto. Simulated Annealing (Carr, 2000) es un algoritmo empleado en la solución de ciertos tipos de problemas de optimización que se vuelven inmanejables (el origen de su nombre es porque imita el proceso sufrido por los átomos fuera de lugar en un metal cuando es calentado y posteriormente enfriado lentamente), los cuales usan métodos combinatorios conforme el número de objetos se vuelve grande, a pesar de que al usar este algoritmo es improbable encontrar una solución óptima, a menudo permite encontrar una solución muy buena, incluso cuando los datos tienen ruido. Finalmente, Random Search es un algoritmo que pertenece a los campos de optimización estocástica y optimización global, el cual es un método de búsqueda directa que no requiere derivadas para buscar un dominio continuo (Ahmadzadeh, 2013).

## 2.8 RUIDO EN DISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES

### 2.8.1 INTRODUCCIÓN

En el contexto de este trabajo debe considerársele como un efecto indeseable, pues afecta la obtención de los valores de los parámetros que se desea recuperar. En otros casos éste resulta de utilidad en la caracterización de semiconductores. El ruido es un flujo espontáneo de corriente o voltaje presente en todos los dispositivos semiconductores. A una superposición de las diferentes fuentes de ruido que existen (ruido resultante), se le conoce como ruido inherente. La intensidad de dicho flujo es función del tipo de dispositivo, del proceso tecnológico y de las condiciones de operación. Los tipos más importantes de ruido son: térmico, shot, G-R,  $1/f$ , entre otros (Konczakowska, y otros, 2011).

### 2.8.2 RUIDO TÉRMICO

Se le conoce también como ruido Johnson y como su nombre lo indica, se debe a la excitación térmica, la cual ocasiona un movimiento aleatorio de los portadores de carga dentro del sólido. Dicho movimiento produce una fluctuación en el voltaje de las terminales para cada elemento resistivo. Debido a que su densidad de potencia es independiente de la frecuencia, se le conoce también como ruido Blanco. Este ruido fue el único añadido a los transitorios capacitivos analizados, debido a que es el más sencillo de simular en Mathematica®.

### 2.8.3 RUIDO SHOT

Está asociado con la estructura discreta de la electricidad e inyección de portadores a través de una unión P-N. Su función de densidad espectral es independiente de la temperatura y es proporcional a la corriente en la unión. La medición de este tipo de ruido en dispositivos a escala nanométrica presenta dificultades, puesto que los valores de corriente medidos se encuentran en el rango de los 10 – 100  $fA$ . Ya que es proporcional a la corriente cualquier desviación a partir de esta relación puede ser empleada para evaluar resistencias de fuga parásitas, además puede usarse para el diagnóstico de fotodiodos, diodos Zener, diodos avalancha y diodos Schottky (Konczakowska, y otros, 2011).

### 2.8.4 RUIDO DE GENERACIÓN-RECOMBINACIÓN

Se le atribuye a la presencia de centros de Generación-Recombinación dentro del material, ocasionando un flujo de portadores, lo cual provoca cambios en la conductancia del dispositivo. Además, esta fuente de ruido depende de la temperatura y de las condiciones de polarización. Cuando existen muchos tipos de centros de G-R con diferentes tiempos de vida de los portadores, el espectro de ruido resultante será



una superposición de diferentes funciones de densidad espectral, por lo tanto, la distribución resultante puede usarse para investigar varios de estos centros. El estudio de los dispositivos mediante esta fuente de ruido sirve como alternativa a la técnica DLTS (Konczakowska, y otros, 2011).

#### 2.8.5 RUIDO $1/f$

Todos los dispositivos de estado sólido (incluso algunos resistores), muestran un tipo de ruido que se incrementa conforme disminuye la frecuencia. Su espectro varía aproximadamente como  $1/f^\alpha$ , donde  $\alpha \approx 1$ . Aunque hasta estos días no se haya establecido completamente una teoría física que describa completamente al ruido de baja frecuencia parece ser que este tipo de ruido está asociado a los defectos en el material que se encuentran cerca de las interfases, por lo que se considera como la fuente de ruido dominante en el contexto de este trabajo (aunque no fue posible añadirlo a los transitorios debido a la complejidad que representa su implementación en Mathematica®). Algunos dispositivos, tales como FETs (Field Effect Transistors) y BJTs (Bipolar Junction Transistors) son afectados por el ruido  $1/f$ . En el caso de los FETs, los electrones viajan a través de una interfaz, por lo que éstos dispositivos son fuertemente afectados por esta fuente de ruido; en cambio, en los BJTs, los electrones cruzan las interfases en una dirección perpendicular, lo que resulta en una menor afectación (Maas, 2005).

## CAPÍTULO 3: DESARROLLO, RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### 3.1 PROBLEMA DIRECTO: DESARROLLO Y OBTENCIÓN DE LOS TRANSITORIOS CAPACITIVOS MONO Y MULTI-EXPONENCIALES

Con el fin de comparar los métodos de análisis, se decidió simular los transitorios de diferentes defectos en varios materiales. Para ello se buscó literatura sobre la caracterización en diferentes semiconductores, buscando que todos los parámetros característicos de los defectos hubiesen sido reportados, es decir:  $N_T$ ,  $\Delta E$  y  $\sigma$  (los cuales pueden consultarse en sus respectivas referencias). Solamente se obtuvieron datos de tres materiales semiconductores:

1. Diodo Schottky de Ge tipo-n (dopado con Sb), el cual posee ocho trampas de portadores mayoritarios y tres de minoritarios, sin embargo, los autores del estudio (Nyamhere, y otros, 2011) no reportaron las densidades de defectos en el material y fueron propuestas empíricamente al observar la altura de los picos de los espectros DLTS reportados y posteriormente fueron ajustadas hasta observar una aproximación razonable entre los espectros simulados y los reportados. Los defectos fueron producidos por un haz de protones de 2 MeV, pues en ese estudio se pretende que los dispositivos electrónicos fabricados con este material sean usados en el espacio.
2. Dos diodos Schottky de GaAs tipo-n (impurificados con Si), cada uno con diferente orientación cristalográfica. Ambos poseen trampas de portadores mayoritarios, cinco para la orientación  $\langle 100 \rangle$  y cuatro para la  $\langle 211 \rangle B^{12}$ . Las muestras fueron obtenidas mediante MBE (Molecular Beam Epitaxy), y el propósito del estudio fue obtener una comprensión

---

<sup>12</sup> El sufijo B indica que el último plano es de As.

completa de las propiedades eléctricas de estos materiales obtenidos en planos de alto índice, puesto que la literatura al respecto ha sido escasa (Mari, y otros, 2009).

3. Uniones  $n^+ - p$  de GaN, en las que se encontraron tres trampas de portadores mayoritarios y dos de minoritarios en la región tipo-p. Las densidades de las trampas de minoritarios no fueron reportadas por los autores (Uk Lee, y otros, 2008), por lo que se propusieron similarmente al caso del Ge. Estas muestras se obtuvieron mediante la técnica MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition) y luego fueron irradiadas con un haz de electrones de 1-2 MeV. Nuevamente, se estudian los efectos de la irradiación. Estos dispositivos pueden ser usados como fotodetectores UV en áreas como la astronomía, el equipamiento militar y el monitoreo de procesos de combustión.

Las expresiones matemáticas necesarias para simular tanto a los transitorios capacitivos, como a los espectros DLTS (las cuales se expusieron en el capítulo 2) fueron codificadas mediante el software Mathcad®. Para cada material y tipo de defecto (atrapa electrones o huecos) o muestra (como en el caso del GaAs) se creó un archivo en Mathcad®, el cual contiene las expresiones antes mencionadas. Las temperaturas a las cuales se simularon los transitorios fueron determinadas de acuerdo con los espectros DLTS reportados en sus respectivos artículos. El periodo de observación de los transitorios fue de 0-500 ms (la resolución mínima del equipo disponible de medición es de 1 ms). Luego, los puntos cartesianos ideales (sin ruido) que corresponden a cada uno de los transitorios simulados fueron exportados a archivos en formato CSV.

Las figuras 3.1 a 3.5 representan un caso donde se aprecia notablemente el ruido simulado. En ellas se expone un transitorio de tres formas: ideal, ruidoso y filtrado. La adición del ruido a la señal y su correspondiente filtrado, simulan transitorios reales, donde los datos presentan este tipo de perturbación. Por otro lado, la figura 3.6 ilustra la evolución con la temperatura de un transitorio capacitivo exponencial ideal para el caso del diodo Schottky de Ge tipo-n.

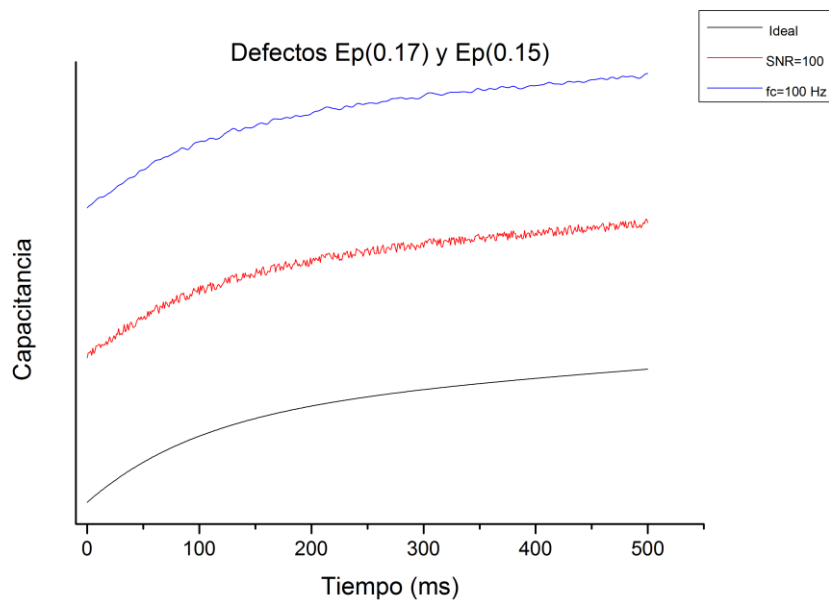


Figura 3.1. Transitorio capacitivo no-exponencial calculado a una temperatura de 65 K, el cual está compuesto por la suma de los defectos atrapa mayoritarios  $E_p(0.17)$  y  $E_p(0.15)$  del diodo Schottky de Ge tipo-n.

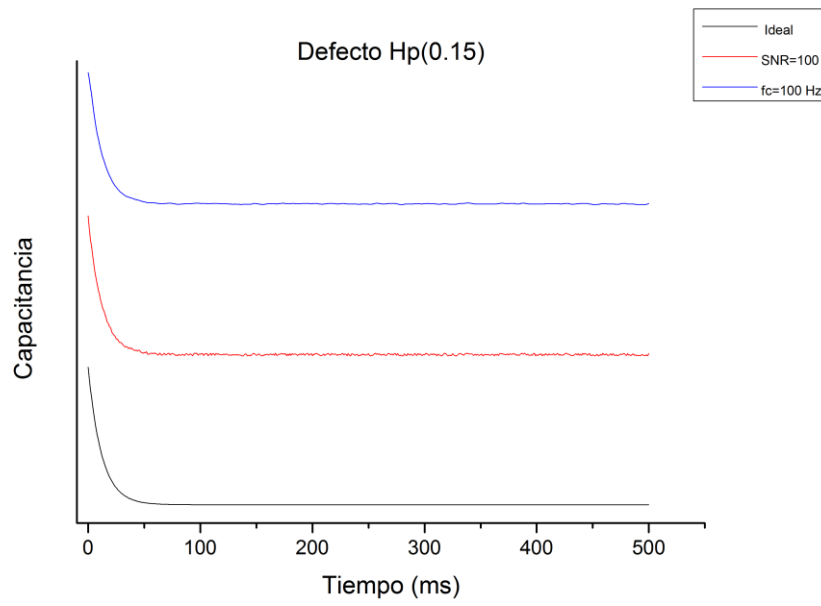


Figura 3.2. Transitorio exponencial de capacitancia calculado a 78 K para el defecto atrapa minoritarios Hp(0.15) del diodo Schottky de Ge tipo-n.

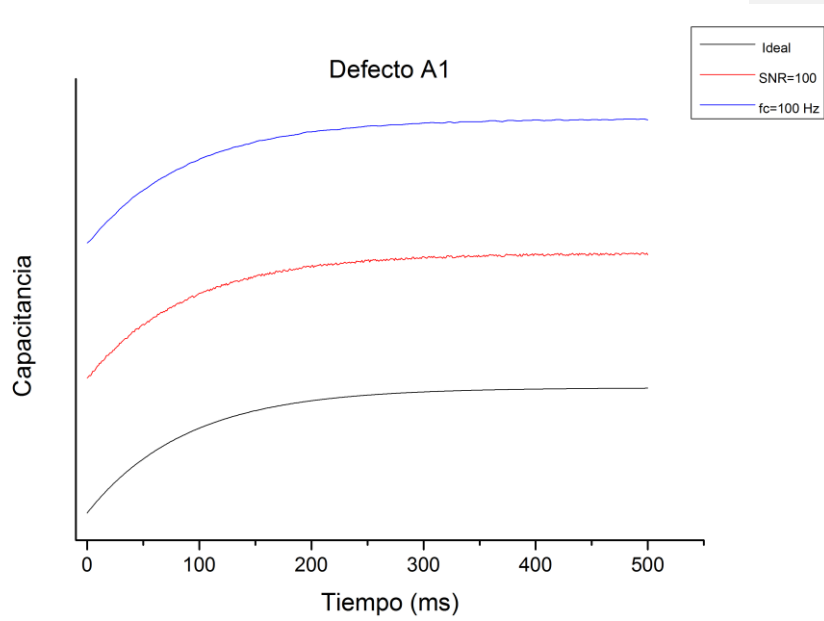


Figura 3.3. Transitorio registrado a 181 K para defecto atrapa mayoritarios A1 en diodos Schottky de GaAs tipo-n cuya orientación es <100>.

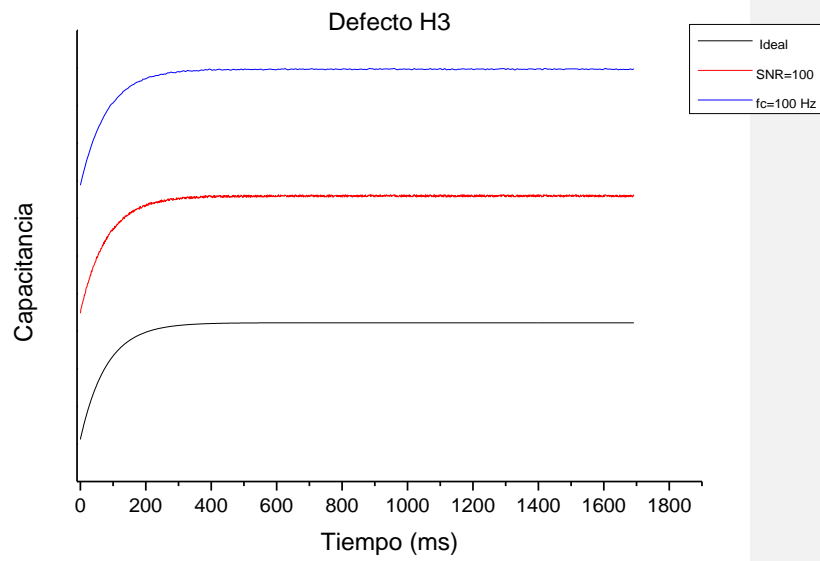


Figura 3.4. Transitorio registrado a 210 K, correspondiente al defecto H3 atrapa mayoritarios (huecos) en la unión  $n^+ - p$  de GaN.

