

**VNiVERSiDAD
D SALAMANCA
FACVLTAD D CiENCiAS**



DEPARTAMENTO D FíSiCA APLiCADA

**Nanodispositivos de GaN para generación de
señales de THz. Simulación Monte Carlo y
análisis experimental**

TESiS DOCTORAL

Ana Íñiguez de la Torre Mulas

Salamanca, 2012

D. Tomás González Sánchez, Catedrático de Electrónica del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Salamanca,

CERTIFICA:

Que el trabajo de investigación que se recoge en la presente Memoria, titulada *Nanodispositivos de GaN para generación de señales de THz. Simulación Monte Carlo y análisis experimental*, y presentada por **Ana Íñiguez de la Torre Mulas** para optar al grado de Doctor, se ha realizado bajo su dirección en el Área de Electrónica del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Salamanca.

Salamanca, a 12 de noviembre de 2012

Tomás González Sánchez
Catedrático de Electrónica
Departamento de Física Aplicada
Universidad de Salamanca

A los míos

“Non igitur dubium est quin rerum omnium, etiam uocum,
reddenda sit ratio; quam si ignorauerimus rogati, fateamur potius
nos nescire, quam nullam esse constanter affirmare”
(El Brocense, *Minerva, seu de causis linguae latinae*, 1587)

“Nothing is so fatal to the progress of the human mind as
to suppose that our views of science are ultimate;
that there are no mysteries in nature;
that our triumphs are complete,
and that there are no new worlds to conquer”
(Sir Humphry Davy, public lecture, 1810)

“No hay duda, pues, que de todas las cosas, incluso de las palabras, hay que dar una explicación racional; si, tras preguntarnos, la desconocemos, es preferible que confesemos que nosotros no la sabemos, antes que afirmar continuamente que no existe ninguna”
(El Brocense, *Minerva, o de las causas de la lengua latina*, 1587)

“Nada es tan negativo para el progreso de la mente humana como suponer que nuestras ideas científicas son definitivas; que no hay misterios en la naturaleza; que nuestros triunfos son completos, y que no existen nuevos mundos por conquistar”
(Sir Humphry Davy, conferencia divulgativa, 1810)

AGRADECIMIENTOS

Si bien hace tiempo que tengo claro los nombres a citar en este momento, no ha sido hasta una semana antes de la impresión del trabajo, viendo que sí, que era cierto, que realmente se acercaba el último *deadline*, cuando por fin me he dispuesto a tratar de plasmar en estas líneas, de extensión limitada, un sentimiento de gratitud y reconocimiento infinito hacia ciertas personas claves en el desarrollo de esta Tesis. Sin duda alguna, mi intención no se cumplirá como sería de justicia hacerlo, pero confío en que esas personas sepan leer más allá de lo que está escrito y reciban mi más sincero agradecimiento, que tanto se merecen.

Haber trabajado durante estos años bajo la dirección de Tomás ha supuesto sin lugar a dudas un verdadero privilegio. Su infatigable dedicación, su capacidad de análisis y su rigor científico, han sido un modelo a seguir. *A mayores*, su incondicional disponibilidad y su trato próximo y cordial han facilitado la labor desempeñada.

Mención especial también merece Daniel, cuyos consejos y apoyo generoso, sumados a su perenne buen humor, han significado un impulso capital. Por fin puedo contestar orgullosa a la pregunta semanal de “¿cuántas páginas?”. Gracias por esa perseverancia.

Del mismo modo he de agradecer el clima de colaboración y la amistad del resto de compañeros tanto del Área de Electrónica como de las Áreas de Electromagnetismo, de Física de la Materia Condensada y de Óptica. Son muchas las horas que compartimos juntos, muchos congresos y proyectos, muchos cafés y *parlaos* en la balaustrada, muchas risas, cenas y pachangas. Gracias, *obligada*, *dziękuję*, *merci* y *grazie*.

Un autre grand merci pour mon voyage à Lille. A Christophe, Guillaume et Paul, de m'avoir intégrée dans leur équipe pendant mon séjour à l'IEMN (Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie) et pour leur coopération scientifique qui, dans la mesure du possible, a contribué à ma formation dans le domaine expérimental, principalement en ce qui concerne les mesures de caractérisation DC. Je remercie également les autres collègues du laboratoire et mon équipe de basket AS Vieux Lille, qui m'ont accueillie comme des leurs dès le début, malgré mes difficultés avec la langue française, et qui ont fait que ces trois mois-là, que je n'oublierai jamais, sont passés à toute allure. Un grand merci à Philippe pour sa compréhension, son soutien et ses encouragements cette dernière année.

Hay muchas otras personas, aparentemente actores secundarios de esta película, a las que debo expresar mi gratitud. A Begoña y Azucena, Jere y Alberto, y Edu y Juan: gracias por animar mi día a día, incluso los fines de semana. A las *viejas glorias salmantinas* por compartir la pasión por el baloncesto. A Juan por su eficiencia en el papeleo y su paciencia con mis despistes. A Borja y a sus padres por permitirme disfrutar recordando las matemáticas de la E.S.O. A Chusas por sus deliciosas tartas y a Ainho por la exquisita cecina de León.

A mis *Intrépidas* y al resto de *Molineros* por estar siempre a mi lado, por tantos buenos momentos y, sobre todo, por haberme apoyado cuando más lo necesitaba. Sinceramente me considero una afortunada al estar rodeada de amigos así. No lo *descambio* por nada del mundo.

Finalmente, a mi familia: perdón y gracias. Perdón porque sé que ha habido momentos en los que el estrés o el desánimo hacían preferible no tratarme mucho. Y sin embargo, han estado conmigo en todo momento, para escucharme, soportarme, secarme las lágrimas y sacarme una sonrisa, llevarme un *tupper* con comida a las dos de la mañana al despacho, etc. Gracias en especial a Ignacio, mi hermano, que es al mismo tiempo un amigo único y un compañero al que admiro, por su ayuda en todos los aspectos en estas *24Doce*. Y por último, aunque ya no pueda leerlo, gracias a mi abuela, por ser la persona que más confianza tenía en mí, y que, pese a no terminar de entender muy bien a qué diablos me dedicaba, estaba completamente segura de que conseguiría lo que me propusiera.

ÍNDICE

INTRODUCCIÓN	1
<hr/>	
CAPÍTULO I	
SIMULACIÓN MONTE CARLO DE GaN	
PARA LA GENERACIÓN DE THz	11
<hr/>	
I.1. MÉTODO DE MONTE CARLO	12
I.1.1. Técnica Monte Carlo de la función transformada inversa	13
I.1.2. Técnica Monte Carlo de aceptación-rechazo	14
I.2. SIMULADOR MONTE CARLO DE PARTÍCULA ÚNICA	16
I.2.1. Esquema de la simulación	18
I.2.2. Mecanismos de <i>scattering</i>	19
I.3. NITRURO DE GALIO	22
I.3.1. Propiedades básicas	22
I.3.2. Modelización del material	24
I.3.2.a. Diagrama de bandas y parámetros	25
I.3.2.b. Emisión y absorción de fonones ópticos polares	27
I.3.3. Resultados	28
I.3.3.a. Temperatura ambiente	28
I.3.3.b. Influencia de la temperatura de operación	29
I.4. SIMULADOR DE DISPOSITIVOS	32
I.4.1. Esquema de la simulación	33
I.4.2. Resolución de la ecuación de Poisson y condiciones de contorno	35
I.4.2.a. Diferencias finitas	36

I.4.2.b. Condiciones de contorno	38
I.4.3. Carga superficial	39
I.4.3.a. Modelo de carga constante	40
I.4.3.b. Modelo de carga auto-consistente	42
I.5. OBTENCIÓN Y TRATAMIENTO DE RESULTADOS	44
I.5.1. Cálculo de magnitudes instantáneas y medias	44
I.5.1.a. Magnitudes instantáneas y medias	44
I.5.1.b. Corriente instantánea	45
I.5.2. Análisis espectral del ruido en corriente	47
I.5.3. Eficiencia de conversión	50

CAPÍTULO II

OSCILACIONES DE CORRIENTE INDUCIDAS POR EMISIÓN DE FONONES ÓPTICOS EN GaN **53**

II.1. FÍSICA DE PLASMA ELECTRÓNICO EN SÓLIDOS	54
II.1.1. Frecuencia de plasma	54
II.1.2. Longitud de Debye	57
II.1.3. Oscilaciones de plasma	59
II.2. BASES TEÓRICAS DE LA OPTTR	61
II.2.1. Explicación del fenómeno	61
II.2.2. Condiciones de oscilación	68
II.3. OPTTR EN GaN VOLÚMICO	74
II.4. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA DE RESULTADOS DE SIMULACIÓN	76
II.5. DIODOS n^+nn^+ DE GaN. RESULTADOS	79
II.5.1. Estructura simulada	79
II.5.2. Resultados en la estructura de referencia	80
II.5.2.a. Corriente	80
II.5.2.b. Magnitudes microscópicas: valores medios	81
II.5.2.c. Magnitudes microscópicas: valores instantáneos	84
II.5.2.d. Análisis espectral de las oscilaciones de corriente	88
II.5.3. Modificaciones sobre la estructura inicial	91

Índice	iii
II.5.3.a. Efecto de la temperatura	91
II.5.3.b. Longitud de la región activa del diodo	97
II.5.3.c. Influencia del dopaje de la zona n	100

CAPÍTULO III

OSCILACIONES GUNN EN SSDs DE GaN 109

III.1. EFECTO GUNN	111
III.1.1. Búsqueda de NDR y descubrimiento del efecto Gunn	111
III.1.2. Estructura de bandas y mecanismo de transferencia de electrones	117
III.1.3. Dinámica de los dominios: evolución espacio-temporal	120
III.1.4. Modos de operación	124
III.1.4.a. Modo ideal de campo uniforme	124
III.1.4.b. Modo de capa de acumulación	125
III.1.4.c. Modo de tiempo de tránsito de capa dipolar	126
III.1.4.d. Modo de capa dipolar atenuada	127
III.1.4.e. Modo de acumulación de carga espacial limitada	128
III.2. DIODOS AUTOCONMUTANTES	129
III.2.1. Principio de funcionamiento	129
III.2.2. Revisión bibliográfica	131
III.2.3. Fabricación	136
III.2.4. Modelo Monte Carlo y geometría de los SSDs	138
III.3. RESULTADOS: SIMULACIONES MONTE CARLO Y MEDIDAS EXPERIMENTALES	141
III.3.1. Simulaciones preliminares: influencia de parámetros básicos	142
III.3.1.a. Influencia de los parámetros del modelo (σ y N_{Db})	142
III.3.1.b. Influencia de la temperatura y de parámetros geométricos	144
III.3.1.c. Estudio de la eficiencia	146
III.3.1.d. Evolución temporal de magnitudes microscópicas	147
III.3.2. Comparación con resultados experimentales del <i>Run 1</i>	150
III.3.2.a. Primeras medidas experimentales	150
III.3.2.b. Comparaciones con el modelo de carga superficial constante	154
III.3.2.c. Comparaciones con el modelo de carga auto-consistente	155
III.3.2.d. Estudio de varias magnitudes	157

III.3.3. Nuevas estrategias de diseño y fabricación del <i>Run 2</i>	160
III.3.3.a. Indicaciones con el modelo de carga constante	160
III.3.3.b. Indicaciones con el modelo de carga auto-consistente	162
III.3.3.c. Resultados experimentales	168
III.3.4. Simulaciones y medidas experimentales del <i>Run 3</i>	175
III.3.4.a. Diseño y fabricación de los SSDs	175
III.3.4.b. Simulaciones y medidas experimentales	179
CAPÍTULO IV	
AUMENTO DEL RUIDO A BAJA FRECUENCIA COMO INDICADOR DE LAS OSCILACIONES	185
<hr/>	
IV.1. MOTIVACIÓN	186
IV.2. RUIDO A BAJA FRECUENCIA EN LOS SSDs	187
IV.3. RUIDO A BAJA FRECUENCIA EN LA OPTTR	190
CONCLUSIONES	193
<hr/>	
APÉNDICE	
DETECCIÓN EN SSDs DE GaN	205
<hr/>	
1. CONCEPTOS BÁSICOS	206
1.a. Detección de señales alternas	206
1.b. Responsividad	207
1.c. Potencia equivalente de ruido	208
1.d. Cálculos Monte Carlo	208
2. RESULTADOS EXPERIMENTALES Y MONTE CARLO PARA DETECCIÓN EN SSDs DE GaN	210
BIBLIOGRAFÍA	215
<hr/>	
<hr/>	

INTRODUCCIÓN

Desde la comprobación experimental de la radiación y propagación electromagnéticas en 1888 por el físico alemán Heinrich Rudolf Hertz,¹ las distintas bandas de frecuencia del espectro electromagnético son cada vez más utilizadas para muy diferentes propósitos.

A. El *gap* de los terahercios

Sin embargo, hay un intervalo de frecuencias alrededor de los terahercios (THz $\equiv 10^{12}$ Hz) en el que queda aún mucho trabajo por hacer para conseguir fuentes, amplificadores y detectores de señales. De hecho, se suele denominar *terahertz gap* a las frecuencias aproximadamente entre 100 GHz y 10 THz (lo que es equivalente a longitudes de onda entre 3 mm y 30 μm), y que, como se observa en la Figura 1, se encuentra entre las regiones objeto de estudio de la electrónica y la fotónica.

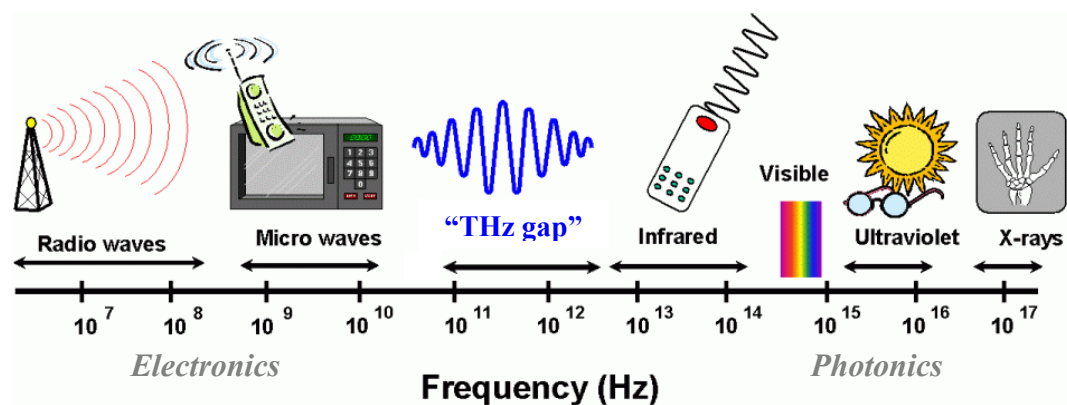


Figura 1. Localización del denominado *terahertz gap* dentro del espectro electromagnético. Imagen extraída del [link](http://www.sp.phy.cam.ac.uk/SPWeb/research/thzcamera/WhatIsTHzImaging.htm) <http://www.sp.phy.cam.ac.uk/SPWeb/research/thzcamera/WhatIsTHzImaging.htm>.

Nótese que esa banda del espectro constituye una fracción sustancial de la luminosidad remanente del *Big Bang* debido a que el corrimiento hacia el rojo cae en

el margen de los THz, donde también encontramos la radiación asociada a la temperatura de los procesos biológicos.²

B. Aplicaciones

Hoy en día la banda de frecuencias de THz es considerada de gran interés por sus potenciales aplicaciones en múltiples campos como son física, astronomía, química, biología, diagnosis médica, espectroscopia, tomografía, control medioambiental, identificación química y biológica, etc.²⁻¹³

La radiación de THz prácticamente no interacciona con muchos compuestos y moléculas apolares (papel, tejidos, madera, etileno, CO₂, etc.), mientras que sí lo hace con moléculas polares (agua, amoniaco, etc.) y con los portadores libres de metales o semiconductores dopados. Tal es así que puede penetrar en los organismos, pero, a diferencia de los rayos-X, no es ionizante, lo cual supone evidentemente un aspecto clave a la hora de considerar su utilización con seres humanos. Es de señalar que la penetración y absorción de los llamados rayos-T dependen del material y de la frecuencia de operación. Por ejemplo, a unos pocos THz la profundidad de penetración a través de soluciones acuosas es muy limitada, mientras que las sustancias plásticas son prácticamente transparentes. Por ello, si se dispusiera de fuentes y detectores sintonizables de esa radiación, casi cualquier objeto podría ser escaneado muy fácilmente. Ello está dando lugar a nuevas iniciativas en medicina para la batalla contra el cáncer y otras enfermedades, que podrían ser detectadas en etapas más tempranas. Asimismo la lucha contra el terrorismo encontraría un excepcional aliado en esta herramienta de radiofrecuencia. Con el objetivo de ilustrar algunas de estas aplicaciones, en la Figura 2 y la Figura 3 mostramos varias imágenes pertenecientes a *TeraView* y *ThruVision*, dos empresas punteras en aplicaciones comerciales en la banda de THz.

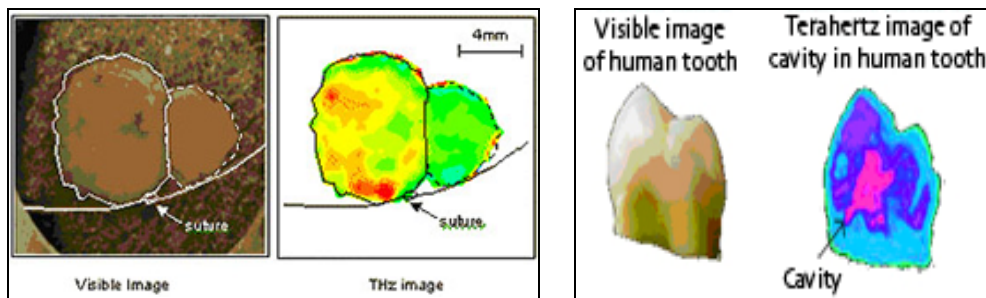


Figura 2. Tecnología de THz para la detección de cáncer de piel y en salud dental.



Figura 3. Tecnología de THz para la detección de armas y explosivos.

C. Últimos avances en detección y emisión

El *terahertz gap* es difícil de llenar tanto desde el punto de vista de la detección como de la emisión. Vamos a citar algunas de las tecnologías más relevantes que se postulan como candidatos prometedores a conquistar ese intervalo de frecuencias. En las Refs. 14 y 15 se recoge bastante información sobre estas y otras técnicas.

En cuanto a la detección de THz podemos destacar tres alternativas. La primera serían los detectores térmicos, como los bolométricos, la celda Golay o los piroeléctricos. La siguiente son los dispositivos electrónicos como los detectores Schottky (operando fundamentalmente como receptores heterodinos) o las oscilaciones de plasma en un gas de electrones bidimensional de un transistor de efecto de campo. Y por último están los detectores basados en fenómenos cuánticos, como los fotodetectores, y los métodos de muestreo electro-óptico de señales. En todos ellos las figuras de mérito que permiten realizar una clasificación de sus prestaciones son la responsividad, la potencia equivalente de ruido y el tiempo de respuesta.

Para la generación de señales de THz existen principalmente tres posibilidades. La primera se trata de la vía óptica, donde destacan tanto los láseres de cascada cuántica (QCL)¹⁶ como el uso de diversos materiales ópticos no-lineales para tratar de disminuir la frecuencia de las fuentes habituales en este campo. Asimismo existe la opción, *a priori* muy adecuada en términos de potencia y frecuencia, del láser de germanio, pero presenta la desventaja de requerir enfriamiento y opera únicamente en modo pulsado. La segunda alternativa es la vía electrónica,¹⁷ siendo en este caso los dispositivos más prometedores los multiplicadores basados en diodos de barrera Schottky (SBD), usando como fuentes de señal de menor frecuencia diodos resonantes de efecto túnel (RTD), diodos Gunn e IMPATT (*IMPact ionization*

Avalanche Transit-Time) y osciladores basados en transistores tanto tipo HBT (*Heterojunction Bipolar Transistor*) como HEMT (*High Electron Mobility Transistor*). La última vía viene de la mano de la optoelectrónica, en donde los dispositivos más utilizados, pese a resultar relativamente voluminosos, son los fotomezcladores y los sistemas electro-ópticos, empleados especialmente en espectroscopia y basados en la excitación de semiconductores con láseres de fs. En la Figura 4 se recoge la potencia emitida en función de la frecuencia para los principales candidatos a emisores en el rango de THz.

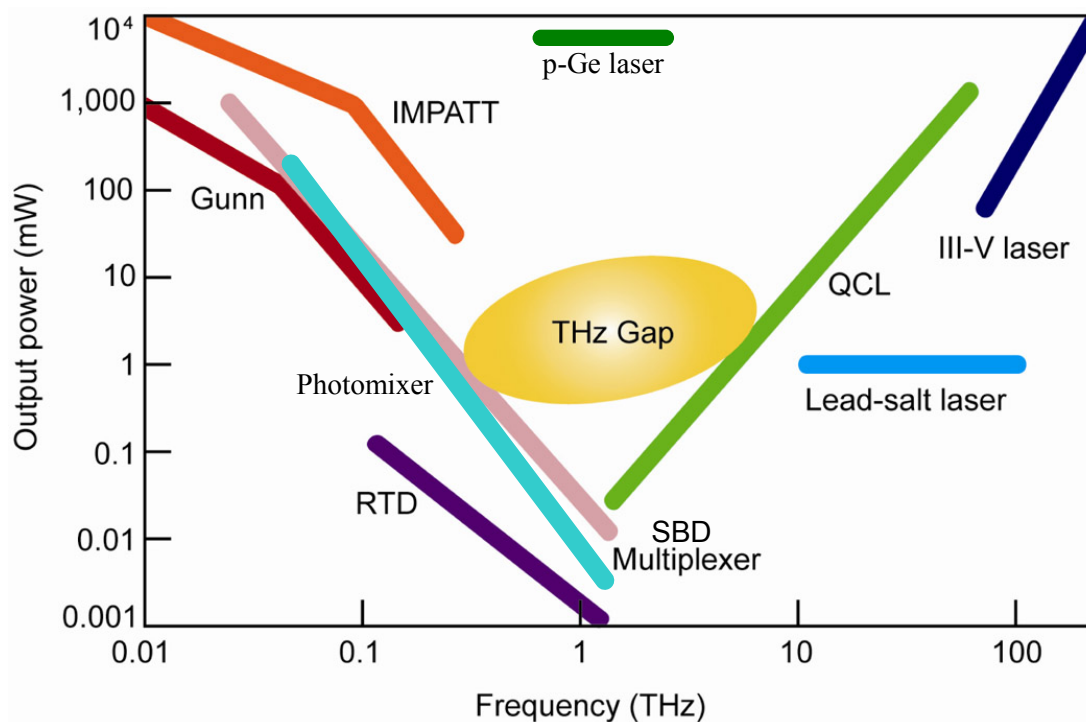


Figura 4. Estado del arte de las fuentes de emisión para frecuencias en torno a los THz.

A pesar de las esperanzas depositadas en el desarrollo de tecnología a frecuencias de THz, en la actualidad aún sólo contamos con fuentes elementales de muy escasa potencia. El progreso tan limitado que ha experimentado la investigación en este campo es consecuencia de dos factores. En primer lugar, y con especial referencia a la vía electrónica, el gran reto de ingeniería que supone la fabricación de dispositivos de dimensiones muy reducidas, en muchos casos nanométricas, del orden de v/f , siendo v la velocidad de los portadores en el material y f la frecuencia de operación. Y en segundo lugar, la restringida demanda de estos dispositivos hasta hace diez años, pues sus aplicaciones estaban limitadas de forma prácticamente exclusiva a campos tan especializados como la espectroscopia

molecular y la radioastronomía. Sin embargo, con la entrada en el nuevo milenio emergen, como citamos anteriormente, importantes aplicaciones de la tecnología de THz en los campos de la defensa, las telecomunicaciones, la medicina, la identificación de compuestos químicos y sustancias biológicas, etc.

D. La solución desde la vía de la electrónica de estado sólido

Los procesos de transporte electrónico determinan los principios básicos de operación de la mayor parte de los dispositivos semiconductores. Más aún, establecen las propiedades relevantes de casi todos los dispositivos de interés en la electrónica de muy alta velocidad. Por ello, las técnicas avanzadas para el estudio de los procesos físicos de la dinámica de portadores de alta velocidad y alta frecuencia juegan un papel muy importante. Por ejemplo, los progresos en dispositivos de estado sólido que utilizan el control de transporte electrónico y modulación de velocidad han tenido un impacto fundamental en la tecnología de microondas.¹⁸ La invención del transistor por Shockley, y la aparición del transistor bipolar (BJT) y los transistores de efecto de campo (FET y MOSFET), revolucionaron definitivamente la electrónica de alta frecuencia. Por supuesto, ello fue el resultado de las ventajas en funcionalidad, fiabilidad, miniaturización y bajo coste comparados con los antiguos dispositivos basados en tubos de vacío para aplicaciones de baja potencia. Sin embargo, los dispositivos semiconductores convencionales presentan limitaciones de operación en ondas submilimétricas. Por lo tanto, se han de diseñar nuevos dispositivos semiconductores que constituyan la base para la generación, amplificación y detección de señales en frecuencias milimétricas y submilimétricas. Pero todavía hoy la banda de frecuencias entre microondas e infrarrojo sigue presentándose como un gran desafío tecnológico.

La nanotecnología está impulsando actualmente el desarrollo de los dispositivos de THz. La progresión hacia la nanoelectrónica y electrónica molecular parece sugerir dispositivos completamente nuevos (como por ejemplo la electrónica de spin)¹⁹ cuyo estudio requiere un riguroso tratamiento cuántico. Por otra parte, las dimensiones nanométricas de los dispositivos implican la aparición de nuevos problemas a abordar: transporte balístico, procesos de no equilibrio, *scattering* disipativo, etc., que requieren un profundo nivel de conocimiento de física del estado sólido.²⁰

Como se dijo anteriormente, en el campo de la electrónica se encuentran varias posibilidades buscando conseguir emisores y detectores eficientes en el rango de los THz: diodos Gunn, multiplicadores de frecuencia, detectores Schottky, dispositivos basados en oscilaciones de plasma, etc.

E. Objetivos y esquema de esta Tesis

Es en este punto donde este trabajo pretende hacer una aportación mediante el análisis de dos candidatos dentro de la vía de los dispositivos electrónicos de estado sólido (ver Figura 5), orientados principalmente a la generación de señales de tan alta frecuencia, que explotan (i) las oscilaciones coherentes de plasma en diodos verticales micrométricos inducidas por la emisión de fonones ópticos (OPTTR, *Optical Phonon Transit Time Resonance*)²¹⁻²³ y (ii) las oscilaciones Gunn²⁴⁻²⁶ en diodos autoconmutantes (SSDs, *Self-Switching Diodes*), que son estructuras planares nanométricas.²⁷

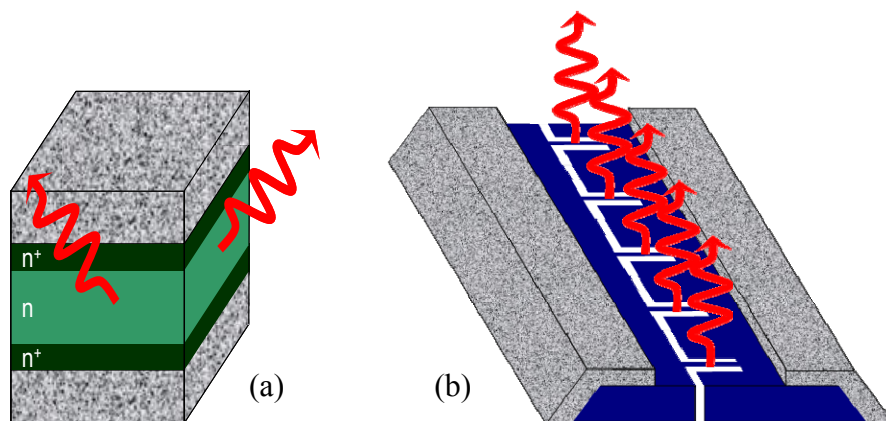


Figura 5. Mecanismos y dispositivos para la generación de señales de THz que se han estudiado en este trabajo: (a) OPTTR en diodos n^+nn^+ y (b) oscilaciones Gunn en SSDs.

En ambos casos se ha optado por emplear nitruro de galio (GaN) como material en el que se basan los dispositivos. Como veremos en este trabajo, y entre otras características, este material de *gap* ancho es considerado un muy buen candidato para la alta frecuencia y potencia, pues presenta una velocidad de saturación de los electrones y un campo eléctrico umbral y de ruptura mayores que los semiconductores convencionales, aspecto este último clave para soportar intensas polarizaciones de DC.²⁸ En el caso de la OPTTR, la elección del GaN viene principalmente motivada por el elevado valor de la energía del fonón óptico polar que, como veremos, es clave para la obtención de oscilaciones relevantes en la corriente.²⁹

La capacidad de operar a frecuencia extremadamente alta estriba en procesos de inestabilidad-oscilación que tienen lugar como consecuencia de interacciones a escala micro y nanométrica, bajo ciertas condiciones y/o geometrías particulares, que han de estudiarse detalladamente para lograr optimizar sus resultados, de manera que los procesos que generan las oscilaciones no resulten anulados por otros efectos.

La OPTTR es un fenómeno que aparece bajo ciertas condiciones en dispositivos electrónicos y que puede dar lugar a oscilaciones en la corriente a frecuencias muy elevadas, incluso de THz. Corresponde a las oscilaciones inducidas por la emisión de fonones ópticos polares, acopladas en régimen cuasibalístico a la frecuencia de plasma en la región activa de un diodo semiconductor. De una manera resumida puede decirse que se trata de aprovechar la dinámica periódica de los portadores originada por la emisión de fonones ópticos polares cuando se aplica una polarización constante al dispositivo. Los portadores, acelerados por el campo eléctrico, se mueven de forma balística hasta alcanzar la energía de emisión de un fonón óptico, e inmediatamente lo emiten, se frenan y vuelven a repetir el ciclo de aceleración. Esta secuencia cíclica de aceleración y frenado de los portadores produce acumulaciones de carga en zonas localizadas (modulación de la densidad de carga), que en ciertas condiciones darán lugar a oscilaciones de alta frecuencia en la corriente a través del dispositivo.

Por otro lado, la búsqueda de oscilaciones de alta frecuencia en los SSDs se fundamenta en el efecto Gunn. Como consecuencia de la transferencia de electrones a un valle superior, el cual les confiere una mayor masa efectiva, se formarán, bajo ciertas condiciones, dominios de carga bien definidos viajando a lo largo del canal, lo que se traduce en oscilaciones en la corriente. Los SSDs son *a priori* relativamente sencillos de fabricar, pues se trata de estructuras planares con unas zanjas aislantes en forma de L que rompen la simetría del canal. Desde nuestro grupo se comenzó a estudiar estos dispositivos hace algunos años, y en la actualidad, en el marco del proyecto europeo *ROOTHZ (Semiconductor Nanodevices for Room Temperature THz Emission and Detection)*, continuamos trabajando con el ambicioso propósito, entre otros, de conseguir generación de señales de THz a temperatura ambiente.

La investigación en estos campos requiere tanto de simulación como de experimentación. La fabricación y caracterización de los dispositivos resultan extraordinariamente complejas y costosas, de forma que el apoyo de la simulación

para un correcto diseño es esencial. El esfuerzo en ambas vertientes es complementario y revierte en ahorro de tiempo y costes. En particular, nuestro trabajo se apoya principalmente en simulación Monte Carlo (MC),³⁰⁻³² procedimiento que posee grandes ventajas frente a otros métodos, pues incluye de forma directa los procesos microscópicos aleatorios que tienen lugar en el transporte electrónico y que resultan de gran importancia en los fenómenos de alta frecuencia.

Acorde con todo lo dicho anteriormente, la Memoria se ha estructurado en cuatro capítulos.

En el primero de los capítulos mostramos la herramienta de simulación empleada, un simulador MC. Se describirá tanto el método utilizado para caracterizar el material bajo estudio como el empleado para las simulaciones de dispositivos completos. Presentaremos las características más relevantes del GaN sobre todo en relación a la generación de señales de THz. Expondremos finalmente el proceso empleado para la obtención y tratamiento de algunos de los resultados de las simulaciones.

Seguidamente, en el segundo capítulo, tras un breve resumen de la física de plasma en sólidos, se explican los fundamentos teóricos del fenómeno OPTTR. Se presentan algunos resultados previos de otros investigadores, aunque hay que indicar que se trata de un terreno poco explorado y la escasa bibliografía versa fundamentalmente sobre otros nitruros distintos al GaN. Mostraremos y analizaremos nuestros resultados obtenidos tanto con el simulador de partícula única como los correspondientes ya a diodos n^+nn^+ de GaN. En éste último caso se empieza con una estructura de partida sobre la cual realizaremos ciertas variaciones para estudiar su influencia en el fenómeno a estudiar, interesándonos concretamente en el efecto de la temperatura, el dopaje y la longitud de la zona activa del diodo. Con todo ello hacemos una propuesta del diseño más recomendable para optimizar el fenómeno.

El tercer capítulo versa sobre los SSDs. Análogamente al capítulo anterior se comienza explicando el fenómeno físico implicado en este caso, el efecto Gunn. A continuación se presenta el dispositivo en cuestión, sus características más importantes y los pasos tecnológicos seguidos para su fabricación. Tras ello se pasa a presentar los resultados de simulación con los distintos modelos empleados. Ya que los procesos de simulación y fabricación han ido de la mano, de modo que uno se

valía de los resultados del otro y viceversa, se irán mostrando los resultados de manera cronológica, tanto los conseguidos con nuestras simulaciones como las comparaciones con los experimentales, algunos de los cuales obtuve yo misma durante una estancia de investigación de tres meses en el IEMN (*Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie*) en Lille (Francia). De esta manera se irán entendiendo los pasos seguidos en el diseño de los diferentes *run* de fabricación llevados a cabo. Si bien el propósito último del proyecto es conseguir un sistema de estado sólido compacto de emisión/detección de señales THz funcionando a temperatura ambiente, mi contribución, que se recoge en este capítulo, ha estado principalmente orientada hacia el estudio de la emisión. No obstante, para completar este trabajo, incluimos al final un apéndice explicando los principales resultados relativos a la detección.

El capítulo cuarto expone el estudio realizado acerca de la relación entre el aumento del ruido en corriente a baja frecuencia y la aparición de las oscilaciones de THz en los dos fenómenos analizados en este trabajo. Y es que, debido a la dificultad existente a la hora de comprobar experimentalmente la presencia de oscilaciones en el rango de los THz e incluso sub-THz, la medida del ruido a baja frecuencia puede resultar una herramienta muy útil para detectar indirectamente su existencia, según predicen nuestras simulaciones MC.

Acabamos esta Memoria con las principales conclusiones de nuestro trabajo.

CAPÍTULO I

SIMULACIÓN MONTE CARLO DE GaN PARA LA GENERACIÓN DE THz

El objetivo de este capítulo es realizar una descripción sucinta de la herramienta de simulación, basada en el método Monte Carlo (MC), que empleamos en este trabajo y que ha sido íntegramente desarrollada en el Grupo de Investigación en Dispositivos Semiconductores de la Universidad de Salamanca. Si bien podemos encontrar un análisis mucho más detallado en varias tesis doctorales llevadas a cabo en nuestro grupo³³⁻³⁹, trataremos de dar una idea general del *modus operandi* para la obtención de los resultados que iremos mostrando a lo largo de este trabajo. Para ello, en primer lugar, describimos la técnica MC. A continuación presentamos el simulador de partícula única, el cual se utiliza para caracterizar el material bajo estudio, aprovechando ese momento para mostrar las características más relevantes del nitruro de galio (GaN), sobre todo en relación a la generación de señales de THz. Después explicaremos el simulador que se emplea a la hora de estudiar dispositivos completos. Finalmente se detallará el proceso de obtención y tratamiento de algunos de los resultados de las simulaciones que suponen una información muy útil a la hora de comprender el fenómeno a estudiar.

I.1. MÉTODO DE MONTE CARLO

Este procedimiento, desarrollado a mediados del siglo pasado⁴⁰⁻⁴², debe su nombre al famoso casino homónimo del Principado de Mónaco ya que se trata, *grosso modo*, de un método consistente en la generación de números aleatorios para abordar problemas estocásticos asociados típicamente a complejas distribuciones de probabilidad y en los que intervienen una gran cantidad de elementos.

John von Neumann y Stanislaw Ulam son considerados sus creadores, dos matemáticos que en los años 40 estaban dedicados al estudio de procesos aleatorios, en particular la difusión de neutrones en material para fisión nuclear. Tales investigaciones acabarían dando lugar, unos años más tarde, al desarrollo de la bomba atómica durante la Segunda Guerra Mundial en el Laboratorio Nacional de Los Álamos en Estados Unidos bajo el denominado Proyecto Manhattan.

A lo largo de los años, y con la rápida evolución de los ordenadores, este método se ha ido empleando para abordar infinidad de problemas en muy distintas ramas del conocimiento, como física nuclear, electrónica, química o incluso economía. De hecho, esta técnica fue aplicada por primera vez al transporte de carga en un semiconductor por Kurosawa en 1966⁴³⁻⁴⁴. Desde entonces se ha convertido en uno de los métodos más empleados en la simulación de dispositivos electrónicos³⁰⁻³² frente a otros como el de deriva-difusión⁴⁵ o el hidrodinámico⁴⁶, puesto que se trata de un modelo completamente microscópico que, a cambio de requerir una gran potencia de cálculo, proporciona resultados muy detallados, precisos y sumamente útiles para la comprensión de los fenómenos físicos bajo estudio.

Para llevar a cabo un cálculo mediante el método MC será necesario en primer lugar contar con una fuente de números aleatorios o, mejor dicho, pseudo-aleatorios, distribuidos uniformemente en el intervalo $[0,1]$. Actualmente cualquier compilador ya dispone de un generador de este tipo, si bien es de señalar que se trata de una cuestión nada trivial, de hecho, estudiada aún en nuestros días. A continuación, a partir de estos números hemos de conseguir valores de una variable que obedezcan a una distribución de probabilidad no uniforme específica del fenómeno aleatorio en cuestión. Para ello existen principalmente dos técnicas, la de la función transformada inversa y la de aceptación-rechazo, ambas implementadas en nuestro código de simulación. Seguidamente, y antes de entrar a presentar nuestra herramienta MC de

trabajo, vamos a mostrar un ejemplo muy sencillo de cada una de estas técnicas, ya que es, en mi opinión, la mejor manera de explicar en qué consisten.

I.1.1. Técnica Monte Carlo de la función transformada inversa

Imaginemos que queremos simular la dinámica de un electrón en un material bajo la acción de un campo eléctrico constante. Sabemos que el movimiento del portador va a consistir en vuelos libres de distinta duración truncados por diversas interacciones con la red cristalina denominadas mecanismos de *scattering*. En este proceso no determinista hay varias magnitudes que responden a ciertas distribuciones de probabilidad. Por ejemplo, la probabilidad $p(t)$ de no sufrir alguna de estas colisiones durante un vuelo libre decae exponencialmente con el tiempo t que lleve volando el portador. Su expresión normalizada es la siguiente

$$p(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} \quad \text{para } t \geq 0, \quad (\text{I.1})$$

donde τ es el tiempo medio de vuelo libre, inverso de la frecuencia media de sufrir choques. Tenemos, por tanto, una distribución no uniforme para los posibles valores de los tiempos de vuelo. Sin embargo, su correspondiente función de distribución acumulada,

$$P(t) = \int_0^t p(t') dt' = 1 - e^{-t/\tau}, \quad (\text{I.2})$$

que refleja la probabilidad de tener tiempos de vuelo menores que un cierto t , es, en sí misma y por definición, una variable aleatoria con distribución uniforme en el intervalo $[0,1]$, que renombraremos r ,

$$r = P(t). \quad (\text{I.3})$$

Así, la inversión de esta expresión,

$$t = P^{-1}(r) = -\tau \ln(1-r), \quad (\text{I.4})$$

nos proporcionará lo que buscábamos: valores aleatorios para t , distribuidos de manera no uniforme según $p(t)$, a partir de valores aleatorios de r cuya distribución es uniforme en $[0,1]$ y que obtendremos con un generador de números aleatorios.

Nótese que como r está distribuido uniformemente en $[0,1]$, tenemos que $u = 1 - r$ también lo estará, por lo que podemos reescribir la última expresión como

$$t = -\tau \ln(u). \quad (\text{I.5})$$

Con el propósito de ilustrar la explicación anterior, en la Figura I.1 se representan las funciones a las que se ha hecho alusión.

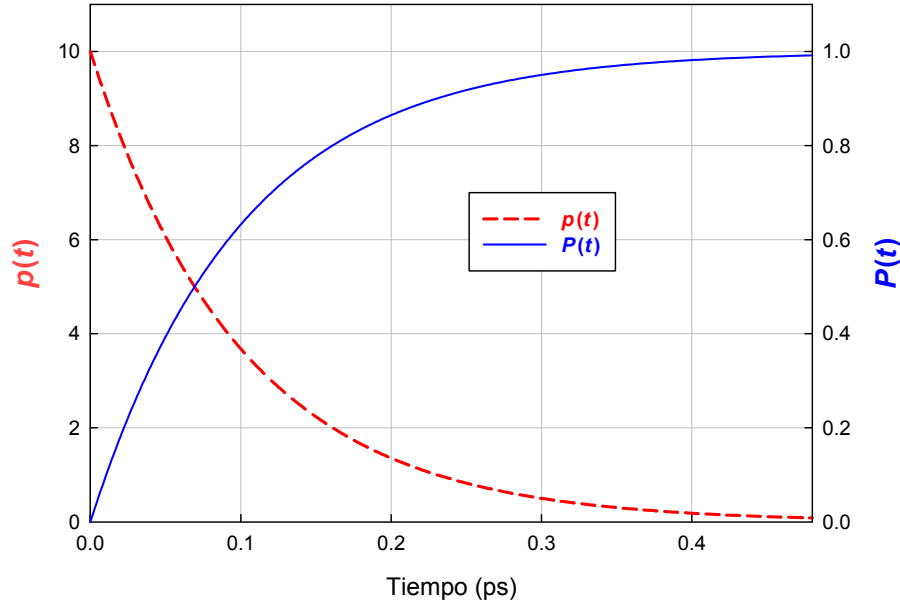


Figura I.1. Funciones involucradas en el ejemplo presentado de aplicación de la técnica MC de la función transformada inversa. Se ha tomado $\tau = 0.1$ ps.

I.1.2. Técnica Monte Carlo de aceptación-rechazo

En ocasiones puede ser muy complicado, así como costoso en términos de tiempo de computación, el generar la función inversa, especialmente cuando la distribución no uniforme que manejamos es de carácter empírico (situación que no acontece en nuestro caso). Es entonces cuando se emplea esta otra técnica denominada de aceptación-rechazo.

En nuestro simulador utilizamos este método, por ejemplo, a la hora de considerar el principio de exclusión de Pauli,³⁰ como mostramos gráficamente en la Figura I.2. Este principio establece que tras un mecanismo de *scattering* no está disponible cualquier estado final, sino que existe una función de ocupación de los estados en función de la energía del electrón, $f(\varepsilon)$, que responde a la estadística de Fermi-Dirac,

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}\right)}, \quad (\text{I.6})$$

donde ε es la energía del electrón, ε_F el nivel de Fermi, k_B la constante de Boltzmann y T la temperatura. Por lo tanto, seleccionado el mecanismo de *scattering* susceptible de acontecer, éste será sólo aceptado si lleva al portador a un estado final de energía ε no ocupado. Es decir, la energía debe obedecer la distribución de probabilidad I.6. Al tratarse de una función de probabilidad sus valores están ya comprendidos en el intervalo $[0,1]$, y lo que se hace simplemente es, mediante un generador de números aleatorios con distribución uniforme en el intervalo $[0,1]$, obtener un número r e inferir si se acepta o se rechaza el mecanismo según sea su valor mayor o menor (o igual) que $f(\varepsilon)$ respectivamente.

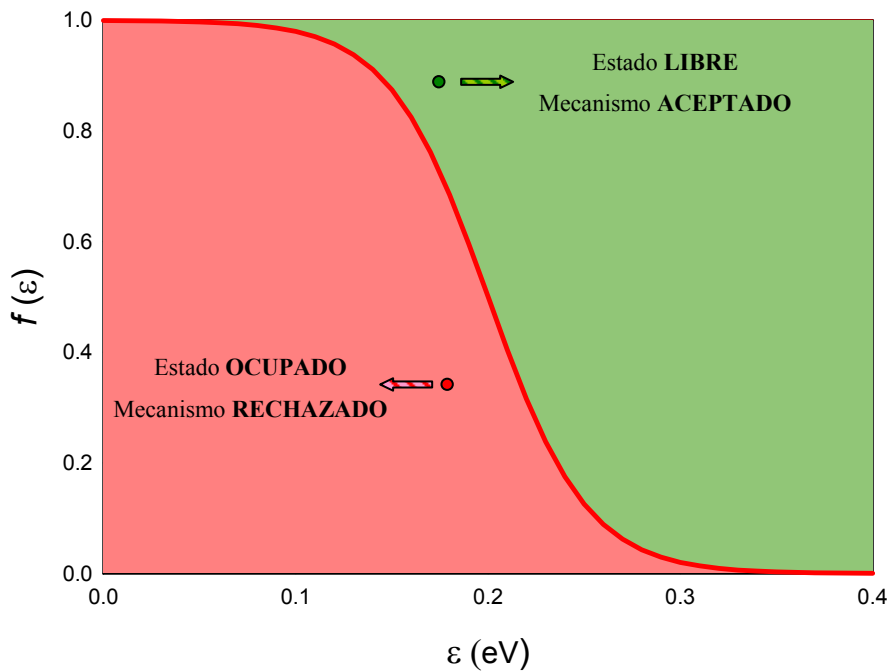


Figura I.2. Representación gráfica de la técnica MC de aceptación-rechazo. Se ha considerado $\varepsilon_F = 0.2$ eV y $T = 300$ K.

I.2. SIMULADOR MONTE CARLO DE PARTÍCULA ÚNICA

En esta sección pasamos ya a presentar el denominado simulador de partícula única, que empleamos para caracterizar materiales semiconductores, es decir, reproducir correctamente sus propiedades volúmicas y poder así simular dispositivos más adelante.

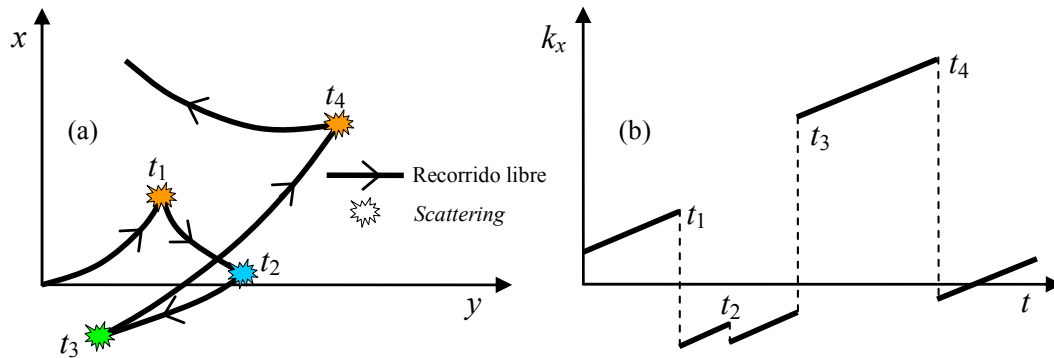


Figura I.3. Esquema simple de la dinámica típica de un electrón sometido a un campo eléctrico uniforme dirigido en el sentido negativo del eje x . (a) Trayectorias erráticas en el espacio real y (b) evolución temporal del momento longitudinal k_x del electrón.

Se trata meramente de simular el movimiento de un solo electrón dentro del material en cuestión, bajo la acción de un campo eléctrico externo constante y dotando al portador de una masa efectiva m^* asociada a la estructura de bandas de la red cristalina en la que se mueve. La red cristalina, asimismo, altera el movimiento del electrón mediante los mecanismos de *scattering*. Por lo tanto, como podemos ver en la Figura I.3(a), la dinámica del portador es una secuencia de recorridos libres (en forma de arcos parabólicos) truncados por mecanismos de *scattering* (considerados instantáneos) que cambian la trayectoria y energía del electrón. Durante el recorrido libre, en el que el movimiento del electrón es gobernado por la acción del campo eléctrico, la evolución temporal de su vector de onda será como la representada en la Figura I.3(b).

La información obtenida sobre el movimiento del electrón nos proporciona, por el principio de ergodicidad, ciertas propiedades (velocidad, energía, movilidad, etc.) de todo el gas de electrones, siempre y cuando se trate de transporte en condiciones homogéneas y estacionarias. Esta situación se cumple claramente en las simulaciones de partícula única que llevamos a cabo con el propósito de caracterizar materiales, ya

que se considera un semiconductor sin límites sometido a la acción de un campo constante y durante un tiempo suficientemente grande.

En la simulación, cada vez que tengamos que obtener el valor de una magnitud física que depende de una distribución de probabilidad compleja, emplearemos la técnica MC de la función transformada inversa como se ha explicado en la sección anterior. En nuestro caso, tales magnitudes físicas suelen ser el tiempo de recorrido libre, el ángulo de desviación y el estado final del portador tras cada mecanismo. También utilizamos la técnica MC cuando haya que seleccionar un evento que dependa de una distribución de probabilidad, como para la elección del mecanismo de *scattering* que sufre el portador simulado.

Este tipo de simulación es relativamente sencillo, y por ello es la base de otros métodos más complejos que ya consideran muchos electrones y/o huecos dentro del cristal, sometidos a la acción de campos eléctricos que se actualizan de manera auto-consistente y con las condiciones de contorno apropiadas, como es el caso de la simulación de dispositivos electrónicos.

I.2.1. Esquema de la simulación

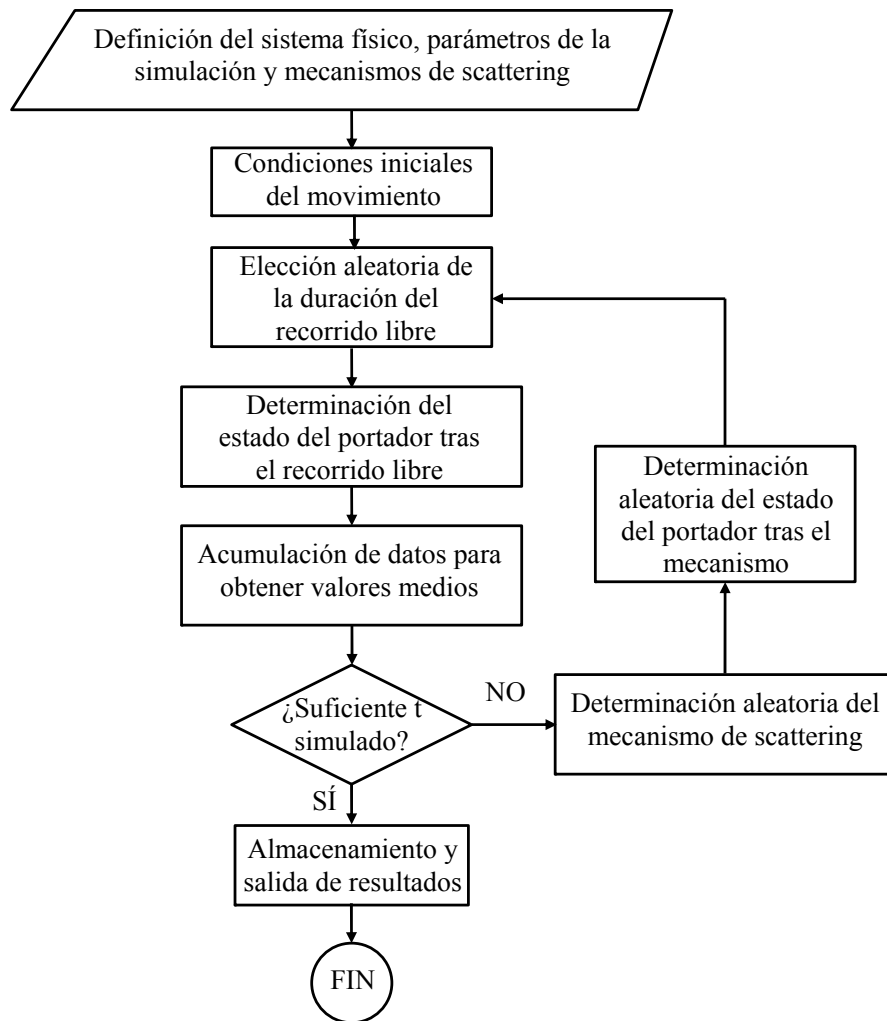


Figura I.4. Diagrama de flujo del programa de partícula única.

La estructura de nuestro programa de partícula única se presenta de manera esquemática en el diagrama de flujo de la Figura I.4. Inicialmente se procede a la definición del sistema físico y de sus parámetros característicos, se proporcionan las magnitudes propias de la situación a simular (temperatura, campo eléctrico, etc.) y también se definen los parámetros que controlan la simulación (duración, paso temporal, etc.), adoptando una solución de compromiso entre la precisión necesaria y el tiempo de cálculo que requiere. A continuación, una vez inicializadas cada una de las variables y contadores, se genera el estado inicial del portador. A partir de este momento comienza la simulación propiamente dicha de su movimiento, una sucesión suficientemente grande de recorridos libres, en los que el portador es acelerado por el campo eléctrico, interrumpidos por diferentes procesos de *scattering*, considerados instantáneos y elegidos de forma aleatoria de acuerdo con sus probabilidades.

A lo largo de la simulación se van acumulando valores instantáneos de varias magnitudes para poder calcular su media durante un tiempo de simulación T según

$$\langle A \rangle_T = \frac{1}{T} \int_0^T A(t) dt = \frac{1}{T} \sum_i \int_0^{t_i} A(t) dt, \quad (I.7)$$

siendo A una magnitud cualquiera, como por ejemplo la velocidad o la ocupación de un valle, y donde hemos separado la integral como la suma de las integrales de los i recorridos libres de duración t_i .

I.2.2. Mecanismos de *scattering*

Puesto que los procesos de *scattering* juegan, como es obvio, un papel muy importante en el transporte electrónico en general, y en particular en los fenómenos físicos que estudiamos, vamos dar algunos detalles de los principales mecanismos que se tienen en cuenta tanto en el simulador de partícula única, como, evidentemente, en el simulador de dispositivos que se describirá más adelante.

En un cristal ideal un portador se vería, en principio, acelerado uniformemente por el campo eléctrico. Pero en realidad el cristal presenta imperfecciones y vibraciones de los átomos que lo componen, provocando, como decíamos, que los electrones en su movimiento sufran una serie de colisiones llamadas mecanismos de *scattering*, que hacen que la velocidad alcance un valor límite estacionario. Estos mecanismos pueden clasificarse utilizando los siguientes criterios.

- Dependiendo de la energía del electrón después de la interacción

Elásticos: El electrón conserva su energía al sufrir el *scattering*.

Inelásticos: Hay un intercambio de energía en la colisión.

- Dependiendo del ángulo entre el vector de onda del electrón antes y después de la interacción

Isótropos: La dirección del vector de onda del electrón después del *scattering* no depende de la dirección de su vector de onda inicial. De hecho, cualquier dirección es igualmente probable.

Anisótropos: La dirección del vector de onda del electrón después del *scattering* sí depende de la dirección de su vector de onda inicial. Típicamente la

probabilidad del estado final es mayor cuando no hay un cambio importante de dirección entre los vectores de onda inicial y final del electrón.

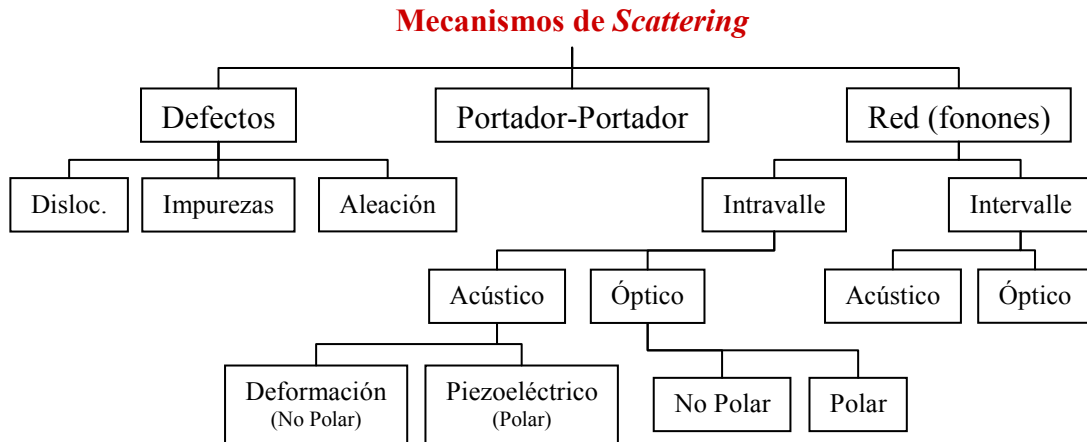


Figura I.5. Esquema de los mecanismos de *scattering*.

- Dependiendo del origen físico de los mecanismos de *scattering* (ver la Figura I.5)

Scattering con defectos:

✓ *Scattering* con **dislocaciones**, tipo de defecto que aparece habitualmente en el crecimiento de capas de GaN.

✓ *Scattering* debido a la interacción con **impurezas ionizadas** (elástico y anisótropo), que en el simulador se evalúa a partir del modelo de Brooks-Herring.³¹

✓ *Scattering* de **aleación**, que aparece sólo en materiales ternarios.³²

Scattering portador-portador: Cuando la densidad de electrones es muy elevada se hacen más probables las colisiones entre ellos. El considerar esta interacción entre portadores, y su consecuente transferencia de momento y energía, resulta muy costoso a nivel de cálculo pues requiere tratar continuamente con la distribución de portadores.^{47,48} Por ello, y pese a que ciertamente su influencia pueda no ser despreciable cuando existan valores de concentraciones muy elevados, nosotros no tenemos implementado este mecanismo en el código de simulación.

Scattering con la red: La interacción del movimiento de los electrones con las vibraciones de los átomos de la red se tiene en cuenta a través de las colisiones con los fonones. Éstos pueden ser de dos tipos, *ópticos* y *acústicos* (dependiendo de su relación de dispersión).⁴⁹ La interacción con la red puede producirse vía un potencial de deformación (también llamado *scattering no polar*) o ser causada por fuerzas

electrostáticas generadas por los desplazamientos de los átomos de la red (también llamado *scattering polar*, o *piezoeléctrico* en el caso de los fonones acústicos).

Dependiendo de si el intercambio de momento del electrón con los fonones hace que se produzca un cambio de valle o no, podemos distinguir entre mecanismos *intervalle* (equivalente y no equivalente) e *intravalle*.

De esta manera, en nuestro programa tenemos implementada la posibilidad de considerar los siguientes mecanismos de *scattering* con la red (con fonones):

- ✓ **Intervalle** (equivalente y no equivalente). Inelástico e isótropo.
- ✓ **Acústico** (no polar). Elástico e isótropo.
- ✓ **Piezoeléctrico**. Elástico y anisótropo.
- ✓ **Óptico polar**. Inelástico y anisótropo.
- ✓ **Óptico no polar**. Inelástico e isótropo. Sólo tiene lugar en los valles L, por lo que no se considera en el estudio de nuestro material, el GaN.

Las probabilidades dependientes de la energía de los distintos tipos de mecanismos, así como el cálculo del estado del electrón después de la interacción, pueden consultarse en la bibliografía.^{30,31,33,34,50,51} El cálculo de estas probabilidades se realiza al empezar la simulación y se almacenan en una matriz tabulada en energía, que se usará en la elección del tipo de *scattering* que sufre el electrón en su dinámica dentro del semiconductor. Esto es así con la excepción, en el caso del simulador de dispositivos, del *scattering* con impurezas, el *scattering* piezoeléctrico y el *scattering* con dislocaciones. Las probabilidades de estos mecanismos deben evaluarse en cada proceso de *scattering* de acuerdo con el nivel de Fermi y la temperatura electrónica locales, magnitudes éstas que influyen en el factor de apantallamiento y que se calculan auto-consistentemente con la concentración local de portadores.⁵² Hay que señalar que pese a que al calcular las probabilidades de *scattering a priori* no se tiene en cuenta el principio de exclusión de Pauli, lo que se hace es emplear la técnica MC de aceptación-rechazo, explicada al principio de este capítulo e implementada por ejemplo en la Ref. 52, para determinar si el estado final posterior a cada mecanismo de *scattering* está ocupado o no. Obviamente es para el caso de materiales con dopajes considerables y/o zonas de acumulación elevada cuando es más importante considerar dicho principio.

I.3. NITRURO DE GALIO

En esta sección vamos a exponer las características más relevantes del material protagonista de nuestro estudio, el GaN, principalmente en relación con lo tratado en este trabajo. Para analizar las propiedades volúmicas empleamos, como hemos explicado, el simulador de partícula única, que nos proporciona información importante para después llevar a cabo el análisis de dispositivos y para comprender mejor todo lo relativo a los fenómenos estudiados.

Hemos de señalar que, de entre todos los mecanismos de *scattering* anteriormente citados, las interacciones presentes en nuestras simulaciones con GaN son: *scattering* con impurezas ionizadas, con dislocaciones, la emisión y absorción de fonones ópticos polares, el *scattering* piezoeléctrico, los fonones acústicos y todas las posibles transferencias intervalle.

I.3.1. Propiedades básicas

Para que un material semiconductor resulte de interés en nuevas líneas de investigación tiene que presentar claras ventajas frente a otros, como pueden ser mejoras de ciertas características, reducción de costes o posibilidad de desarrollar nuevas aplicaciones.

Frente a los semiconductores hoy en día más comunes (Si, GaAs e InP), algunos nuevos materiales que están atrayendo atención son los conocidos como semiconductores de *gap* ancho: SiC y GaN. La Tabla I.1 recoge algunas de las propiedades de estos materiales a temperatura ambiente.

	Si	GaAs	InP	4H SiC	GaN
Gap (eV)	1.1	1.42	1.35	3.26	3.44
Movilidad de electrones (cm²/Vs)	1500	8500	5400	700	900
Velocidad de saturación (pico) (10⁷ cm/s)	1.0 (1.0)	1.0 (2.1)	1.0 (2.3)	2.0 (2.0)	1.5 (2.5)
Campo eléctrico de ruptura (MV/cm)	0.3	0.4	0.5	2.0	3.3
Conductividad térmica (W/cmK)	1.5	0.5	0.7	4.5	2.1

Tabla I.1. Propiedades de varios semiconductores a temperatura ambiente. Datos extraídos de la Ref. 53.

Estos semiconductores, por su pequeña constante de red, presentan necesariamente fuertes enlaces atómicos, lo que les confiere gran resistencia frente a ambientes agresivos y cambios bruscos de temperatura.

Otra ventaja de los semiconductores de *gap* ancho es que presentan una velocidad de saturación de los electrones y un campo de ruptura muy elevados, lo que les convierte en prometedores elementos constitutivos de dispositivos de potencia y alta frecuencia, asunto éste de relevante actualidad.

Estos materiales también se están utilizando en dispositivos de emisión de luz, entre el azul y el ultravioleta.

Centrándonos en nuestro material, el GaN, presenta grandes diferencias respecto a otros semiconductores más convencionales. Por ejemplo, se ha de crecer sobre otros sustratos porque por el momento no es posible fabricar monocristales de GaN competitivos comercialmente. La distinta constante de red entre el GaN y el sustrato conlleva la aparición de una densidad de dislocaciones relativamente alta (10^8 - 10^{10} cm⁻²), pero se están realizando notables esfuerzos tecnológicos para reducir este problema.

Otra propiedad importante, sobre todo en el estudio y desarrollo de HEMTs, es que este material presenta una constante piezoeléctrica y un campo de polarización espontánea elevados, lo que facilita conseguir altas densidades de portadores en estructuras de capas sin dopaje.

Es de resaltar que una velocidad de saturación tan elevada como la que presenta el GaN permite que los dominios de carga que se forman y se desplazan a lo largo de los dispositivos, para finalmente dar lugar a oscilaciones en la corriente, lo hagan a muy alta velocidad, lo cual se traduce directamente en la posibilidad de operar a frecuencia elevada. Precisamente en el fenómeno que estudiaremos en el Capítulo III, las oscilaciones por efecto Gunn, se aprovecha esta característica, puesto que a lo largo de los diodos tendrá lugar un transporte de acumulaciones de carga. La formación de esos dominios es posible en el GaN, así como en otros materiales III-V, gracias a la existencia de una movilidad diferencial negativa, consecuencia a su vez de la estructura de bandas de energía, como veremos más adelante. Esa propiedad se presenta en el GaN a partir de un campo umbral muy

elevado, lo cual, sumado al alto valor del campo de ruptura, supone una ventaja para fabricar dispositivos de potencia.

En relación a la OPTTR (*Optical Phonon emission assisted Transit-Time Resonance*), que es el otro fenómeno estudiado en este trabajo (Capítulo II), se ha de indicar que la elevada energía del fonón óptico polar en el GaN, 0.091 eV, hace que la interacción portador-fonón sea muy fuerte, por lo que la OPTTR se presentará de manera destacada.

Finalmente hemos de precisar que en nuestro estudio tratamos el GaN con estructura wurtzita (α -GaN), que es la estructura estable a presión atmosférica y la utilizada en la fabricación de los SSDs (*Self-Switching Diodes*) que veremos en el Capítulo III. Se muestra en la Figura I.6.

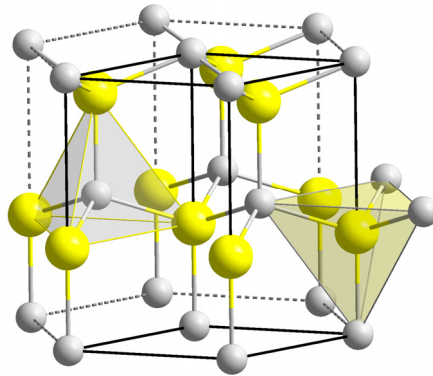


Figura I.6. Estructura cristalina del GaN-wurtzita.

I.3.2. Modelización del material

A continuación vamos a ver algunos aspectos importantes a la hora de simular el material, como son el modelo de bandas adoptado o los parámetros físicos que se emplean en el programa de partícula única. Es importante señalar que la bibliografía relativa a modelos MC empleados para el estudio de dispositivos basados en GaN no es especialmente abundante ni detallada, y existe además gran dispersión tanto en los resultados obtenidos como en los parámetros utilizados.⁵⁴⁻⁵⁶ Asimismo, las medidas experimentales con las que calibrar el simulador son escasas, salvo varias características velocidad-campo.^{57,58} Por todo ello, se optó por utilizar los valores más fiables y que son frecuentemente aceptados para los parámetros más conocidos, mientras que para el resto se trató de asignar valores razonables que proporcionasen un buen acuerdo entre los resultados de simulación y los medidos experimentalmente.

El simulador permite variar múltiples magnitudes como son el campo aplicado, la temperatura, la impurificación, etc., de manera que es posible simular situaciones muy dispares, conforme a los datos experimentales disponibles, y lograr así una completa y detallada modelización del material. Mostraremos algunos de los resultados de estas simulaciones bajo distintas condiciones, recordando que se considera un material homogéneo, sin límites y bajo un campo eléctrico constante.