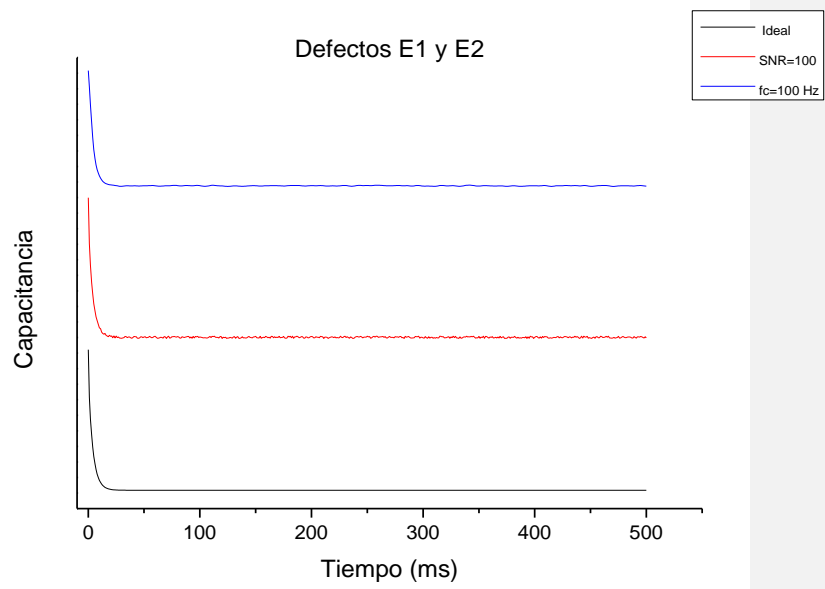


Figura 3.5. Transitorio observado a 350 K, de los defectos E1 y E2 atrapa minoritarios (electrones), en la unión  $n^+ - p$  de GaN.



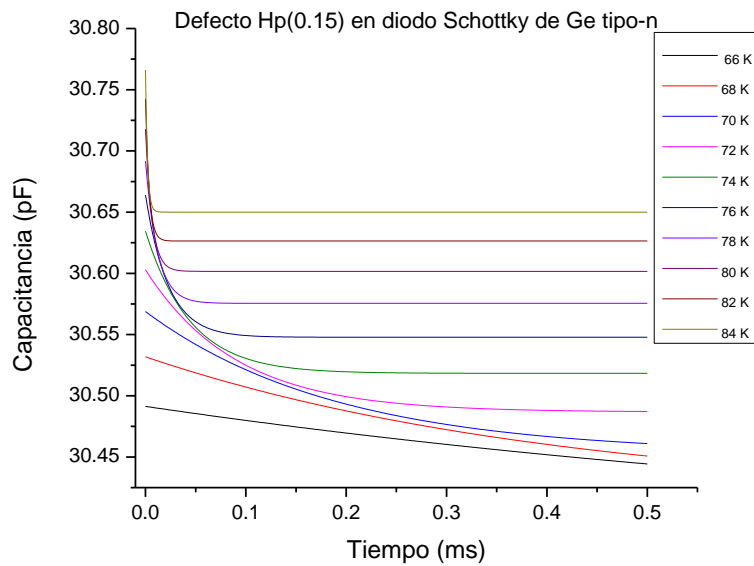


Figura 3.6. Evolución de un transitorio capacitivo exponencial a diferentes temperaturas.

### 3.1.1 DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Los artículos consultados no muestran imágenes de los transitorios de capacitancia que fueron obtenidos experimentalmente. En nuestras simulaciones las magnitudes obtenidas fueron variadas:

1. Para el caso del Ge, el valor típico de las capacitancias registradas una vez que se alcanza el estado estacionario, ronda en decenas de pico faradios.
2. En las muestras de GaAs, las capacitancias típicas en estado estacionario presentan valores de más de un centenar de pico faradios.

3. En la mayoría de los casos, la amplitud asociada a cada componente exponencial de un transitorio es menor que el valor de  $C_0$ 
  - a. En el caso del Ge, para las trampas de portadores mayoritarios (electrones) existe una diferencia de entre dos y tres órdenes de magnitud, mientras que, para las trampas de huecos, la diferencia es de uno a dos órdenes de magnitud.
  - b. Con las muestras de GaAs, esta diferencia va desde uno hasta tres órdenes de magnitud para la muestra cuya orientación es  $\langle 100 \rangle$ , mientras que para la muestra con orientación  $\langle 211 \rangle$  esta diferencia oscila entre uno y dos órdenes.
4. Con referencia a las razones de emisión registradas a las temperaturas de observación de los transitorios, se puede decir que
  - a. En la muestra de Ge, para las trampas de electrones los valores van desde aproximadamente 19 hasta  $2263 \text{ s}^{-1}$ , mientras que son aproximadamente de 10 hasta  $154 \text{ s}^{-1}$  para las trampas de huecos.
  - b. Para las muestras de GaAs con orientación  $\langle 100 \rangle$ , éstas van aproximadamente desde 11 hasta  $73 \text{ s}^{-1}$ , mientras que para la muestra con orientación  $\langle 211 \rangle$ , son aproximadamente desde 6 hasta  $37 \text{ s}^{-1}$ .

Respecto al GaN, existe la particularidad de que los valores de la capacitancia en estado estacionario ( $C_0$ ) para los defectos atrapa mayoritarios (huecos en la región tipo-p), son mucho menores que los valores de las amplitudes, lo que ocasiona que los valores mostrados en las gráficas tengan signo negativo. La enorme densidad volumétrica de defectos equiparable a la de impurezas poco profundas es la razón de que ocurra lo anterior, como puede corroborarse en

(Morkoç, 2008). La consecuencia fundamental de la presencia de una gran densidad de niveles profundos dentro del material (como se mencionó en §4.1.1.3), es que la posición del nivel de Fermi está determinada tanto por la densidad de los niveles profundos como por la concentración de impurezas con niveles poco profundos. Similarmente, la distribución de carga se vería afectada por dichos defectos, influenciando la capacitancia y la forma de los transitorios. Esto implica que el modelo de transitorios exponenciales ya presentado no es aplicable.

## 3.2 PROBLEMA DIRECTO: DESARROLLO Y OBTENCIÓN DE LOS ESPECTROS DLTS

### 3.2.1 DIODOS SCHOTTKY DE Ge TIPO-N

Mediante Mathcad® se simuló los espectros DLTS y aunque (Nyamhere, y otros, 2011) no reportaron el filtro analógico empleado, solamente se usó al Box-Car mediante la función expresada en (2.51). Como puede notarse en dicha expresión, se necesitan los tiempos  $t_1$  y  $t_2$  para filtrar cada una de las señales obtenidas, los cuales no fueron reportados por sus autores. Ellos solamente reportaron el valor de la ventana de razones ( $\tau_{max}$ ) utilizada para los espectros de los defectos atrapa mayoritarios y minoritarios. Usaron  $\tau_{max} = \frac{1}{80} s$ , por lo que los tiempos  $t_1$  y  $t_2$  deben ser determinados usando la expresión (2.52). Una de estas raíces fue propuesta mientras que la otra se obtuvo numéricamente con Mathcad®; se propuso arbitrariamente que  $t_1 = 0.003 s$  dando como resultado  $t_2 = 0.033 s$ . Las tablas 3.1 y 3.2 muestran los valores de los parámetros de los defectos atrapa mayoritarios y minoritarios respectivamente, así como las densidades propuestas de los defectos. La notación usada en este trabajo se basa en la propuesta por (Nyamhere, y otros, 2011), de la cual  $E_p$  significa una trampa de electrones para la muestra irradiada con el haz de protones y  $H_p$  para una trampa de huecos irradiada con protones.

| <b>Defecto</b> | $\Delta E_T$ (eV) | $\sigma_n$ (cm <sup>-2</sup> ) | $N_T$ (cm <sup>-3</sup> ) |
|----------------|-------------------|--------------------------------|---------------------------|
| $E_p(0.38)$    | 0.38              | $6.7 \times 10^{-14}$          | $6.5 \times 10^{13}$      |
| $E_p(0.32)$    | 0.32              | $3.3 \times 10^{-13}$          | $5.0 \times 10^{12}$      |
| $E_p(0.31)$    | 0.31              | $7.4 \times 10^{-13}$          | $4.5 \times 10^{13}$      |
| $E_p(0.22)$    | 0.22              | $1.6 \times 10^{-13}$          | $2.5 \times 10^{13}$      |
| $E_p(0.20)$    | 0.20              | $2.0 \times 10^{-13}$          | $2.0 \times 10^{13}$      |
| $E_p(0.17)$    | 0.17              | $2.3 \times 10^{-13}$          | $5.25 \times 10^{13}$     |
| $E_p(0.15)$    | 0.15              | $3.5 \times 10^{-13}$          | $1.0 \times 10^{13}$      |
| $E_p(0.04)$    | 0.04              | $7.0 \times 10^{-13}$          | $1.3 \times 10^{13}$      |

Tabla 3.1. Trampas de portadores mayoritarios y sus densidades en diodo Schottky de Ge tipo-n.

| <b>Defecto</b> | $\Delta E_T$ (eV) | $\sigma_n$ (cm <sup>-2</sup> ) | $N_T$ (cm <sup>-3</sup> ) |
|----------------|-------------------|--------------------------------|---------------------------|
| $H_p(0.15)$    | 0.15              | $6.1 \times 10^{-14}$          | $1.5 \times 10^{13}$      |
| $H_p(0.30)$    | 0.30              | $7.0 \times 10^{-13}$          | $1.25 \times 10^{14}$     |
| $H_p(0.27)$    | 0.27              | $1.5 \times 10^{-13}$          | $1.5 \times 10^{14}$      |

Tabla 3.2. Defectos atrapa minoritarios y sus concentraciones en diodo Schottky de Ge tipo-n.

### 3.2.1.1 DISCUSIÓN DE RESULTADOS DEL ESPECTRO DE MAYORITARIOS

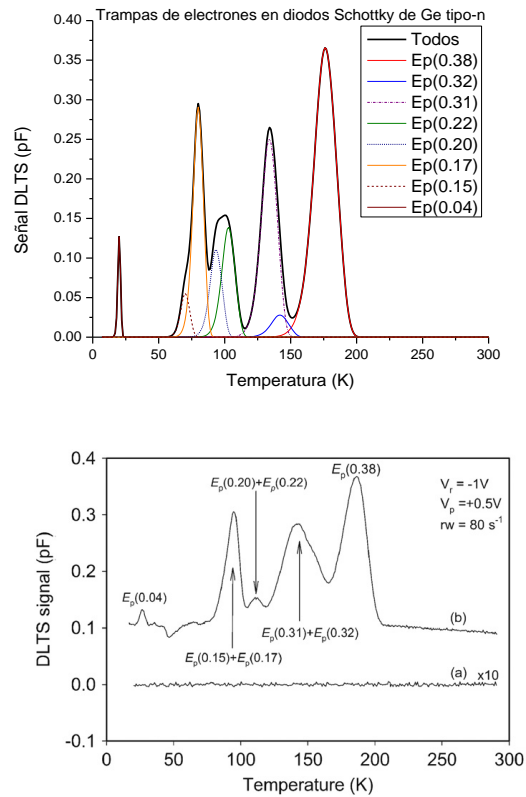


Figura 3.7. (Arriba) espectro DLTS simulado para trampas de mayoritarios.  
(Abajo) espectro original del diodo Schottky de Ge.

Puesto que en la figura 3.4 existen diferencias entre el espectro simulado en este trabajo y el reportado en (Nyamhere, y otros, 2011), se puede variar mínimamente la concentración de tales defectos hasta encontrar una

coincidencia entre ambos espectros, ya que las concentraciones no fueron reportadas.

### 3.2.1.2 DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS DEL ESPECTRO DE MINORITARIOS

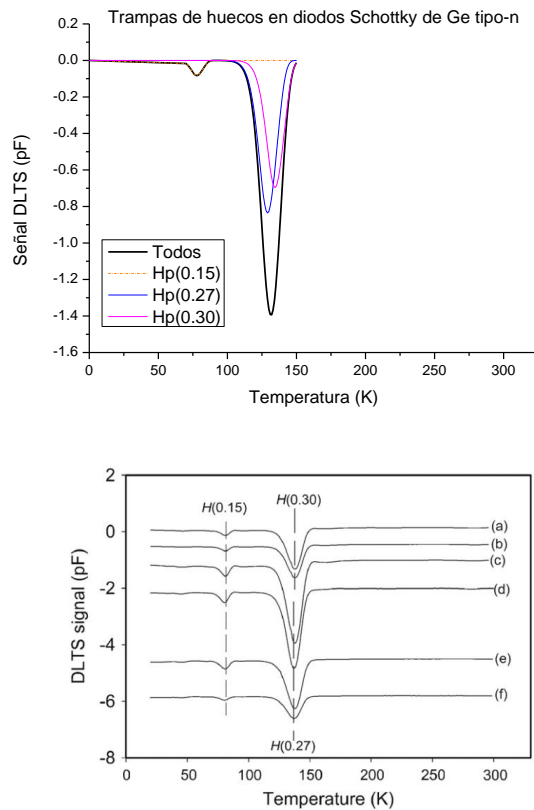


Figura 3.8. (Arriba) espectro DLTS estimado para las trampas de minoritarios en diodo Schottky de Ge. (Abajo) espectro original del diodo Schottky de Ge para (a) luego de irradiación con haz de protones de 2 MeV y luego de recocido a (b) 100 °C, (c) 150 °C, (d) 200 °C, (e) 250 °C y (f) 300 °C.

Respecto a los espectros de los defectos atrapa minoritarios (huecos), en el simulado (parte superior de la figura 3.5) se sugiere que el pico localizado alrededor de los 150 K se compone de dos defectos, en contraposición al espectro de referencia, en el cual se interpreta que el pico pertenece solamente a un defecto (antes y después de realizar el tratamiento), como se aprecia en la parte inferior de dicha figura. Derivado de la simulación de este espectro y aunque las densidades de estos defectos se determinaron empíricamente pues no fueron reportadas (Nyamhere, y otros, 2011), se plantea como hipótesis que el pico mostrado en el espectro de referencia antes del recocido térmico y localizado cerca de los 150 K se compone en realidad de dos defectos y no de uno, es decir, antes del recocido, el defecto Hp(0.27) estaría presente en una densidad mucho menor que la del defecto Hp(0.30) y en consecuencia se consideraría que la densidad del defecto Hp(0.27) sería despreciable, luego, conforme se aumentó la temperatura del recocido hasta ser de 300°C, la densidad del defecto Hp(0.30) sería mucho menor que la del defecto Hp(0.27). La forma de comprobar dicha hipótesis es conocer los valores reales de las concentraciones de estos defectos en las muestras analizadas.

### 3.2.2 DIODOS SCHOTTKY DE GaAs TIPO-N

Los autores de este estudio (Mari, y otros, 2009) no reportaron el filtro analógico usado, por lo que nuevamente se decidió simular un Box-Car. En el análisis DLTS de los diodos de GaAs, el valor de la ventana de razones fue de  $\tau_{max} = 50 \text{ s}^{-1}$  para ambos espectros. Los autores tampoco reportaron los valores de  $t_1$  y  $t_2$  (el procedimiento para simular los espectros DLTS en este material es el mismo que se describió para el caso del Ge), usando  $t_1 = 0.0075 \text{ s}^{-1}$  y  $t_2 = 0.042 \text{ s}^{-1}$ . La tabla 3.3 muestra los valores de los parámetros

de los defectos reportados por (Mari, y otros, 2009). Por otro lado, el propósito de la figura 3.6 es mostrar que, aunque exista un solo pico de anchura considerable, puede ser que no esté relacionado a un solo defecto, sino a varios, como se expuso en §2.5. Finalmente, la figura 3.7 muestra una comparación entre los espectros simulados y los reportados en la literatura.

| Muestra | Defecto | $\Delta E$ (eV) | $\sigma_n$ (cm <sup>2</sup> ) | $N_T$ (cm <sup>-3</sup> ) |
|---------|---------|-----------------|-------------------------------|---------------------------|
| <100>   | A1      | 0.054           | $4.92 \times 10^{-23}$        | $2.57 \times 10^{15}$     |
|         | A2      | 0.143           | $1.14 \times 10^{-21}$        | $1.31 \times 10^{15}$     |
|         | A3      | 0.163           | $2.14 \times 10^{-21}$        | $1.72 \times 10^{15}$     |
|         | A4      | 0.283           | $9.19 \times 10^{-20}$        | $3.77 \times 10^{14}$     |
|         | A5      | 0.323           | $3.48 \times 10^{-20}$        | $1.27 \times 10^{15}$     |
| <211>B  | B1      | 0.467           | $4.28 \times 10^{-18}$        | $2.16 \times 10^{17}$     |
|         | B2      | 0.496           | $9.69 \times 10^{-18}$        | $1.05 \times 10^{17}$     |
|         | B3      | 0.482           | $1.78 \times 10^{-17}$        | $2.06 \times 10^{17}$     |
|         | B4      | 0.570           | $6.17 \times 10^{-17}$        | $2.26 \times 10^{17}$     |

Tabla 3.3. Valores de los parámetros de los defectos encontrados en las dos muestras, empleados para la simulación de los transitorios y de los espectros DLTS.



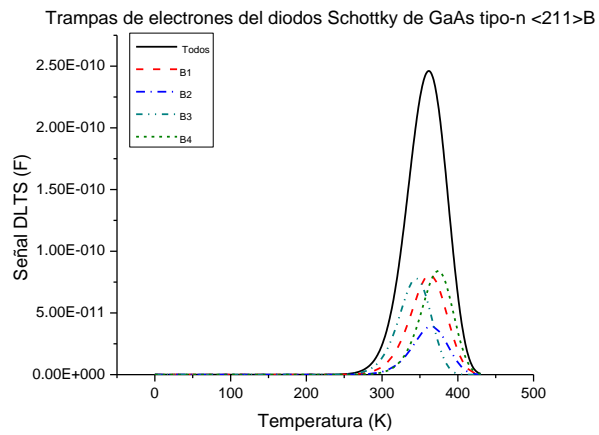
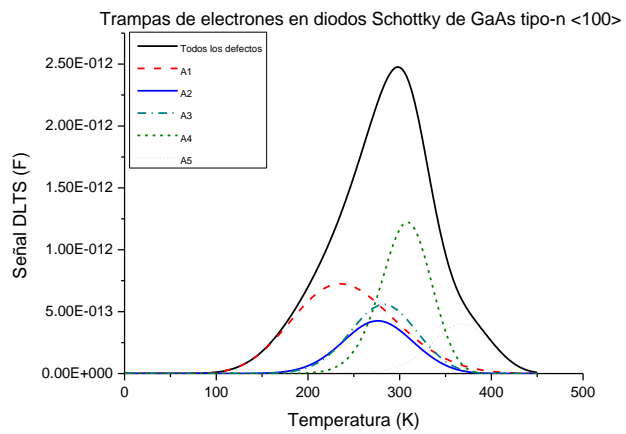


Figura 3.9 (Arriba) Espectro DLTS simulado para trampas de mayoritarios en diodo Schottky de GaAs <100>. (Abajo) espectro DLTS simulado para trampas de electrones en diodo Schottky de GaAs <211>B.

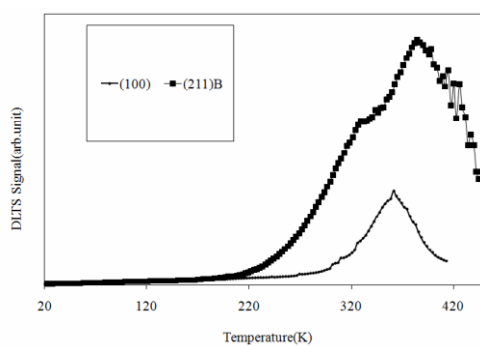
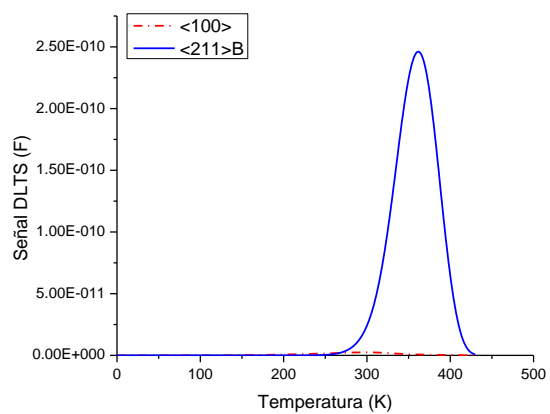


Figura 3.10. (Arriba) espectro DLTS simulado de los diodos Schottky de GaAs con orientación  $\langle 100 \rangle$  y  $\langle 211 \rangle$ . (Abajo) espectro de referencia.

### 3.2.2.1 DISCUSIÓN DE RESULTADOS DE LOS ESPECTROS

#### 3.2.2.1.1 Muestra $\langle 100 \rangle$

Pese a que los autores del estudio (Mari, y otros, 2009) reportaron los valores de todos los parámetros de los defectos encontrados en las muestras y que entre éstos la densidad de defectos sea mucho menor a la densidad de átomos de impurezas, se pudieron observar algunas inconsistencias para la muestra con

orientación <100>. Primero, existe un corrimiento hacia la izquierda con respecto al espectro de referencia. Segundo, el pico simulado se observa en un rango de temperatura aproximado desde 150 K hasta 450 K, es decir, es más ancho que el pico del espectro reportado, pues aquel se aprecia aproximadamente desde 300 K hasta 420 K; por otro lado, la altura del pico del espectro simulado no puede compararse con el de referencia, pues sus autores no especificaron los valores en el eje de las ordenadas. Es probable que dichas inconsistencias se deban a que los puntos que definen las rectas en la gráfica de Arrhenius reportada presentan algo de ruido, por lo que puede existir un error grande en los valores calculados de la ordenada al origen y la pendiente, resultando en valores inexactos para la sección eficaz de captura y la energía de activación, respectivamente.

#### 3.2.2.1.2 Muestra <211>B

Para esta muestra el pico del espectro simulado es más estrecho que el original. Al igual que con el espectro de la muestra con orientación <100>, la altura de los picos no puede compararse, mientras que en el espectro simulado el pico se observa bien definido, esto no ocurre en el caso del espectro original. La causa de estas diferencias es la enorme densidad de defectos (como se muestra en la tabla 3.3), pues el modelo empleado es inapropiado. Por lo tanto, hasta no contar con un modelo que incluya el cálculo del nivel de Fermi y de los transitorios de capacitancia considerando la enorme densidad de defectos, no es posible comparar el espectro simulado con el reportado.

#### 3.2.3 UNIONES $n^+ - p$ DE GaN

En el artículo de referencia no se especifica la función de filtrado analógico utilizada en la obtención de los espectros DLTS, por lo que aquí se utilizó Box-

Car para la simulación, por ser el más común. Sin embargo, además fueron simulados los espectros con el filtro Lock-In, debido a que al principio no se encontró una buena aproximación entre el espectro obtenido con el Box-Car y el reportado, desafortunadamente, los resultados obtenidos con el Lock-In son similares a los del Box-Car, aunque difieren en su altura. Para el filtro Lock-In se estableció arbitrariamente que de la ecuación (2.53),  $g = t_0 = 1$ . Sin embargo, las simulaciones que se obtuvieron con ambos tipos de filtros son semejantes entre sí, por lo que la disparidad que se tiene con los espectros reportados persiste. Finalmente, los espectros reportados por los autores del estudio tienen una forma invertida a la convencional<sup>13</sup>, por lo que los espectros simulados en este trabajo también fueron invertidos.

Los autores (Uk Lee, y otros, 2008) especifican que los valores de las ventanas de razones para los espectros de mayoritarios y minoritarios son, respectivamente:  $1.485 \text{ s}^{-1}$  y  $3.868 \text{ s}^{-1}$ . Para determinar los valores de  $t_1$  y  $t_2$  (dado que no fueron reportados por los autores), nuevamente se siguió el procedimiento empleado para el caso del Ge, estos son:  $t_1 = 0.625 \text{ s}$  y  $t_2 = 0.724 \text{ s}$  (mayoritarios),  $t_1 = 0.25 \text{ s}$  y  $t_2 = 0.267 \text{ s}$  (minoritarios). Por otro lado, las tablas 3.4 y 3.5 muestran los valores de los parámetros reportados, sin embargo, en esta última además se muestran las densidades propuestas en este trabajo para los defectos atrapa minoritarios. Las figuras 3.7 y 3.8 comparan los espectros obtenidos por ambos filtros con los espectros publicados en la literatura.

---

<sup>13</sup> En la forma convencional de la técnica DLTS, los picos que representan a las trampas de portadores mayoritarios se representan con signo negativo, mientras que los de minoritarios son de signo positivo.

| <b>Defecto</b> | $\Delta E_T$ (eV) | $\sigma_n$ (cm <sup>-2</sup> ) | $N_T$ (cm <sup>-3</sup> ) |
|----------------|-------------------|--------------------------------|---------------------------|
| H1             | 0.16              | $2.49 \times 10^{-18}$         | $2.8 \times 10^{17}$      |
| H2             | 0.20              | $2.45 \times 10^{-18}$         | $3.3 \times 10^{16}$      |
| H3             | 0.34              | $6.21 \times 10^{-18}$         | $1.32 \times 10^{17}$     |

Tabla 3.4. Parámetros y sus valores para las trampas de huecos en diodos de GaN.

| <b>Defecto</b> | $\Delta E_T$ (eV) | $\sigma_n$ (cm <sup>-2</sup> ) | $N_T$ (cm <sup>-3</sup> ) |
|----------------|-------------------|--------------------------------|---------------------------|
| E1             | 0.36              | $4.5 \times 10^{-18}$          | $2 \times 10^{17}$        |
| E2             | 0.44              | $6.7 \times 10^{-18}$          | $4 \times 10^{17}$        |

Tabla 3.5. Parámetros y sus valores para las trampas de electrones en diodos de GaN.

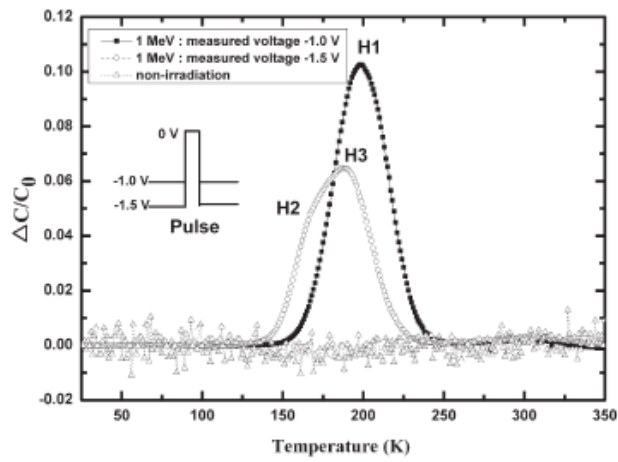
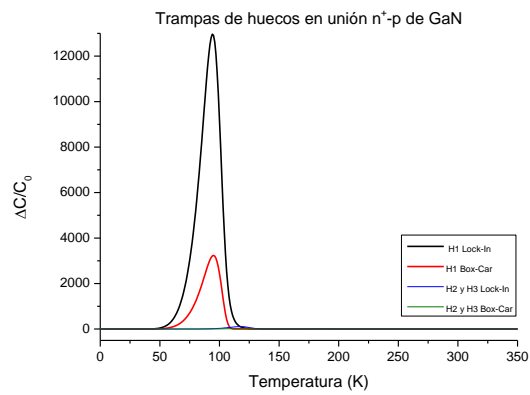


Figura 3.11. (Arriba) comparación entre los espectros DLTS simulados con los filtros Box-Car y Lock-In para los defectos atrapa mayoritarios (huecos). (Abajo) espectro reportado por los autores del estudio de GaN.

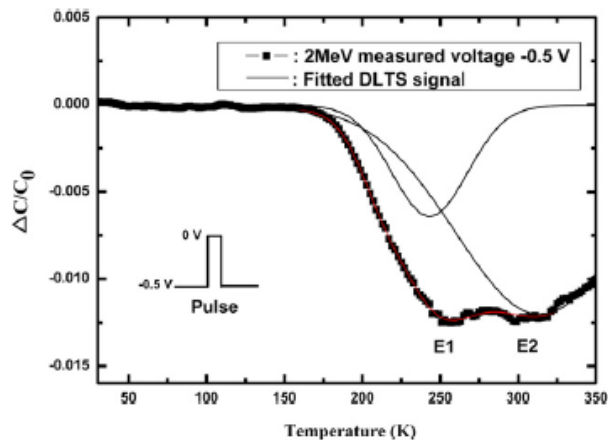
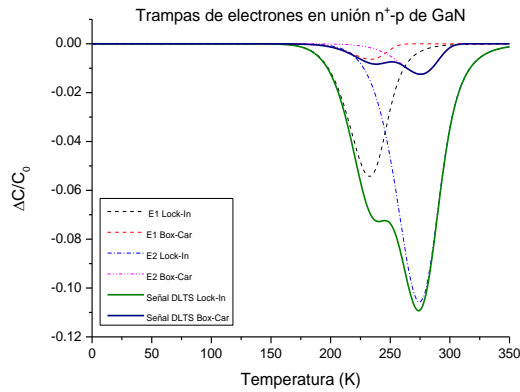


Figura 3.12. (Arriba) espectros DLTS simulados mediante dos tipos de filtro: Lock-In y Box-Car. (Abajo) espectro para trampas de electrones en GaN reportado en la literatura.

### 3.2.3.1 DISCUSIÓN DE RESULTADOS DE LOS ESPECTROS

#### 3.2.3.1.1 Trampas de huecos en región tipo-p

El espectro simulado de los defectos atrapa mayoritarios (huecos) presenta disparidades con el reportado por (Uk Lee, y otros, 2008) tanto en las posiciones

de los picos como en su altura, a pesar de haber utilizado los valores de los parámetros de los defectos y de la ventana de razones que ellos especificaron. Se debe recordar que las concentraciones de defectos reportadas son del orden de las densidades de impurezas en el material. En un sentido práctico, la técnica DLTS ya no es funcional tal y como se ha presentado aquí. La solución que incluya tales características requiere primero, del planteamiento de las expresiones correspondientes incluyendo las concentraciones altas de niveles profundos: el principio de neutralidad de carga para determinar el nivel de Fermi, la ecuación de Poisson y las ecuaciones correspondientes de la capacitancia y los transitorios producidos por los defectos. Lo segundo que se requiere es la solución de la ecuación de neutralidad de carga y de Poisson, requiriendo en cada caso el uso de métodos numéricos para ello. Para este material los autores del estudio no especificaron cómo calcularon las concentraciones de los defectos, sin embargo, (Wang, y otros, 2013) dan una idea de cómo hacerlo. El uso de las mediciones de Efecto Hall dependiente de la temperatura (Blood, y otros, 1992) son una alternativa para estas situaciones.

#### 3.2.3.1.2 Trampas de electrones en región tipo-p

Se puede apreciar que los espectros DLTS de las trampas de portadores minoritarios (electrones) no coinciden exactamente en temperatura con los reportados. Las concentraciones de tales defectos se propusieron de manera empírica, resultando en una aproximación bastante razonable con respecto a lo reportado.