I.3.2.a. Diagrama de bandas y parámetros

Si bien la estructura de bandas completa del GaN es tan compleja como muestra la Figura I.7, en nuestro modelo sólo se considera una banda de conducción formada por los tres mínimos de energía señalados, los valles Γ_1 , U y Γ_3 , asimilados a valles esféricos no parabólicos³⁰ a través de la expresión

$$\varepsilon(\mathbf{k})(1 + \alpha\varepsilon(\mathbf{k})) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}, \quad (\text{I.8})$$

donde ε es la energía del electrón, \mathbf{k} su momento, \hbar la constante de Planck, m^* la masa efectiva en el fondo del valle y α el coeficiente de no parabolicidad.

Esta simplificación es perfectamente asumible ya que para los campos considerados las subbandas de conducción superiores están completamente deshabitadas. Asimismo, puesto que siempre se tratará de dopajes tipo n , solamente se tiene en cuenta la contribución a la corriente de los electrones.

Los parámetros propios de los tres valles considerados se recogen en la Tabla I.2, y en la Tabla I.3 se muestran otros parámetros característicos del material.

El GaN es un semiconductor de *gap* directo. El punto más bajo de la banda de conducción se encuentra en el centro de la 1ª zona de Brillouin, en el punto Γ (valle Γ_1), 3.44 eV por encima del máximo de la banda de valencia, situado también en el punto Γ . El primer mínimo de la banda de conducción inmediatamente superior está entre los puntos M y L, dando lugar a un valle (6 equivalentes) que suele denominarse valle U, a 2.2 eV del mínimo del valle Γ_1 . Y el siguiente mínimo, apenas 0.2 eV por encima del mínimo del valle U, está de nuevo en el punto Γ (valle Γ_3).

En el estudio de los diodos autoconmutantes o SSDs veremos que las posibles oscilaciones en la corriente son debidas al efecto Gunn, fenómeno típico de

materiales III-V, por el cual se forman acumulaciones de portadores al ser transferidos del valle Γ_1 al valle U, en donde, a causa de la mayor masa efectiva que éste les confiere, se mueven más lentamente y dan lugar a la creación de esos dominios de carga.

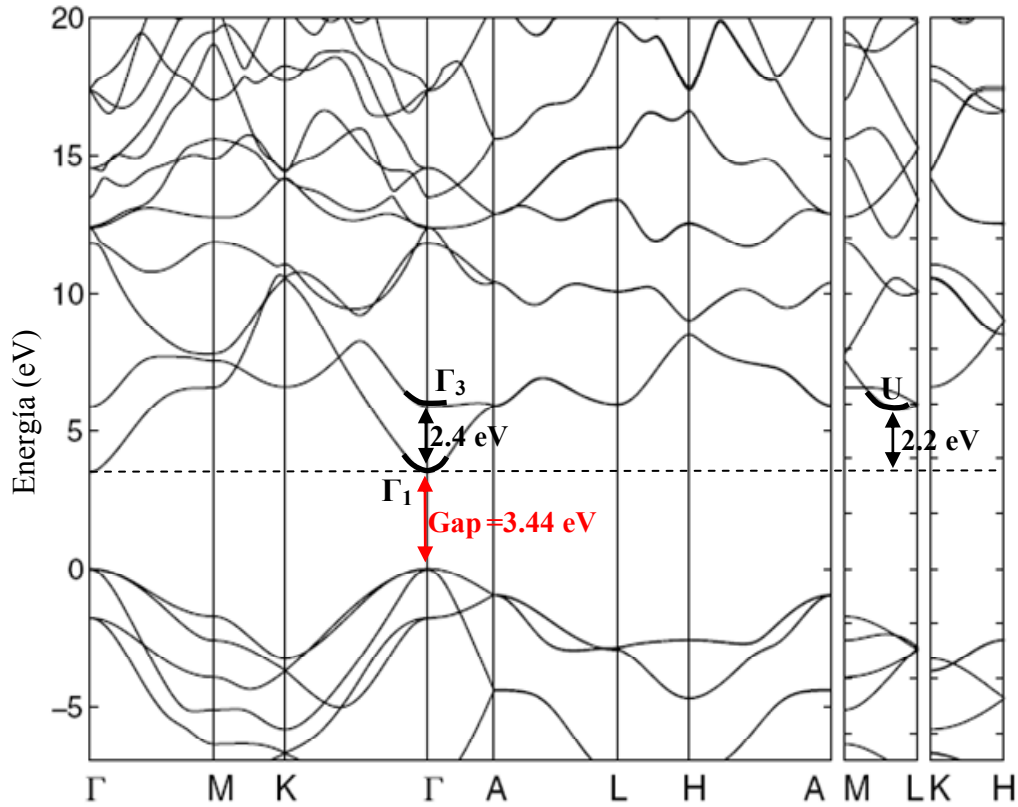


Figura I.7. Estructura de bandas del GaN-wurtzita.

	Valle Γ_1	Valle U	Valle Γ_3
Masa efectiva	0.22	0.39	0.28
Coef. no parabolicidad (eV^{-1})	0.37	0.50	0.22
Nivel de energía desde Γ_1 (eV)	-	2.2	2.4
Número de valles equivalentes	1	6	1
Pot. deformación acústico (eV)	8.3	8.3	8.3
Pot. def. intervalle (10^{10} eV/m)	10	10	10
Energía fonón óptico polar (meV)	91.2	91.2	91.2
Energía fonón intervalle (meV)	91.2	91.2	91.2

Tabla I.2. Parámetros físicos de los diferentes valles del GaN.

Densidad (kg/m³)	6150
Velocidad del sonido (m/s)	6560
Permitividad rel. baja frecuencia	8.9
Permitividad rel. alta frecuencia	5.35
Gap (eV)	3.44
Constante de red (Å)	5.185
Constante piezoeléctrica (C/m²)	0.375

Tabla I.3. Parámetros característicos del material GaN.

I.3.2.b. Emisión y absorción de fonones ópticos polares

Como ya se ha mencionado, nuestro simulador MC de partícula única nos ofrece la posibilidad de considerar múltiples mecanismos de *scattering*. En el caso particular de la OPTTR, resulta clave analizar la relación de probabilidades entre emisión y absorción de fonones ópticos polares, aspecto éste al que volveremos al explicar el fenómeno en el próximo capítulo. De acuerdo con la bibliografía,³⁰ las expresiones para dichas probabilidades cumplen la siguiente dependencia con el factor de ocupación de fonones, que sigue una distribución de Bose-Einstein

$$P_{abs} \propto N_k \text{ y } P_{em} \propto N_k + 1, \quad (I.9)$$

$$\text{siendo } N_k = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_0 / K_B T) - 1} \text{ y } N_k + 1 = \frac{\exp(\hbar\omega_0 / K_B T)}{\exp(\hbar\omega_0 / K_B T) - 1}.$$

Ésta es la única dependencia con la temperatura que presentan dichas probabilidades, lo cual supone que a muy bajas temperaturas sólo tendrán importancia los procesos de emisión de fonones. A medida que crece la temperatura, los procesos de absorción cobran mayor entidad, mientras que la emisión de fonones apenas se ve afectada. En la Figura I.8 se muestran gráficamente las probabilidades de emisión y absorción a temperaturas de 40 K y 300 K. Se observa que en cuanto la energía alcanza el valor necesario para la emisión del fonón óptico polar (0.091 eV), la probabilidad de la emisión crece bruscamente, y se hace, para el caso de 40 K,

muchos órdenes de magnitud superior a la probabilidad de absorción. Sin embargo, para 300 K ambas probabilidades difieren sólo en un factor 30.

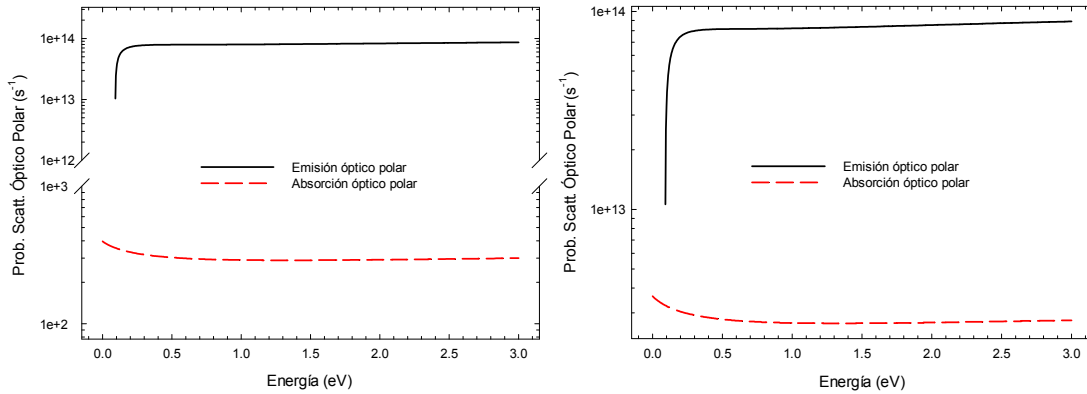


Figura I.8. Probabilidades de emisión y absorción de fonones ópticos polares en GaN a temperaturas de (a) 40 K y (b) 300 K.

I.3.3. Resultados

A continuación se muestran resultados obtenidos para el GaN con el modelo de partícula única considerando una impurificación de 10^{15} cm^{-3} . El tiempo simulado es de 5 ns. Inicialmente los cálculos se realizan a temperatura ambiente y después a temperaturas más bajas, principalmente por el interés que conlleva analizar la influencia de la temperatura en el fenómeno de la OPTTR, el cual pasaremos a estudiar en detalle en el capítulo siguiente. Se presentarán las gráficas de valores medios de velocidad y energía cinética, y las de ocupación de valles y número de mecanismos de *scattering* en función del campo eléctrico.

I.3.3.a. Temperatura ambiente

Los resultados proporcionados por el simulador cuando la temperatura es de 300 K se recogen en las gráficas de la Figura I.9.

En la curva velocidad-campo [Figura I.9(a)] podemos observar que, después de la zona lineal para campos bajos (movilidad constante), la pendiente tiende a disminuir hasta que la velocidad alcanza un máximo. Así, a partir de un campo umbral en torno a 200 kV/cm, la pendiente es negativa. Esto significa una movilidad diferencial negativa, la cual resulta de gran interés en la generación de señales de muy alta frecuencia mediante efecto Gunn, como ocurre en el caso de los diodos SSD que estudiaremos en el Capítulo III. Su origen ha de atribuirse a los mecanismos de transferencia intervalle [Figura I.9(d)]. Como vemos en la Figura I.9(c), para

campos débiles los electrones pueblan mayoritariamente el valle Γ_1 . A campos suficientemente altos (por encima del valor correspondiente al máximo de la velocidad) los portadores pueden ser transferidos a valles superiores, en nuestro caso el valle U, donde se mueven más lentamente debido a su mayor masa. Esto también se aprecia en la Figura I.9(b), que refleja la pérdida de energía cinética y la distinta masa efectiva de los portadores al cambiar de valle.

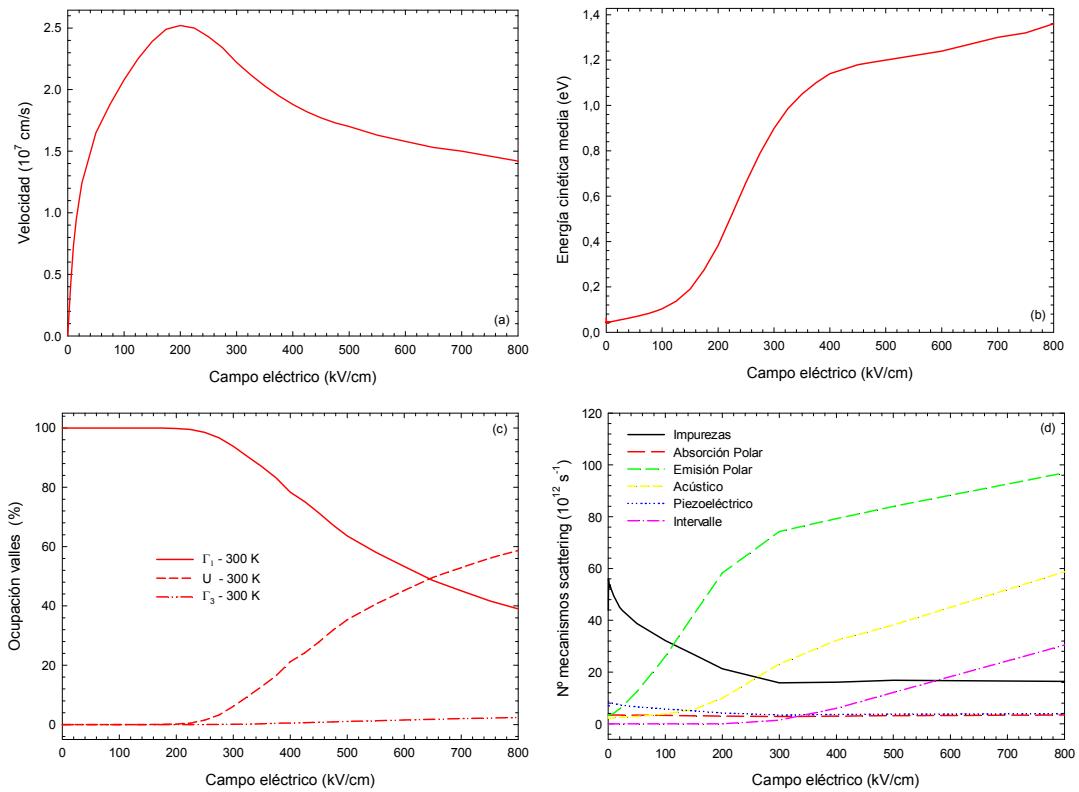


Figura I.9. Magnitudes microscópicas calculadas a temperatura ambiente en función del campo eléctrico. (a) Velocidad y (b) energía cinética medias de los electrones, (c) ocupación de valles y (d) número de mecanismos de *scattering* por unidad de tiempo.

I.3.3.b. Influencia de la temperatura de operación

Cuando variamos la temperatura entre 15 y 300 K encontramos resultados notablemente diferentes, como se aprecia en la Figura I.10 y en la Figura I.11, incluyéndose en el primer caso un zoom para campos bajos, que serán los aplicados sobre los diodos simulados para obtener la OPTTR.

Las curvas de velocidad frente al campo eléctrico [Figura I.10(a)] muestran valores más bajos a temperaturas superiores, como es de esperar en razón de la mayor probabilidad de sufrir mecanismos de *scattering*. Se observa también que el máximo de la velocidad aparece a campos inferiores a medida que disminuimos la

temperatura. Esto es debido a que a temperaturas menores los electrones consiguen antes la energía necesaria para abandonar el valle Γ_1 y ser transferidos al valle U, como se aprecia en la Figura I.11(a) y en la Figura I.11(b).

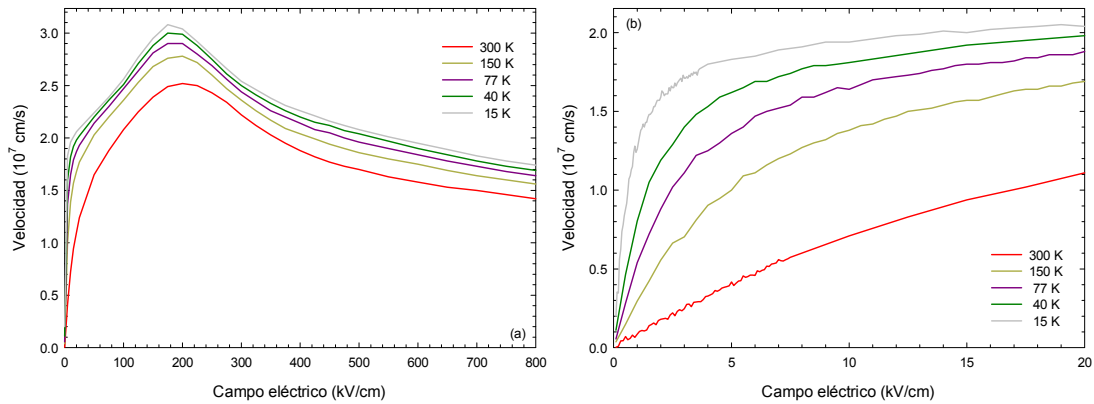


Figura I.10. (a) Influencia de la temperatura en la característica velocidad-campo. (b) Zoom de la región de campos bajos.

En la Figura I.10(b), que presenta la curva velocidad-campo para polarizaciones débiles, se observa una fuerte dependencia de la movilidad con la temperatura. Para 15 K se detecta un brusco cambio de pendiente relacionado con la activación de la emisión de fonones ópticos polares. Cuando la temperatura aumenta, debido a la creciente influencia de otros mecanismos de *scattering*, ese cambio de pendiente se suaviza de manera progresiva, desapareciendo prácticamente a 300 K.

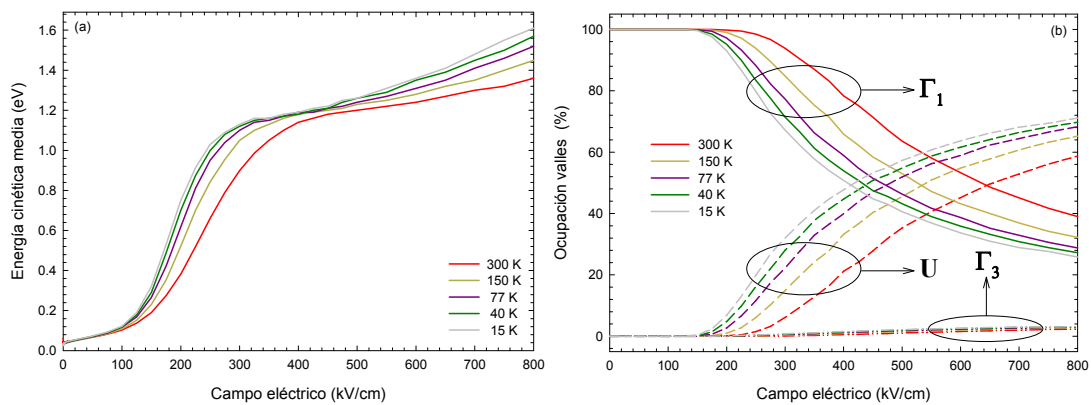


Figura I.11. Influencia de la temperatura en (a) la energía media y (b) la ocupación de los valles.

Resaltamos también que para los pequeños valores de campo eléctrico a los que haremos las simulaciones sobre la OPTTR en diodos de GaN, la ocupación de portadores será prácticamente exclusiva en el valle Γ_1 independientemente de la temperatura, como se aprecia en la Figura I.11(b). En cambio, en el caso de las oscilaciones Gunn en SSDs, las polarizaciones aplicadas son muy elevadas y hacen

posible esa transferencia de portadores del valle Γ_1 al U que da lugar a la formación de dominios de carga.

La información acerca de las probabilidades de *scattering* para emisión y absorción de fonones a 40 y 300 K presentadas anteriormente (Figura I.8), se complementa ahora con las tasas de *scattering* de todos los mecanismos considerados en nuestra simulación en función del campo aplicado y para varias temperaturas entre 15 y 150 K. En la Figura I.12 se observa cómo a temperaturas bajas domina el *scattering* de emisión de fonones ópticos polares sobre el de absorción, que es prácticamente inexistente, mientras que cuando la temperatura crece, ambas tasas se hacen comparables.

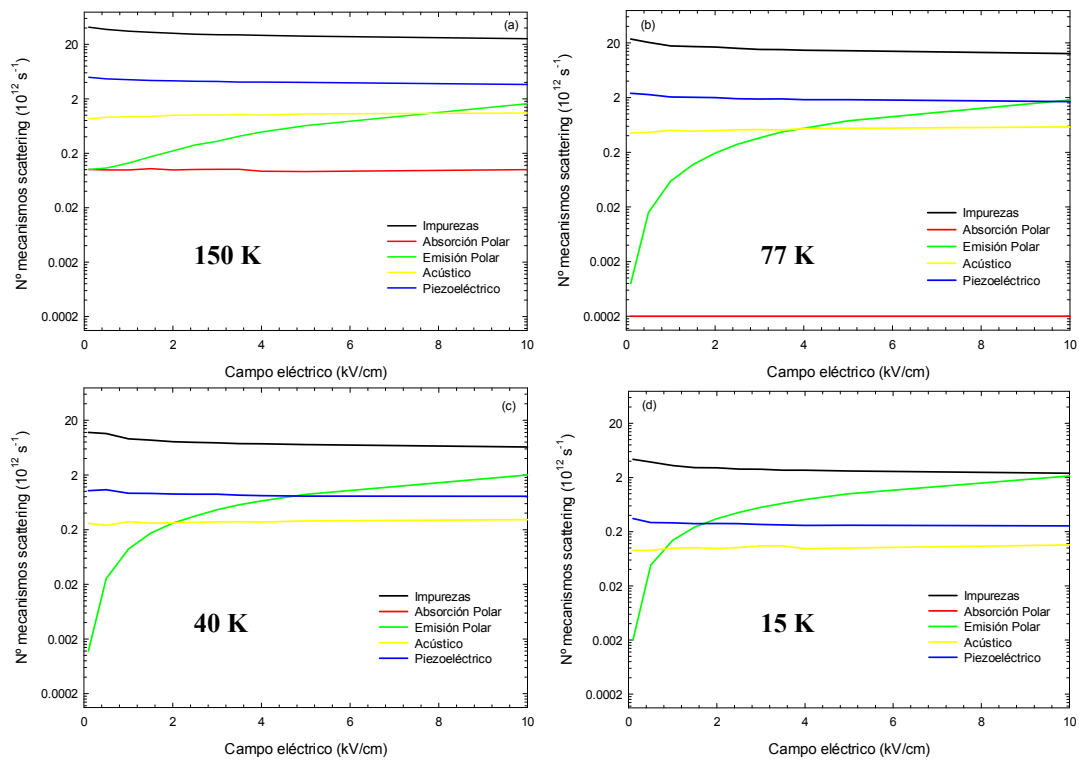


Figura I.12. Influencia de la temperatura en el número de mecanismos de *scattering*. (a) 150 K, (b) 77 K, (c) 40 K y (d) 15 K.

Aunque las gráficas muestran la presencia de otros mecanismos de *scattering* con tasas muy apreciables (fundamentalmente piezoelectrico y con impurezas), apenas afectarán al fenómeno de la OPTTR por su carácter de elásticos (no dan lugar a pérdida de energía) y anisótropos (apenas alteran la dirección de la velocidad).

I.4. SIMULADOR DE DISPOSITIVOS

Para el estudio de estructuras no homogéneas y con dimensiones finitas utilizaremos un simulador *ensemble* MC semiclásico acoplado auto-consistentemente con una resolución bidimensional de la ecuación de Poisson. En este método se simula un cierto número de partículas (durante un tiempo suficientemente largo) que se mueven en el seno de un campo eléctrico auto-consistente, actualizado en cada paso temporal a través de la solución de la ecuación de Poisson, teniendo en cuenta la posición de los portadores y la distribución de impurezas. De este modo, la solución puede considerarse continua en el tiempo. Por otra parte, para que la solución también pueda admitirse continua en el espacio es necesario definir un mallado espacial suficientemente fino.

En la Figura I.13 se ha representado de forma esquemática la dinámica de un portador en la simulación MC de dispositivos. Una vez discretizado el dominio de simulación, se resuelve la ecuación de Poisson (detallaremos el método utilizado más adelante) y se obtiene el campo eléctrico en cada una de las celdas. Como hemos dicho, el campo eléctrico se actualiza en cada paso temporal pero, además, hay que resaltar que éste también cambia de una celda a otra. Por ello, cada vez que se determina la duración de un recorrido libre es preciso calcular si el mecanismo de *scattering* tiene lugar después de que el portador cambie de celda o de que acabe el paso temporal, ya que, si así fuera, en parte de ese recorrido sería otro campo el responsable de su aceleración. El paso temporal dt con el que se actualiza el campo eléctrico está limitado superiormente por el inverso de la frecuencia de plasma⁵⁹ f_p y por el tiempo de relajación dieléctrica⁶⁰ τ_d , de manera que dt debe cumplir que $2\pi f_p dt < 2$ y $dt < \tau_d$.

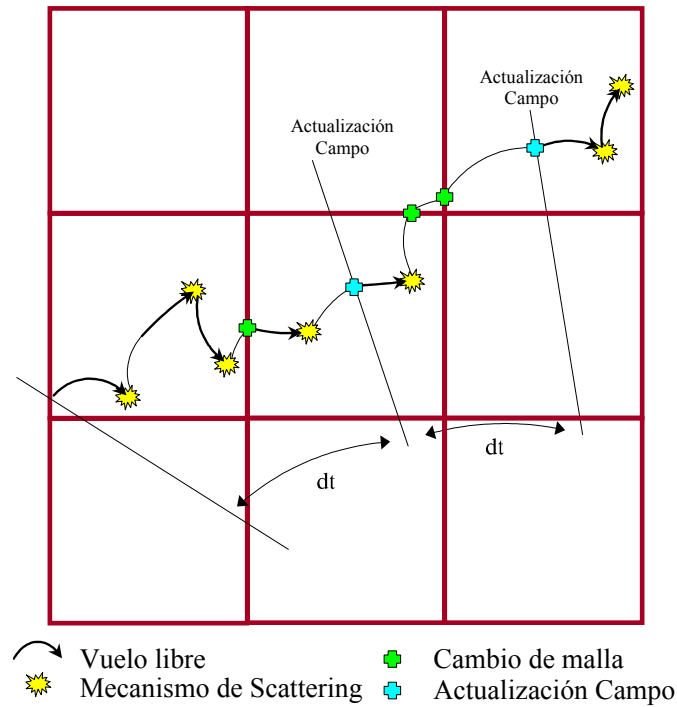


Figura I.13. Dinámica de un electrón en una simulación MC de dispositivos.

La principal desventaja de este método es que requiere la utilización de potentes ordenadores para poder llevar a cabo todas las operaciones descritas en un tiempo de cálculo aceptable. Además, la estructura del programa, como podremos comprobar a continuación, no es muy compatible con una paralelización del código que podría suponer un ahorro de tiempo considerable.

I.4.1. Esquema de la simulación

Como podemos ver en la Figura I.14, empezamos la simulación con la definición del dispositivo, estableciendo las dimensiones geométricas globales y las del mallado espacial. Indicamos los múltiples parámetros de los materiales involucrados y de la simulación propiamente dicha, como la temperatura, la duración del paso temporal, el número N de iteraciones, el dopaje local que queremos asignar, etc. También hay que definir la posición de los contactos, cuya modelización, en lo relativo a la distribución de velocidades de los portadores inyectados y la estadística de inyección de los mismos,⁶¹ resulta esencial en el análisis de dispositivos, sobre todo si el transporte es cuasibalístico.

A continuación se establecen las condiciones iniciales de los portadores: posición, energía y vector de onda. La posición se determina de acuerdo con la impurificación de cada zona, de manera que inicialmente tengamos neutralidad de

carga. La energía se obtiene a partir de una distribución térmica que sitúa a los portadores en equilibrio termodinámico con la red. Y las componentes del vector de onda también se determinan aleatoriamente.

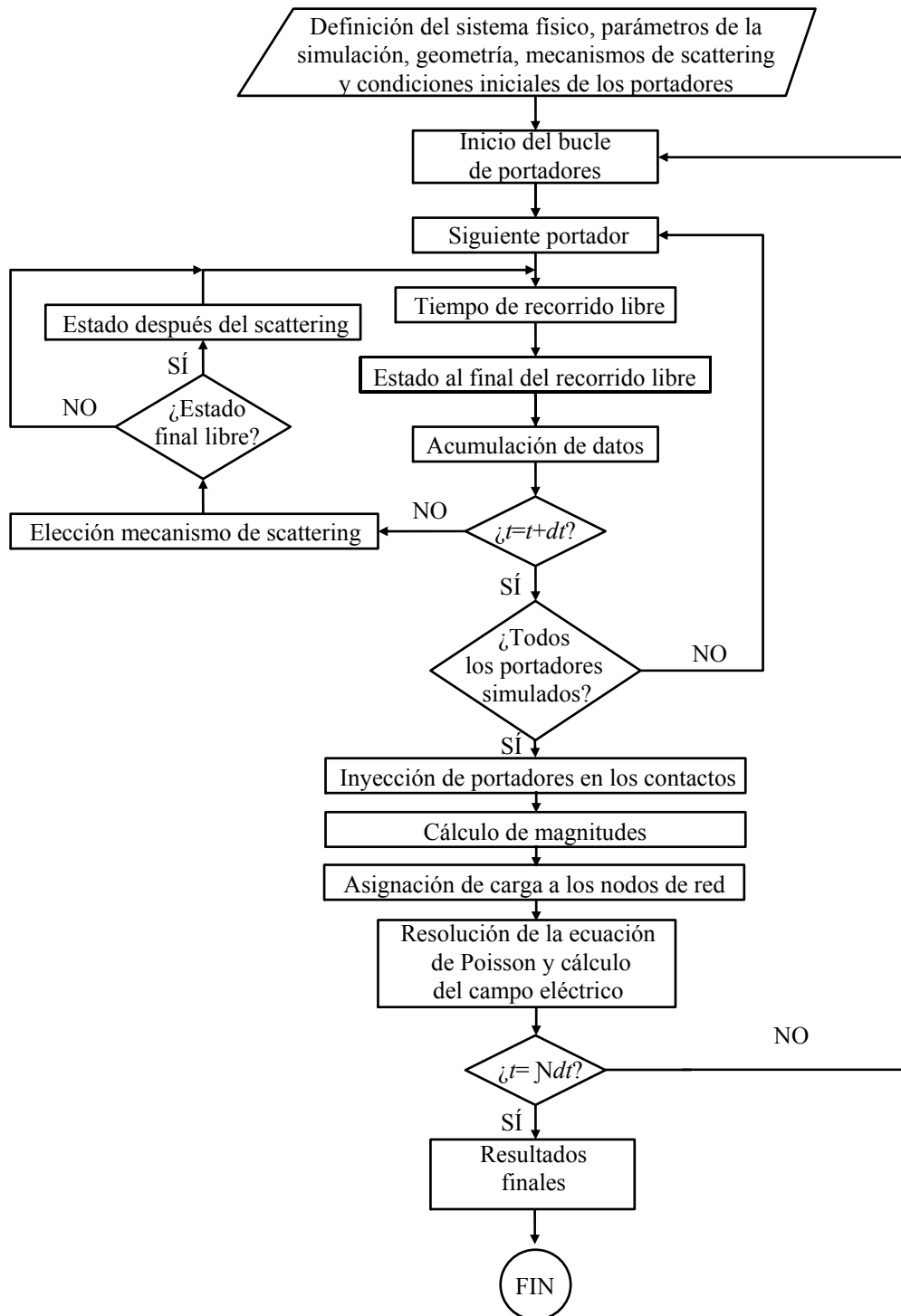


Figura I.14. Diagrama de flujo de la simulación MC de dispositivos.

Definido el dispositivo y establecidas las condiciones iniciales, se trata ahora de simular a la vez un conjunto de partículas durante los N pasos temporales. Al final de cada uno de ellos hay que actualizar el potencial y el campo, teniendo también en cuenta los portadores que hayan salido o se hayan inyectado por los contactos. Se van acumulando los valores instantáneos de múltiples magnitudes y transcurridos los N pasos temporales se obtienen los resultados finales calculando valores medios.

Es importante señalar que, con el fin de economizar el tiempo de computación y hacer viables los cálculos, en este tipo de simulaciones no se simula el movimiento de todos y cada uno de los portadores que habría realmente en el dispositivo, sino que se considera un número de “super-partículas” menor (aunque elevado) con una carga asignada correspondiente al número de portadores que representen.

I.4.2. Resolución de la ecuación de Poisson y condiciones de contorno

Para calcular el campo eléctrico (que despreciando los efectos magnéticos de inducción consideraremos conservativo) y así poder determinar la dinámica de los portadores dentro del semiconductor, se ha de resolver la ecuación de Poisson

$$\vec{\nabla} \cdot [\varepsilon_0 \varepsilon_r(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \varphi(\mathbf{r}, t)] = -\rho(\mathbf{r}, t), \quad (\text{I.10})$$

donde φ es el potencial eléctrico en cada punto, ρ la densidad de carga, ε_0 la constante dieléctrica del vacío y ε_r la permitividad relativa estática del material. Supondremos que ε_r es independiente del tiempo (medio no dispersivo) y del campo aplicado (comportamiento lineal), y constante escalar para cada material (medio isótropo y homogéneo). En todo el trabajo que vamos a realizar se supondrá que esta permitividad no resulta afectada por la dinámica electrónica objeto de nuestro estudio.

Para el caso bidimensional podremos escribir

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = -\frac{\rho(x, y)}{\varepsilon}, \quad (\text{I.11})$$

donde ya denotamos con ε la permitividad dieléctrica, tal que $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$.

I.4.2.a. Diferencias finitas

La técnica numérica usada para resolver esta ecuación I.11 es el método de diferencias finitas (discretización del teorema del valor medio del potencial o, también, caso particular del método de elementos finitos). Este método se basa en la discretización de las ecuaciones en cada nodo de un mallado rectangular, no necesariamente uniforme, en que se divide previamente la geometría del dispositivo. Así se obtiene un mapa de campo eléctrico más preciso, que permite hacer una resolución más minuciosa en aquellos lugares en los que la no homogeneidad del campo sea más pronunciada. El modelo usado se esquematiza en la Figura I.15. El dispositivo se discretiza en un conjunto de $N \times M$ celdas de distintos tamaños, de forma que, para una correcta resolución, se cumpla que las dimensiones de las mallas sean menores que la longitud de Debye (ecuación II.12).³⁰

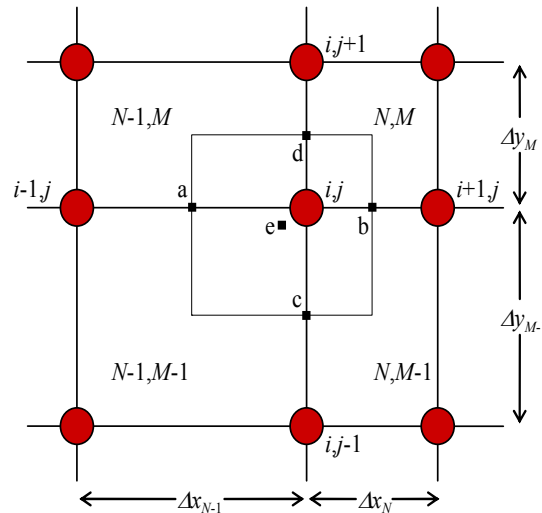


Figura I.15. Esquema para resolución de la ecuación de Poisson.