### 3.3 PROBLEMA INVERSO

#### 3.3.1 DESARROLLO

Cada uno de los archivos que contiene a los puntos cartesianos ideales (mencionados en §3.1), es leído y almacenado en memoria por un programa escrito en el lenguaje Wolfram para el software Mathematica® y posteriormente a cada transitorio almacenado le fue añadida una componente de ruido blanco mediante la instrucción **WhiteNoiseProcess** con un valor de la relación señal-ruido de 100 para todos los transitorios simulados, elegida para no distorsionar la señal de forma muy significativa o bien para que sus efectos no se consideren despreciables. Posteriormente, la señal ruidosa en dichos transitorios fue filtrada con la instrucción **LowpassFilter**, la cual simula un filtro pasa-bajas, en cuyo caso la frecuencia de corte elegida fue de 100 Hz para todos los transitorios debido a que previamente se realizaron pruebas a distintas frecuencias de corte y en la mencionada se observó en todos los casos que la señal filtrada se suavizó considerablemente.

Al principio se simuló un transitorio no-exponencial ideal (sin ruido) que contemplaba todos los defectos mencionados en el Ge de un solo tipo con el propósito de conocer si los métodos numéricos de Prony, NonlinearModelFit y Laplace-Padé podían determinar con exactitud los parámetros de todas las componentes. De estos métodos, solo Prony y NonlinearModelFit fueron capaces de identificar todos los valores de los parámetros de interés en el transitorio. Puesto que en una medición real se obtienen transitorios con ruido, se decidió simular y añadir la fuente de ruido mencionada en el párrafo anterior a estos transitorios, lo que cambió la situación para el método de Prony, pues todos los valores de los parámetros obtenidos fueron erróneos, mientras que para NonlinearModelFit solo algunos de los valores obtenidos fueron

aproximados, cuando mucho para dos componentes. En vista de estos resultados, se decidió simular solamente transitorios con una y dos componentes exponenciales.

Los algoritmos de los métodos numéricos y aquellos que procesan los datos antes del análisis (eliminación del offset y del ruido) fueron codificados en el lenguaje Wolfram® de Mathematica®. Cada transitorio analizado por los métodos estudiados (Prony, NonlinearModelFit y Laplace-Padé) posee su propio programa, el cual contiene una copia de todos los algoritmos antes mencionados, con el propósito de que los datos obtenidos sean analizados posteriormente, pues luego de la ejecución del programa estos pueden ser guardados en disco. Cada uno de los algoritmos de los métodos numéricos se encuentra dentro de una rutina distinta.

Las instrucciones más importantes para el método de Prony son **Table**, **Solve** y **LeastSquares**, las cuales crean tablas, resuelven una ecuación y emplean el método de mínimos cuadrados, respectivamente. En el caso de Laplace-Padé, se realiza una interpolación de la función que contiene los puntos cartesianos simulados mediante la instrucción **Interpolation** y además se requiere utilizar un paquete llamado **FunctionApproximations**, el cual es invocado a través de la instrucción **Needs**, pues dicho paquete contiene a la instrucción **NIntegrateInterpolatingFunction**, la cual realiza una integración numérica de la función interpolada. Así mismo, la aproximante de Padé y la expansión en fracciones parciales se realiza respectivamente mediante las instrucciones **PadeApproximant** y **Apart**. Respecto a **NonlinearModelFit**, la opción elegida para realizar el análisis con los métodos disponibles (discutidos en §2.6.4) fue Automatic, que es la más general y predeterminada.

Antes de analizar a cada transitorio, se realizó el procesamiento de los datos simulados en tres pasos: lectura de los datos ideales contenidos en el archivo con formato CSV y su almacenamiento en la memoria del programa, simulación y adición del ruido a esta señal ideal, y finalmente el filtrado de la señal ruidosa, que elimina parcialmente el ruido. Para el primer paso se usó la instrucción **Import** para leer el archivo que contiene los puntos cartesianos “ideales” del transitorio y asignar dicha instrucción a una variable para ser almacenados y usados posteriormente. El segundo paso produjo los puntos cartesianos con ruido y se completó mediante las instrucciones **TransformedProcess**, **WhiteNoiseProcess**, **UniformDistribution** y **RandomFunction**. El cumplimiento del tercer paso se logró a través de la instrucción **LowpassFilter**, dando como resultado los puntos cartesianos filtrados del transitorio. Una vez que se obtuvieron los transitorios ideal, ruidoso y filtrado, se compararon gráficamente para observar tanto la distorsión de la señal ruidosa con la ideal como el efecto del filtrado. Para calcular el valor de la SNR (Signal to Noise Ratio), se utilizó la siguiente expresión:

$$SNR = \frac{AmplitudTransitorio}{AmplitudRuido}. \quad (3.1)$$

Por otra parte, dado que los transitorios ideal y con ruido poseen un offset, y puesto que el método de Laplace-Padé sólo es capaz de analizar datos sin offset, de acuerdo con lo que se estableció en §2.6.3.4, este tuvo que ser removido aproximadamente de ambas clases de transitorios, es decir que, para realizar un análisis con dicho método, primero se removió el offset y posteriormente se aplicó el filtro pasa-bajas a los datos sin offset.

Finalmente, la solución del problema inverso consiste en la obtención de los valores de los parámetros que constituyen a los transitorios de capacitancia ( $C_0$ ,  $A_{n,p}$  y  $e_{n,p}$ ) por medio de los métodos numéricos. Los datos de entrada para cada método de análisis corresponden a los transitorios filtrados (con y sin offset). Solamente los métodos de Prony y NonlinearModelFit son capaces de analizar transitorios con offset. Una vez que se obtuvieron los parámetros característicos asociados a cada método, se generó una lista de coordenadas cartesianas por cada método de análisis y transitorio (con y sin offset), cada una de estas fue graficada y comparada con la señal filtrada. No obstante, para el caso de Prony, algunos valores de los parámetros extraídos son complejos, por lo que no se ilustra la comparación gráfica.

Para utilizar el método de la inversión numérica de la transformada de Laplace con regularización (descrito en §2.6.3.2.1) en el análisis de los transitorios que forman parte de este trabajo, primero se probó este con los ejemplos propuestos por su autor, con el propósito de observar la reproducibilidad de los resultados que el obtuvo, sin embargo, los resultados que aquí se obtuvieron no concordaron con los presentados por Kryzhniy, consecuentemente el método no fue utilizado en este trabajo. Durante la programación de este método y pruebas antes mencionadas existió una colaboración del Dr. Rodolfo Quintero, quien elaboró en Mathematica® un simulador interactivo basado en este método para analizar transitorios con un máximo de dos componentes exponenciales, el cual se encuentra en proceso de revisión para ser incluido en el sitio de internet Wolfram Demonstrations Project.

### 3.3.2 RESULTADOS DEL PROBLEMA INVERSO

En el apartado siguiente se muestran los ajustes gráficos entre los datos filtrados y los calculados a través de los métodos numéricos. Así mismo, se muestra la comparación entre los parámetros determinados del transitorio ideal y los obtenidos luego del análisis, como una referencia para determinar la exactitud de los resultados obtenidos por cada método. El propósito de las comparaciones gráfica y numérica es ilustrar el mal planteamiento del problema, es decir que, aunque se tenga un buen ajuste gráfico, esto no garantiza que los valores obtenidos del análisis numérico sean correctos. Los transitorios que aquí se analizan son los más representativos de este trabajo. Finalmente, las tablas que pertenecen al método de Laplace-Padé no muestran el offset, el cual finalmente se acepta como el valor restado previo a la aplicación del método.

#### 3.3.2.1 DIODO SCHOTTKY DE Ge TIPO-N: TRANSITORIO NO-EXPONENCIAL DE LOS DEFECTOS ATRAPA MAYORITARIOS $E_p(0.17)$ Y $E_p(0.15)$ , REGISTRADO A 65 K.

##### 3.3.2.1.1 MÉTODO DE PRONY

| Valor    | $C_0$ (pF) | $A_{0.17}$ (pF)     | $e_{0.17}$ ( $s^{-1}$ ) | $A_{0.15}$ (pF)         | $e_{0.15}$ ( $s^{-1}$ ) |
|----------|------------|---------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| Ideal    | 30.35      | -0.4073             | -0.182                  | -0.07759                | -9.851                  |
| Obtenido | 29.9485    | -0.00566-<br>0.025i | -63.8-378.5i            | -<br>0.00566+0<br>.025i | -<br>63.8+378<br>.5i    |

Tabla 3.6. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con el método de Prony para el transitorio no-exponencial formado por los defectos  $E_p(0.17)$  y  $E_p(0.15)$  en Ge.

### 3.3.2.1.2 NonlinearModelFit

| Valor    | $C_0$ (pF) | $A_{0.17}$ (pF) | $e_{0.17}$ (s <sup>-1</sup> ) | $A_{0.15}$ (pF) | $e_{0.15}$ (s <sup>-1</sup> ) |
|----------|------------|-----------------|-------------------------------|-----------------|-------------------------------|
| Ideal    | 30.35      | -0.4073         | -0.182                        | -0.07759        | -9.851                        |
| Obtenido | 47.2756    | -17.3279        | -<br>0.00391304               | -<br>0.0803686  | -9.65574                      |

Tabla 3.7. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con NonlinearModelFit para el transitorio no-exponencial formado por los defectos Ep(0.17) y Ep(0.15) en Ge.

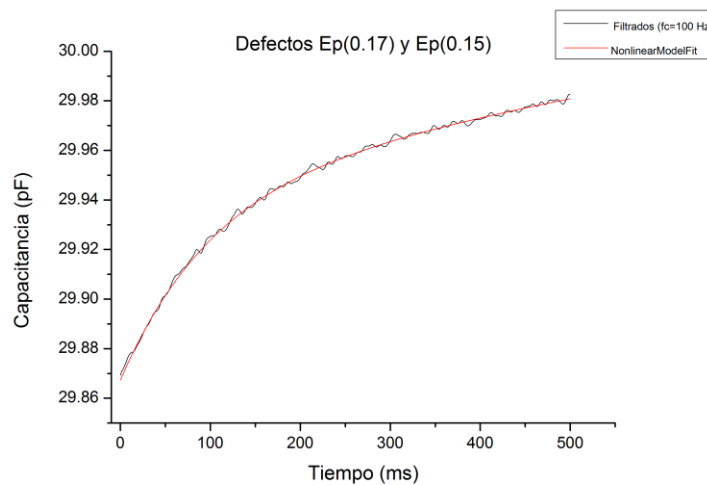


Figura 3.13. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con NonlinearModelFit para el transitorio no-exponencial formado por los defectos Ep(0.17) y Ep(0.15) en Ge.

**Con formato:** Fuente: (Predeterminada) +Cuerpo (Calibri), 11 pto, Sin Cursiva, Color de fuente: Automático, Sin Expandido / Comprimido

### 3.3.2.1.3 LAPLACE-PADÉ

| Valor    | $A_{0.17}$ (pF) | $e_{0.17}$ ( $s^{-1}$ ) | $A_{0.15}$ (pF) | $e_{0.15}$ ( $s^{-1}$ ) |
|----------|-----------------|-------------------------|-----------------|-------------------------|
| Ideal    | -0.4073         | -0.182                  | -0.07759        | -9.851                  |
| Obtenido | -0.110738       | -6.33806                | 0.000105849     | 25.5495                 |

Tabla 3.8. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con Laplace-Padé para el transitorio no-exponencial formado por los defectos  $Ep(0.17)$  y  $Ep(0.15)$  en Ge.

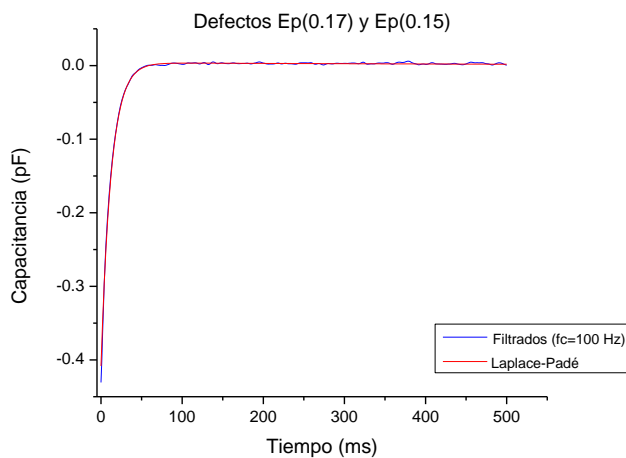


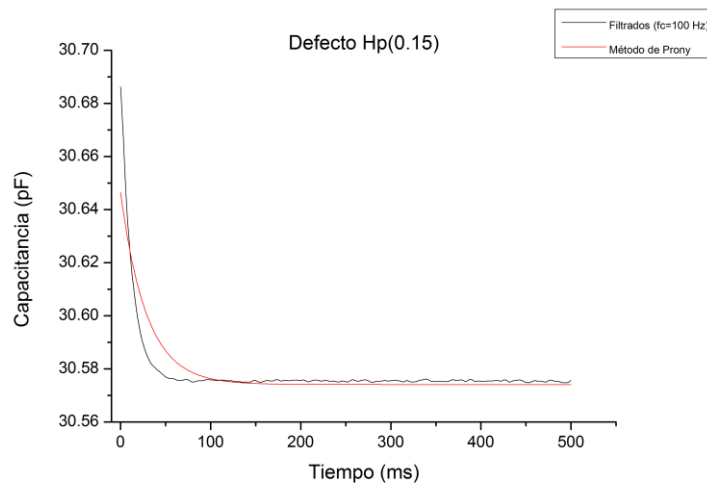
Figura 3.14. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con Laplace-Padé para el transitorio no-exponencial formado por los defectos  $Ep(0.17)$  y  $Ep(0.15)$  en Ge.

3.3.2.2 DIODO SCHOTTKY DE Ge TIPO-N: TRANSITORIO EXPONENCIAL DEL DEFECTO ATRAPA MINORITARIOS  $H_p(0.15)$ , REGISTRADO A 78 K.

3.3.2.2.1 MÉTODO DE PRONY

| Valor    | $C_0$ (pF) | $A$ (pF)  | $e_n$ ( $s^{-1}$ ) |
|----------|------------|-----------|--------------------|
| Ideal    | 30.58      | 0.1161    | -83.686            |
| Obtenido | 30.5741    | 0.0723819 | -34.7255           |

Tabla 3.9. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con el Método de Prony para el transitorio exponencial formado por el defecto  $H_p(0.15)$  en Ge.



Con formato: Fuente: (Predeterminada) +Cuerpo (Calibri), 11 pto, Sin Cursiva, Color de fuente: Automático, Sin Expandido / Comprimido

Figura 3.15. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con el Método de Prony para el transitorio exponencial formado por el defecto  $H_p(0.15)$  en Ge.



### 3.3.2.2.2 NonlinearModelFit

| Valor    | $C_{\infty}$ (pF) | $A$ (pF) | $e_n$ ( $s^{-1}$ ) |
|----------|-------------------|----------|--------------------|
| Ideal    | 30.58             | 0.1161   | -83.686            |
| Obtenido | 30.5754           | 0.125101 | -82.5373           |

Tabla 3.10. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con NonlinearModelFit para el transitorio exponencial formado por el defecto Hp(0.15) en Ge.

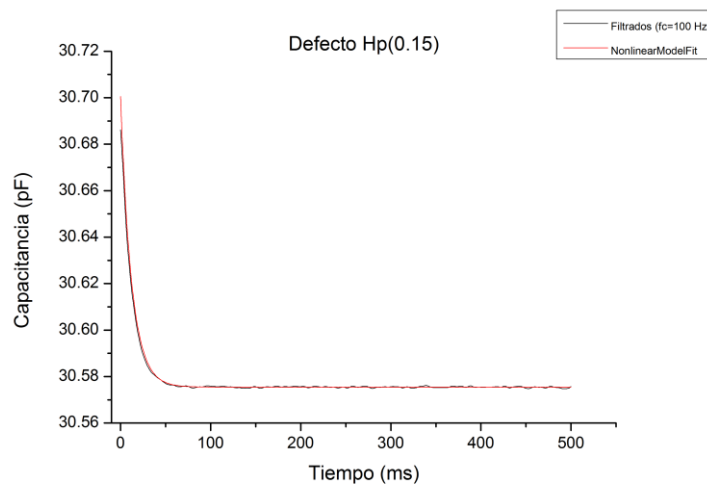


Figura 3.16. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con NonlinearModelFit para el transitorio exponencial formado por el defecto Hp(0.15) en Ge.

**Con formato:** Fuente: (Predeterminada) +Cuerpo (Calibri), 11 pto, Sin Cursiva, Color de fuente: Automático, Sin Expandido / Comprimido

### 3.3.2.2.3 LAPLACE-PADÉ

| Valor    | $A$ (pF) | $e_n$ ( $s^{-1}$ ) |
|----------|----------|--------------------|
| Ideal    | 0.1161   | -83.686            |
| Obtenido | 0.117217 | -85.1439           |

Tabla 3.11. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con Laplace-Padé para el transitorio exponencial formado por el defecto Hp(0.15) en Ge.

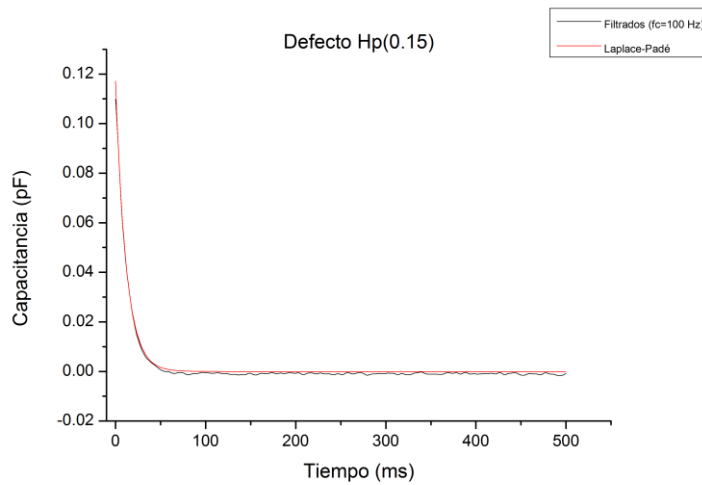


Figura 3.17. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con Laplace-Padé para el transitorio exponencial formado por el defecto Hp(0.15) en Ge.

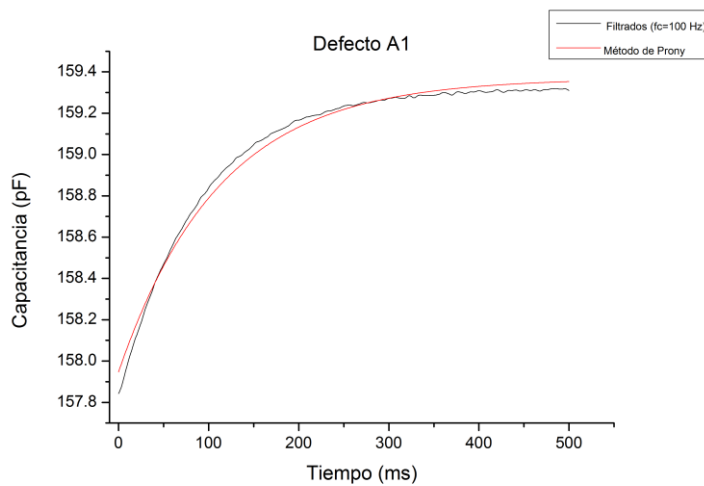
**Con formato:** Fuente: (Predeterminada) +Cuerpo (Calibri), 11 pto, Sin Cursiva, Color de fuente: Automático, Sin Expandido / Comprimido

3.3.2.3 DIODO SCHOTTKY DE GaAs TIPO-N, MUESTRA A: TRANSITORIO EXPONENCIAL DEL DEFECTO ATRAPA MAYORITARIOS A1, REGISTRADO A 181 K.

3.3.2.3.1 MÉTODO DE PRONY

| Valor    | $C_0$ (pF) | $A$ (pF) | $e_n$ (s <sup>-1</sup> ) |
|----------|------------|----------|--------------------------|
| Ideal    | 159.3      | -1.494   | -11.316                  |
| Obtenido | 159.369    | -1.42238 | -8.96933                 |

Tabla 3.12. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con el Método de Prony para el transitorio exponencial formado por el defecto A1.



Con formato: Fuente: 11 pto, Sin Cursiva, Color de fuente: Automático, Sin Expandido / Comprimido

Figura 3.18. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con el Método de Prony para el transitorio exponencial formado por el defecto A1 en GaAs.

### 3.3.2.3.2 NonlinearModelFit

| Valor    | $C_0$ (pF) | $A$ (pF) | $e_n$ (s <sup>-1</sup> ) |
|----------|------------|----------|--------------------------|
| Ideal    | 159.3      | -1.494   | -11.316                  |
| Obtenido | 159.32     | -1.51073 | -11.284                  |

Tabla 3.13. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con NonlinearModelFit para el transitorio exponencial formado por el defecto A1.

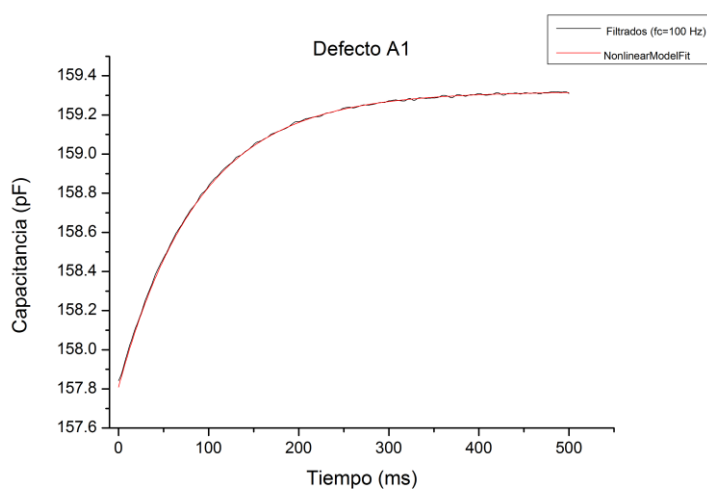


Figura 3.19. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con NonlinearModelFit para el transitorio exponencial formado por el defecto A1 en GaAs.

**Con formato:** Fuente: 11 pto, Sin Cursiva, Color de fuente: Automático, Sin Expandido / Comprimido

### 3.3.3.2.3 LAPLACE-PADÉ

| Valor    | $A$ (pF) | $e_n$ (s <sup>-1</sup> ) |
|----------|----------|--------------------------|
| Ideal    | -1.494   | -11.316                  |
| Obtenido | -1.53059 | -11.0733                 |

Tabla 3.14. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con Laplace-Padé para el transitorio exponencial formado por el defecto A1.

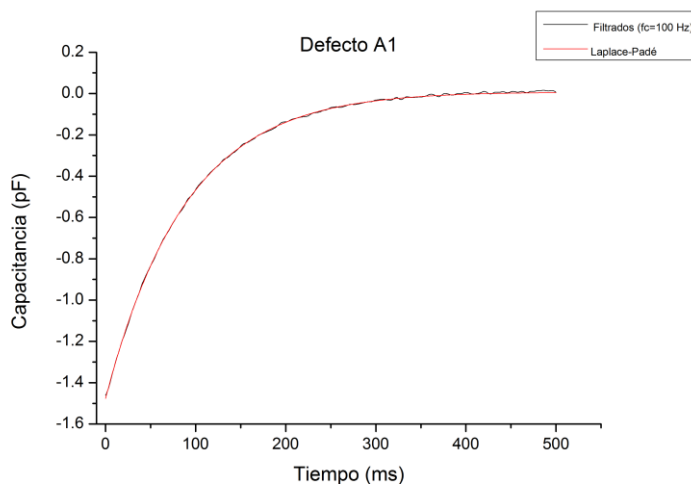


Figura 3.20. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con Laplace-Padé para el transitorio exponencial formado por el defecto A1 en GaAs.

**Con formato:** Fuente: (Predeterminada) +Cuerpo (Calibri), 11 pto, Sin Cursiva, Color de fuente: Automático, Sin Expandido / Comprimido

3.3.2.4 UNIÓN  $n^+ - p$  DE GaN: TRANSITORIO EXPONENCIAL DEL DEFECTO ATRAPA MAYORITARIOS (HUECOS) H3, REGISTRADO A 210 K.

3.3.2.4.1 MÉTODO DE PRONY

| Valor    | $C_0$ (pF) | $A$ (pF) | $e_n$ ( $s^{-1}$ ) |
|----------|------------|----------|--------------------|
| Ideal    | 22.34      | -310.7   | -12.558            |
| Obtenido | 17.6318    | -394.132 | -23.6294           |

Tabla 3.15. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con el Método de Prony para el transitorio exponencial formado por el defecto H3.

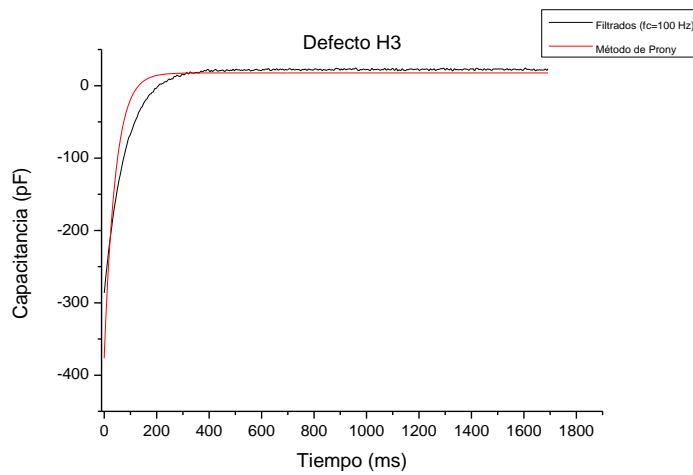


Figura 3.21. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con el Método de Prony para el transitorio exponencial formado por el defecto H3 en GaN.

### 3.3.2.4.2 NonlinearModelFit

| Valor    | $C_0$ (pF) | $A$ (pF) | $e_n$ (s <sup>-1</sup> ) |
|----------|------------|----------|--------------------------|
| Ideal    | 22.34      | -310.7   | -12.558                  |
| Obtenido | 22.3981    | -314.379 | -12.5232                 |

Tabla 3.16. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con NonlinearModelFit para el transitorio exponencial formado por el defecto H3.

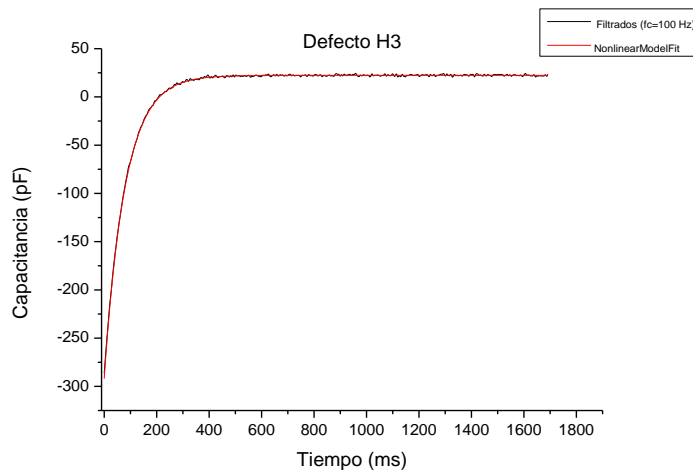


Figura 3.22. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con NonlinearModelFit para el transitorio exponencial formado por el defecto H3 en GaN.

### 3.3.2.4.3 LAPLACE-PADÉ

| Valor    | $A$ (pF) | $e_n$ ( $s^{-1}$ ) |
|----------|----------|--------------------|
| Ideal    | -310.7   | -12.558            |
| Obtenido | -310.869 | -12.4571           |

Tabla 3.17. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con Laplace-Padé para el transitorio exponencial formado por el defecto H3.

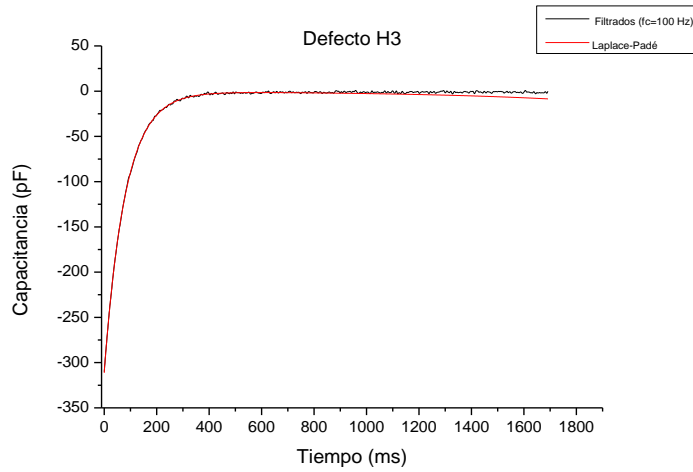


Figura 3.23. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con Laplace-Padé para el transitorio exponencial formado por el defecto H3 en GaN.



3.3.2.5 UNIÓN  $n^+ - p$  DE GaN: TRANSITORIO NO-EXPONENCIAL DE LOS DEFECTOS ATRAPA MINORITARIOS (ELECTRONES) E1 Y E2, REGISTRADO A 350 K.

3.3.2.5.1 MÉTODO DE PRONY

| Valor    | $C_{\infty}$ (pF) | $A_{E1}$ (pF) | $e_{nE1}$ ( $s^{-1}$ ) | $A_{E2}$ (pF) | $e_{nE2}$ ( $s^{-1}$ ) |
|----------|-------------------|---------------|------------------------|---------------|------------------------|
| Ideal    | 97.95             | 3.987         | -2340                  | 18.6          | -245.503               |
| Obtenido | 97.9772           | 8.74044+9i    | -276.757-228i          | 8.74044-9i    | -276.757+228i          |

Tabla 3.18. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con el Método de Prony para el transitorio no-exponencial formado por los defectos E1 y E2 en GaN.

3.3.2.5.2 NonlinearModelFit

| Valor    | $C_0$ (pF) | $A_{E1}$ (pF) | $e_{nE1}$ ( $s^{-1}$ ) | $A_{E2}$ (pF) | $e_{nE2}$ ( $s^{-1}$ ) |
|----------|------------|---------------|------------------------|---------------|------------------------|
| Ideal    | 97.95      | 3.987         | -2340                  | 18.6          | -245.503               |
| Obtenido | 97.9536    | -13.596       | -1003.35               | 30.8831       | -273.788               |

Tabla 3.19. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con NonlinearModelFit para el transitorio no-exponencial formado por los defectos E1 y E2 en GaN.

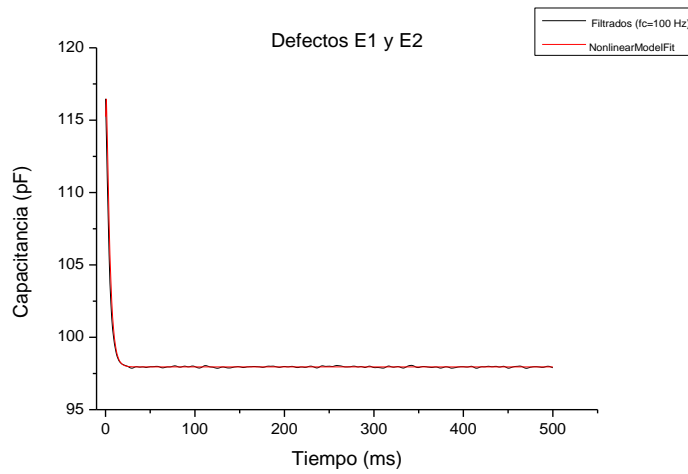


Figura 3.24. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con NonlinearModelFit para el transitorio no-exponencial formado por los defectos E1 y E2 en GaN.