El proceso de resolución de la ecuación de Poisson tiene dos fases. Durante la primera, llamada de asignación de carga,³³ se calculan las densidades de carga eléctrica que se atribuyen a los nodos del dispositivo, las cuales se utilizarán en la segunda fase, que consiste en la resolución del sistema de ecuaciones resultantes de la discretización de la ecuación I.11. La carga asignada a cada nodo para la resolución de la ecuación de Poisson es la media de las densidades de carga en las cuatro celdas que rodean al nodo durante el paso temporal anterior, ponderadas, lógicamente, por la superficie de cada celda.

Con nuestra técnica se calcula el potencial en los nodos del mallado y el campo eléctrico en cada una de las celdas. La discretización de esta ecuación usando el modelo propuesto anteriormente da como resultado

$$\begin{aligned}
& \varphi_{i,j-1} \frac{2(\Delta x_N + \Delta x_{N-1})}{\Delta y_{M-1}} + \varphi_{i-1,j} \frac{2(\Delta y_M + \Delta y_{M-1})}{\Delta x_{N-1}} \\
& - \varphi_{i,j} 2 \left[(\Delta x_N + \Delta x_{N-1}) \left(\frac{1}{\Delta y_M} + \frac{1}{\Delta y_{M-1}} \right) + (\Delta y_M + \Delta y_{M-1}) \left(\frac{1}{\Delta x_N} + \frac{1}{\Delta x_{N-1}} \right) \right] \\
& + \varphi_{i+1,j} \frac{2(\Delta y_M + \Delta y_{M-1})}{\Delta x_N} + \varphi_{i,j+1} \frac{2(\Delta x_N + \Delta x_{N-1})}{\Delta y_M} = \\
& - \left(\bar{\rho}_{N-1,M-1} \Delta x_{N-1} \Delta y_{M-1} / \varepsilon_{N-1,M-1} + \bar{\rho}_{N,M-1} \Delta x_N \Delta y_{M-1} / \varepsilon_{N,M-1} + \right. \\
& \left. - \left(\bar{\rho}_{N-1,M} \Delta x_{N-1} \Delta y_M / \varepsilon_{N-1,M} + \bar{\rho}_{N,M} \Delta x_N \Delta y_M / \varepsilon_{N,M} \right) \right).
\end{aligned} \tag{I.12}$$

Nótese que los potenciales son magnitudes asociadas a los nodos (subíndices i, j), mientras que las permitividades se corresponden con las celdas (subíndices N, M) de la discretización. Aplicando la ecuación Poisson I.12 a todos los nodos de la red con las condiciones de contorno apropiadas (Dirichlet o Neumann),³⁸ tendremos un conjunto de $(N+1) \times (M+1)$ ecuaciones lineales. Este sistema es penta-diagonal, y para su resolución utilizaremos el método LU,⁶² en el que es necesario calcular la matriz inversa de los coeficientes del sistema. La inversión de la matriz (que es el cálculo más trabajoso) sólo es necesario realizarla al principio de la simulación para, en intervalos sucesivos, aplicar esa matriz inversa a los segundos miembros de la ecuación de Poisson I.12 (que sí se calculan cada dt).

Una vez determinado el potencial en cada nodo, las componentes del campo eléctrico \mathbf{E} en cada celda serán las siguientes

$$\begin{aligned}
E_x^{N,M} &= -\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\varphi_{i+1,j+1} - \varphi_{i,j+1}}{\Delta x_N} + \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{\Delta x_N} \right), \\
E_y^{N,M} &= -\frac{\partial \varphi}{\partial y} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{\Delta y_M} + \frac{\varphi_{i+1,j+1} - \varphi_{i+1,j}}{\Delta y_M} \right),
\end{aligned} \tag{I.13}$$

en donde, como puede verse, se han promediado los valores en el contorno de la celda a la hora de calcular el campo eléctrico.

I.4.2.b. Condiciones de contorno

Debido a que nuestro recinto de simulación es finito, y además existen regiones del dispositivo donde las propiedades eléctricas varían abruptamente al cambiar de material o al pasar a una zona dieléctrica, diremos que nuestro estudio corresponde al caso de un problema “homogéneo a trozos”. En las transiciones tendremos que imponer las condiciones de contorno que correspondan en cada caso. Las condiciones de contorno para la ecuación de Poisson son de dos tipos, a saber, tipo Dirichlet, cuando se especifica el valor del potencial en la frontera, como es el caso de los contactos de un dispositivo, y tipo Neumann, cuando lo que se impone es la densidad de carga superficial σ en el contorno. De ese valor de σ extraemos información sobre la discontinuidad en la componente normal del vector desplazamiento \mathbf{D} (que recordamos satisface $\mathbf{D} = -\varepsilon \vec{\nabla} \varphi$) a través de

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) = \sigma, \quad (\text{I.14})$$

donde \mathbf{n} es el vector normal a la superficie de la frontera entre los medios 1 y 2 como muestra la Figura I.16.

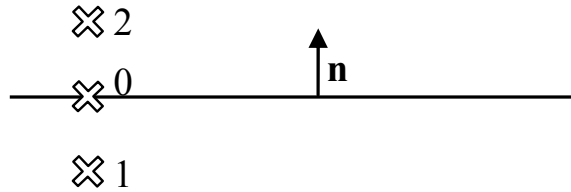


Figura I.16. Esquema para las condiciones de contorno.

Se dice entonces que un problema está bien planteado, tiene solución única, si en todos los puntos del contorno conocemos, según corresponda, el valor del potencial o su gradiente normal, lo que se conoce como representación integral del potencial. Las condiciones tipo Dirichlet se introducen de manera trivial en la matriz de los coeficientes de la ecuación de Poisson. Pero para las condiciones de tipo Neumann, cuya expresión discretizada (y empleando la continuidad del potencial eléctrico) toma la forma siguiente

$$-\varepsilon_2 \frac{\varphi_2 - \varphi_0}{\Delta y_{20}} - \left(-\varepsilon_1 \frac{\varphi_0 - \varphi_1}{\Delta y_{01}} \right) = \sigma, \quad (\text{I.15})$$

se complica apreciablemente al aparecer una casuística compleja para geometrías como esquinas y ángulos. En estos casos se tendrán que asignar los coeficientes de la matriz de Poisson de una manera particular, como se detalla en la Ref. 38.

Pese a no ser el método empleado en este trabajo, es de señalar que también cabe la posibilidad de considerar dicha carga superficial de una manera más general al incluirla como una carga volúmica asociada al nodo correspondiente, expandiéndola en la dirección perpendicular a la superficie cargada. Los detalles de este formalismo se pueden encontrar en la Ref. 39.

Recapitulando los pasos a seguir en relación al cálculo auto-consistente del potencial eléctrico, diremos que los coeficientes de la matriz de Poisson para cada nodo son independientes del tiempo y se calculan al inicio de la simulación. Sin embargo, la resolución propiamente dicha de la ecuación de Poisson se lleva a cabo en cada paso temporal evaluando los segundos miembros y obteniendo finalmente los potenciales asociados a cada nodo de acuerdo con la discretización del problema. Se ha de señalar que la carga superficial, que aparece vía condición de contorno en la resolución del problema, juega en infinidad de ocasiones un papel crucial en los resultados de las simulaciones.

I.4.3. Carga superficial

Cuando nos encontramos con dispositivos de dimensiones significativamente mayores que los recorridos medios de los electrones, los fenómenos de superficie no juegan un papel determinante en el funcionamiento. Sin embargo, al acercarnos a las dimensiones nanométricas los efectos de superficie pueden influir de manera importante en el comportamiento del dispositivo electrónico. Por este motivo, a continuación describiremos brevemente cuáles son las posibilidades de incorporar dichos efectos en un simulador MC como el que acabamos de presentar.

En primer lugar, señalar que la inclusión de los fenómenos superficiales de forma estadística es inviable desde el punto de vista del método MC, ya que los tiempos característicos de dichos mecanismos son muy elevados (del orden de microsegundos) con respecto al tiempo total que se simula (nanosegundos a lo sumo). Por ejemplo, si quisiéramos reproducir el proceso de carga y descarga de una trampa, es decir, la ocupación y desocupación de estados superficiales con energías dentro del *gap* que aparecen inevitablemente como consecuencia de las

discontinuidades, necesitaríamos simular un tiempo del orden de $1 \mu\text{s}$. Esto supondría que, usando un paso temporal, como es habitual, de 1 fs , sería necesaria la friolera de mil millones de iteraciones. Por tanto, parece lógico optar por incorporar los efectos superficiales de forma global a través de un modelo *ad hoc*.

I.4.3.a. Modelo de carga constante

Una manera sencilla de abordar el problema es emplear un valor de la densidad de carga superficial constante que, ajustado mediante comparación con medias experimentales, nos permita dar cuenta del vaciamiento de portadores que acontece por repulsión coulombiana y de los consecuentes efectos en el valor de la corriente. Dicho valor para la carga superficial, estimado en condiciones de equilibrio, será introducido como un dato de entrada, es válido durante toda la simulación, para todos los potenciales aplicados, y no presenta variación espacial.

Conviene explicar en este momento, aunque de manera concisa, cómo se realizan estimaciones del valor de la carga superficial a partir, típicamente, de medidas de caracterización eléctrica DC de distintas geometrías.

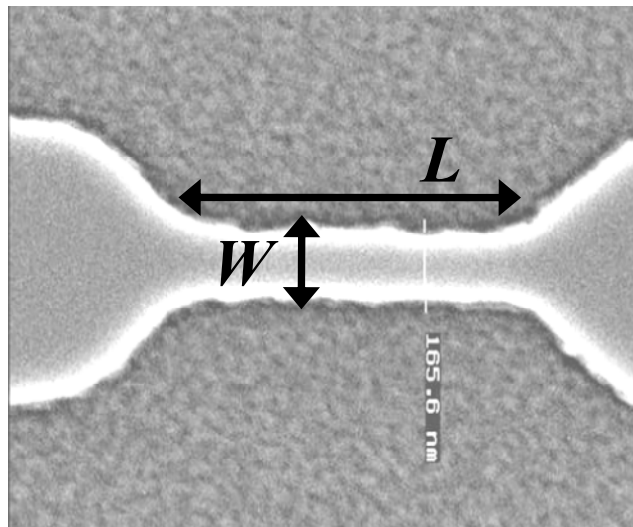


Figura I.17. Imagen SEM (*Scanning Electron Microscope*) de un canal semiconductor de longitud L y anchura W .

Veamos en primer lugar cómo podemos obtener el valor de la resistencia R de un canal con anchura W y longitud L , como el mostrado en la Figura I.17, analizando curvas I - V medidas sobre varios canales diferentes.

La resistencia total será la suma de la resistencia del canal más la resistencia de cada acceso R_C de acuerdo con la expresión

$$R = 2R_C + R_{\square} \frac{L}{W}, \quad (\text{I.16})$$

donde R_{\square} es la resistencia cuadrada de la estructura de capas. Entonces, representando la resistencia total R (inverso de la pendiente en el origen de las características I - V medidas) de varios canales de igual anchura W en función de la longitud L , y extrapolando para longitud nula, se determina el valor de la resistencia de los accesos R_C [Figura I.18(a)], con lo que ya resulta inmediato conocer la resistencia de un canal aislado.

Por otro lado, aunque la anchura física del canal sea W , la carga superficial existente en las interfases da lugar, como decíamos, a lo que se denomina como vaciamiento lateral W_d , de manera que en términos efectivos la anchura se ve reducida en dos veces ese vaciamiento. Por lo tanto, la gráfica de la conductancia $G = 1/(R - 2R_C)$ en función de la anchura W para una longitud dada, permite calcular el valor de W_d como se muestra en la Figura I.18(b).

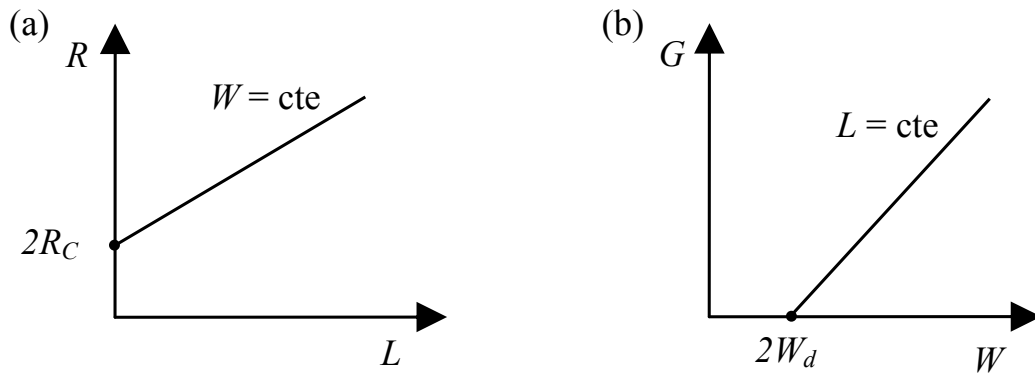


Figura I.18. Método para el cálculo de la resistencia de accesos R_C y del vaciamiento lateral W_d .

Finalmente estimamos el valor de la carga superficial según

$$\sigma = N W_d, \quad (\text{I.17})$$

donde N representa la densidad volúmica de electrones en equilibrio, con lo que ya es posible realizar simulaciones con el método de carga constante, que validaremos

en primera instancia comparando las curvas I - V simuladas con los resultados experimentales.

Este método de carga constante ha demostrado muy buen funcionamiento en cuanto al ajuste de características experimentales de HEMTs basados en diferentes tipos de heteroestructuras, como por ejemplo AlInAs/GaInAs,⁶³ AlGaIn/GaN,⁶⁴⁻⁶⁶ AlInSb/InSb⁶⁷ o InAs/AlSb.⁶⁸ También ha sido tremendamente eficaz a la hora de proporcionar información para entender el funcionamiento de múltiples nanodispositivos balísticos como el rectificador balístico de cuatro terminales,⁶⁹ las uniones de tres terminales en forma de Y o de T,⁷⁰⁻⁷² el transistor balístico por deflexión⁷³ e incluso el SSD,⁷⁴ como veremos en el Capítulo III. Sin embargo, en ciertas ocasiones este modelo tan sencillo no permite reproducir algunos procesos que tienen lugar en los dispositivos. Éste es el caso, por ejemplo, de los SSDs, donde, tras un análisis tan valioso como necesario con el modelo de carga constante, veremos que se requiere un nuevo modelo más realista, y en consecuencia más complejo, ya que el valor de la carga superficial en realidad sí que varía a lo largo de la interfase y también con el potencial aplicado debido a la inhomogeneidad de la concentración de portadores y a lo elevado de las polarizaciones utilizadas, razón por la que se ha bautizado al modelo como de carga auto-consistente.

I.4.3.b. Modelo de carga auto-consistente

Con el fin de intentar reproducir de una manera más correcta la influencia de los estados superficiales se elabora un modelo, ampliamente detallado en la Ref. 38, que tiene en cuenta de forma auto-consistente la presencia o ausencia de portadores en el interior del canal. Es decir, modificamos “artificialmente” el valor de la carga de superficie en función de la cantidad de portadores que haya en las proximidades de la frontera. La idea es que la carga superficial vaya cambiando de manera que se adapte a las condiciones tanto de potencial como de geometría propias de cada estructura. Evidentemente este continuo proceso de actualización supone un considerable incremento en el tiempo de simulación, por lo que a menudo tratamos de emplear inicialmente el modelo de carga constante que, pese a sus limitaciones, nos puede proporcionar información muy útil de cara a las primeras etapas de fabricación de dispositivos y optimización del modelo propiamente dicho.

Veamos algunos detalles de la implementación relativos al procedimiento para modificar la ocupación de los estados superficiales en este modelo de carga auto-consistente. Se ha de calcular la concentración de portadores en las proximidades de las fronteras (N_{front}) como una media sobre un cierto número de iteraciones N_i . A continuación se comprueba si N_{front} está en el intervalo $[N_{\text{bajo}}, N_{\text{alto}}]$ que representa los límites entre los que deseamos adaptar esa concentración en la cercanía de las discontinuidades (ver Figura I.19). Si la concentración (N_{front}) es mayor que el límite superior (N_{alto}), aumentamos la carga superficial en una cantidad $\Delta\sigma$, de forma que su efecto de repulsión produzca un mayor vaciamiento del canal y disminuya, por tanto, la concentración. Por el contrario, si N_{front} es menor que el límite inferior (N_{bajo}), la carga superficial se reduce en la misma cantidad $\Delta\sigma$ para disminuir el vaciamiento inducido. La elección de unos valores razonables para los parámetros implicados no es trivial y requiere de un proceso de optimización para obtener resultados fiables en tiempos de simulación razonables.⁷⁵

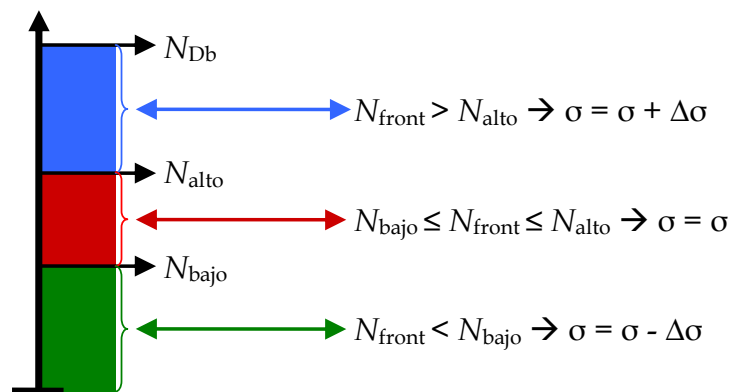


Figura I.19. Esquema para la adaptación de la carga superficial a través de la comparación de la concentración de portadores.

I.5. OBTENCIÓN Y TRATAMIENTO DE RESULTADOS

En esta sección se desarrollan otros aspectos importantes en una simulación MC, como son la determinación de múltiples magnitudes y parámetros físicos, así como el análisis de los resultados obtenidos, focalizando la atención en aquellos aspectos más significativos de nuestro trabajo.

Como veremos en los resultados presentados en los próximos capítulos, las simulaciones nos proporcionan información de magnitudes como la velocidad, energía y concentración de portadores, potencial y campo eléctrico, tasas de los distintos mecanismos de *scattering*, ocupación de valles, etc.; tanto valores instantáneos como medios y sus variaciones espaciales. Debido a que en este trabajo nos interesa particularmente el estudio de posibles oscilaciones en la corriente, detallaremos el proceso seguido para el cálculo de su valor instantáneo, así como su análisis espectral para inferir la frecuencia y potencia espectral de las oscilaciones. Por último, también se explica cómo analizamos, a través de lo que se denomina eficiencia de conversión, la capacidad potencial de un dispositivo para proporcionarnos potencia AC a partir simplemente de polarización DC cuando éste se integre en un circuito real.

I.5.1. Cálculo de magnitudes instantáneas y medias

I.5.1.a. Magnitudes instantáneas y medias

En todos los cálculos y para todas las polarizaciones se simula al principio una cantidad de iteraciones suficiente para alcanzar el régimen estacionario. Posteriormente, se van acumulando los resultados para calcular los valores instantáneos y medios de las diferentes magnitudes. De esta manera, el valor instantáneo de una magnitud A en el instante t y la posición \mathbf{r} , correspondiente a la celda p , en la que hay $N_p(t)$ portadores, será³⁰

$$A_p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N_p(t)} \sum_{i=1}^{N_p(t)} A_i(t), \quad (\text{I.18})$$

donde $A_i(t)$ es el valor de A para la partícula i en el instante t . Si se desea obtener el valor medio temporal de A en la posición \mathbf{r} , $A_p(\mathbf{r})$, no hay más que realizar una

media de los valores instantáneos, calculados del modo anteriormente descrito, a lo largo del tiempo de simulación.

I.5.1.b. Corriente instantánea

El cálculo de la corriente instantánea es uno de los puntos clave en el análisis de las características estáticas, dinámicas y del ruido de un dispositivo electrónico. La manera más intuitiva y sencilla de calcularla sería contar las partículas que salen/entran del dispositivo a través de un contacto por unidad de tiempo. El principal problema de este método es que requiere muchas iteraciones para ser fiable y además no permite calcular de forma precisa la corriente en cada instante de tiempo y registrar así sus posibles fluctuaciones temporales. Por lo tanto, la utilización de un método más exacto permitirá un mejor análisis de las características dinámicas y del ruido.

El método del que hablamos se fundamenta en el teorema de Ramo-Shockley,^{76,77} desarrollado originariamente para el cálculo de corrientes instantáneas inducidas en conductores vecinos como consecuencia de la dinámica electrónica en tubos de vacío. Este teorema ha sido sucesivamente extendido hasta el caso más general, demostrando su validez cuando existen también cargas espaciales fijas,⁷⁸ en casos con medios dieléctricos inhomogéneos,⁷⁹ con electrodos con potencial variable,⁸⁰ e incluyendo la presencia de mecanismos con dependencia temporal extrema, procesos Auger, fotoexcitación, recombinación Shockley-Read-Hall, etc.^{81,82}

Se trata de un procedimiento muy potente para calcular la contribución a la corriente en un determinado electrodo procedente de todos los electrones que se mueven dentro del dispositivo. De esta forma el movimiento de un portador de carga contribuye a la corriente en terminales aunque no alcance físicamente los contactos y el valor de la corriente así calculada es mucho más exacto y con mayor significación estadística. Cuando los potenciales de los electrodos son fijos, el cambio de posición del electrón produce una variación en la carga de los contactos (las líneas de fuerza del campo cambian y por ello la densidad de carga en los terminales debe adaptarse) que ha de verse reflejada en una corriente a través del dispositivo. Así, la contribución a la corriente es gradual, aunque, evidentemente, cuando el electrón

abandone el dispositivo la contribución total será la misma que si lo hubiésemos contado sólo en el momento de la salida.

Si tenemos un sistema de geometría arbitraria con M electrodos a potenciales fijos y N partículas libres desplazándose en su interior (Figura I.20), basándonos en el principio de superposición, podemos calcular en cada instante t la carga inducida en el electrodo j como un sumatorio de la carga de cada partícula, q_k , ponderada por un factor geométrico adimensional, $V_j^*(\mathbf{r}_k)$, que corresponde al potencial en la posición de la partícula k , \mathbf{r}_k , cuando el electrodo j se mantiene a potencial unidad mientras el resto se conecta a tierra y eliminamos toda carga, fija y móvil, del sistema.^{77,83} Es decir

$$Q_j = -\sum_{k=1}^N q_k V_j^*(\mathbf{r}_k) . \quad (\text{I.19})$$

Entonces, para obtener la correspondiente corriente recogida en el electrodo j no habrá más que hacer la derivada temporal de esa carga, llegándose a la expresión siguiente en la aproximación cuasiestática

$$i_j(t) = -\sum_{k=1}^N q_k \mathbf{v}_k \cdot \vec{\nabla} V_j^*(\mathbf{r}_k) , \quad (\text{I.20})$$

donde \mathbf{v}_k es la velocidad de la partícula k .

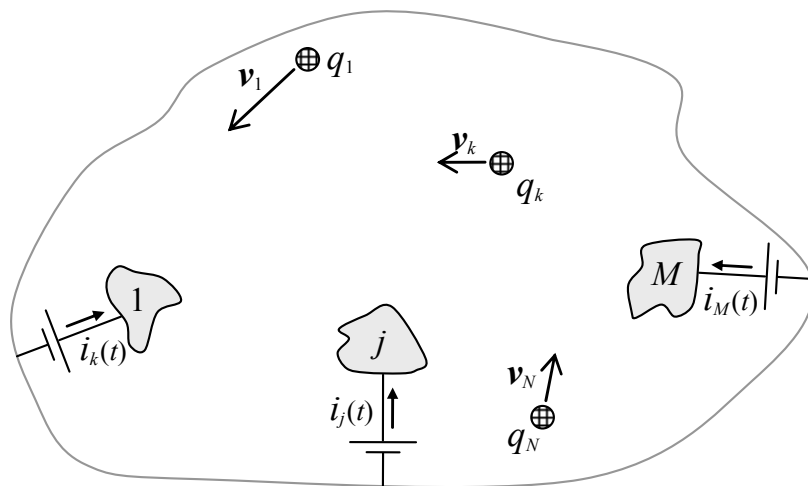


Figura I.20. Esquema de un dispositivo con M electrodos y N partículas moviéndose en el interior.

Por otra parte, si los potenciales de los contactos varían en el tiempo, se inducirán cargas en los electrodos y tendremos, añadida a la $i_j(t)$ anteriormente indicada, una corriente de desplazamiento dada por

$$i_{Dj}(t) = \sum_{p=1}^M C_{jp} \frac{\Delta V_p}{\Delta t}, \quad (\text{I.21})$$

donde C_{jp} es la capacidad entre los contactos j y p , e ΔV_p es el incremento de potencial en el electrodo p .

I.5.2. Análisis espectral del ruido en corriente

A continuación exponemos de manera breve un resumen de los conceptos más importantes del análisis espectral de señales continuas o discretas (entendiendo por señal una variable física que evoluciona en el tiempo), ya que se emplea en este trabajo a la hora de estudiar las oscilaciones en la corriente.

Las series de Fourier constituyen la herramienta matemática básica del análisis espectral de Fourier empleado para estudiar funciones periódicas a través de la descomposición de dicha función como combinación de senos y cosenos. El nombre se debe al matemático francés Jean Baptiste Joseph Fourier, que desarrolló la teoría cuando estudiaba la ecuación del calor. Fue el primero que estudió tales series sistemáticamente y publicó sus resultados iniciales en 1807 y 1811.

Cuando la función a estudiar no es periódica (decimos que tiene un periodo infinito), se emplea la transformada de Fourier. Es una aplicación que hace corresponder a una función continua $f(x)$ de la variable real x , típicamente el tiempo, otra función $F(u)$ definida de la manera siguiente

$$F(u) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-j2\pi ux) dx. \quad (\text{I.22})$$

La variable u que aparece en la transformada de Fourier se llama habitualmente variable de frecuencia. De este modo, en el análisis de señales, la transformada de Fourier es una relación entre el dominio del tiempo y el de la frecuencia. La transformada de Fourier es en general compleja, y es el cuadrado de su módulo, denominado habitualmente espectro de potencia o densidad espectral de

$f(x)$, la magnitud que nos interesará especialmente en el análisis espectral de las oscilaciones de corriente.

Imaginemos ahora que, como ocurre en nuestro caso con la corriente eléctrica en el dispositivo, la función $f(x)$ se ha discretizado en una sucesión de N muestras separadas por Δx , empezando con x_0 . La transformada discreta de Fourier (DFT) toma la siguiente forma

$$F(n\Delta u) = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} f(x_0 + m\Delta x) \exp(-j2\pi n m/N), \quad (\text{I.23})$$

para $n = 0, 1, 2, \dots, N-1$.

La resolución de la transformada, Δu , viene determinada por la longitud de la serie de $f(x)$, ya que Δu e Δx están relacionados por la expresión

$$\Delta u = \frac{1}{N\Delta x}. \quad (\text{I.24})$$

El número etapas de cálculo que se necesitan para obtener la transformada discreta de Fourier es del orden de N^2 . Pero una descomposición apropiada, procedimiento denominado transformada rápida de Fourier (FFT, *Fast Fourier Transform*), puede hacer que el número de multiplicaciones y sumas complejas sea proporcional a $N \log_2 N$. Esa reducción de operaciones supone un considerable ahorro de tiempo de cálculo, sobre todo cuando N es un número elevado. La Figura I.21 muestra una comparación entre el número de etapas de cálculo de la FFT y la DFT.

En el procesamiento de una señal en el dominio del tiempo por medio de DFT o FFT, el teorema de Shannon⁸⁴ requiere que la tasa de muestreo sea $f_s \geq 2W$ muestras por segundo, donde W es el ancho de banda en frecuencia de la señal. Si tenemos una secuencia de T segundos con N muestras, la tasa de muestreo es $f_s = N/T$. Además, recuérdese que el espaciado entre muestras de frecuencia es $\Delta f = f_s/N = 1/T$, lo que se conoce como resolución en frecuencia.

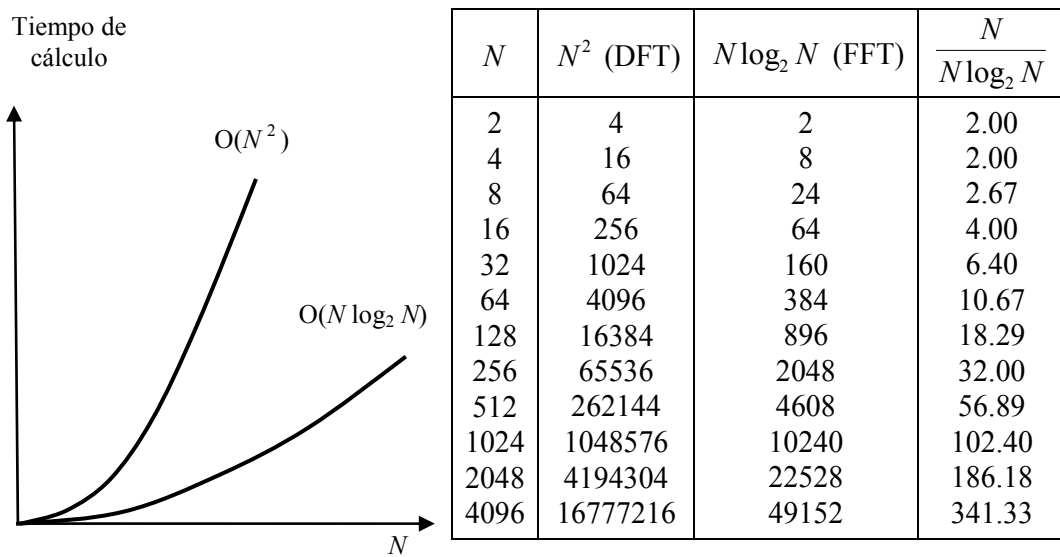


Figura I.21. Gráfica y tabla para mostrar la mejora de la FFT frente a la DFT como consecuencia de la reducción en el número de etapas de cálculo necesarias.

En nuestro caso particular, vamos a emplear la FFT para obtener la densidad espectral del ruido en corriente, puesto que lo que nos interesan son sus fluctuaciones. Existen varios algoritmos para implementar la FFT. Nosotros emplearemos el que aparece en la Ref. 62, denominado método de doblados sucesivos, que exige que el número de puntos (muestras) sea una potencia entera de 2 y que nos proporciona los resultados en tiempos de cálculo verdaderamente pequeños.

Típicamente el número de datos que empleamos es $N = 2^{19} = 524288$ de un total de 600.000 iteraciones simuladas, correspondientes a 300 ps con un paso temporal de 0.5 fs. De esta manera, la resolución en frecuencia que obtenemos es muy precisa, $\Delta f \approx 3.8$ GHz.

Es muy importante insistir en que para que los distintos espectros de potencia correspondientes a diversas situaciones de simulación puedan compararse entre sí, es necesario tomar siempre el mismo número de puntos con idéntico paso temporal, y restar a cada uno el valor medio del conjunto (nivel de DC) para no analizar más que las fluctuaciones de la corriente.

I.5.3. Eficiencia de conversión

Dentro del estudio dinámico de las oscilaciones, una de las figuras de mérito más importantes es la eficiencia con la que un dispositivo puede generar potencia. La capacidad de conversión de una señal de continua (DC) en alterna (AC) nos da una idea de las posibilidades del dispositivo actuando como fuente de señal.

Para analizar esta propiedad con nuestro simulador MC empleamos un método utilizado habitualmente⁸⁵⁻⁸⁷ que pasamos a explicar brevemente. En esta ocasión se aplica una señal monocromática de frecuencia f y amplitud V_{AC} superpuesta a un potencial de continua V_{DC} , es decir

$$V(t) = V_{DC} + V_{AC} \sin(2\pi f t). \quad (I.25)$$

Estas condiciones de operación son equivalentes a las que tendría nuestro dispositivo en un circuito sintonizado (elementos R , L y C), pero en lugar de ser esa red la que realce las oscilaciones a la frecuencia de resonancia $f = (2\pi\sqrt{LC})^{-1}$, lo imponemos nosotros directamente en la simulación.⁸⁵ Se evalúa la potencia DC disipada, P_{DC} , y la media temporal de la potencia AC, P_{AC} , según

$$P_{DC} = \overline{I(t)} V_{DC}, \quad (I.26)$$

$$P_{AC} = \frac{V_{AC}}{T} \int_0^T I(t) \sin(2\pi f t) dt,$$

donde $I(t)$ es la intensidad de corriente e $\overline{I(t)}$ su valor medio durante el tiempo T de simulación; y el cociente entre ambas cantidades, con un signo menos, es la denominada eficiencia de conversión

$$\eta = -\frac{P_{AC}}{P_{DC}}. \quad (I.27)$$

Por lo tanto, valores negativos de η indican un comportamiento resistivo del diodo, mientras que valores positivos significan generación AC a partir de DC.

Puesto que en el caso por ejemplo de los SSDs el objetivo último es conseguir dispositivos emisores de alta frecuencia, con potencias elevadas y a temperatura ambiente, nos valdremos de la simulación para optimizar el diseño de los mismos. Para ello, se analiza la evolución del valor de η variando múltiples parámetros,

principalmente geométricos, la temperatura, la polarización DC, la amplitud V_{AC} de la señal armónica y por supuesto haciendo un barrido en frecuencia.