### 3.3.2.5.3 LAPLACE-PADÉ

| Valor    | $A_{E1}$ (pF) | $e_{nE1}$ ( $s^{-1}$ ) | $A_{E2}$ (pF) | $e_{nE2}$ ( $s^{-1}$ ) |
|----------|---------------|------------------------|---------------|------------------------|
| Ideal    | 3.987         | -2340                  | 18.6          | -245.503               |
| Obtenido | 0.130492      | -1.39259               | 24.703        | -313.987               |

Tabla 3.20. Valores teóricos y obtenidos luego de realizar el análisis numérico con Laplace-Padé para el transitorio no-exponencial formado por los defectos E1 y E2 en GaN.

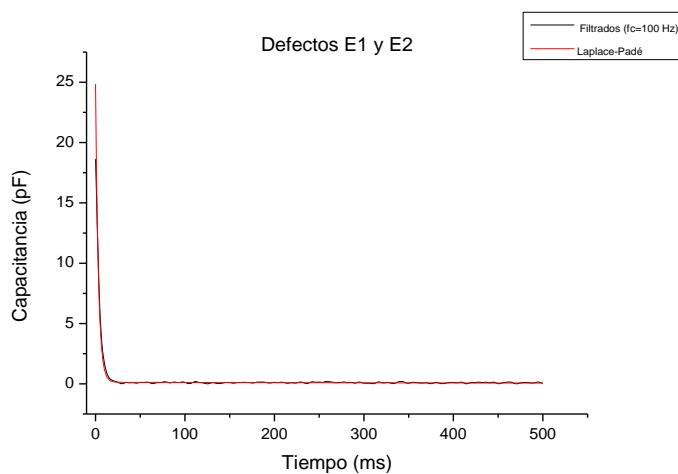


Figura 3.25. Comparación gráfica entre los datos filtrados y el transitorio generado con los resultados del análisis numérico con Laplace-Padé para el transitorio no-exponencial formado por los defectos E1 y E2 en GaN.

### 3.3.3 DISCUSIÓN DE RESULTADOS DE LOS TRANSITORIOS EXPONENCIALES

De acuerdo con los resultados mostrados en el capítulo anterior, el método de Prony permite obtener valores aproximados para el Offset ( $C_0$ ) e inclusive para la amplitud de este tipo de transitorios. Sin embargo, este método falla al

obtener una buena aproximación para el valor de la razón de emisión (constante de tiempo de decaimiento).

En el contexto de los problemas inversos, el método de Prony viola las condiciones de unicidad y estabilidad definidas por Hadamard (Hansen, 2010), en otras palabras, incluso cuando la señal haya sido filtrada, el método es sensible a las pequeñas perturbaciones que existan en los datos experimentales, pues se puede producir una gran perturbación en los valores de los parámetros que se desean obtener, dando como resultado más de una solución y que éstas sean irregulares.

Por otro lado, se puede apreciar que la solución obtenida por `NonlinearModelFit`, presenta una mejor aproximación que el método de Prony para todos los parámetros que caracterizan al transitorio, es decir:  $C_0$ ,  $A$  y  $e$  (capacitancia en estado estacionario, amplitud y razón de emisión, respectivamente). Se puede decir que este método permite que se cumplan todas las condiciones que definen a un problema bien planteado (existencia, unicidad y estabilidad). No obstante, de los métodos numéricos que forman parte de esta herramienta, hasta la fecha no es posible determinar cuál o cuáles de ellos son los que Mathematica® empleó para encontrar la solución.

Finalmente, los resultados obtenidos con el método de Laplace-Padé son equiparables a los obtenidos con `NonlinearModelFit`. A diferencia de este último, para realizar un análisis con Laplace-Padé, no es necesario especificar el número de componentes exponenciales del transitorio, y sí un valor para  $s_0$ , el cual puede ser una aproximación a una de las razones de emisión del transitorio.

Además, debe especificarse el valor de  $L$  y  $M$  (orden del numerador y denominador de las aproximantes de Padé, respectivamente), siendo  $L < M$ . Sin embargo, la desventaja principal del método de Laplace-Padé, es el enorme tiempo de ejecución que se necesita para realizar un análisis (a diferencia de un análisis con NonlinearModelFit), pues la estrategia que se siguió para Laplace-Padé fue realizar una sucesión finita de cálculos (en promedio se realizan cinco cálculos) para valores de  $L$  y  $M$  con incrementos de uno, para un solo valor de  $s_0$ , es decir, que dicha sucesión ocasiona que el algoritmo sea costoso a nivel computacional debido a la integración numérica y a la interpolación que se realiza sobre los puntos cartesianos para que se realice la integración. La razón de aplicar esta estrategia se debe a que  $L$  y  $M$  permiten obtener el número de términos racionales en la aproximación de la Transformada de Laplace de una suma de exponenciales, algo que en la práctica se desconoce.

#### 3.3.4 DISCUSIÓN DE RESULTADOS DE LOS TRANSITORIOS NO-EXPONENCIALES

Cuando se trata de transitorios capacitivos formados con dos o más componentes exponenciales, el método de Prony obtiene valores complejos para todos los parámetros que componen al transitorio ( $C_0$ ,  $A_i$  y  $e_i$ ). Sin embargo, la parte imaginaria del Offset es muy pequeña comparada con la parte real, por lo que ésta puede despreciarse, razón por la cual sólo aparece la parte real en las tablas comparativas. Al igual que en el análisis de transitorios exponenciales, este método es incapaz de resolver el problema inverso puesto que no se cumplen las condiciones de unicidad y estabilidad.

En referencia a NonlinearModelFit, aunque no se tenga una certeza de cuál o cuáles de los métodos numéricos emplea para realizar el análisis, cuando se trata de transitorios no-exponenciales se obtiene una buena aproximación del

valor de  $C_0$ . Aunado a ello, cuando el transitorio es una suma de dos componentes exponenciales, se observó que dicho método es capaz de determinar de forma muy aproximada los valores de los parámetros de sólo una de las componentes ( $A$  y  $e$ ), aunque es posible obtener valores aproximados para todas las componentes de este tipo de transitorio (tal es el caso de los defectos Hp(0.27) y Hp(0.30) del diodo de Ge); no obstante, es posible que el método sea incapaz de obtener una buena aproximación para todas ellas, como es el caso de los transitorios de los defectos Ep(0.32) y Ep(0.31) del diodo Schottky de Ge y de los defectos A2 y A3 de los diodos Schottky de GaAs. Con respecto al GaAs, aunque gráficamente se obtenga un ajuste casi perfecto, esto no garantiza que los valores de los parámetros obtenidos sean los correctos, debido al mal planteamiento del problema (Istratov, y otros, 1999). En un transitorio con tres componentes exponenciales, como es para los diodos Schottky de GaAs tipo-n con defectos B1, B2 y B3, este método sólo fue capaz de determinar de forma aproximada los valores de las razones de emisión de dos de las tres componentes y ningún valor de las amplitudes fue determinado de forma aproximada, sin embargo, gráficamente se obtuvo un ajuste muy bueno.

Por último, Laplace-Padé se comporta de forma similar a NonlinearModelFit cuando se trata de un transitorio con dos componentes, aunque para el transitorio de tres componentes antes mencionado, el método de Laplace-Padé solamente pudo determinar dos de sus tres componentes; asimismo, se comparó el tiempo de ejecución entre ambos métodos y Laplace-Padé es el que más tarda debido a la integración numérica y a la interpolación.

## CAPÍTULO 4: CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

### 4.1 CONCLUSIONES

1. La simulación de la señal DLTS para la muestra de Ge proporciona resultados similares a los reportados por los autores en la literatura. En los casos de GaAs y GaN, las diferencias observadas son debidas a la invalidez del modelo simple presentado.

2. NonlinearModelFit permite determinar con precisión el offset de la línea de base para transitorios exponenciales, aunque en el caso de transitorios no-exponenciales el resultado puede no ser preciso.
3. El método de Prony es muy sensible al ruido. En consecuencia, aunque los datos hayan sido filtrados, los resultados obtenidos con este son en general erróneos.
4. Para un transitorio mono-exponencial, los métodos NonlinearModelFit y Laplace-Padé ofrecen los mejores resultados cuando se trata de datos filtrados. Sin embargo, este último es más costoso a nivel computacional, pues en promedio un análisis con Laplace-Padé dura aproximadamente tres minutos, mientras que NonlinearModelFit no tarda más de treinta segundos.
5. Para un transitorio con dos componentes, NonlinearModelFit es capaz de proveer resultados más aproximados de la amplitud y la constante de tiempo de ambas componentes. Este método proporciona los mejores resultados a pesar del mal planteamiento del problema. En consecuencia, es el más apropiado para propuestas experimentales que requieran realizar los cálculos punto a punto simultáneamente con el barrido térmico o bien para una técnica a temperatura constante durante tiempos largos y con un gran número de puntos en el transitorio.

#### 4.2 TRABAJO FUTURO

1. Estudiar la posible propuesta de un modelo para calcular los transitorios de capacitancia cuando se trate de una densidad de defectos equiparable o mayor a la densidad de átomos de impurezas.



2. Analizar el efecto del filtrado sobre transitorios que contengan ruido  $1/f$  simulado.
3. Realizar una revisión de los distintos métodos de Laplace regularizados para una posterior inclusión de dicho método en un algoritmo numérico práctico.
4. Desarrollar un sistema de caracterización de niveles profundos en semiconductores, que incluya el uso de lo estudiado en este trabajo y algún algoritmo de análisis de transitorios largos adquiridos a temperatura constante. En dicho sistema, el software de análisis en su interfaz gráfica puede ser codificado en cualquier lenguaje de programación de alto nivel mientras que el núcleo del programa para el análisis de los transitorios experimentales debe ser codificado en el lenguaje Wolfram por medio de Mathematica.

### Trabajos citados

**Ahmadzadeh Reza** Mathworks [En línea]. - 5 de 7 de 2013. - <https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/38630-random-search-algorithm>.

**Aster Richard C., Borchers Brian y Thurber Clifford H.** Parameter Estimation and Inverse Problems [Libro]. - [s.l.] : Academic Press, 2012.

**Black Noel, Moore Shirley y Weisstein Eric W.** MathWorld [En línea] // Conjugate Gradient Method. - Wolfram. - 10 de Octubre de 2017. - <http://mathworld.wolfram.com/ConjugateGradientMethod.html>.

**Blood P. y Orton J. W.** The Electrical Characterization of Semiconductors: Majority Carriers and Electron States [Libro]. - Redhill, UK : Academic Press, 1992.

**Carr Roger** Mathworld [En línea]. - 2000. - <http://mathworld.wolfram.com/SimulatedAnnealing.html>.

**Chapra Steven C. y Canale Raymond P.** Métodos numéricos para ingenieros Con programas de aplicación [Libro]. - México, D.F. : McGraw-Hill Interamericana, 2003.

**Dobaczewski L. [y otros]** Laplace transform deep-level transient spectroscopic studies of defects in semiconductors [Publicación periódica]. - Warsaw, Poland : American Institute of Physics, 1994. - 1 : Vol. 76.

**Dobaczewski L., Peaker A. R. y Nielsen K. Bonde** Laplace-transform deep-level spectroscopy: The technique and its applications to the study of point defects in semiconductors [Publicación periódica] // Applied Physics Reviews - Focused Review. - 2004. - págs. 4689-4728.

**Hansen Per Christian** Discrete Inverse Problems Insight and Algorithms [Libro]. - Lyngby, Dinamarca : Society for Industrial and Applied Mathematics, 2010.

**Hildebrand Francis B.** Introduction to Numerical Analysis [Libro]. - Mineola N.Y. : Dover Publications, 1974.

**Istratov Andrei A. y Vyvenko Oleg F.** Exponential analysis in physical phenomena [Publicación periódica] // Review of Scientific Instruments. - 1999. - pág. 25.

**Jaros M.** Deep Levels in Semiconductors [Libro]. - [s.l.] : Adam Hilger Ltd, 1982.

**Kimerling L. C.** New Developments in Defect Studies in Semiconductors [Publicación periódica] // IEEE Transactions on Nuclear Science. - 1976. - págs. 1497-1505.

**Kittel Charles y Kroemer Herbert** Thermal Physics [Libro]. - San Francisco : W. H. Freeman, 1980.

**Konczakowska Alicja y Wilamowski Bogdan M.** Noise in Semiconductor Devices [Sección de libro] // The Industrial Electronics Handbook: Fundamentals of Industrial Electronics. - [s.l.] : CRC Press, 2011.

**Kryzhniy V. V.** High-resolution exponential analysis via regularized numerical inversion of Laplace transforms [Publicación periódica]. - Krasnodar, Rusia : Elsevier, 2004.

**Lanczos Cornelius** Applied Analysis [Libro]. - Englewood Cliffs, NJ. : Prentice-Hall, 1959. - pág. 272.

**Lang D. V.** Deeplevel transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors [Publicación periódica]. - Murray Hill, New Jersey : Journal of Applied Physics, 1974. - 3023 : Vol. 45.

**Maas Stephen A.** Noise in Linear and Nonlinear Circuits [Libro]. - Norwood, MA : Artech House, 2005.

**Mari R. H. [y otros]** Laplace DLTS of molecular beam epitaxy GaAs grown on (100) and (211)B substrates [Publicación periódica]. - Nottingham : Physica Status Solidi, 2009. - 12 : Vol. 6.

**McGuire Gary E.** Characterization of Semiconductor Materials Principles and Methods [Libro]. - Mill Road, Park Ridge, New Jersey : Noyes Publications, 1989. - Vol. Volume 1.

**McKelvey John P.** Física del Estado Sólido y de Semiconductores [Libro]. - México D.F. : Limusa, 1980.

**Miller G. L., Ramirez J. V. y Robinson D. A. H.** A Correlation Method for Semiconductor Transient Signal Measurements [Publicación periódica] // Journal of Applied Physics. - 1975. - págs. 2638-2644.

**Morkoç Hadis** Handbook of Nitride Semiconductors and Devices [Libro]. - Richmond : Wiley-VCH, 2008. - Vols. Vol. 1: Materials Properties, Physics and Growth.

**Nyamhere C. [y otros]** Deep level transient spectroscopy (DLTS) study of defects introduced in antimony doped Ge by 2 MeV proton irradiation [Publicación periódica]. - [s.l.] : Physica B, 2011. - Vol. 406.

**Provencher Stephen W.** CONTIN: A general purpose constrained regularization program for inverting noisy linear algebraic and integral equations [Publicación periódica] // Computer Physics Communications. - 1982. - págs. 229-242.

**Rouse Margaret y Gibilisco Stan** WhatIs.com [En línea]. - Julio de 2012. - <http://whatis.techtarget.com/definition/stochastic-optimization>.

**Roy Dilip K** Physics of Semiconductor Devices [Libro]. - India : Universities Press, 2004.

**Sauer Timothy** Análisis Numérico [Libro]. - [s.l.] : Pearson Educación, 2013.

**Schroder Dieter K.** Semiconductor Material and Device Characterization [Libro]. - Tempe, AZ : Wiley-Interscience, 2006.

**Sze S. M.** Physics of Semiconductor Devices [Libro]. - Murray Hill, New Jersey : Wiley-Interscience, 1969.

**Sze S. M.** Semiconductor Devices Physics and Technology [Libro]. - Danvers, MA : John Wiley & Sons, 2002.

**Tin Chin-Che** Deep Level Transient Spectroscopy [Sección de libro] // Characterization of Materials / aut. libro Kaufmann Elton N.. - [s.l.] : John Wiley & Sons, 2012.

**Tokuda Y. [y otros]** DLTS study of n-type GaN grown by MOCVD on GaN substrates [Publicación periódica] // Superlattices and Microstructures. - 2006. - págs. 268-273.