Cuando se presenten los resultados veremos curvas con varias bandas de emisión a frecuencias dentro del rango de los THz, aunque con valores de eficiencia no muy altos. No obstante, es necesario señalar que por tratarse de GaN podremos aplicar polarizaciones de continua muy elevadas (potencia DC alta) y obtener potencia AC significativa pese a tener valores bajos de la eficiencia de conversión.

CAPÍTULO II

OSCILACIONES DE CORRIENTE INDUCIDAS POR EMISIÓN DE FONONES ÓPTICOS EN GaN

Al aplicar una diferencia de potencial entre terminales de un diodo, pueden aparecer ciertas inestabilidades en la corriente relacionadas con efectos de plasma originados por la emisión de fonones ópticos polares (inestabilidad de Ryzhiĭ),^{21,22} por transferencia de portadores a valles superiores,⁸⁸ etc. El fenómeno que nos concierne en este capítulo es la inestabilidad de corriente que conlleva el llamado efecto Ryzhiĭ,^{21,22} cuya explicación física reside en que los electrones que cruzan la estructura n^+nn^+ sufran una o varias paradas en la zona activa debido a emisiones de fonones ópticos polares. Utilizaremos el acrónimo OPTTR (*Optical Phonon emission assisted Transit-Time Resonance*) para referirnos a este fenómeno físico.

En este capítulo comenzaremos haciendo una breve revisión de los principios básicos de física de plasma en sólidos. Se explicarán los conceptos de oscilaciones y frecuencia de plasma y longitud de Debye, que resultan necesarios para comprender posteriormente el fenómeno de la OPTTR y las condiciones de oscilación. A continuación se presentan secuencias temporales de la velocidad instantánea obtenidas con el simulador Monte Carlo (MC) de partícula única con el objetivo de ilustrar la explicación del fenómeno y sobre todo la influencia de la temperatura de operación. Seguidamente mostramos algunos de los resultados ya publicados por otros autores, para pasar finalmente a presentar nuestro estudio de la OPTTR en diodos de nitruro de galio (GaN) simulados con el MC de dispositivos. Ha de señalarse que varios de los resultados obtenidos se han publicado en la Ref. 89.

II.1. FÍSICA DE PLASMA ELECTRÓNICO EN SÓLIDOS

Se define plasma como un sistema eléctricamente neutro formado por partículas cargadas libres. Ya que la mayor parte de la materia del Universo está ionizada, el estudio del plasma es enormemente importante en cualquier rama de la física. En el análisis de su comportamiento intervienen las ecuaciones del electromagnetismo y las de la mecánica. Dejando de lado la descripción precisa de la dinámica de cada una de las partículas, el problema suele abordarse a través de la aproximación hidrodinámica. Aunque la física de plasmas tiene su origen en los campos de la astrofísica, fusión nuclear, física de altas energías, etc., una buena parte de su desarrollo es aplicable también al plasma electrónico en física del estado sólido. La neutralidad eléctrica local de un plasma electrónico en equilibrio en un sólido se garantiza considerando, además de los electrones libres, los iones positivos en reposo de la propia estructura cristalina.

La principal diferencia de un plasma electrónico en sólidos frente al plasma convencional (formado por electrones e iones positivos libres) es la posibilidad de romper la neutralidad eléctrica local mediante la aplicación de un campo eléctrico de frecuencia nula debido, evidentemente, a que sólo pueden desplazarse los electrones libres. Por el contrario, en un plasma convencional resulta necesario que el campo eléctrico supere cierta frecuencia para que sólo los electrones libres puedan seguir las oscilaciones impuestas por éste, mientras que los iones positivos, debido a su mayor masa, se retrasan respecto del campo e incluso congelan su movimiento.

La idea de un fondo de carga uniforme y un fluido electrónico es válida solamente si consideramos una escala de longitudes grande comparada con la distancia entre partículas, es decir, se trata de un estudio no estadístico de un fenómeno colectivo. Hay otra limitación adicional, la denominada longitud de apantallamiento de Debye, que señala la frontera entre el comportamiento colectivo del fluido electrónico y la dinámica de partículas individuales.⁹⁰

II.1.1. Frecuencia de plasma

El concepto de frecuencia de plasma nació cuando en 1920 Langmuir observó que las ondas de radio de frecuencias de algunos MHz resultaban completamente reflejadas por la ionosfera. De hecho, todo nuestro conocimiento de la densidad de

portadores libres en la ionosfera, y su dependencia espacio-temporal, está basado en el estudio de la reflexión ionosférica de señales de radio. Vamos a estudiar la dinámica del plasma mediante un tratamiento sencillo a fin de precisar el concepto de frecuencia de plasma en un plasma electrónico en el sólido.

Sea un sistema ideal infinitamente grande y localmente neutro formado por un fondo positivo (correspondiente a los iones del sólido) y un gas de electrones libres, todo ello en reposo y con densidad uniforme, que llamaremos plasma frío. Cuando se perturba este sistema desplazando un conjunto de electrones una cierta distancia, quedando una carga positiva neta en su lugar, aparece un campo eléctrico \mathbf{E} como se muestra en la Figura II.1.

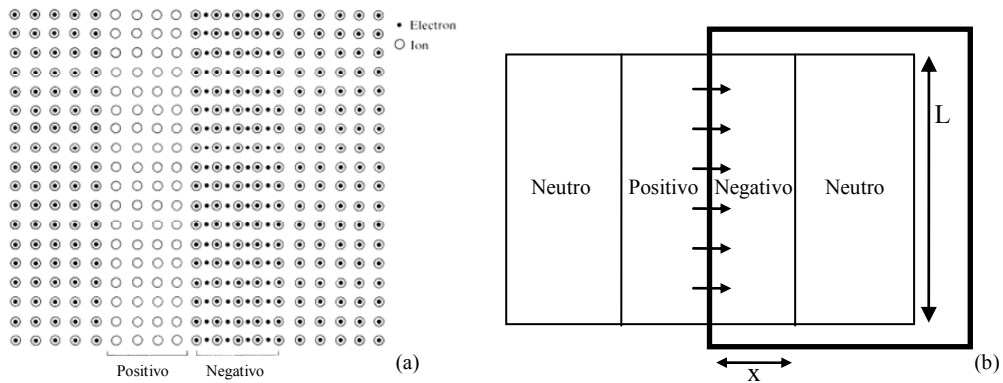


Figura II.1. (a) Ruptura de la neutralidad eléctrica local en el plasma tras desplazar un conjunto de electrones. (b) Recinto de integración para aplicar el teorema de Gauss.

Este campo arrastra a los electrones e intenta recuperar la neutralidad eléctrica local. Así, adquieren una velocidad que tiende a devolverlos a su posición inicial, convirtiéndose en energía cinética la energía electrostática de la perturbación original. Pero los electrones sobrepasan esa posición de energía electrostática nula (energía cinética máxima), de forma que la situación de las acumulaciones de carga positiva y negativa se invierte. Este proceso de oscilación de densidades de carga continuaría indefinidamente si no hubiera términos disipativos. La presencia de mecanismos de *scattering* no elásticos da lugar al amortiguamiento de las oscilaciones de plasma.

Para calcular la frecuencia característica de oscilación f_p escribimos la ecuación del movimiento para un electrón

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -q\mathbf{E}, \tag{II.1}$$

donde x representa la coordenada del electrón respecto de su posición original.

Aplicando el teorema de Gauss en el recinto rectangular como se muestra en la Figura II.1(b), se tiene (por unidad de longitud perpendicular al dibujo)

$$\int_S \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S} = Q/\varepsilon, \quad (\text{II.2})$$

siendo Q la carga encerrada en ese recinto.

De acuerdo con la figura

$$\int_S \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S} = -LE. \quad (\text{II.3})$$

Si denominamos N a la densidad de electrones en equilibrio, se tiene

$$Q = -LxNq. \quad (\text{II.4})$$

Combinando estas ecuaciones se obtiene que el campo eléctrico es

$$E = \frac{Nq}{\varepsilon} x, \quad (\text{II.5})$$

y por lo tanto

$$\ddot{x} = -\frac{Nq^2}{m\varepsilon} x. \quad (\text{II.6})$$

La solución corresponde a una oscilación armónica cuya frecuencia propia es la frecuencia de plasma

$$f_p = \frac{q}{2\pi} \sqrt{\frac{N}{m\varepsilon}}. \quad (\text{II.7})$$

Y sustituyendo la masa m por el producto de m_0 y m^* (masa del electrón libre y masa efectiva del electrón), encontramos

$$f_p = \frac{q}{2\pi} \sqrt{\frac{N}{m^* m_0 \varepsilon_0 \varepsilon_r}}. \quad (\text{II.8})$$

II.1.2. Longitud de Debye

Supongamos ahora que en nuestro sistema ideal de plasma frío anteriormente descrito introducimos una carga puntual positiva Q_0 . Inmediatamente, la interacción coulombiana atraerá a sus proximidades una nube de electrones, de forma que la carga resultará parcialmente apantallada para el resto del plasma. Es decir, fuera de esa nube el campo eléctrico se debilita notablemente. Consideremos ahora la agitación térmica de los electrones que hará que, aunque los de la parte más interna de esa nube no puedan escapar de las proximidades del exceso de carga, los que están más alejados sí puedan hacerlo si su energía térmica excede la energía potencial electrostática asociada a la carga Q_0 apantallada.⁹¹ Por ello, si estos electrones escapan, la carga Q_0 quedaría apantallada más débilmente. Resolvamos el problema a fin de analizar el fenómeno a través de una longitud característica, la longitud de Debye λ_D , que informe de la intensidad de ese apantallamiento y del tamaño representativo de la nube electrónica responsable del mismo.

Recordando la estadística de Boltzmann, la distribución de electrones en función de su energía electrostática $W = -q\varphi$, siendo φ el potencial originado por la carga Q_0 apantallada, es

$$n(\varphi) = Ne^{\frac{q\varphi}{k_B T}}, \quad (\text{II.9})$$

siendo k_B la constante de Boltzmann.

Así, en equilibrio, la densidad de carga neta en la nube que rodea a la carga puntual Q_0 será

$$\rho(\varphi) = q(N - n(W)) = q \left(N - Ne^{\frac{q\varphi}{k_B T}} \right) \approx -N \frac{q^2 \varphi}{k_B T}, \quad (\text{II.10})$$

donde se ha efectuado la aproximación de primer orden para pequeño argumento en la exponencial ($q\varphi \ll k_B T$).

La solución auto-consistente del problema exige que φ y ρ estén también relacionados a través de la ecuación de Poisson, que, excluyendo la singularidad en el origen (posición de la carga puntual Q_0), se escribe

$$\nabla^2 \varphi = \frac{Nq^2}{k_B T \epsilon_0 \epsilon_r} \varphi. \quad (\text{II.11})$$

El factor que multiplica al potencial en el segundo miembro tiene dimensiones de inverso de longitud al cuadrado y nos lleva directamente a definir el radio de apantallamiento de Debye

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{k_B T \epsilon_0 \epsilon_r}{Nq^2}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_B T}{m_0 m^*}} \frac{1}{f_p}. \quad (\text{II.12})$$

Es de señalar la estrecha relación existente entre la longitud de Debye y la frecuencia de plasma que se observa en esa ecuación II.12. Como era de esperar, la longitud de Debye crece con la temperatura, indicándonos que cuanto mayor sea ésta, mayor será también el número de electrones que desde una distancia determinada de Q_0 pueden alejarse de ella, dando así lugar a un apantallamiento más débil, o lo que es lo mismo, un valor mayor de λ_D .

La interpretación precisa de la longitud de Debye se encuentra en la solución de la ecuación de Poisson (ecuación II.11), lo que resulta sencillo en coordenadas esféricas debido a la simetría central del problema

$$\varphi(r) = \frac{Q_0}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{e^{(-r/\lambda_D)}}{r}. \quad (\text{II.13})$$

La longitud de Debye es la distancia a la cual el potencial eléctrico de la carga apantallada cae a $1/e$ del potencial que correspondería a una simple carga puntual Q_0 .

Hay que puntualizar que en el contexto de nuestra aproximación ($q\varphi \ll k_B T$), el radio de la nube de carga que apantalla completamente a Q_0 es siempre infinito, como se ve en la expresión del potencial II.13. Por el contrario, la longitud de Debye

es siempre una medida finita que denota la rapidez con que cae el potencial alrededor de Q_0 , es decir la efectividad del apantallamiento electrostático.

Para terminar este sub-apartado hay que indicar que la validez del razonamiento que se acaba de exponer exige, además de que $q\phi \ll k_B T$, la presencia de una gran cantidad de electrones en la esfera de Debye N_{Debye} , que permita así considerar el problema con simetría central. Esta cantidad se escribe

$$N_{Debye} = \frac{4\pi}{3} \lambda_D^3 N = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\lambda_D}{r_0} \right)^3. \quad (\text{II.14})$$

Es decir, la longitud de apantallamiento de Debye λ_D debe ser mucho mayor que la distancia media entre las partículas del plasma r_0 .

II.1.3. Oscilaciones de plasma

Los conceptos de frecuencia de plasma y longitud de Debye tan estrechamente ligados que acabamos de introducir, resultan esenciales para entender las oscilaciones en plasmas. La idea de oscilación del plasma corresponde a un comportamiento colectivo y coherente de una distribución de electrones en respuesta a la presencia de una modulación espacial de la densidad de carga, o lo que es lo mismo, a la existencia de un campo eléctrico no uniforme, que diremos ondulatorio, asociado a esas fuentes (ver Figura II.1). En el caso de la OPTTR esa modulación espacial es debida a la secuencia de vuelos libres y paradas de los electrones como resultado de la emisión de fonones ópticos polares. Cuando los electrones en una posición determinada del plasma se mueven en respuesta a ese campo eléctrico ondulatorio, caracterizado por una periodicidad espacial λ , la densidad de carga local necesariamente varía, dando lugar a una nueva contribución al propio campo eléctrico. Si los electrones han de participar en ese movimiento ondulatorio, deben oscilar coherentemente en respuesta al campo eléctrico local. La garantía de esta coherencia puede razonarse desde dos puntos de vista diferentes, en términos de la longitud de onda λ del campo ondulatorio y en función de argumentos de apantallamiento o longitud de Debye λ_D .

La contribución al campo eléctrico asociada al movimiento de esa agrupación de electrones está necesariamente gobernada en el tiempo por la frecuencia de

plasma, y hace falta que transcurra un tiempo del orden de $(2\pi f_p)^{-1}$ para que la nueva contribución al campo eléctrico varíe significativamente. Si el electrón tiene una velocidad térmica promedio $v_T = \sqrt{k_B T / m_0 m^*}$, durante ese tiempo recorrerá una distancia $v_T / 2\pi f_p$, que es exactamente la longitud de Debye λ_D . Si λ_D es mucho mayor que la longitud de onda λ del campo eléctrico ondulatorio, el electrón en su recorrido experimenta un valor promedio prácticamente nulo del campo eléctrico (las fuerzas sobre el electrón se cancelan por corresponder al promedio durante muchos periodos) y la oscilación coherente se hace imposible. Solamente si

$$\lambda_D \ll \lambda \tag{II.15}$$

la dinámica del electrón estará determinada por el campo eléctrico local, con la fase particular que corresponda a esa posición, haciendo posible la oscilación coherente a frecuencias próximas a f_p .

Desde otro punto de vista podemos decir que para que la oscilación coherente tenga lugar, cada agrupación de electrones debe ser afectada solamente por la contribución del campo eléctrico ondulatorio en esa región. Ello requiere que el campo eléctrico de otras fuentes distantes esté bien apantallado. Es decir, de nuevo volvemos a la condición de la ecuación II.15.⁹¹

Así, la relación que liga las tres longitudes relevantes en nuestro estudio de oscilaciones de plasma se escribe como

$$r_0 \ll \lambda_D \ll \lambda. \tag{II.16}$$

II.2. BASES TEÓRICAS DE LA OPTTR

Pasemos ahora a estudiar el fenómeno de la OPTTR, que puede dar lugar a oscilaciones de corriente en un dispositivo semiconductor en el rango de sub-THz. Estas oscilaciones son consecuencia de la realimentación de la oscilación de plasma mediante un campo ondulatorio asociado a la periodicidad de una modulación de carga por emisión de fonones. Pese a parecer en principio un fenómeno sencillo, hemos de señalar que no existe una bibliografía extensa sobre el tema y mucho menos pruebas experimentales suficientes. En este apartado trataremos de presentar de la manera más clara posible las bases teóricas de este fenómeno, así como las condiciones necesarias para que se muestre de manera apreciable en forma de oscilaciones de corriente.

II.2.1. Explicación del fenómeno

Nuestro objeto de estudio es la dinámica de los electrones en un material semiconductor, analizando el movimiento de cada portador dentro del material cuando se aplica un campo eléctrico. Como ya dijimos, debido a la presencia de la red cristalina, el electrón se comporta con una masa efectiva asociada a la estructura de bandas de energía. Además, su movimiento se ve afectado por los mecanismos de *scattering*, de forma que la trayectoria del portador es una serie de vuelos libres interrumpidos por esos procesos de *scattering*.

Tal y como vimos en el capítulo anterior, hay varios mecanismos de *scattering* cuyas probabilidades dependen fuertemente de la temperatura. Para el estudio del fenómeno abordado, que tiene lugar sólo a baja temperatura, nos interesa casi exclusivamente el *scattering* por intercambio de fonones ópticos polares entre los electrones y la red (emisión y absorción). Otros procesos de *scattering* no afectan apreciablemente al análisis del sistema, ya sea por su carácter elástico y anisótropo o por ser despreciable su probabilidad a bajas temperaturas.

Cuando la temperatura del sistema sea lo suficientemente baja como para que el mecanismo de absorción de fonones ópticos polares de energía $\hbar\omega_0$ por parte de portadores libres sea prácticamente nulo, esto es

$$T \ll \hbar\omega_0 / k_B, \quad (\text{II.17})$$

y sea, por tanto, la emisión de fonones ópticos el mecanismo de *scattering* más probable, entonces encontraremos un movimiento de los portadores con carácter cíclico en el espacio de momentos.

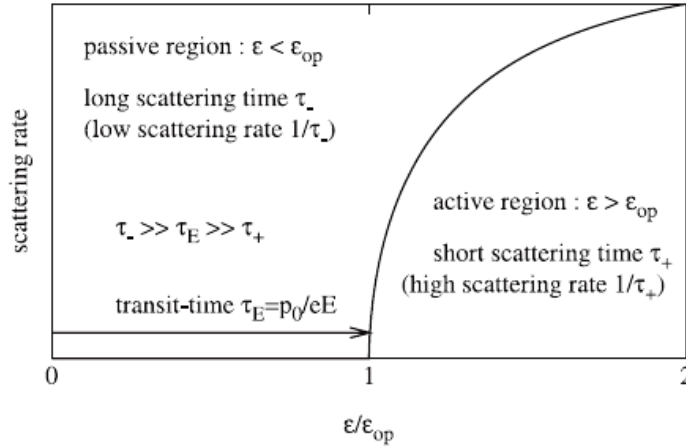


Figura II.2. Representación esquemática del espacio de momentos (energía) subdividido en dos regiones, pasiva y activa, con respecto a la energía del fonón óptico. Figura tomada de la Ref. 23.

Como podemos ver en la Figura II.2, el espacio de momentos está dividido en dos regiones separadas por la frontera que indica la aparición del mecanismo de emisión de fonones ópticos,²³ es decir, cuando los portadores superan la energía $\hbar\omega_0$. El radio de esta superficie esférica de separación entre ambas regiones en el espacio de momentos es

$$p_0 = \sqrt{2m_0 m^* \hbar\omega_0}. \quad (\text{II.18})$$

Cada portador empieza su movimiento en el espacio de momentos en la llamada región pasiva o de baja energía, $\varepsilon \ll \hbar\omega_0$, con $p \approx 0$. En esta región, aunque no hay emisión de fonones, los portadores podrían sufrir otros mecanismos de *scattering* (fonones acústicos, piezoelectrico o impurezas) a los que asignaremos una constante de tiempo característica τ_- . A temperaturas suficientemente bajas este tiempo será muy grande, puesto que en esas condiciones la probabilidad de que se dé alguno de esos mecanismos es muy pequeña. Los portadores son acelerados por el campo eléctrico aplicado, de manera que se moverán hacia la denominada zona

activa, donde ya sí puede tener lugar la emisión de fonones ópticos, que se caracteriza por una constante de tiempo

$$\tau_+ \ll \tau_- . \quad (\text{II.19})$$

El tiempo que, desde el origen del espacio de momentos, tardaría un electrón en alcanzar la energía necesaria para emitir un fonón gracias a la aceleración del campo eléctrico se denomina tiempo de tránsito, y viene dado por

$$\tau_E = p_0 / eE . \quad (\text{II.20})$$

Por lo tanto, para que el portador pueda alcanzar la frontera en su movimiento balístico ha de cumplirse

$$\tau_E \ll \tau_- . \quad (\text{II.21})$$

Ahora bien, la condición que muestra esta ecuación II.21 es necesaria para alcanzar la frontera pero no garantiza que se consiga ese movimiento cíclico al que nos referíamos anteriormente. Para ello ha de cumplirse además que la penetración en la región activa sea pequeña, y así el electrón emita rápidamente un fonón óptico, se frene prácticamente por completo y regrese de esta forma al centro de la zona pasiva, donde nuevamente será acelerado por el campo eléctrico para repetir el ciclo. Esta nueva condición, en términos de tiempos característicos, se escribe del siguiente modo

$$\tau_+ \ll \tau_E , \quad (\text{II.22})$$

y desde el punto de vista energético sería

$$\delta\varepsilon \ll \hbar\omega_0 , \quad (\text{II.23})$$

donde $\delta\varepsilon$ es la energía de penetración, es decir, el exceso de energía del portador respecto de la energía mínima necesaria para emitir un fonón óptico.

De este modo, cuando se cumplan simultáneamente las condiciones de las ecuaciones II.21 y II.22 sobre los tiempos característicos, tendremos el movimiento cíclico. El portador, que parte del centro de la zona pasiva del espacio de momentos, se mueve durante un tiempo τ_E , acelerado por el campo eléctrico, hacia la zona

activa, donde penetra mínimamente hasta emitir un fonón óptico. Este mecanismo reduce su velocidad hasta casi frenarlo por completo, llevándolo de nuevo al centro de la zona pasiva para empezar el siguiente ciclo.

En la Figura II.3 se representa de manera esquemática el proceso de emisión de fonones ópticos para un electrón a lo largo del tiempo.

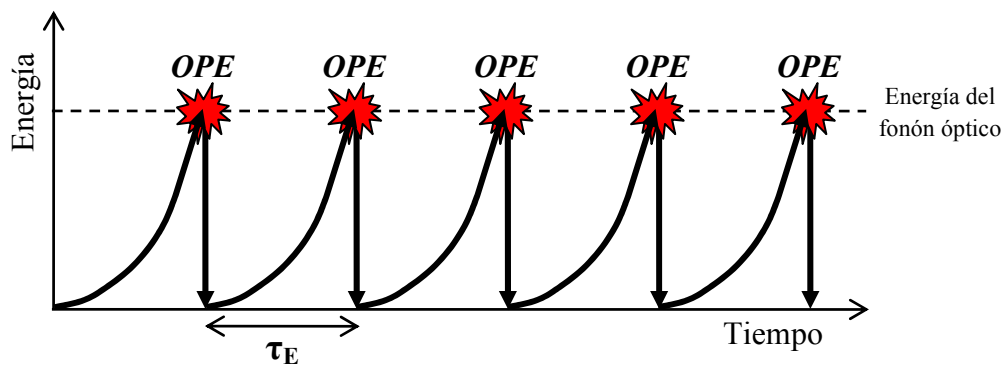


Figura II.3. Esquema del proceso de emisión de fonones ópticos (*Optical Phonon Emission*, OPE) para un electrón en el tiempo.

Este movimiento cíclico en el espacio de momentos se corresponde, en el espacio real, con la concatenación de vuelos libres del portador, acelerado en la dirección del campo eléctrico, y las consecuentes paradas al emitir un fonón óptico.

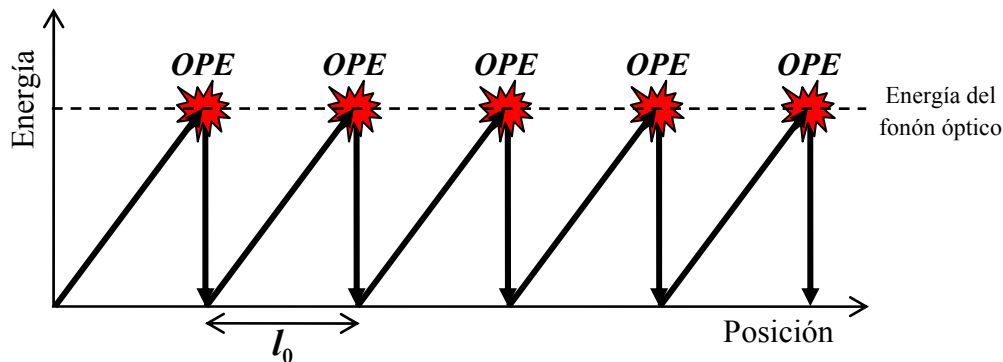


Figura II.4. Esquema de la emisión de fonones ópticos (*Optical Phonon Emission*, OPE) por parte de un electrón a lo largo de su recorrido.

Como se observa en la Figura II.4, el periodo espacial de este movimiento será, por tanto, la distancia que ha de recorrer un electrón acelerado por un campo eléctrico de intensidad E hasta alcanzar de forma balística la energía de emisión del fonón óptico. Es decir

$$l_0 = \frac{\hbar\omega_0}{eE}. \quad (\text{II.24})$$

Puesto que nuestro objetivo es conseguir oscilaciones de corriente en un dispositivo electrónico, tenemos que lograr que este fenómeno se dé coherentemente para un amplio conjunto de electrones. Por ello, es importante recalcar que pese a que las condiciones de las ecuaciones II.21 y II.22 aseguran la OPTTR en el espacio de momentos, éstas no garantizan que en el espacio real el efecto resultante tenga una periodicidad espacial, con periodo l_0 , de las emisiones de fonones ópticos por parte de todos los portadores. Para ello es necesario que la dispersión en velocidad de los portadores en el momento de la inyección en la región activa sea muy pequeña,

$$\delta v \ll \frac{P_0}{m_0 m^*}, \quad (\text{II.25})$$

pues sólo de esta forma resultará posible la emisión de fonones (y la consecuente formación de acumulaciones de carga debido a la reducción de velocidad) en ciertas zonas localizadas de la muestra a lo largo de su longitud por parte de todos los portadores.

La condición II.25 se consigue fácilmente mediante la utilización, por ejemplo, de uniones n^+n , que crean una barrera de potencial abrupta. De hecho, nuestro estudio se enfocará hacia estructuras (o diodos) n^+nn^+ . En la Figura II.5 se muestra un esquema de este tipo de estructura, indicando la impurificación de cada zona y el perfil habitual de potencial y campo eléctrico en equilibrio.

De acuerdo con la bibliografía ya citada,²³ cuando se tiene la estructura longitudinal de acumulaciones de carga antes mencionada hablamos de perturbaciones eléctricas longitudinales.^{21,22} Esto equivale a decir que la presencia de esa modulación de densidad de carga será la fuente de un campo eléctrico ondulatorio y por lo tanto la razón última para que tengan lugar las oscilaciones de plasma electrónico, como se explicó en el apartado anterior. Esta situación no puede darse si no se satisface la condición de baja dispersión de velocidad, aunque cabe aún la posibilidad de inestabilidades de plasma asociadas a perturbaciones eléctricas transversales que no estudiaremos en el presente trabajo.⁹²⁻⁹⁵

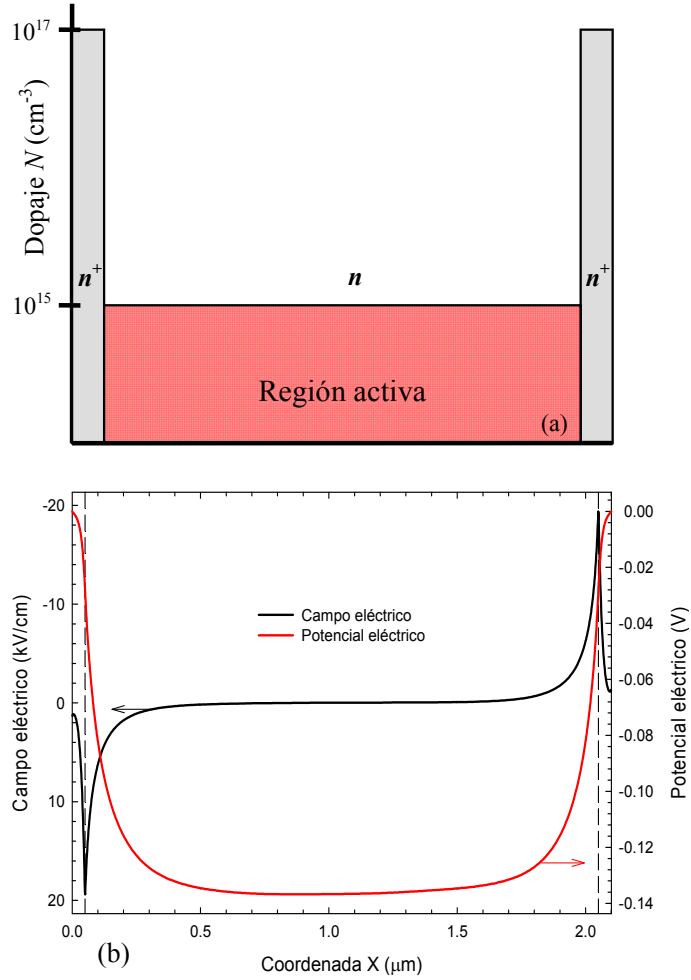


Figura II.5. (a) Esquema de una estructura n^+nn^+ indicando el dopaje en cada zona. (b) Perfil de campo y potencial eléctrico en equilibrio para temperatura ambiente.

A continuación vamos a entrar más en detalle en lo que ocurre en una estructura n^+nn^+ cuando aumenta el potencial aplicado (siendo constante en el tiempo) bajo las tres condiciones (II.21, II.22 y II.25) que nos aseguran la OPTTR con periodicidad en el espacio real.

Empecemos por el caso más sencillo, un potencial aplicado U que conlleve la emisión de un solo fonón por parte de cada portador. Es decir

$$u_0 < U < 2u_0, \quad (\text{II.26})$$

siendo $u_0 = \hbar\omega_0/e$. Los electrones inyectados en el cátodo, que suelen denominarse *cold electrons* porque tienen una energía media muy baja, son acelerados por el campo eléctrico hasta obtener la energía $\hbar\omega_0$. Entonces se paran al emitir un fonón óptico y sufren una segunda y última aceleración en la dirección del campo eléctrico.

La zona de parada de los portadores al emitir el fonón no tiene porqué localizarse en la mitad exacta de la zona activa del diodo (región n), sino que suele dividir a ésta en dos regiones de longitud diferente, siendo, obviamente, la longitud de la zona de la primera aceleración, que coincidirá con l_0 , mayor (o igual) que la de la segunda.

Como consecuencia de ese frenado de los portadores al emitir el fonón, la densidad en esa zona crece, dando lugar a una acumulación de carga. Si ésta es suficientemente densa, la interacción coulombiana dificulta la llegada de nuevos portadores, de manera que la inyección se ralentiza fuertemente hasta que la nube de carga es drenada por el contacto de salida. Cuando esto ocurre, la corriente crece y el proceso se repite, dando lugar a oscilaciones en la corriente a través del dispositivo y consecuentemente a la emisión de radiación electromagnética de muy alta frecuencia.

Puesto que la frecuencia característica del proceso es $f_E = 1/\tau_E$, se tiene

$$f_E = eE/p_0. \quad (\text{II.27})$$

Con el fin de aumentar la frecuencia de la señal generada, interesa incrementar la polarización del dispositivo, garantizando siempre la condición II.22, lo que sugiere considerar ciertos semiconductores, como por ejemplo algunos nitruros, en los que la interacción portador-fonón sea más fuerte que en los compuestos III-V usuales⁹⁶ por ser $\hbar\omega_0$ muy elevado (y por ello τ_+ más pequeño).⁵⁴

Si aplicamos un potencial tal que

$$U \geq 2u_0, \quad (\text{II.28})$$

los portadores obtendrán la energía suficiente para emitir más de un fonón al recorrer la estructura. Así, se establece el denominado *free carrier grating*, término que se emplea para referirse a la existencia de una modulación en la concentración de electrones (y evidentemente en otras magnitudes) asociada a la presencia de varias zonas de frenado de los portadores, puesto que éstos van a emitir varios fonones en su recorrido.^{23,29,97-102}

Así, en el caso de emisión múltiple de fonones los portadores experimentan aceleraciones y paradas hasta que salen por el ánodo, y dan lugar a una modulación de carga con periodicidad espacial de longitud

$$l_0 = \hbar\omega_0 / e \langle E \rangle, \quad (\text{II.29})$$

donde $\langle E \rangle$ es el valor medio del campo en la zona de aceleración.²³ El número de regiones de parada (lugares de máxima densidad de carga) corresponderá a la parte entera de $eU/\hbar\omega_0$.

De acuerdo con la bibliografía⁹⁸⁻¹⁰² puede afirmarse que este comportamiento se asimila al transporte en una sucesión de subestructuras n^+nn^+ de longitud l_0 , ya que cada zona de parada es simultáneamente ánodo y cátodo de las regiones anterior y posterior, respectivamente. Si fuera realmente así, una sucesión de estructuras n^+nn^+ , podríamos también encontrar oscilaciones de corriente si hubiera coherencia temporal entre las emisiones en las distintas zonas.