**Uk Lee Dong [y otros]** Characterization of electron irradiated GaN n+ -p diode [Publicación periódica]. - [s.l.] : Thin Solid Films, 2008. - Vol. 516.

**Wang Wei-Ju [y otros]** DLTS Analyses of GaN p-i-n Diodes Grown on Conventional and Patterned Sapphire Substrates [Publicación periódica] // IEEE Electron Device Letters. - 2013. - págs. 1376-1378.

**Weisstein Eric W.** Mathworld [En línea] // Mathworld. - 2007. - <http://mathworld.wolfram.com/Nelder-MeadMethod.html>.

**Weisstein Eric W.** MathWorld [En línea] // Method of Steepest Descent. - 10 de Octubre de 2017. - <http://mathworld.wolfram.com/MethodofSteepestDescent.html>.

**Williams Richard** Determination of Deep Centers in Conducting Gallium Arsenide [Publicación periódica]. - [s.l.] : Journal of Applied Physics, 1966. - 3411 : Vol. 37.

**Yeremian Edouard y Claverie Pierre** Analysis of multiexponential functions without a hypothesis as to the number of components [Publicación periódica]. - Paris : Nature, 1987. - 12 : Vol. 326.

Apéndice A: Programa en Mathcad que simula transitorios capacitivos como resultado de la emisión térmica de huecos en el diodo Schottky de Ge tipo-n.

Se encuentra disponible sólo en forma electrónica como un archivo de Mathcad.

Apéndice B: Código fuente del programa en Mathematica que contiene los algoritmos del análisis no-exponencial, así como la simulación del ruido blanco y su correspondiente filtrado en el transitorio del defecto Hp(0.15) del diodo Schottky de Ge tipo-n.

---

Definición de los algoritmos necesarios: Método de Prony, Laplace-Padé, NonlinearModelFit y Método de Momentos. Así mismo, se definen rutinas para pre-procesar los datos (eliminación del Offset y ruido). Para el método de Laplace-Padé, se incluye una rutina para eliminar las raíces artificiales.

```

MetodoProny[ordenadas_, Nptos_, ncomp_, Δt_] :=
Module[{Nmax = Nptos, ReglasOrdenadas, ReglasDeltaf, sistemaEcuacionesAmplitudes,
módulo

sistemaEcuacionesα, coeff, varsa, vectorSolucionesα, Resultados, Resultadosμ,
Raicesμ, coefμ, amplitudesCalculadas, b, ResultadosC, OffsetCalculado,
ctesDecaimientoCalculadas, ListaAmplitudesCtesDecaimientoCalculadas,
ParametrosObtenidos, ExpresionResultante),
Nmax = Nptos - 2;
ReglasOrdenadas = Table[fi → ordenadas[[i + 1]], {i, 0, Length[ordenadas] - 1}];
ReglasDeltaf = Table[Δfk → fk+1 - fk, {k, 0, Nmax}] /. ReglasOrdenadas;
sistemaEcuacionesAmplitudes =
Table[ $\sum_{j=0}^{ncomp} C_j \text{If}[j = 0, (\mu_j)^0, (\mu_j)^i] = f_i$ , {i, 0, Nptos - 1}];
sistemaEcuacionesα = Table[ $\sum_{j=1}^{ncomp} \Delta f_{i-j} \alpha_j = -\Delta f_i$ , {i, ncomp, Nmax}];
coeff = Table[Δfi-j, {i, ncomp, Nmax}, {j, 1, ncomp}] /. ReglasDeltaf;
MatrixForm[coeff];
varsa = Table[αi, {i, 1, ncomp}];
MatrixForm[varsa];
vectorSolucionesα = Table[-Δfi, {i, ncomp, Nmax}] /. ReglasDeltaf;
MatrixForm[vectorSolucionesα];
]

```



```

| suma de matrices
If[Nptos >= 2 ncomp,
| si
  If[Nptos == 2 ncomp, Resultados = LinearSolve[coeff, vectorSoluciones] /. ReglasDeltaf,
  | si | resuelve ecuación lineal
  Resultados = LeastSquares[coeff, vectorSoluciones],
  | mínimos cuadrados
  Print["El número de puntos debe ser mayor o
  | escribe
  igual al doble del número de componentes"]];
(*Resultados=LeastSquares[coeff,vectorSoluciones]*)
| mínimos cuadrados
varα = Table[αi = Resultados[[i]], {i, 1, ncomp}];
| tabla
Resultadosμ = Solve[ $\sum_{i=0}^{ncomp} \mu^{ncomp-i} \text{If}[i = 0, \alpha_i^4, \alpha_i] = 0$ ];
| resuelve | si
Raicesμ = Table[μi → Resultadosμ[[i, 1, 2]], {i, 1, ncomp}];
| tabla
(*0sis ncomp*)
coefμ = Table[If[j == 0, (μj)0, (μj)4], {i, 0, Nptos - 1}, {j, 0, ncomp}] /. Raicesμ;
| tabla | si
(*0sis ncomp*)
MatrixForm[coefμ];
| forma de matriz
amplitudesCalculadas = Table[Ci, {i, 0, ncomp}];
| tabla
MatrixForm[amplitudesCalculadas];
| forma de matriz
b = Table[fi, {i, 0, Nptos - 1}] /. ReglasOrdenadas;
| tabla
MatrixForm[b];
| forma de matriz
ResultadosC = LeastSquares[coefμ, b, Tolerance → 10-15];
| mínimos cuadrados | tolerancia
OffsetCalculado = {C0 → ResultadosC[[1] ]};
amplitudesCalculadas = Table[Ci → ResultadosC[[i + 1]], {i, 1, ncomp}];
| tabla
ctesDecaimientoCalculadas = Table[ai →  $\frac{\text{Log}[\mu_i]}{\Delta t}$ , {i, 1, ncomp}] /. Raicesμ;
| tabla
ListaAmplitudesCtesDecaimientoCalculadas =
Table[{amplitudesCalculadas[[i]], ctesDecaimientoCalculadas[[i]], {i, 1, ncomp}}];
| tabla
(*ParametrosObtenidos=Join[OffsetCalculado,
| junta
ListaAmplitudesCtesDecaimientoCalculadas];
Return[ParametrosObtenidos];*)
| retorna

```

```

ExpresionResultante = C0 +  $\sum_{i=1}^{ncomp} C_i e^{s_i t}$  /. OffsetCalculado /. amplitudesCalculadas /.
ctesDecaimientoCalculadas;
Return[ExpresionResultante];];

```

Needs["FunctionApproximations`"];

```

LaplacePade[K_, s0_, abs_, ords_, limInf_, limSup_, L_, M_] :=
Module[{tamanoListaPtos, ptos, g, t, j, Faprox, Result},

tamanoListaPtos = If[Length[abs] == Length[ords], Length[abs], 0];
ptos = Table[{abs[[i]], ords[[i]]}, {i, 1, tamanoListaPtos}];
g = Interpolation[ptos];
G[s_] := NIntegrateInterpolatingFunction[(-t)^j g[t] Exp[-s t], {t, limInf, limSup}];
F[s_] :=  $\sum_{j=0}^k \frac{1}{j!} G[s0] (s - s0)^j$ ;
Faprox = PadeApproximant[F[s], {s, s0, {L, M}}];
Result = Apart[Faprox];
Return[Result];];

```

```

EliminarRaicesArtificiales[Resultado_] := Module[{NuevoResultado, i},
NuevoResultado = 0;
For[i = 1, i <= Length[Resultado], i++,
(*If[NumberQ[Numerator[Resultado[[i]]]] == False | Numerator[Resultado[[i]]] < 1 10^-3,
NuevoResultado += Resultado[[i]]];*)
If[NumberQ[Numerator[Resultado[[i]]]] == False, ,
NuevoResultado += Resultado[[i]]];
Return[NuevoResultado]];

```

```

AjusteNoLineal[N_, datos_, At_] :=
Module[{Modelo, ListaAmplitudes, ListaRestriccionesAmplitudes,

```

```

ListaRazonesEmision, Params, Resultado, Posicion, Inicio),
Modelo = A0 +  $\sum_{i=1}^N A_i e^{-\lambda_i t}$ ;
ListaAmplitudes =
Table[If[i == 1, Modelo[[i]], Modelo[[i, 2]]], {i, 1, Length[Modelo]};
ListaRazonesEmision = Table[Modelo[[i, 1, 2, 3]], {i, 2, Length[Modelo]};
Params = Join[ListaAmplitudes, ListaRazonesEmision];
(*ListaRestriccionesAmplitudes=
Table[ListaAmplitudes[[i]] < 0, {i, 1, Length[ListaAmplitudes]};
Resultado = NonlinearModelFit[datos, {Modelo, ListaRestriccionesAmplitudes},
Params, t, MaxIterations -> 10000];
Resultado = NonlinearModelFit[datos, Modelo, Params, t, MaxIterations -> 1000000];
(*New code begins here*)
Posicion = Flatten[Position[Params, a1]];
Inicio = Posicion[[1]];
For[i = Inicio, i <= Length[Params], i++,
Resultado[[1, 2, i, 2]] =  $\frac{\text{Resultado}[[1, 2, i, 2]]}{\Delta t}$ ];
(*New code ends here*)
Return[Resultado];
];
EliminarOffset[abs_, ords_] := {Module[{N, tm, NvasOrds},
N = If[Length[abs] == Length[ords], Length[abs], 0];
tm = ords[[N]];
NvasOrds = Table[ords[[i]] - tm, {i, 1, N}];
Return[NvasOrds];
];
EliminarRuido[TSOrdenadasRuidosas_,  $\omega$ ] :=
{Module[{TSOrdenadasFiltradas, NpuntosFiltrados, LOordenadasFiltradas},
(*coords = LowpassFilter[ptos,  $\omega$ ];

```

```

ordr=Table[coords[[i,2]],(i,1,Length[coords]);*
TSOrdenadasFiltradas = LowpassFilter[TSOrdenadasRuidosas, ω];
NpuntosFiltrados = Length[TSOrdenadasFiltradas[[2, 1, 1]]];
LOrdenadasFiltradas =
Table[TSOrdenadasFiltradas[[2, 1, 1, i]], (i, 1, NpuntosFiltrados)];
Return[LOrdenadasFiltradas];
);
ECM[f_, y_] := Module[{Nelem, Δ, Resultado},
If[Length[f] == Length[y], Nelem = Length[f], Nelem = 0];
Δ = Table[{y[[i]] - f[[i]]}^2, (i, 1, Nelem)];
Resultado =  $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{Nelem} \Delta[[i]]}{Nelem}}$ ;
Return[Resultado];
];
CompararErroresSenalFiltrada[ordsIdeales_, ordsRuidosas_, ω_] :=
Module[{ordsFiltradas, error},
ordsFiltradas = EliminarRuido[ordsRuidosas, ω];
error = SetPrecision[ECM[ordsFiltradas, ordsIdeales], 5];
Return[error];];
AnálisisCompletoMetodoProny[TSOrdsRuidosas_, ncomp_, Δt_, ω_] :=
Module[{LOrdsFiltradas, Nptos, Expresion},
LOrdsFiltradas = EliminarRuido[TSOrdsRuidosas, ω];
Nptos = Length[LOrdsFiltradas];
Expresion = MetodoProny[LOrdsFiltradas, Nptos, ncomp, Δt];
Return[Expresion];
];
\

```

## Caso exponencial

### Adquisición, tratamiento de datos, y simulación de ruido de los puntos experimentales.

```
(«Adquisición de datos»)
LCoordenadas =
  Import["C:\Users\Daniel\Google Drive\Projects\Master\SSES\Q6\Capacitance Transients
  Simulation\Mathcad\Ge\Datos
  experimentales\Fermi-Dirac\Minoritarios\GeDatosHp015-Fermi-Dirac.csv"];

(«Tratamiento»)
Npuntos = Length[LCoordenadas];
limInf = 0;
Δt = 1 × 10-3;
T = (Npuntos - 1) Δt;

LAbcisas = Table[LCoordenadas[[i, 1]], {i, 1, Length[LCoordenadas]}];
LOrdenadasIdeales = Table[LCoordenadas[[i, 2]], {i, 1, Length[LCoordenadas]}];
TSOrdenadasIdeales = TimeSeries[LOrdenadasIdeales, {0, T, Δt}];
TSCordenadasIdeales = TimeSeries[LOrdenadasIdeales, {LAbcisas}];

(«Simulación de ruido»)

(« Amplitud de la exponencial »)
ampRuido = 1.161 × 10-15;
(«Fuente de ruido blanco»)
P = TransformedProcess[noise[t],
  noise = WhiteNoiseProcess[UniformDistribution[{-ampRuido, ampRuido}], t];
data = RandomFunction[P, {0, Npuntos - 1}];

(« En formato de Mathematica, extraído de data »)
tiempo = data["Times"];
```

```

datos = data["Values"];
tiempo = Δt (tiempo);
sec = Range[Dimensions[tiempo][[1]]];
datRuido = Table[{tiempo[[i]], datos[[i]], (i, sec)}];

(*Combinación de los datos ideales con el ruido*)
LCoordenadasRuidosas = LCoordenadas;
LCoordenadasRuidosas[[All, 2]] = LCoordenadas[[All, 2]] + datRuido[[All, 2]];
LOrdenadasRuidosas = LCoordenadasRuidosas[[All, 2]];
TSCordenadasRuidosas = TimeSeries[LCoordenadasRuidosas];
TSOrdenadasRuidosas = TimeSeries[LOrdenadasRuidosas, {0, T, Δt}];

```

---

## Pre-procesamiento de los datos experimentales

$\omega = 100 \text{ Hz}$  ;

## Reducción de ruido en el transitorio con Offset, por medio de un filtro pasabajas con $f_c = 100$ Hz.

```

LOrdenadasFiltradasConOffset = EliminarRuido[TSOrdenadasRuidosas,  $\omega$ ];
TSOrdenadasFiltradasConOffset = TimeSeries[LOrdenadasFiltradasConOffset];

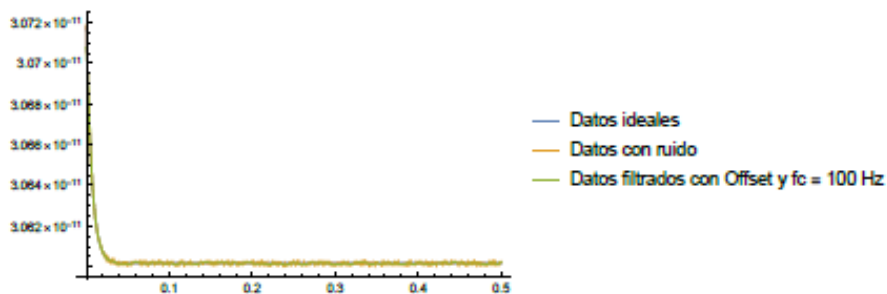
LCoordenadasFiltradasConOffset =
  Table[{LAbcisas[[i]], LOrdenadasFiltradasConOffset[[i]]},
    {i, 1, Length[LOrdenadasFiltradasConOffset]};

TSCordenadasFiltradasConOffset = TimeSeries[LCoordenadasFiltradasConOffset];

(* Generación de archivo csv: Problema directo *)
LComparacionProblemaDirectoOffset =
  Table[{
     $\frac{LAbcisas[[i]]}{10^{-3}}$ ,  $\frac{LOrdenadasIdeales[[i]]}{10^{-12}}$ ,  $\frac{LOrdenadasRuidosas[[i]]}{10^{-12}}$ ,
     $\frac{LOrdenadasFiltradasConOffset[[i]]}{10^{-12}}$ }, {i, 1, Length[LAbcisas]};

Export["C:\Users\Daniel\Google Drive\Projects\Master\SSES\Q6\Resultados
  Tesis\Ge\CSV\Fermi-Dirac\Minoritarios\Hp015\Ge-Hp015-ProblemaDirectoOffset-Fermi-
  Dirac.csv", LComparacionProblemaDirectoOffset];
(*Representación gráfica de datos ideales, ruidosos y filtrados*)
ListLinePlot[
  {TSCordenadasIdeales, TSCordenadasRuidosas, TSCordenadasFiltradasConOffset},
  PlotRange -> Full, PlotRangeClipping -> False, PlotLegends ->
  {"Datos ideales", "Datos con ruido", "Datos filtrados con Offset y  $f_c = 100$  Hz"}]