Un análisis más detallado del problema, como se verá en la interpretación de los resultados en el último apartado de este capítulo, exige considerar el campo teniendo en cuenta tanto su dependencia temporal (asociada a la consecución de una solución auto-consistente a medida que evoluciona el sistema) como su dependencia espacial en cada una de las zonas de modulación de carga. Nótese además que $\langle E \rangle$ no es más que el campo externo promedio en todo el dispositivo. Todos estos aspectos, junto con la necesidad de coherencia en la dinámica de modulación de carga, resultarán relevantes a la hora de justificar nuestros resultados (muy especialmente la presencia o ausencia de oscilaciones en la corriente), así como su dependencia con los distintos parámetros de la topología de la estructura n^+nn^+ , la temperatura, el dopaje o el potencial aplicado.

II.2.2. Condiciones de oscilación

Tras haber expuesto las bases teóricas de la OPTTR, en este sub-apartado vamos a analizar las condiciones necesarias para lograr oscilaciones relevantes en la intensidad de corriente.

Como ya hemos dicho, por un lado es necesario que los mecanismos de emisión de fonones ópticos entre las distintas zonas estén sincronizados. Además, si

la distribución periódica de carga (cuya frecuencia natural de oscilación es la de plasma) recibe y drena electrones con una cadencia impuesta por la frecuencia f_E , resulta evidente que cuando ésta sea próxima a f_p , el fenómeno podrá realimentarse de manera coherente. Así, las acumulaciones de carga serán cíclicamente drenadas por el ánodo, dando lugar a oscilaciones de corriente sobre un cierto nivel de continua impuesto por el campo externo.

El campo eléctrico, modulado por la concentración de carga, es el responsable de que haya una realimentación en el proceso. Tras tener lugar una emisión y el consecuente incremento local de densidad de carga, campo eléctrico y concentración, acoplados auto-consistentemente, provocan que las siguientes emisiones resulten desplazadas en el tiempo y en el espacio. En estas condiciones el campo eléctrico no presenta un perfil estable, sino que se va adaptando continuamente a las variaciones de densidad de carga, y es esto lo que hace que se obtengan las oscilaciones coherentes de plasma que buscamos. Pero cuando el potencial aplicado crece, la distancia entre las zonas de emisión de fonones es demasiado pequeña (el campo ondulatorio ya no satisface la condición II.15) y esa realimentación es incapaz de mantener las oscilaciones coherentes.

Vamos a tratar de analizar a grandes rasgos las condiciones necesarias para que la amplitud de las oscilaciones sea apreciable, y con ello intentaremos calcular aproximadamente la frecuencia máxima de oscilación para cada estructura, así como la situación óptima para observar el fenómeno.

Recordemos la expresión para la frecuencia de oscilación esperada (obtenida a partir de las ecuaciones II.18 y II.27)

$$f_E = \frac{eE}{\sqrt{2m_0 m^* \hbar \omega_0}}. \quad (\text{II.30})$$

Consideraciones básicas sobre esta expresión nos llevan a pensar que aumentando el campo podremos incrementar la frecuencia a nuestra conveniencia hasta un límite marcado en principio por el campo de ruptura, que es generalmente de valor elevado.

Pero por otra parte, puesto que $l_0 = \hbar\omega_0/eE$, al aumentar el campo reducimos la separación entre zonas de emisión consecutivas. Si esta distancia l_0 es menor que un cierto valor umbral $l_{0_{min}}$ (relacionado con la longitud de Debye a través de la condición II.15), la realimentación del campo no será efectiva y las oscilaciones desaparecerán. Además, cuanto más pequeña es la separación entre las acumulaciones de carga, y por lo tanto mayor el número de zonas de emisión, la cantidad de carga en cada una de ellas es menor, dando lugar a una modulación más suavizada en el campo, prácticamente inapreciable en comparación con el campo externo, haciéndose mucho menores las oscilaciones en corriente. En esta situación es el campo externo quien define las posiciones de emisión de fonones de forma bien localizada. En cualquier caso debemos añadir el hecho de que, como se observará en los resultados de las simulaciones, al aumentar el potencial aplicado el campo presenta un perfil cada vez más creciente de cátodo a ánodo. Así, el campo responsable de las aceleraciones de los portadores de cada zona de acumulación será notablemente dependiente de la posición, y ya no podremos hablar de un l_0 y un τ_E constantes a lo largo de la zona activa. Este efecto podría hacer desaparecer la sincronización entre mecanismos de emisión, ya que aunque todos los portadores emitan el fonón en los mismos sitios, ya no lo harán de manera coherente en el tiempo.

Teniendo en cuenta las ecuaciones anteriores, la frecuencia máxima a la que podremos esperar obtener oscilación en la corriente vendrá determinada por el valor umbral de l_0 de acuerdo con las consideraciones mencionadas, tomando como expresión

$$f_{m\acute{a}x} = \frac{\eta}{l_{0_{min}}}, \quad (\text{II.31})$$

donde $\eta = \sqrt{\hbar\omega_0/2m_0m^*}$, que no es más que la velocidad media durante un vuelo libre. Nótese que el factor que hemos denominado η sólo depende del material. Sin embargo, este factor no será el más relevante para obtener una mayor frecuencia de oscilación, sino que el parámetro clave será el l_0 umbral. De hecho, si comparamos

el valor de este factor η para GaN frente a InP, obtenemos resultados muy similares, puesto que el GaN tiene mayor $\hbar\omega_0$ pero también mayor m^* .

Por lo tanto, tenemos que tratar de conseguir el menor l_0 posible. Como decíamos, el valor mínimo de esta longitud estará muy relacionado con la longitud de Debye. En efecto, tras el análisis de nuestros resultados inferimos que ha de cumplirse $l_0 \geq 20\lambda_D$ ($l_{0_{min}} \approx 20\lambda_D$) si queremos que la modulación del campo sea notable. Consecuentemente, cuanto menor sea λ_D , menor podrá ser l_0 y, por tanto, tendremos oscilaciones hasta mayor frecuencia. Recordando que la longitud de Debye es $\lambda_D = \sqrt{k_B T \epsilon_0 \epsilon_r / q^2 N}$, la única diferencia para esta magnitud entre distintos materiales será consecuencia de distintas ϵ_r . Para GaN, ϵ_r toma un valor inferior que para otros semiconductores, lo cual favorecerá tener una λ_D menor. Y una vez fijado el material a emplear, será clave la impurificación de la zona activa y la temperatura de operación. De este modo, para menor temperatura y mayor dopaje conseguimos una λ_D menor. Esto lo comprobaremos con los resultados de nuestras simulaciones al final de este capítulo. Para mayor impurificación de la zona activa, la modulación de carga tiene más intensidad y la realimentación del campo eléctrico se mantiene efectiva hasta distancias l_0 menores. El hecho de aumentar la temperatura tiene un doble efecto negativo: por un lado hace que λ_D sea mayor, dificultando la posibilidad de conseguir frecuencias de oscilación altas y, por otro lado, otros mecanismos de *scattering* aumentan su probabilidad de ocurrir, lo que evidentemente hace perder coherencia al fenómeno.

No obstante, hemos de señalar que aunque el mayor valor de $\hbar\omega_0$ en GaN no sea tan relevante en la máxima frecuencia obtenida, sí lo es en la amplitud de las oscilaciones de la corriente. Cuanto mayor sea la energía de emisión del fonón óptico polar más fuerte será la modulación en velocidad, repercutiendo esto directamente en la amplitud de las oscilaciones. Y es que tan importante es que el fenómeno persista hasta frecuencias elevadas como que se presente con intensidad suficiente, puesto que de otro modo no podremos hablar sino de ruido electrónico. Por todo ello el GaN parece un material muy apropiado para lograr el objetivo señalado.

Escogido un material, un dopaje y una temperatura tenemos establecida la frecuencia máxima de oscilación. Para obtener una determinada frecuencia se fija el valor del campo medio a aplicar. Éste se puede conseguir, en principio, con cualquier combinación de potencial y longitud de la zona activa que cumpla $E = V/l$. Evidentemente, el valor del potencial ha de ser como mínimo el necesario para conseguir la energía de emisión de un fonón, $eV \geq \hbar\omega_0$, o lo que es lo mismo, la longitud de la zona activa será al menos la longitud de vuelo libre, $l \geq l_0$. Por lo tanto, salvo estas acotaciones, en distintas estructuras de un mismo material (con igual impurificación y a temperatura semejante) tendremos, en teoría, el mismo límite de frecuencia a partir del cual dejamos de hablar de oscilación para hablar de ruido. El hecho de tener la misma frecuencia máxima no quiere decir que se tengan los mismos resultados en amplitud de oscilaciones. El rango de potenciales para el que tendremos oscilaciones será menor cuanto menor sea la longitud de la zona n , llegando incluso a que ese rango de potenciales sea prácticamente un único valor de potencial, $V = \hbar\omega_0/e$, cuando $l = l_{0_{min}}$. Por el contrario, para longitudes mayores, $l = nl_{0_{min}}$ con $n = 2, 3, 4, \dots$, podemos subir del potencial desde $V = \hbar\omega_0/e$ hasta potenciales más elevados, $V = n\hbar\omega_0/e$, dando lugar a situaciones de n emisiones de fonones.

En la Figura II.6 se ilustran de manera esquemática los razonamientos que acabamos de expresar, comparando dos estructuras del mismo material, dopaje y temperatura, pero con longitudes diferentes. El área de cada uno de los rectángulos representa la carga acumulada en las correspondientes zonas de parada. A medida que aumenta el número de esas zonas se reduce su anchura y aumenta su altura.

Dentro del rango de potenciales que provocan oscilaciones, la amplitud de éstas será máxima para potenciales intermedios. Para potenciales muy bajos, l_0 puede resultar tan grande que durante ese vuelo el portador sufra otros mecanismos de *scattering* distintos a la emisión del fonón, rompiendo la coherencia deseada. Y para potenciales mayores, como ya hemos dicho, se pierde amplitud y coherencia en las oscilaciones.

Por supuesto, siempre hemos de tener en cuenta, por encima de todo, la relación entre el fenómeno que presentamos y las oscilaciones de plasma. Las

oscilaciones de la corriente tienden a ser mayores cuando la frecuencia resultante está en torno a la frecuencia de oscilación de plasma de la zona activa. Y analizando la expresión de esta frecuencia, $f_p = (q/2\pi)\sqrt{N/m^*m_0\varepsilon_0\varepsilon_r}$, vemos nuevamente que un alto dopaje favorecerá la consecución de altas frecuencias de oscilación. Asimismo, la elección del material influye en el valor de la frecuencia de plasma, pero lo hará en menor medida. Si comparamos f_p entre el GaN y el InP, como hicimos con el factor η , se obtienen de nuevo valores similares porque el GaN tiene mayor m^* pero menor ε_r .

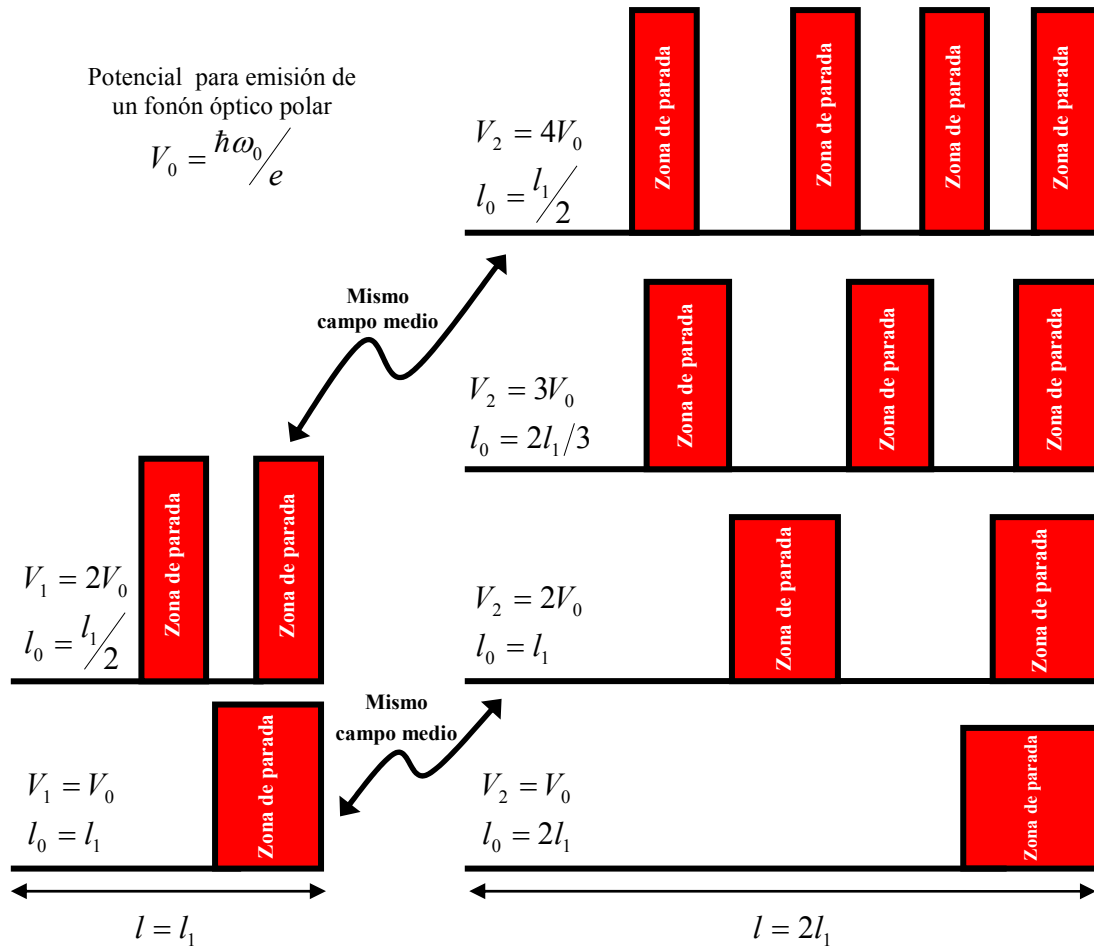


Figura II.6. Esquema de las zonas de parada para dos estructuras de distinta longitud en diferentes condiciones de potencial aplicado.

II.3. OPTTR EN GaN VOLÚMICO

Antes de pasar al estudio sistemático de la OPTTR en diodos, consideramos interesante estudiar la dinámica de un solo electrón en GaN. Emplearemos el simulador de partícula única para analizar la evolución temporal de la velocidad instantánea del electrón al moverse a través del material para diferentes temperaturas. Ello permite comprender detalladamente el origen de los efectos de la modulación de densidad de carga y oscilaciones de la corriente, asociados a la OPTTR, que aparecerán bajo ciertas condiciones en los diodos simulados.

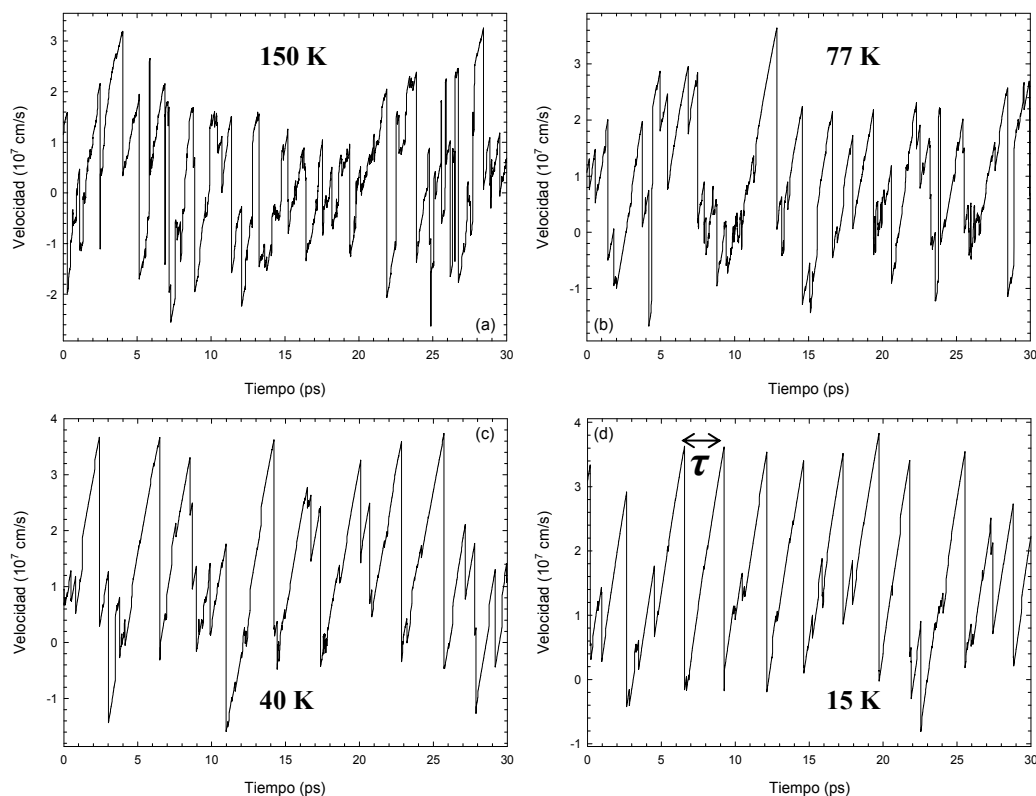


Figura II.7. Secuencias de la velocidad instantánea del electrón para diferentes temperaturas: (a) 150 K, (b) 77 K, (c) 40 K y (d) 15 K. El campo aplicado es de 2 kV/cm.

Los resultados de simulación mostrados en la Figura II.7 recuerdan al esquema de la Figura II.3 (salvo el detalle de que en aquel caso se representaba la energía a lo largo del tiempo), ratificando lo que explicábamos en esas páginas acerca de la concatenación de vuelos libres y paradas como consecuencia de la emisión de fonones ópticos. Además, en esta ocasión analizamos la influencia de un aumento en la temperatura, pues la coexistencia de varios mecanismos de *scattering* perturbará inevitablemente nuestro escenario, acabando por eliminar el carácter periódico de la

dinámica del portador, e imposibilitando, por tanto, las oscilaciones de corriente cuando se trate ya de una simulación completa de múltiples electrones en un diodo.

A muy baja temperatura [Figura II.7(d)] el comportamiento es sencillo. El portador se acelera uniformemente (tramos rectos inclinados) hasta alcanzar la energía de emisión del fonón, lo emite y se frena bruscamente (líneas descendentes verticales). El proceso se repite cíclicamente a lo largo del material, acorde con los esquemas de la Figura II.3 y de la Figura II.4 que mostramos en la explicación teórica del fenómeno de la OPTTR. A medida que crece la temperatura [Figura II.7(a)-(c)] el fenómeno se hace más complejo. Progresivamente van presentándose algunos mecanismos de *scattering* adicionales. En particular, se pueden identificar mecanismos de absorción de fonones ópticos polares como bruscos incrementos de velocidad (líneas ascendentes verticales), que se hacen más frecuentes cuanto más crece la temperatura. Todo ello está de acuerdo con las expresiones de las probabilidades de emisión y absorción de fonones ópticos polares (ecuación I.9). Cabe señalar que la presencia de velocidades máximas menores, e incluso de velocidades negativas, cuando la temperatura es elevada no hace sino refrendar los argumentos expuestos acerca de la aparición de mecanismos de *scattering* adicionales.

En la Figura II.7(d) se ha señalado con τ el periodo de ese comportamiento cíclico de la velocidad. A bajas temperaturas su valor, de 2.7 ps, es muy próximo al previsto por la teoría, $\tau_E = 2.5$ ps (ecuación II.20), para un campo eléctrico de 2 kV/cm. Esta pequeña diferencia entre ambos valores se debe principalmente a la presencia de algún mecanismo de *scattering* por impurezas, acústico o piezoeléctrico (pequeñas caídas verticales de la velocidad), que hacen aumentar τ con respecto a su valor teórico para el caso en que sólo hubiera mecanismos de emisión de fonones ópticos polares. También contribuye al incremento de τ el hecho de que la emisión del fonón pueda no producirse exactamente cuando el electrón alcanza la energía $\hbar\omega_0$, sino que el *scattering* acontece tras haber penetrado ligeramente en la región activa, como explicamos en el apartado anterior.

Una vez comprendida la dinámica para un solo portador, ya estamos en condiciones de abordar un estudio más general para la corriente de electrones que tiene lugar en un diodo de GaN. Las diferencias fundamentales con lo estudiado

hasta ahora son de dos tipos. En primer lugar, la propia dispersión de velocidad inicial de los portadores en el momento de la inyección en la región activa (recuérdese la condición II.25), que será responsable de un ensanchamiento en las zonas de frenado por emisión del fonón. Y en segundo lugar, y más importante aún, la necesidad de obtener una solución auto-consistente, considerando un gran número de portadores, que hace que el perfil de campo y densidades de carga cambien y se actualicen constantemente en el dispositivo, modificándose la anchura y la intensidad de las acumulaciones de portadores tras las emisiones de fonones.

II.4. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA DE RESULTADOS DE SIMULACIÓN

En este apartado mostraremos un breve resumen de los escasos resultados publicados sobre el tema que nos ocupa, correspondientes a simulaciones MC a baja temperatura en estructuras n^+nn^+ , en particular diodos de InP y de InN.^{23,103} Típicamente se presenta la característica I - V , la dependencia temporal de la corriente instantánea para distintas polarizaciones y eventualmente los perfiles de campo eléctrico y concentración de carga.

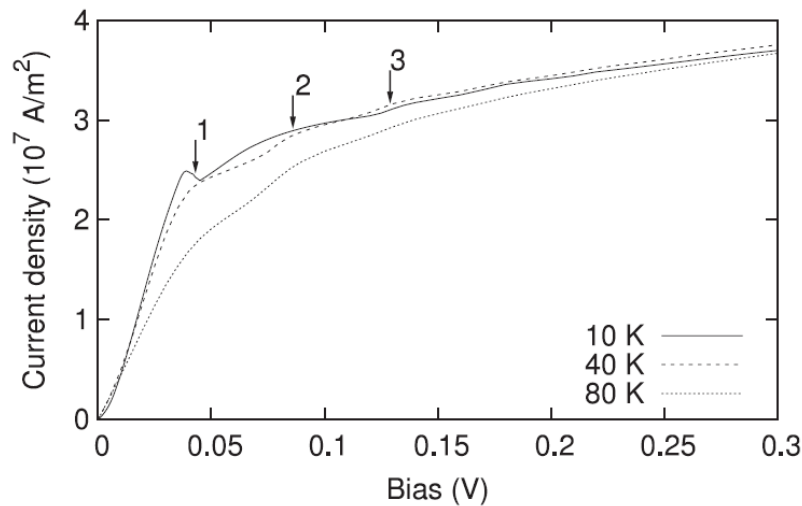


Figura II.8. Gráficas I - V obtenidas para una estructura n^+nn^+ de InP a diferentes temperaturas: 10, 40 y 80 K. Las flechas 1, 2 y 3 indican los potenciales de polarización para los cuales un electrón puede ganar la energía de emisión de uno, dos y tres fonones, respectivamente, durante su recorrido a lo largo de la zona n . Figura extraída de la Ref. 103.

En la Figura II.8 se muestra la relación corriente-voltaje a tres temperaturas distintas para un diodo n^+nn^+ de InP.¹⁰³ Se observa, especialmente a baja temperatura, la existencia de varios puntos de cambio de pendiente asociados a la emisión de uno, dos o hasta tres fonones ópticos de acuerdo con el potencial aplicado. Se aprecia claramente cómo el espaciado entre ellos corresponde justamente a la energía del fonón óptico polar $\hbar\omega_0$, que para el InP es 0.043 eV.

Hay que señalar que este tipo de resultados obtenidos con la simulación se han encontrado también experimentalmente en estructuras de InSb,¹⁰⁴ GaAs,¹⁰⁵ InGaAs¹⁰⁶ e InP¹⁰⁷ a temperaturas criogénicas. Asimismo, los resultados presentados en la Ref. 108 muestran medidas de generación en InP con la frecuencia señalada en el estudio teórico de la OPTTR.

La Figura II.9 presenta la evolución de la corriente a la temperatura de 10 K para distintos potenciales aplicados.¹⁰⁹ Se observa cómo es necesario superar el potencial umbral asociado a la emisión de fonones para poder encontrar oscilaciones regulares en la corriente a frecuencias en el rango de sub-THz. Asimismo se puede ver que al elevar el potencial aplicado el fenómeno desaparece paulatinamente. Esto ocurre a partir de cierto valor que dependerá esencialmente de la temperatura, de la geometría de la estructura y del material bajo estudio.

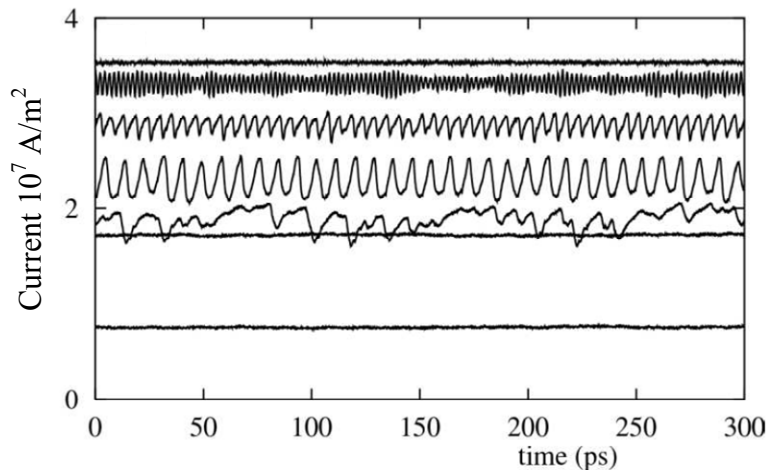


Figura II.9. Secuencias de corriente en una estructura de InP para potenciales aplicados $V = 0.02, 0.035, 0.045, 0.09, 0.2, 0.4$ y 0.6 V (curvas de abajo hacia arriba). Figura extraída de la Ref. 109.

Finalmente, en la Figura II.10 se muestran los perfiles de campo en la zona activa del diodo de InP para distintas temperaturas y potenciales aplicados. Se puede apreciar cómo al superar el potencial necesario para la emisión de un fonón comienza a notarse la modulación de densidad de carga por su efecto en el perfil del campo eléctrico. Igualmente, a medida que la temperatura aumenta se diluye progresivamente esta dependencia espacial.

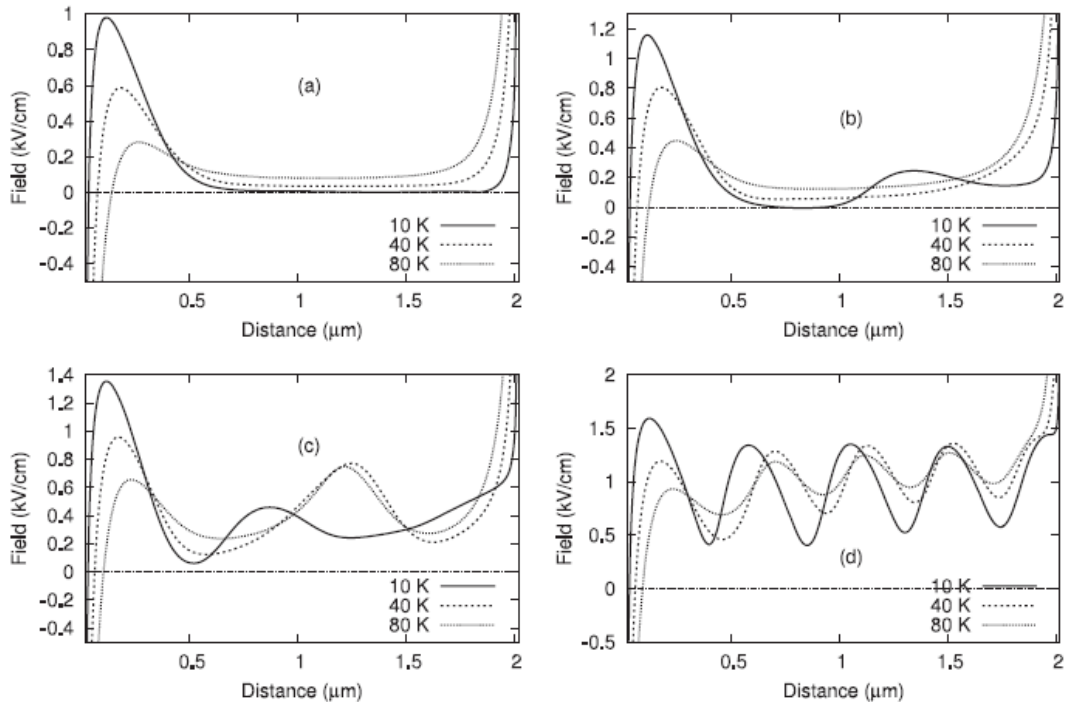


Figura II.10. Perfiles de campo eléctrico en la región n para una estructura n^+nn^+ de InP a temperaturas de 10, 40 y 80 K. Las imágenes (a), (b), (c) y (d) corresponden respectivamente a potenciales aplicados de 0.03, 0.05, 0.09 y 0.2 V. Figura extraída de la Ref. 103.

II.5. DIODOS n^+nn^+ DE GaN. RESULTADOS

En este apartado pasamos finalmente a presentar los resultados obtenidos con el simulador MC de dispositivos en diodos de GaN. Después de mostrar los aspectos fundamentales asociados a la OPTTR en el diodo de partida, se presentarán y explicarán en detalle múltiples resultados, analizándose la influencia de la temperatura, el dopaje y las dimensiones del dispositivo en la modulación de carga, las oscilaciones de corriente y los perfiles de campo eléctrico, entre otros. Con el fin de extraer la máxima información de los resultados de simulación, el estudio se ha realizado tanto en el dominio del tiempo como en el de la frecuencia.

II.5.1. Estructura simulada

Como diodo de partida para nuestro estudio hemos tomado una estructura n^+nn^+ de GaN a una temperatura de 15 K, con región activa de longitud $L = 2 \mu\text{m}$ y dopaje 10^{15} cm^{-3} , y zonas n^+ de 50 nm con dopaje de 10^{17} cm^{-3} (Figura II.11).

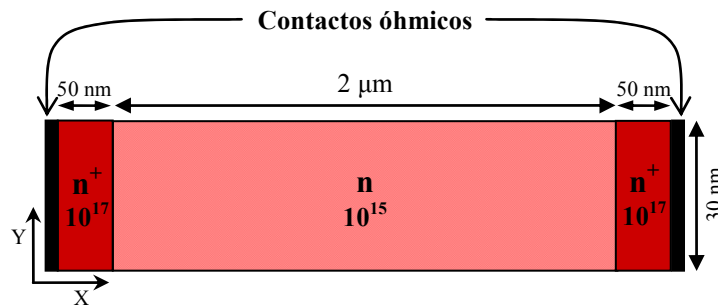


Figura II.11. Estructura simulada de referencia, indicando su geometría e impurificación en cm^{-3} .

Las dimensiones del mallado utilizado para resolver la ecuación de Poisson se han elegido cuidadosamente, así como el paso temporal empleado. Se ha adoptado una solución de compromiso entre la precisión requerida en nuestro estudio, la potencia de cálculo disponible y el tiempo asumible, del orden de un día por cada valor de polarización eléctrica. Ello nos ha llevado a emplear un mallado no uniforme en el que la densidad de celdas se incrementa en las proximidades de las zonas de transición n^+n . Se ha cuidado que el tamaño de aquéllas sea siempre menor que la longitud de Debye y que el paso temporal sea también inferior que el tiempo característico del proceso más rápido implicado en nuestro estudio. Todo ello ha dado lugar a un mallado rectangular de dimensiones de 1 a 5 nm según la zona, y un paso temporal de 0.5 fs. Por otro lado, hay que señalar que dado que estos diodos son

estructuras verticales, las dislocaciones son esencialmente paralelas al transporte electrónico, por lo que el correspondiente mecanismo de *scattering* tiene una influencia despreciable en los resultados.

II.5.2. Resultados en la estructura de referencia

Para exponer los resultados de forma ordenada, hemos elegido comenzar con la representación de la corriente frente al potencial aplicado, para a continuación mostrar la forma de la corriente en función del tiempo. Al usar un simulador 2D los resultados que obtenemos para la corriente tienen unidades de A/m, de manera que para recuperar el valor en A habría que multiplicar por la dimensión no simulada (en metros), la profundidad del diodo. Igualmente, si se deseara conocer la densidad de corriente en A/m² bastaría con dividir por el tamaño vertical de la estructura, 30 nm, cuyo valor es irrelevante en el fenómeno estudiado.

El estudio se completa con valores medios de magnitudes microscópicas (componente longitudinal en el caso de tratarse de magnitudes vectoriales) como el número de mecanismos de *scattering* con fonones ópticos, la concentración de portadores, el potencial y el campo eléctrico, la velocidad y la energía. Estas gráficas muestran una periodicidad espacial de longitud l_0 , como hemos ido apuntando a lo largo del capítulo. Con el fin de profundizar en el estudio del fenómeno, también se representan valores instantáneos de algunas magnitudes a lo largo de un periodo de la oscilación. Finalmente se realiza un análisis espectral de las oscilaciones de corriente, en el que habría que multiplicar dos veces por la dimensión no simulada para recuperar el valor de la densidad espectral en A²s.

II.5.2.a. Corriente

En primer lugar analizamos la dependencia de la densidad de corriente con el potencial aplicado en la estructura de referencia. Como se aprecia en la Figura II.12(a), la pendiente de la característica I - V presenta ciertos cambios bruscos que suelen denominarse *kinks*. Éstos tienen lugar cuando el potencial aplicado es suficiente para provocar la emisión de fonones ópticos polares, es decir, cuando $eV = n\hbar\omega_0$, para $n = 1, 2, 3, \dots$. En nuestro caso $\hbar\omega_0 = 0.091$ eV.

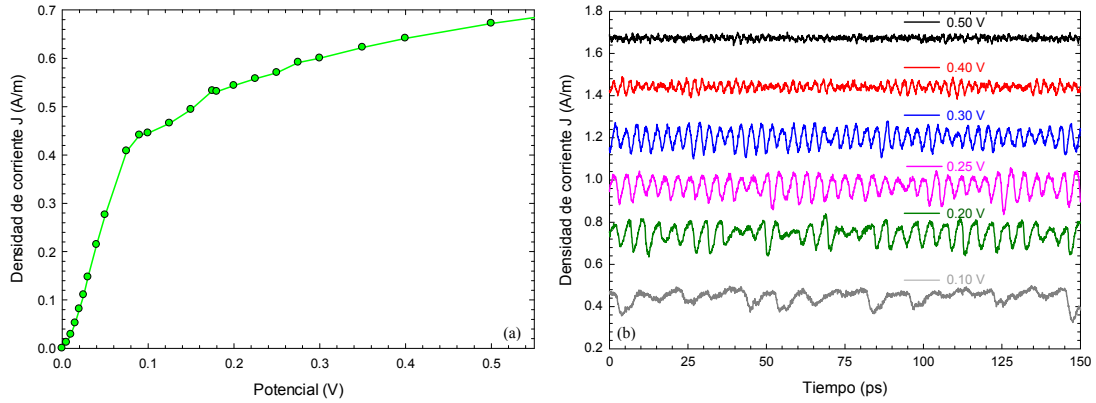


Figura II.12. (a) Densidad de corriente frente al potencial aplicado para el diodo de referencia. (b) Secuencia temporal de la densidad de corriente para diversos potenciales aplicados. Para facilitar su visualización, cada secuencia temporal se ha desplazado 0.2 A/m respecto a la anterior.

En la Figura II.12(b) observamos cómo aparecen claras oscilaciones en la corriente a frecuencias de sub-THz al superar el potencial correspondiente a la energía del fonón. Para valores muy elevados del potencial, la amplitud de las oscilaciones cae notablemente, hecho cuya explicación abordaremos más adelante.

II.5.2.b. Magnitudes microscópicas: valores medios

El siguiente paso consiste en analizar las magnitudes microscópicas proporcionadas por el simulador para poder explicar con el máximo detalle el fenómeno que estamos estudiando. Se presentan los perfiles de los valores medios de dichas magnitudes a lo largo de la estructura, calculados durante un tiempo de 500 ps. Analizaremos los casos correspondientes a los potenciales aplicados más significativos [los mismos que los detallados en la Figura II.12(b)]. Las líneas a trazos verticales que aparecen en todas las gráficas que se mostrarán indican los límites de la zona n del diodo.

i) Scattering con fonones ópticos polares y concentración de portadores

En la Figura II.13 se han representado el número de emisiones de fonones ópticos polares por partícula y por unidad de tiempo y la concentración de portadores a lo largo de la estructura. En la Figura II.13(a) se observa que la cantidad de zonas de emisión para una polarización aplicada dada es siempre la parte entera del cociente $eU/\hbar\omega_0$. La presencia de esa secuencia de máximos de emisión, que presenta la periodicidad espacial prevista, $l_0 = \hbar\omega_0/e \langle E \rangle$, nos anuncia la formación de un perfil de concentración de electrones que estará modulado espacialmente, como se observa en la Figura II.13(b).

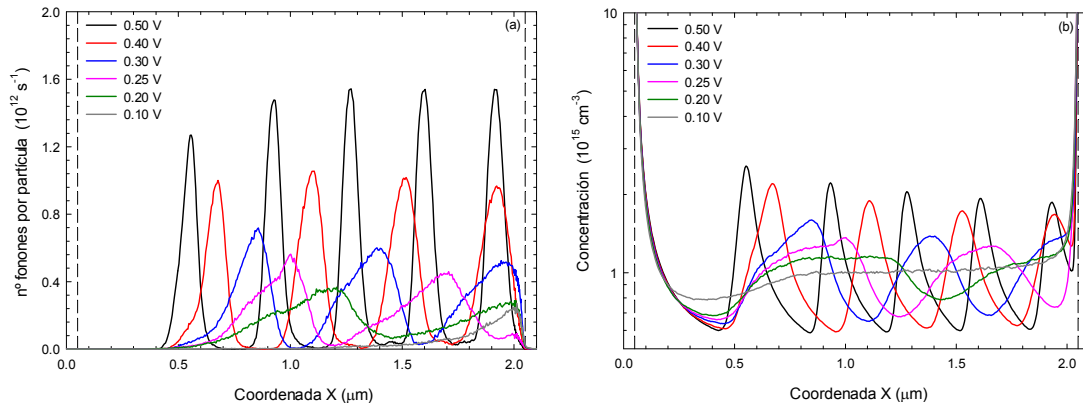


Figura II.13. Perfiles de (a) número de mecanismos de *scattering* con fonones ópticos polares por partícula y por unidad de tiempo y (b) concentración de electrones a lo largo de la estructura para diversos potenciales aplicados.

Aunque también se aprecia en el resto de los perfiles, es en la Figura II.13(a) donde mejor se detecta que las zonas de modulación de las diferentes magnitudes (en este caso el número de fonones emitidos) asociadas al fenómeno bajo estudio resultan más anchas y deslocalizadas cuanto menor es el potencial aplicado (siempre que sea mayor que el valor umbral). Para analizar estos aspectos conviene hacer un estudio más detallado, considerando los valores instantáneos de las diferentes magnitudes como veremos más adelante.

En cuanto a la concentración de electrones, mostrada en la Figura II.13(b), conviene resaltar que valores de densidad de electrones por encima/debajo del fondo de dopaje de la zona activa (10^{15} cm^{-3}) reflejan la presencia de regiones con exceso de carga negativa/positiva, que se presentan alternativamente, dando así lugar a un perfil ondulatorio del campo eléctrico y a las consecuentes oscilaciones de plasma, como se explicó al inicio del capítulo.

ii) Potencial y campo eléctrico

A continuación pasamos a estudiar la forma de los perfiles del potencial y el campo eléctrico, mostrados en la Figura II.14. Como acabamos de señalar, el perfil ondulado del campo eléctrico [Figura II.14(b)] muestra claramente la presencia de una estructura de modulación de carga en toda la longitud de la zona activa del dispositivo de acuerdo con el fenómeno de emisión de fonones ópticos. Al aumentar el potencial aplicado, la periodicidad espacial l_0 del campo eléctrico se reduce, alejándonos de la condición necesaria para la oscilación del plasma, $\lambda_D \ll l_0$. En cualquier caso, en la gráfica se observa que para los potenciales aplicados más altos

el perfil ondulado del campo eléctrico muestra una tendencia hacia valores crecientes, y cada vez con menor modulación a medida que nos acercamos al ánodo. Es justamente para estos valores cuando desaparece la oscilación en corriente de la Figura II.12(b). Esto aconseja relacionar la ausencia de oscilaciones de corriente a potenciales elevados con la falta de coherencia en las oscilaciones de plasma. En efecto, el valor creciente del campo eléctrico medio al desplazarnos hacia el ánodo rompe la simetría traslacional a lo largo de la estructura, y por lo tanto impide las oscilaciones coherentes del plasma, ya que τ_E y l_0 tomarían valores decrecientes a lo largo de la zona n al desplazarnos hacia el ánodo, de acuerdo con las ecuaciones $\tau_E = p_0/eE$ y $l_0 = \hbar\omega_0/eE$. Nótese asimismo que la débil modulación que presenta el campo eléctrico para polarizaciones elevadas hace que su efecto en la OPTTR resulte atenuado.

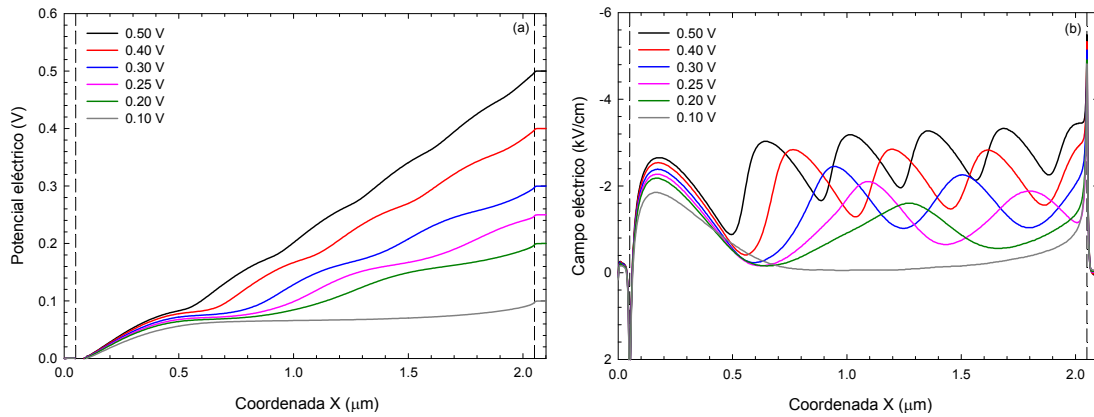


Figura II.14. Perfiles de (a) potencial y (b) campo eléctrico a lo largo de la estructura para diversos potenciales aplicados.

iii) Velocidad y energía

Por último, analizamos tanto la velocidad como la energía de los portadores a lo largo de la estructura. Los perfiles de dichas magnitudes se encuentran representados en la Figura II.15. En nuestro estudio, la velocidad y la energía cinética aportan prácticamente la misma información, ya que a los débiles campos aplicados los portadores no cambian de valle, permanecen en el valle Γ_1 , de forma que su masa efectiva no varía y no pierden energía cinética.

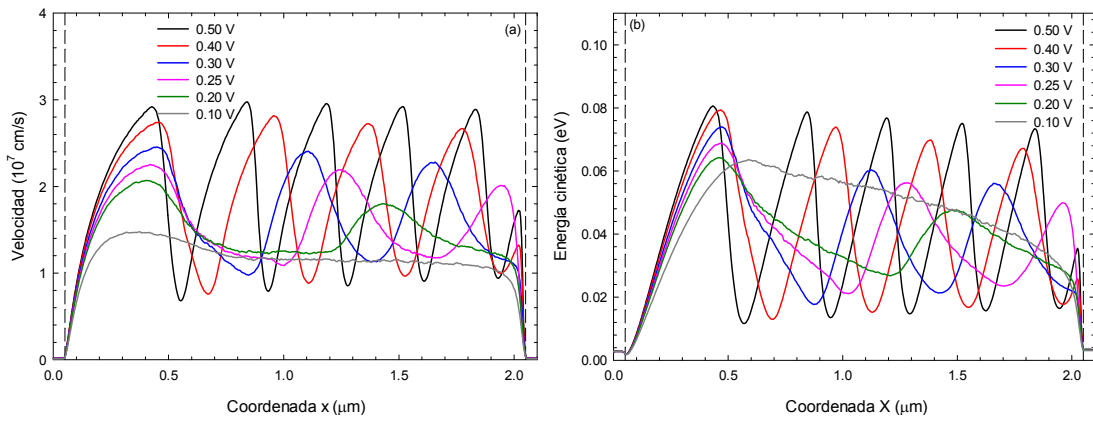


Figura II.15. Perfiles de (a) velocidad y (b) energía cinética de los portadores a lo largo de la estructura para diversos potenciales aplicados.

Como se observa en la Figura II.15, se producen fuertes variaciones en la velocidad y la energía cinética de los portadores cuando se desplazan a través de la zona activa. Como cabía esperar, las zonas de frenado de la Figura II.15(a) coinciden espacialmente con las regiones de emisión de fonones de la Figura II.13(a) y de acumulación de electrones en la Figura II.13(b). Cabe destacar también que la energía máxima de los portadores no alcanza el valor previsto de 0.091 eV y que su valor mínimo (y el de la velocidad) no es nulo como correspondería al fenómeno de la emisión de fonones. Ello ha de relacionarse con el hecho de que la región de frenado tiene una anchura no nula, de forma que al promediar incluimos tanto portadores próximos a emitir el fonón como otros que ya se han ralentizado, suavizándose así la forma teórica en diente de sierra del perfil de energía. De hecho, cuando el potencial aplicado crece y las zonas de frenado se definen nítidamente, encontramos que los perfiles de energía y velocidad se acercan más a los esperados.

II.5.2.c. Magnitudes microscópicas: valores instantáneos

Nos referimos aquí por valores instantáneos de las magnitudes microscópicas no tanto a su valor en un tiempo determinado, sino a sus valores promedio en intervalos suficientemente pequeños (del orden de una décima parte del periodo de oscilación). Esto nos permitirá obtener una información muy detallada de la evolución de las magnitudes microscópicas, filtrando componentes aleatorias inherentes a la simulación. Se mostrarán los resultados para dos potenciales de operación muy distintos; con y sin oscilación de corriente.

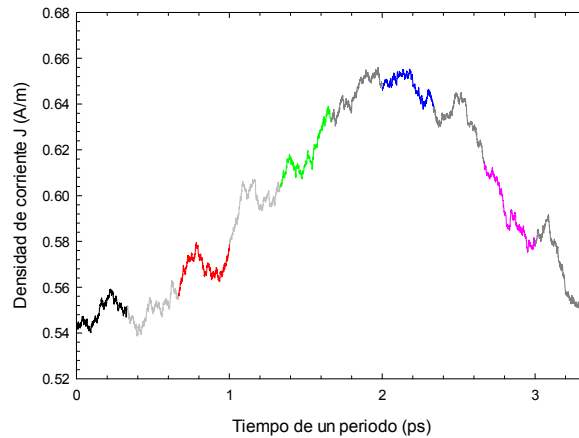
i) Potencial aplicado de 0.3 V

Figura II.16. Densidad de corriente a lo largo de un periodo para un potencial aplicado de 0.3 V.

En la Figura II.16 se muestra la densidad de corriente a lo largo de un periodo de oscilación, apreciándose su división en diez muestras a fin de obtener los valores instantáneos de la emisión de fonones por unidad de tiempo, concentración de portadores, potencial, campo eléctrico, velocidad y energía. Los colores de los cinco intervalos de tiempo resaltados en la Figura II.16 se utilizarán en la Figura II.17 para identificar los tiempos correspondientes a los diferentes perfiles representados.

Como se aprecia en las gráficas de los perfiles de las diferentes magnitudes, Figura II.17, las curvas para distintos tiempos dentro de un periodo no son coincidentes, sino que se observa cómo varían en magnitud y posición, justificándose así los perfiles medios poco definidos que veíamos en el sub-apartado anterior para esta polarización de 0.3 V. Es precisamente en esta situación cuando la corriente en el dispositivo presenta oscilaciones de amplitud notable. En estas condiciones de polarización, las acumulaciones de carga, que tienden a oscilar a la frecuencia de plasma, ganan y pierden electrones a la frecuencia f_E , de forma que el campo eléctrico, auto-consistente con esas fuentes de carga, también oscila a esa frecuencia. Cuando esta frecuencia es próxima a f_p , el fenómeno resulta coherente y se reflejará en oscilaciones de corriente a través del dispositivo. En definitiva, es el campo eléctrico el responsable de que haya una realimentación en el proceso. Cuando se produce un incremento de densidad de carga como consecuencia de un proceso de emisión, el campo eléctrico se modifica y hace que las siguientes emisiones varíen su posición, con el campo eléctrico adecuándose constantemente al nuevo perfil de densidad de carga.

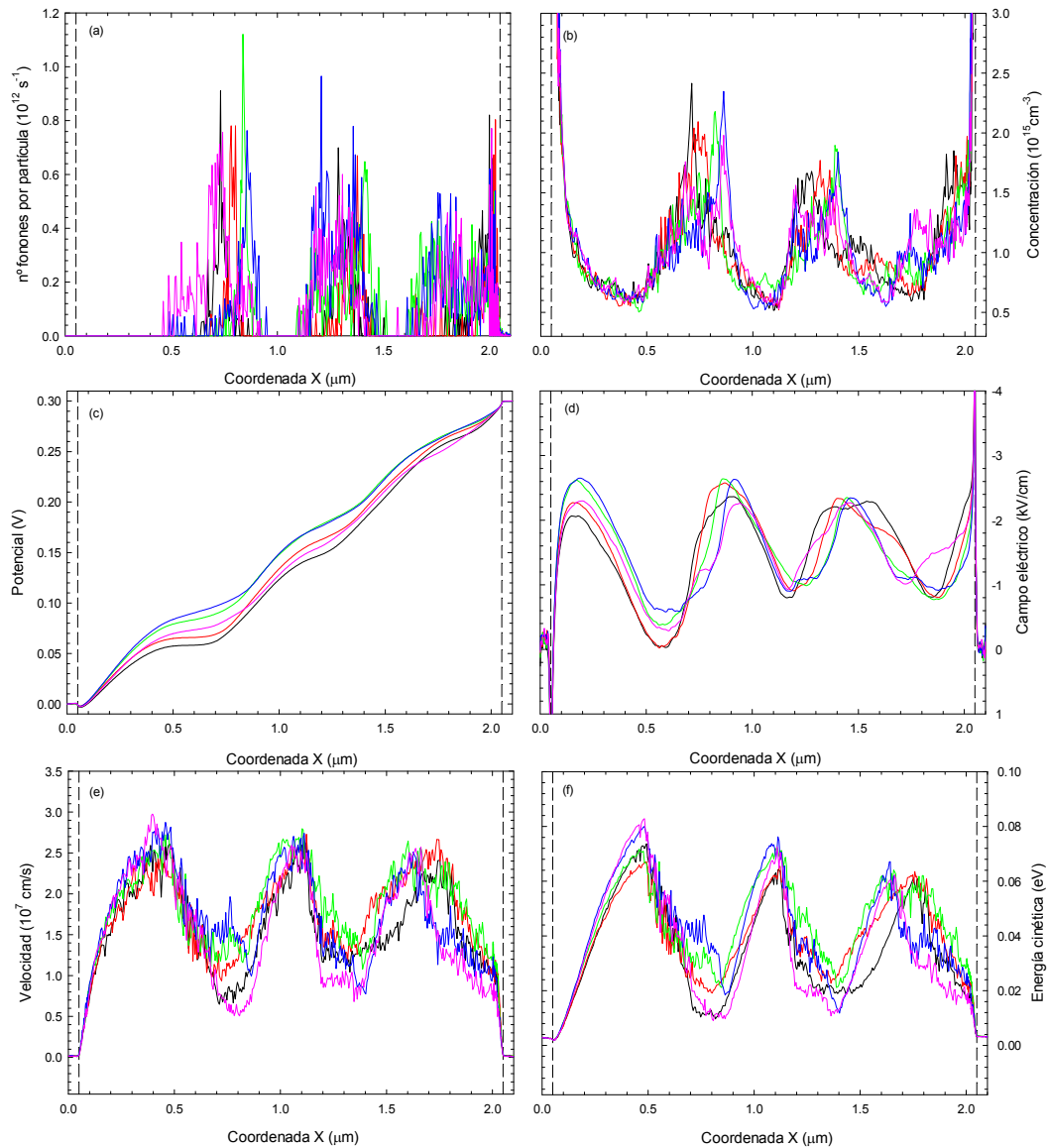


Figura II.17. Evolución de los perfiles de las magnitudes microscópicas durante el periodo mostrado en la Figura II.16. (a) Número de fonones ópticos polares emitidos por partícula y por unidad de tiempo, (b) concentración de electrones, (c) potencial eléctrico, (d) campo eléctrico, (e) velocidad y (f) energía cinética de los portadores a lo largo de la estructura. Cada perfil corresponde al intervalo de tiempo representado con el mismo color en la Figura II.16.

ii) Potencial aplicado de 0.5 V

En la Figura II.18 se muestra la forma de la densidad de corriente (que apenas oscila) a lo largo de un “periodo” y su división en diez muestras para una polarización de 0.5 V.

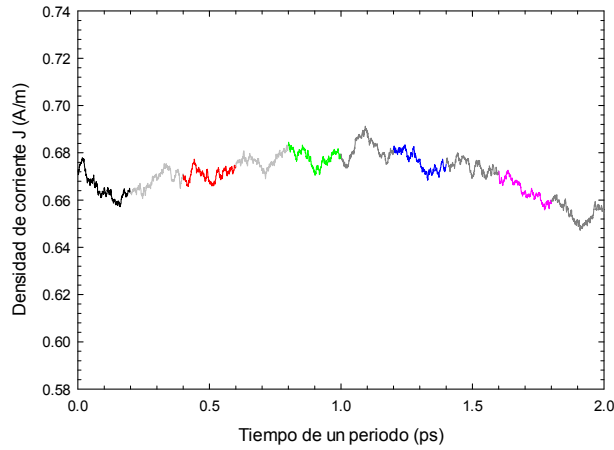


Figura II.18. Densidad de corriente a lo largo de un “periodo” para un potencial aplicado de 0.5 V.

Ahora nuestros resultados son muy distintos. Como se puede apreciar en la Figura II.19, que muestra los valores instantáneos de las diferentes magnitudes, las curvas para distintos tiempos son prácticamente coincidentes, con un espaciado de las zonas de emisión de fonones l_0 que coincide con el valor teórico de $0.365 \mu\text{m}$, dando lugar así a los perfiles medios bien definidos que vimos en el apartado anterior para este valor de potencial de 0.5 V. En estas circunstancias, $l_0 \approx 14\lambda_D$, no se satisface suficientemente la condición $\lambda_D \ll l_0$, por lo que la corriente no presenta una oscilación de amplitud apreciable, sino que toma un valor prácticamente constante, con pequeñas fluctuaciones [Figura II.12(b) y Figura II.18].

La existencia de variaciones temporales de los perfiles a lo largo de un periodo constituye la clave para detectar la posibilidad de oscilaciones de corriente. Así, siempre que se satisfaga la condición $\lambda_D \ll l_0$, esas variaciones, caracterizadas por la frecuencia f_E , podrán sintonizarse con las oscilaciones de plasma de frecuencia f_p , dando lugar a oscilaciones de amplitud importante en la corriente cuando ambas frecuencias resulten próximas, como observamos para valores intermedios del potencial aplicado. Por el contrario, cuando $\lambda_D \geq l_0$ no cabe esperar ningún fenómeno de realimentación de oscilaciones de carga, que se presentarán de forma incoherente sin dar lugar a oscilaciones de corriente en el dispositivo. Esto es lo que se observa para los potenciales aplicados más altos. Las zonas de parada de los electrones aparecen muy próximas y bien definidas por el campo externo, y la dinámica de portadores pierde el carácter de fenómeno colectivo, desapareciendo de esta forma cualquier posibilidad de oscilaciones de corriente.

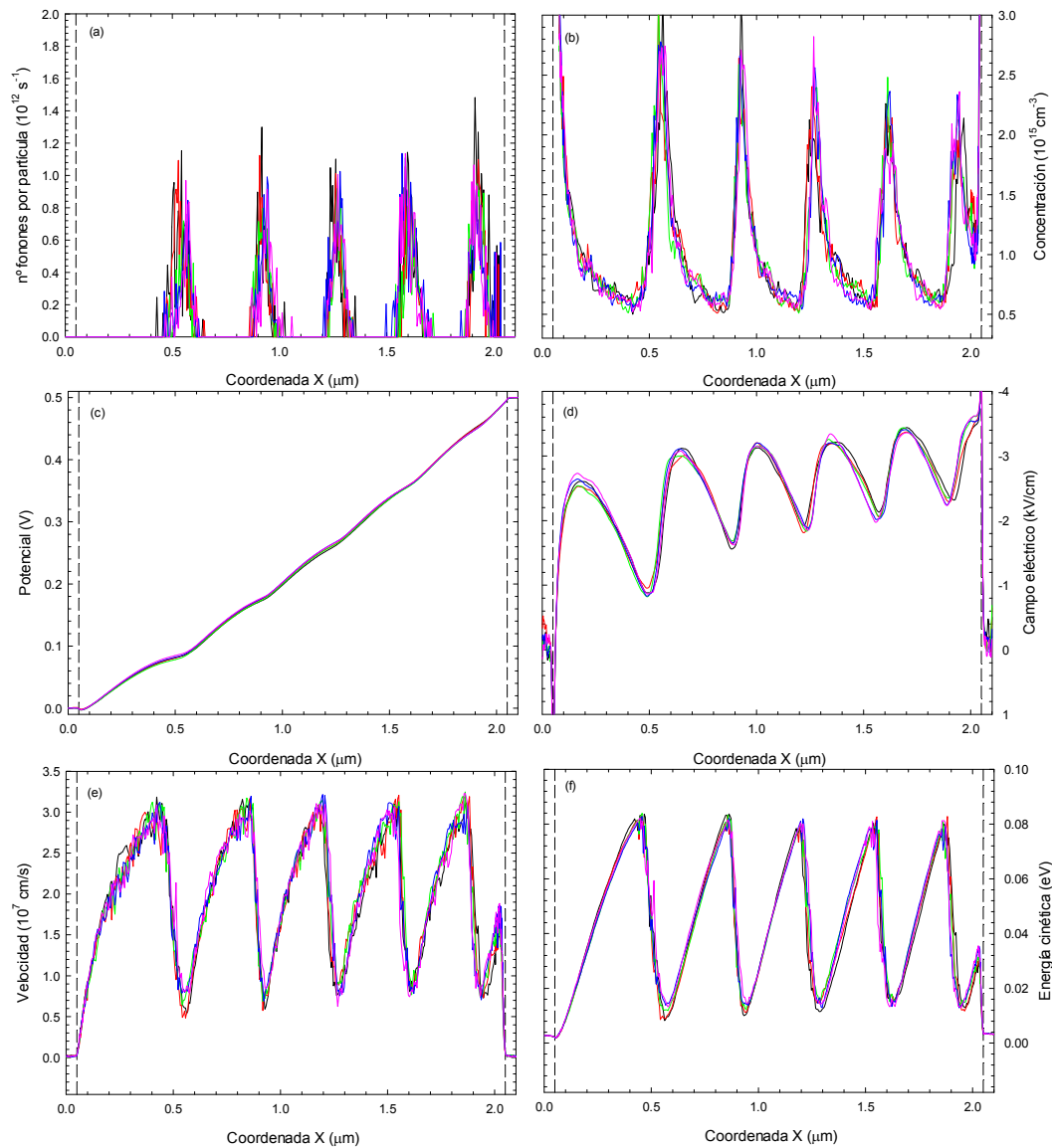


Figura II.19. Evolución de los perfiles de las magnitudes microscópicas durante el periodo mostrado en la Figura II.18. (a) Número de fonones ópticos polares emitidos por partícula y por unidad de tiempo, (b) concentración de electrones, (c) potencial eléctrico, (d) campo eléctrico, (e) velocidad y (f) energía cinética de los portadores a lo largo de la estructura. Cada perfil corresponde al intervalo de tiempo representado con el mismo color en la Figura II.18.

II.5.2.d. Análisis espectral de las oscilaciones de corriente

En este sub-apartado presentamos los espectros en frecuencia de las oscilaciones de corriente para varios potenciales aplicados. En concreto, hemos evaluado la densidad espectral de las fluctuaciones de la corriente, que mostramos en la Figura II.20 en función de la frecuencia. Para su cálculo, el método empleado ha sido el de la transformada rápida de Fourier (FFT, *Fast Fourier Transform*), que se explicó en el primer capítulo. En todos los espectros se observa un pico de potencia

destacable, cuya amplitud varía mucho de unas polarizaciones a otras, por lo que en las gráficas de la Figura II.20 se han escogido los factores de escala vertical adecuados para poder visualizarlos. La frecuencia de dichos picos, siempre en el rango de sub-THz, se desplaza gradualmente hacia valores más altos cuando aumentamos la polarización. La amplitud del pico toma valores bastante elevados (indicando la presencia de una oscilación significativa) para potenciales aplicados intermedios (0.20, 0.25 y 0.30 V), para los cuales las oscilaciones eran ya claramente visibles en la corriente [Figura II.12(b)]. Es justo para estas polarizaciones cuando la frecuencia del pico es más próxima a la frecuencia de plasma de la región n (alrededor de 0.2 THz en esta estructura de referencia).

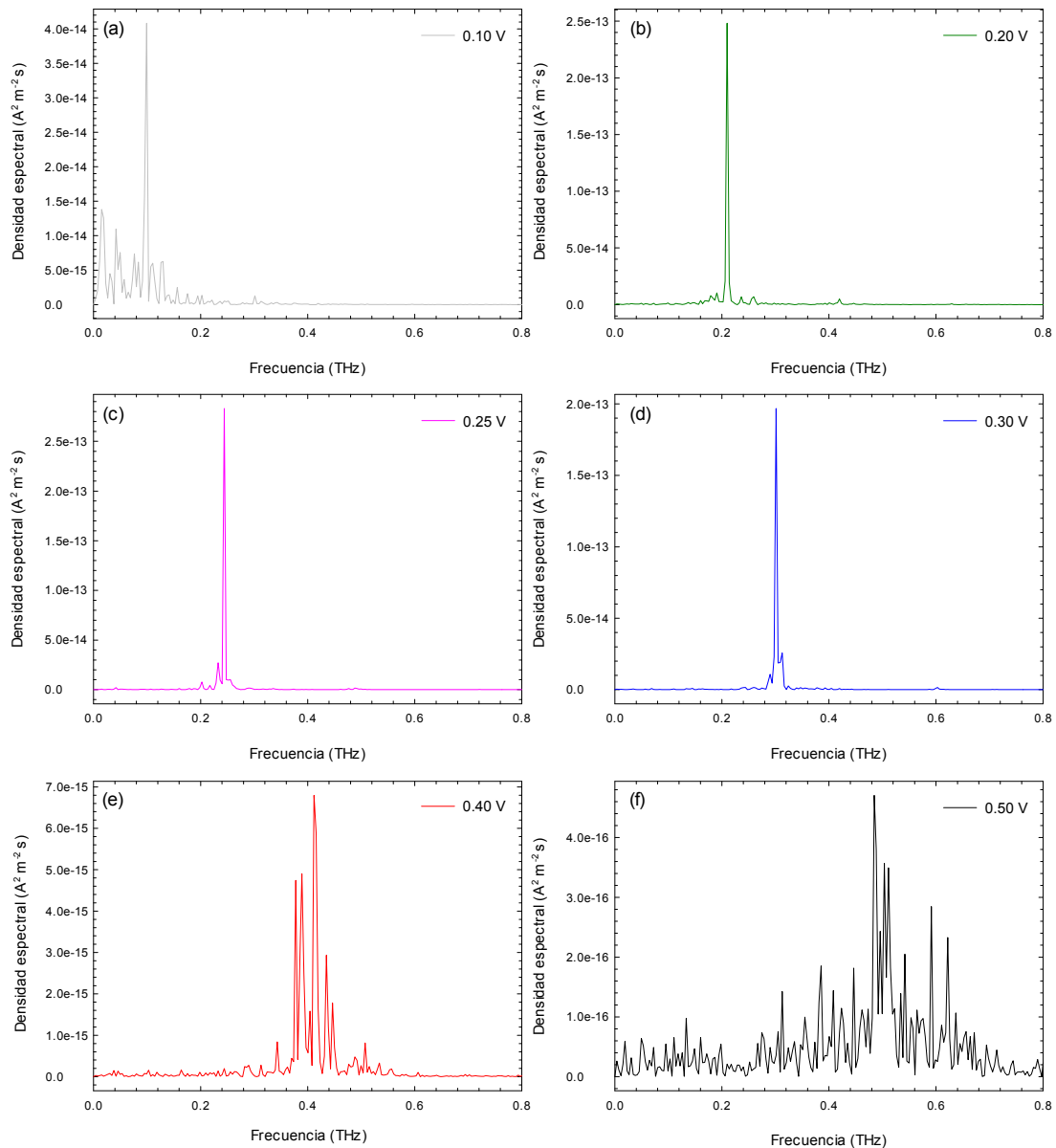


Figura II.20. Densidad espectral de las fluctuaciones de corriente en función de la frecuencia para diversos potenciales aplicados.

La Figura II.21 muestra tanto la frecuencia como la amplitud de las oscilaciones de corriente en función de la polarización.

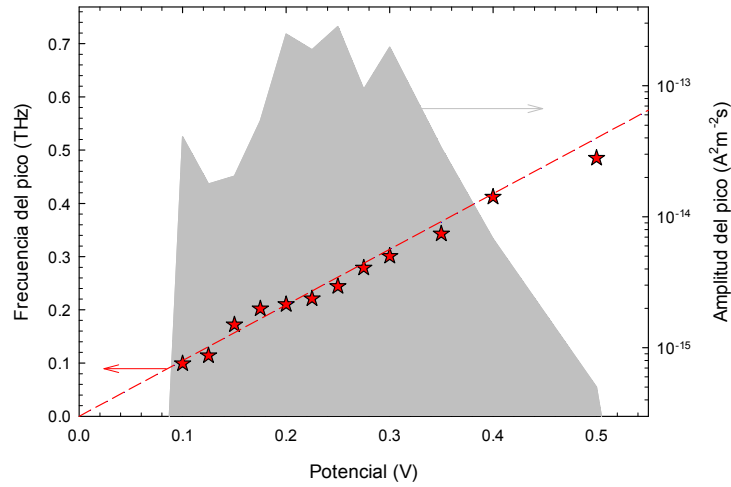


Figura II.21. Frecuencia de la oscilación (recta teórica y resultados de la simulación) y amplitud del pico asociado en la densidad espectral en función del potencial aplicado.

Por debajo de 0.1 V (umbral para la emisión de los fonones ópticos polares) no se aprecia ningún pico en el espectro. Después, para potenciales intermedios, se alcanza la amplitud máxima (frecuencias de oscilación próximas a la del plasma). Para las polarizaciones más altas el fenómeno va desapareciendo gradualmente debido a la ya mencionada disminución de la separación entre las zonas de frenado. La dependencia de la frecuencia de oscilación con el potencial aplicado presenta un muy buen acuerdo con la expresión teórica que indica su proporcionalidad con la polarización (ecuación II.30)

$$f_E = \frac{e}{L\sqrt{2m_0m^*\hbar\omega_0}}V = \kappa V, \quad (\text{II.32})$$

siendo $\kappa \approx 1 \text{ THz/V}$ para la estructura de referencia ($L = 2 \mu\text{m}$).