```



## Eliminación del Offset (datos con ruido) y Reducción del ruido en la señal

mediante filtro pasa-bajas con  $f_c = 100$  Hz.

```

(* Eliminación de Offset en ordenadas ideales *)
LOrdenadasIdealesSinOffset = EliminarOffset[LAbcisas, LOrdenadasIdeales];
LCoordenadasIdealesSinOffset = Table[{LAbcisas[[i]], LOrdenadasIdealesSinOffset[[i]]},
  {i, 1, Length[LOrdenadasIdealesSinOffset]}];

TOrdenadasIdealesSinOffset = TimeSeries[LOrdenadasIdealesSinOffset, {0, T, Δt}];
TSCoordenadasIdealesSinOffset = TimeSeries[LCoordenadasIdealesSinOffset];

ListLinePlot[LCoordenadasIdealesSinOffset, PlotRange → All]

(* Eliminación de Offset en ordenadas con ruido *)
LOrdenadasRuidosasSinOffset = EliminarOffset[LAbcisas, LOrdenadasRuidosas];
LCoordenadasRuidosasSinOffset = Table[{LAbcisas[[i]], LOrdenadasRuidosasSinOffset[[i]]},
  {i, 1, Length[LOrdenadasRuidosasSinOffset]}];

TOrdenadasRuidosasSinOffset = TimeSeries[LOrdenadasRuidosasSinOffset, {0, T, Δt}];
TSCoordenadasRuidosasSinOffset = TimeSeries[LCoordenadasRuidosasSinOffset];

(* Reducción de ruido en ordenadas sin Offset *)
LOrdenadasFiltradasSinOffset = EliminarRuido[TOrdenadasRuidosasSinOffset, ω];
LCoordenadasFiltradasSinOffset = Table[{LAbcisas[[i]], LOrdenadasFiltradasSinOffset[[i]]},
  {i, 1, Length[LOrdenadasFiltradasSinOffset]}];

TOrdenadasFiltradasSinOffset = TimeSeries[LOrdenadasFiltradasSinOffset, {0, T, Δt}];
TSCoordenadasFiltradasSinOffset = TimeSeries[LCoordenadasFiltradasSinOffset];

(* Generación de archivo csv: Problema directo *)
LComparacionProblemaDirectoSinOffset = Table[
  {
 $\frac{LAbcisas[[i]]}{10^{-3}}$ ,
 $\frac{LOrdenadasIdealesSinOffset[[i]]}{10^{-12}}$ ,
 $\frac{LOrdenadasRuidosasSinOffset[[i]]}{10^{-12}}$ ,
 $\frac{LOrdenadasFiltradasSinOffset[[i]]}{10^{-12}}$ 
}, {i, 1, Length[LAbcisas]}];

```

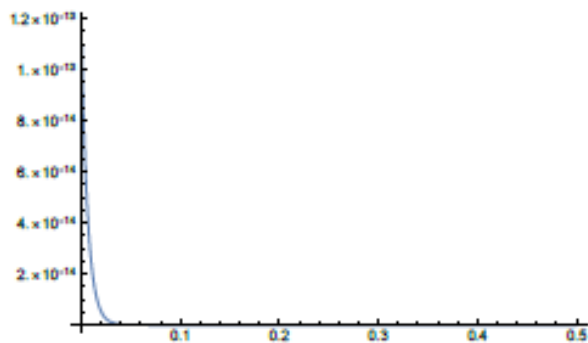


```

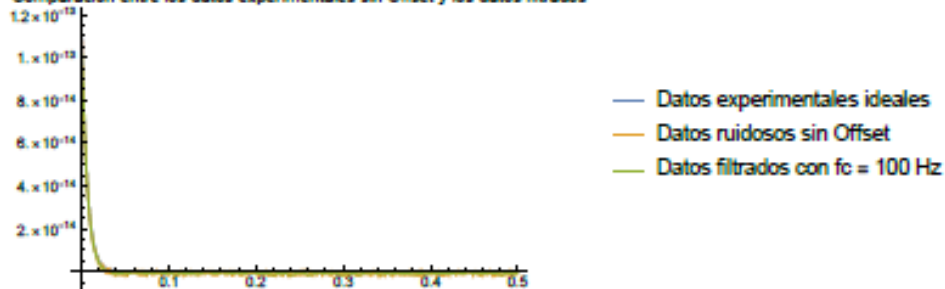
Export["C:\Users\Daniel\Google Drive\Projects\Master\SSES\Q6\Resultados
constante
  Tesis\Ge\CSV\Fermi-Dirac\Minoritarios\Hp015\Ge-Hp015-ProblemaDirectoSinOffset-
  Fermi-Dirac.csv", LComparacionProblemaDirectoSinOffset];

(* Comparación gráfica de los transitorios sin Offset, ideales,
desplazamiento
con ruido y luego del filtrado *)
ListLinePlot[{TSCoordenadasIdealesSinOffset, TSCoordenadasRuidosasSinOffset,
gráfico de línea de una lista
  TSCoordenadasFiltradasSinOffset}, PlotRange -> All, PlotLabel ->
rango de rep... todo etiqueta de representación
  "Comparación entre los datos experimentales sin Offset y los datos filtrados",
desplazamiento
  PlotLegends -> {"Datos experimentales ideales",
leyendas de representación
  "Datos ruidosos sin Offset", "Datos filtrados con fc = 100 Hz"}]
desplazamiento

```



Comparación entre los datos experimentales sin Offset y los datos filtrados



## Análisis de los datos experimentales filtrados y con Offset: Método de Prony y NonlinearModelFit.

### Ajuste con el método de Prony

```
LParamsPronyFiltradosConOffset =  
  MetodoProny[LOrdenadasFiltradasConOffset, Npuntos, 1, Δt];  
  
LOrdenadasFiltradasConOffsetProny = Table[LParamsPronyFiltradosConOffset, {t, 0, T, Δt}];  
                                     |  
                                     |tabla  
  
LCoordenadasFiltradasConOffsetProny =  
  Table[{LAbcisas[{i}], LOrdenadasFiltradasConOffsetProny[{i}]},  
        |  
        |tabla  
        {i, 1, Length[LOrdenadasFiltradasConOffsetProny]}];  
                                     |  
                                     |longitud
```

### Ajuste con NonlinearModelFit

```
LParamsNLMFiltradosConOffset =  
  Normal[AjusteNoLineal[1, EliminarRuido[TSOrdenadasRuidosas, ω], Δt];  
        |  
        |normal  
  
LOrdenadasFiltradasConOffsetNLM = Table[LParamsNLMFiltradosConOffset, {t, 0, T, Δt}];  
                                     |  
                                     |tabla  
  
LCoordenadasFiltradasConOffsetNLM =  
  Table[{LAbcisas[{i}], LOrdenadasFiltradasConOffsetNLM[{i}]},  
        |  
        |tabla  
        {i, 1, Length[LOrdenadasFiltradasConOffsetNLM]}];  
                                     |  
                                     |longitud
```

## Análisis de los datos experimentales filtrados y sin Offset: Laplace-Padé

### Ajuste con Laplace-Padé

```

LParamsLaplacePadeFiltradosSinOffset =
  Table[InverseLaplaceTransform[EliminarRaicesArtificiales[LaplacePade[20, 12, LAbcisas,
    EliminarRuido[TSOrdenadasRuidosasSinOffset, ω], 0, T, 1, 1 + 1]], s, t], {1, 0, 2}];
LOrdenadasFiltradasSinOffsetLaplacePade = Table[
  LParamsLaplacePadeFiltradosSinOffset[[3]], {t, 0, T, Δt});
LCoordenadasFiltradasSinOffsetLaplacePade =
  Table[{LAbcisas[[i]], LOrdenadasFiltradasSinOffsetLaplacePade[[i]]},
    {i, 1, Length[LOrdenadasFiltradasSinOffsetLaplacePade]};
  
```

## Resumen de parámetros de datos filtrados, con y sin Offset

```

LFrecYMetodosFiltro = {{ω, LParamsPronyFiltradosConOffset,
  LParamsNLMFiltradosConOffset, LParamsLaplacePadeFiltradosSinOffset[[3]}}];
TableForm[LFrecYMetodosFiltro, TableHeadings ->
  {None, {"Frecuencia de corte", "Prony (con Offset)",
    "NonlinearModelFit (con Offset)", "Laplace-Padé (sin Offset)"}},
  {ajusta a modelo no lineal, desplazamiento, desplazamiento}];
  
```

| Frecuencia de corte | Prony (con Offset)   | NonlinearModelFit (con Offset)                     |
|---------------------|--|--|
| 100 Hz              | $3.06009 \times 10^{-11} + 6.78486 \times 10^{-14} e^{-57.8169 t}$ | $3.06016 \times 10^{-11} + 1.2998 \times 10^{-13}$ |

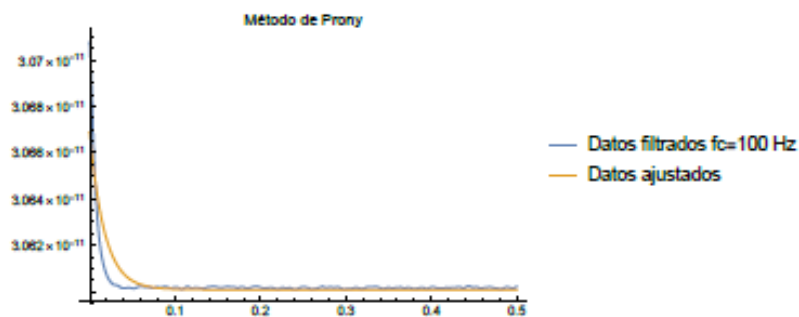
## Comparación gráfica de los parámetros obtenidos por los distintos métodos

### Filtrados y con Offset

#### Prony

```
(* Problema inverso: Generación de archivo csv para el método de Prony *)
LComparacionProblemaInversoProny =
  Table[{
     $\frac{LAbcisas[[i]]}{10^{-3}}$ ,  $\frac{LOrdenadasFiltradasConOffset[[i]]}{10^{-12}}$ ,
     $\frac{LOrdenadasFiltradasConOffsetProny[[i]]}{10^{-12}}$ 
  }, {i, 1, Length[LABcisas]}];

Export["C:\Users\Daniel\Google Drive\Projects\Master\SSES\Q6\Resultados
  Tesis\Ge\CSV\Fermi-Dirac\Minoritarios\Hp015\Ge-Hp015-ProblemaInversoProny-Fermi-
  Dirac.csv", LComparacionProblemaInversoProny];
(* Comparación gráfica *)
ListLinePlot[
  {LCoordenadasFiltradasConOffset, LCoordenadasFiltradasConOffsetProny}, PlotRange -> All,
  PlotLabel -> "Método de Prony",
  PlotLegends -> {"Datos filtrados fc=100 Hz", "Datos ajustados"}]
```



## NonlinearModelFit

(\* Problema inverso: Generación de archivo csv para NonlinearModelFit \*)

[ajusta a modelo no lineal]



LComparacionProblemaInversoNLM =

```
Table[{  
  [tabla]  $\frac{LAbcisas[[i]]}{10^{-3}}$ ,  $\frac{LOrdenadasFiltradasConOffset[[i]]}{10^{-12}}$ ,  
  
   $\frac{LOrdenadasFiltradasConOffsetNLM[[i]]}{10^{-12}}$ }, {i, 1, Length[LAbcisas]};  
[longitud]
```

Export["C:\Users\Daniel\Google Drive\Projects\Master\SSES\Q6\Resultados

[constante]

Tesis\Ge\CSV\Fermi-Dirac\Minoritarios\Hp015\Ge-Hp015-ProblemaInversoNLM-Fermi-Dirac.csv", LComparacionProblemaInversoNLM];

(\* Comparación gráfica \*)

ListLinePlot[

[gráfico de línea de una lista]

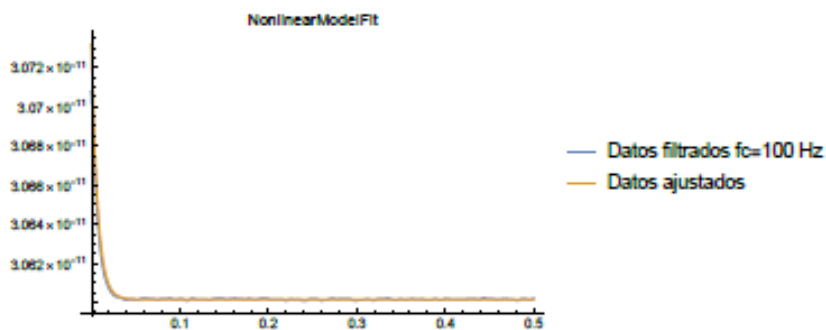
```
{LCoordenadasFiltradasConOffset, LCoordenadasFiltradasConOffsetNLM}, PlotRange -> All,  
[rango de rep... [todo]
```

PlotLabel -> "NonlinearModelFit",

[etiqueta de rep... [ajusta a modelo no lineal]

PlotLegends -> {"Datos filtrados fc=100 Hz", "Datos ajustados"}]

[leyendas de representación]

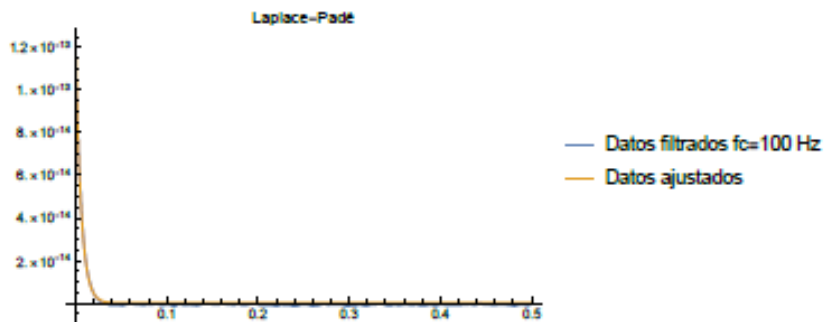


## Filtrados y sin Offset: Laplace-Padé

```
(* Problema inverso: Generación de archivo csv para el método de Laplace-Padé *)
LComparacionProblemaInversoLaplacePade =
Table[{
   $\frac{LAbcisas[[i]]}{10^{-3}}$ ,  $\frac{LOrdenadasFiltradasSinOffset[[i]]}{10^{-12}}$ ,
   $\frac{LOrdenadasFiltradasSinOffsetLaplacePade[[i]]}{10^{-12}}$ }, {i, 1, Length[LABcisas]}];

Export["C:\Users\Daniel\Google Drive\Projects\Master\SSES\Q6\Resultados
Tesis\Ge\CSV\Fermi-Dirac\Minoritarios\Hp015\Ge-Hp015-ProblemaInversoLaplacePade-
Fermi-Dirac.csv", LComparacionProblemaInversoLaplacePade];

(* Comparación gráfica *)
ListLinePlot[{LCoordenadasFiltradasSinOffset,
LCoordenadasFiltradasSinOffsetLaplacePade}, PlotRange -> All,
PlotLabel -> "Laplace-Padé", PlotLegends ->
{"Datos filtrados fc=100 Hz", "Datos ajustados"}]
```



Apéndice C: Diagrama de flujo general del sistema propuesto de caracterización de niveles profundos de energía en semiconductores