Finalmente, en la Figura II.22 mostramos de nuevo el espectro en frecuencia de la oscilación de corriente, en escala logarítmica, para el caso de mayor amplitud de oscilación (0.25 V). Con objeto de aportar la máxima información, para calcular este espectro se ha realizado una simulación mucho más larga, que permite apreciar incluso la presencia de varios armónicos (0.5, 0.75 y 1 THz) de la frecuencia fundamental, 0.25 THz.

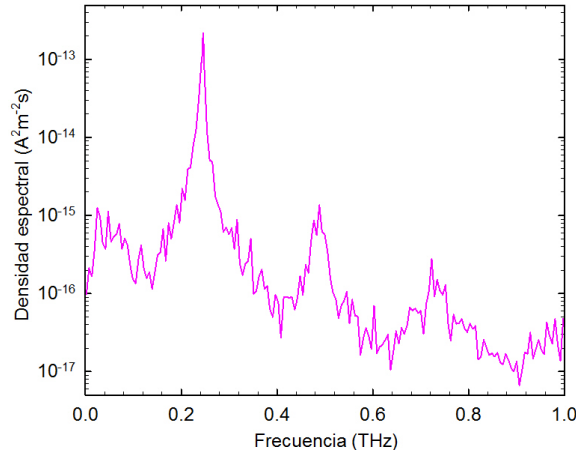


Figura II.22. Densidad espectral para $V=0.25$ V considerando mayor tiempo de simulación.

II.5.3. Modificaciones sobre la estructura inicial

Tras haber mostrado y analizado los resultados obtenidos en las simulaciones de la estructura de partida, en este sub-apartado estudiamos la influencia sobre éstos de variaciones en la temperatura y en la longitud y dopaje de la zona activa.

II.5.3.a. Efecto de la temperatura

i) Temperatura de 40 K

Como podemos apreciar en la Figura II.23, para la temperatura de 40 K aún se observan los *kinks* en la característica $I-V$, pero de manera mucho más suave, y la amplitud de las oscilaciones de corriente se ha reducido muy notablemente.

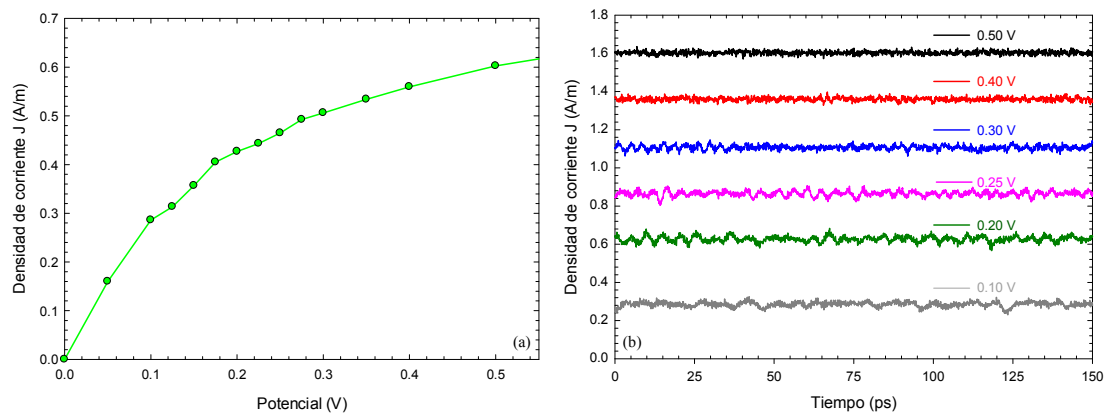


Figura II.23. (a) Densidad de corriente frente al potencial aplicado. (b) Secuencia temporal de la densidad de corriente para varios potenciales aplicados. Para facilitar su visualización, cada secuencia temporal se ha desplazado 0.2 A/m respecto a la anterior. La temperatura de simulación es 40 K.

La razón de este comportamiento, como se avanzaba en la explicación de la OPTTR y ya comprobábamos con los resultados de partícula única, no es otra que el hecho de que al aumentar la temperatura entran en juego otros mecanismos de

scattering (en especial la absorción de fonones ópticos polares) y nos alejamos de la secuencia coherente de aceleraciones y paradas de los portadores a lo largo de la región activa.

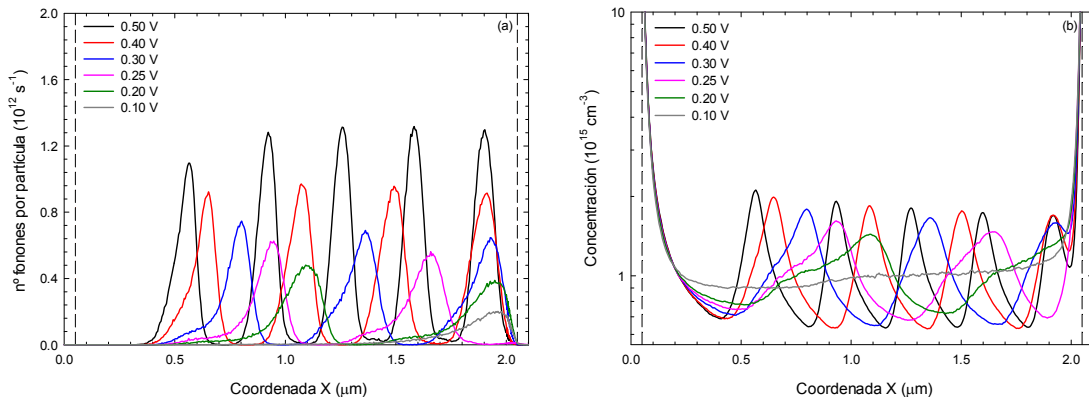


Figura II.24. Perfiles de (a) número de mecanismos de *scattering* con fonones ópticos polares por partícula y por unidad de tiempo y (b) concentración de electrones a lo largo de la estructura para diversos potenciales aplicados. La temperatura de simulación es 40 K.

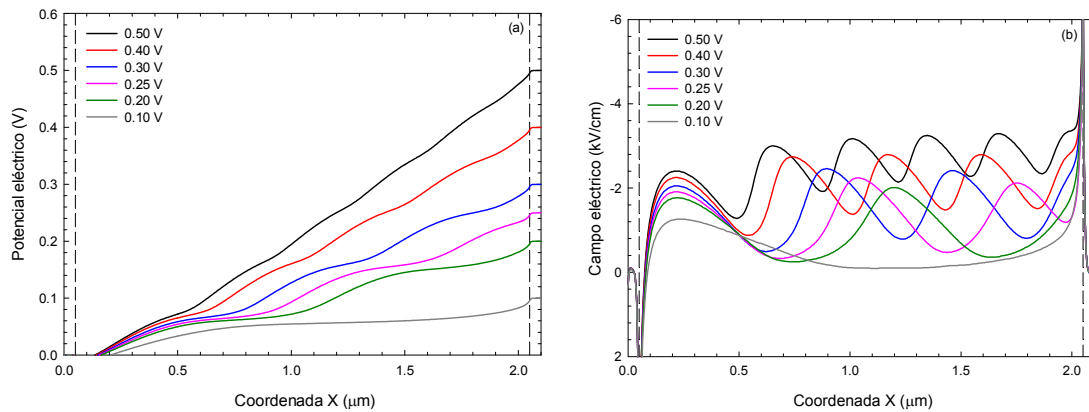


Figura II.25. Perfiles de (a) potencial y (b) campo eléctrico a lo largo de la estructura para diversos potenciales aplicados. La temperatura de simulación es 40 K.

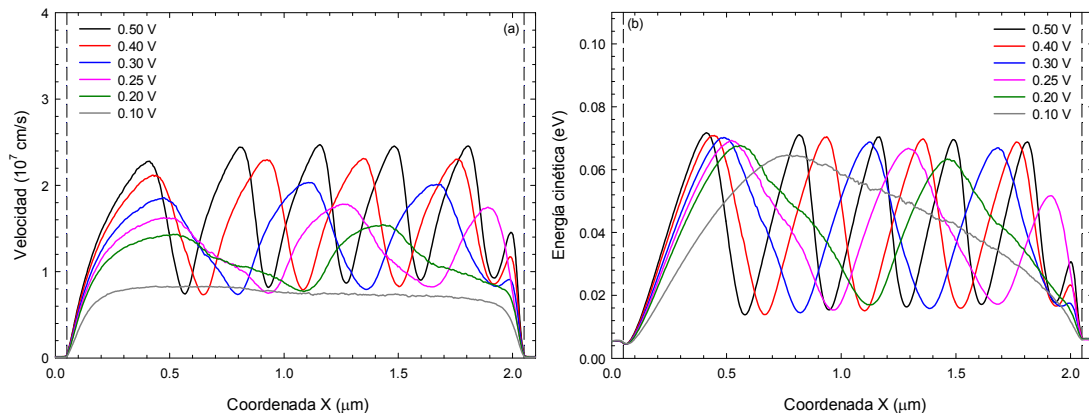


Figura II.26. Perfiles de (a) velocidad y (b) energía cinética de los portadores a lo largo de la estructura para diversos potenciales aplicados. La temperatura de simulación es 40 K.

Al igual que hicimos para la estructura inicial, en la Figura II.24, Figura II.25 y Figura II.26 mostramos los perfiles de varias magnitudes obtenidos tras promediar a lo largo de muchas iteraciones. No es fácil encontrar claras diferencias entre estos perfiles y los correspondientes a 15 K. Lo más relevante es la menor modulación que presentan todas las magnitudes a 40 K. Igualmente, a esta temperatura superior se aprecia que los perfiles exhiben una forma más definida, incluso a los menores potenciales.

Quizá sea la gráfica de la concentración de portadores [Figura II.24(b)] la que más fácilmente muestra esas diferencias. Obsérvese cómo a 40 K y para el potencial de 0.3 V el perfil de densidad de carga es notablemente más definido que el correspondiente a 15 K [Figura II.13(b)], justificándose de esta forma la ausencia de oscilaciones, puesto que la mayor longitud de Debye correspondiente a temperaturas superiores limita los valores del potencial aplicado que siguen satisfaciendo la condición $\lambda_D \ll l_0$.

En la misma línea de la exposición de resultados para la estructura de referencia, en la Figura II.27 mostramos los valores instantáneos del perfil del campo eléctrico a lo largo de un periodo para un potencial aplicado de 0.3 V. Como ocurría a baja temperatura para potenciales más altos, observamos que para 40 K la nitidez en los perfiles del campo eléctrico es patente ya para 0.3 V.

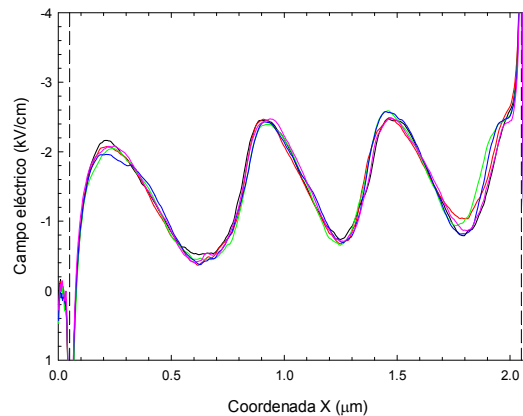


Figura II.27. Evolución del perfil del campo eléctrico a lo largo de un periodo para $V = 0.3$ V y $T = 40$ K.

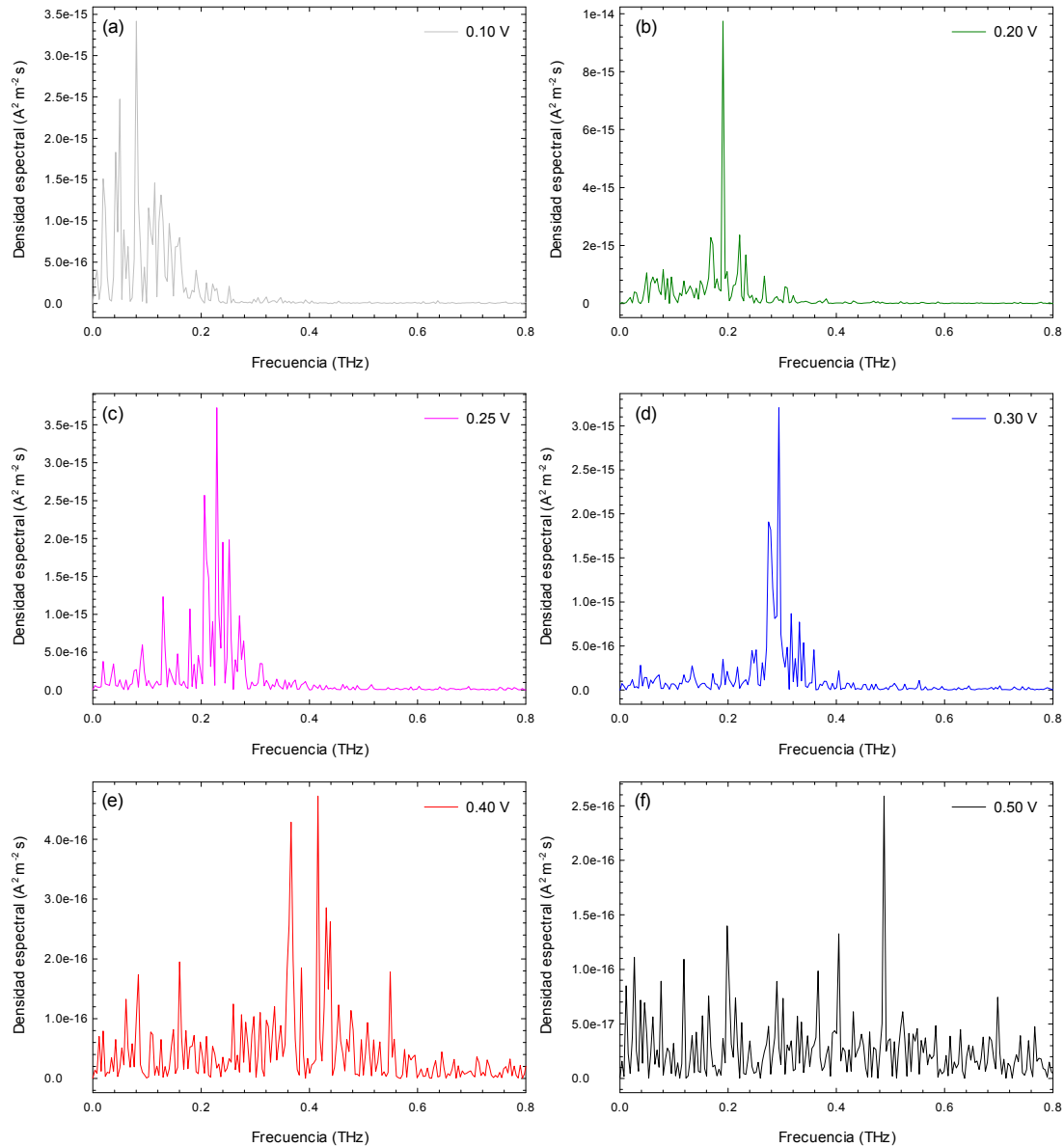


Figura II.28. Densidad espectral de las fluctuaciones de corriente en función de la frecuencia para diversos potenciales aplicados.

En consecuencia, y como vemos en la Figura II.28, los espectros en frecuencia ya no son tan limpios y definidos. No obstante, aún se pueden apreciar picos para potenciales intermedios, de amplitud bastante inferior que para 15 K (prácticamente de un orden de magnitud menos), que siguen manteniendo la relación de proporcionalidad entre frecuencia y potencial aplicado que se deduce del análisis teórico del fenómeno (Figura II.29). Nuevamente, el comportamiento oscilatorio es óptimo en torno a la frecuencia de plasma de la zona n (0.2 THz).

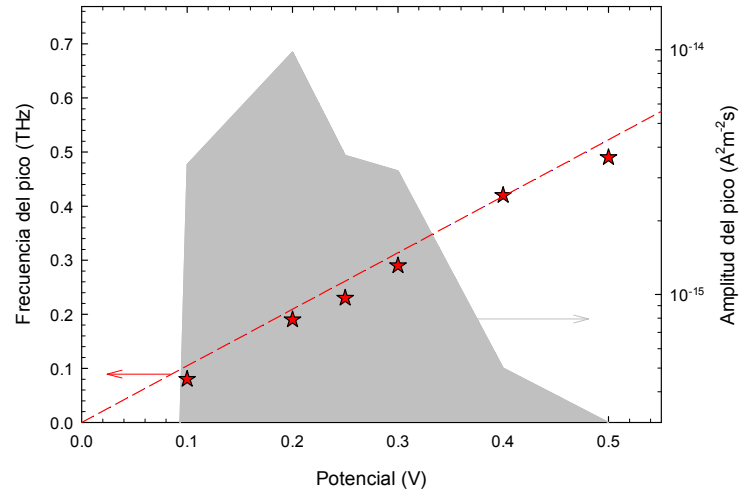


Figura II.29. Frecuencia de la oscilación (recta teórica y resultados de la simulación) y amplitud del pico asociado en la densidad espectral en función del potencial aplicado a 40 K.

ii) Temperatura de 150 K

A esta temperatura, además de los argumentos relacionados con la condición $\lambda_D \ll l_0$, que a temperatura tan elevada difícilmente puede satisfacerse, la presencia notable de otros mecanismos de *scattering* hace desaparecer completamente las oscilaciones de corriente (Figura II.30). Las fluctuaciones observadas en las secuencias de corriente se reducen a ruido.

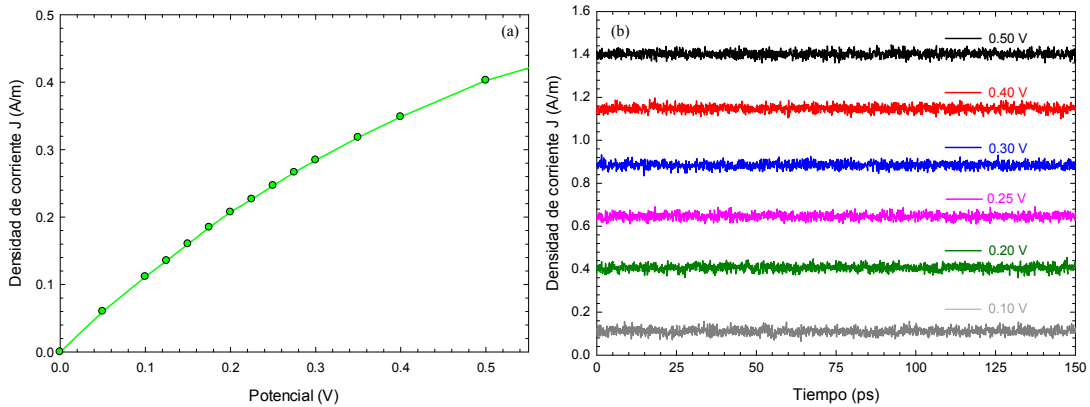


Figura II.30. (a) Densidad de corriente frente al potencial aplicado. (b) Secuencia temporal de la densidad de corriente para diversos potenciales aplicados. Para facilitar su visualización, cada secuencia temporal se ha desplazado 0.2 A/m respecto a la anterior. La temperatura de simulación es 150 K.

Por otra parte, al aumentar la temperatura, la barrera de potencial asociada a la unión n^+n del cátodo disminuye, dando lugar a un incremento en la dispersión de velocidad con la que los portadores son inyectados en la región activa de la

estructura, lo cual, como ya se explicó, dificulta la localización y periodicidad espacial de las zonas de emisión de fonones.

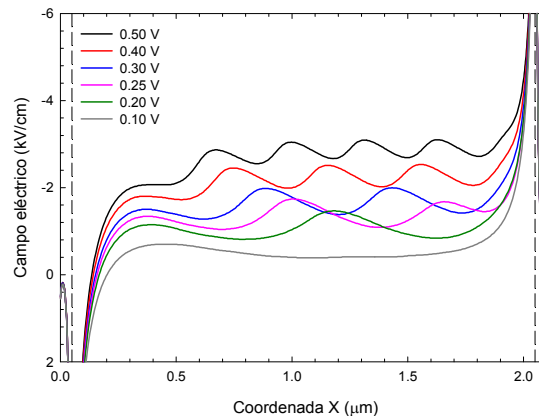


Figura II.31. Perfil del campo eléctrico a lo largo de la estructura para diversos potenciales aplicados. La temperatura de simulación es 150 K.

En esta situación, la modulación de la concentración de carga es muy tenue, de forma que el perfil del campo eléctrico presenta una periodicidad espacial notablemente enmascarada y de amplitud muy reducida, como se observa en Figura II.31.

Si analizamos la evolución del perfil del campo eléctrico a lo largo de algunos picosegundos, Figura II.32, podemos observar que apenas se modifica en el tiempo, y presenta una clara disminución de su amplitud de modulación con respecto a temperaturas inferiores.

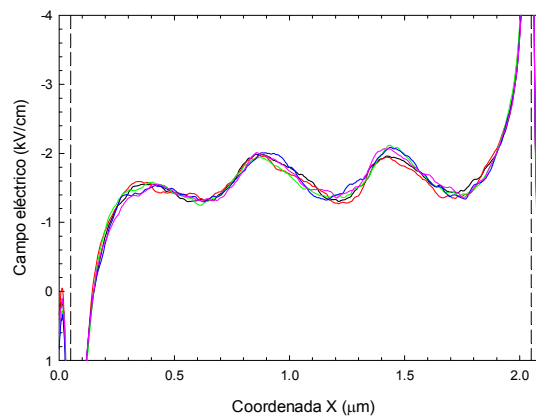


Figura II.32. Evolución del perfil del campo eléctrico a lo largo de un periodo para $V=0.3$ V y $T=150$ K.

II.5.3.b. Longitud de la región activa del diodo

i) Longitud de la zona n de $3 \mu\text{m}$

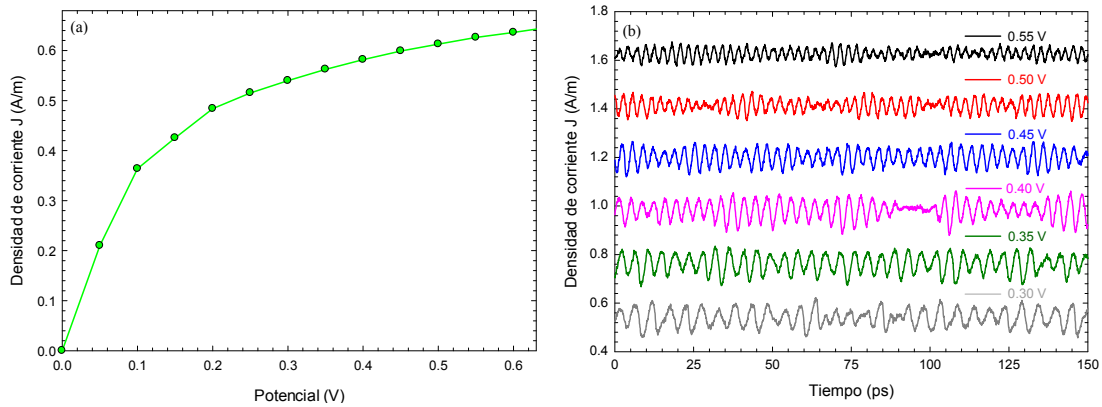


Figura II.33. (a) Densidad de corriente frente al potencial aplicado. (b) Secuencia temporal de la densidad de corriente para diversos potenciales aplicados. Para facilitar su visualización, cada secuencia temporal se ha desplazado 0.2 A/m respecto a la anterior. La longitud de la región activa es de $3 \mu\text{m}$.

Cuando aumentamos la longitud de la región activa del diodo, manteniendo la temperatura a 15 K, las oscilaciones de corriente persisten hasta potenciales aplicados mayores que en la estructura de referencia (zona n de $2 \mu\text{m}$), tal y como se aprecia en la Figura II.33. Esto se debe a que para un potencial aplicado dado, el campo eléctrico medio es menor cuanto mayor es la longitud de la zona n , con lo cual el espaciado l_0 entre las zonas de modulación es mayor (ecuación II.24), como muestra la Figura II.6. El valor máximo del potencial para el que existen oscilaciones resulta evidentemente proporcional a la longitud de la zona activa, correspondiendo a un campo límite de aproximadamente 2.3 kV/cm.

En la gráfica de emisión de fonones ópticos [Figura II.34(a)] se observan perfiles difusos aún para potenciales elevados. Nótese cómo el diodo sigue oscilando para potenciales correspondientes a la emisión de hasta al menos seis fonones, 0.55 V. El perfil de campo eléctrico [Figura II.34(b)] no presenta una tendencia apreciable a valores crecientes al desplazarnos hacia el ánodo, garantizándose así la coherencia del fenómeno y la consiguiente presencia de oscilaciones.

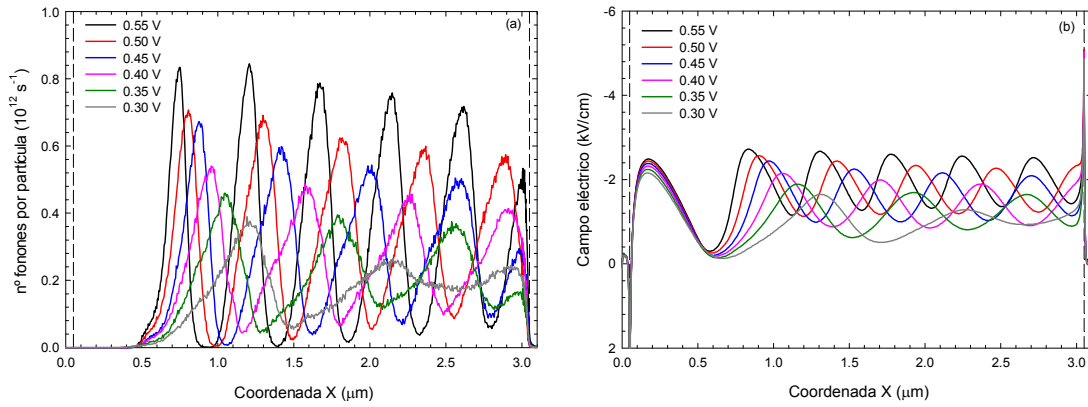


Figura II.34. (a) Número de mecanismos de *scattering* con fonones ópticos polares por partícula y por unidad de tiempo y (b) perfil de campo eléctrico para diversos potenciales aplicados.

Se puede comprobar cómo el espaciado de las zonas de emisión de fonones l_0 coincide con su valor teórico. Por ejemplo, para un potencial aplicado de 0.4 V se obtiene $l_0 = 0.68 \mu\text{m}$, que satisface la condición $\lambda_D \ll l_0$ ($l_0 \approx 27\lambda_D$), obteniéndose claras oscilaciones en la corriente.

La amplitud de las oscilaciones, así como su frecuencia, son muy similares al caso de la estructura inicial. De nuevo se encuentra un perfecto acuerdo con la expresión teórica de la frecuencia frente al potencial aplicado (ecuación II.32 con $\kappa \approx 0.7 \text{ THz/V}$), así como una oscilación óptima alrededor de la frecuencia de plasma (0.2 THz) [Figura II.35].

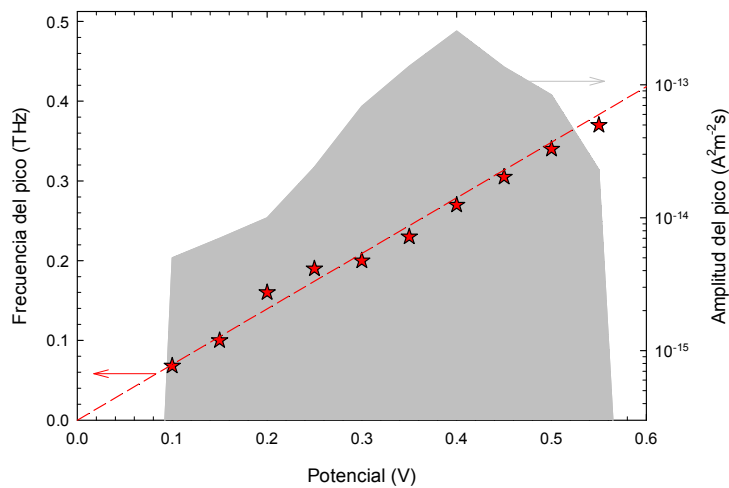


Figura II.35. Frecuencia de la oscilación (recta teórica y resultados de la simulación) y amplitud del pico asociado en la densidad espectral en función del potencial aplicado. La longitud de la zona activa es de $3 \mu\text{m}$.

Aunque sería de esperar que la aparición de las oscilaciones sólo dependiera de la energía del fonón óptico, independientemente de la longitud de la región activa, si

comparamos la Figura II.21 con la Figura II.35, podemos observar que para el diodo más largo el comienzo de las oscilaciones tiene lugar con una amplitud menor. La justificación de este resultado radica en el hecho de que cuanto mayor sea el tiempo de vuelo hasta la emisión del fonón (recuérdese que el campo eléctrico es menor en la estructura larga), mayor será también la probabilidad de que se den otros procesos de *scattering*. Este efecto contribuye, además de la coincidencia con la frecuencia de plasma, a que los valores máximos de amplitud de las oscilaciones se desplacen hacia potenciales aplicados mayores.

ii) Longitud de la zona n de 1 μm

En contraste con el caso anterior, cuando reducimos la longitud de la región activa hasta 1 μm , las oscilaciones de corriente desaparecen para potenciales aplicados bajos, como se observa en la Figura II.36.

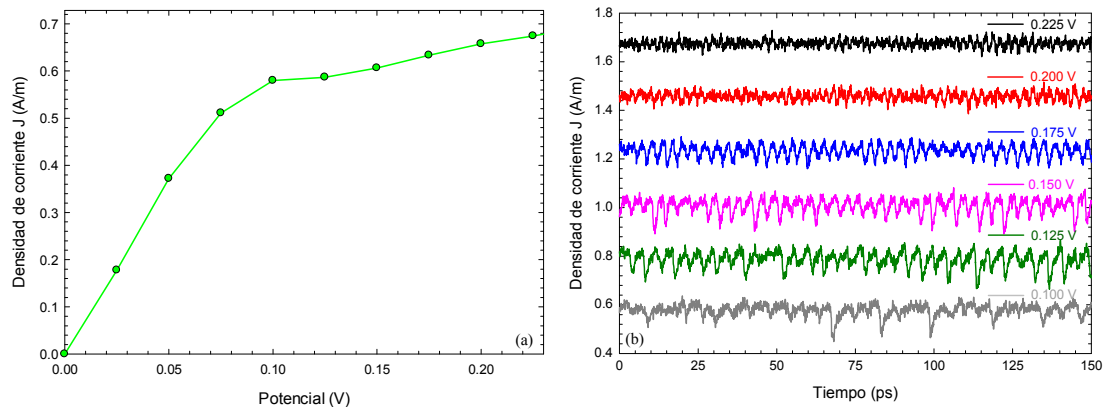


Figura II.36. (a) Densidad de corriente frente al potencial aplicado. (b) Secuencia temporal de la densidad de corriente para diversos potenciales aplicados. Para facilitar su visualización, cada secuencia temporal se ha desplazado 0.2 A/m respecto a la anterior. La longitud de la región activa es de 1 μm .

En la gráfica de emisión de fonones ópticos [Figura II.37(a)] los perfiles son nítidos desde potenciales bajos; sólo son difusos y no localizados para el caso de emisión de un único fonón ($V < 0.2$ V). El campo eléctrico, Figura II.37(b), presenta una tendencia creciente al desplazarnos hacia el ánodo desde potenciales bajos, por lo que se rompe la coherencia y desaparecen las oscilaciones. En términos de la longitud de Debye, ocurre que el rango de potenciales para el que se satisface la condición $\lambda_D \ll l_0$ es muy reducido, pues al ser menor la longitud de la región activa, el campo eléctrico medio para un potencial dado es mayor, de modo que l_0 disminuye.

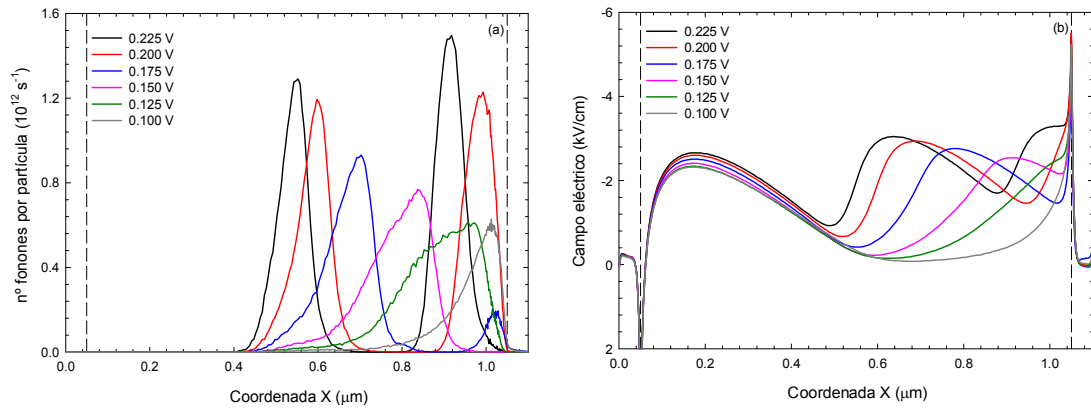


Figura II.37. (a) Número de mecanismos de *scattering* con fonones ópticos polares por partícula y por unidad de tiempo y (b) perfil de campo eléctrico para diversos potenciales aplicados.

Debido a que sólo tenemos oscilaciones significativas para la emisión de un fonón a lo largo de la región activa, los resultados no se ajustan tan bien como en casos anteriores a lo previsto teóricamente para la relación entre frecuencia y potencial aplicado, obteniéndose frecuencias de oscilación menores que las esperadas, Figura II.38. La amplitud de las oscilaciones, mientras éstas tienen lugar, es elevada (pero menor que para las longitudes mayores), siendo máxima de nuevo a la frecuencia de plasma, 0.2 THz.

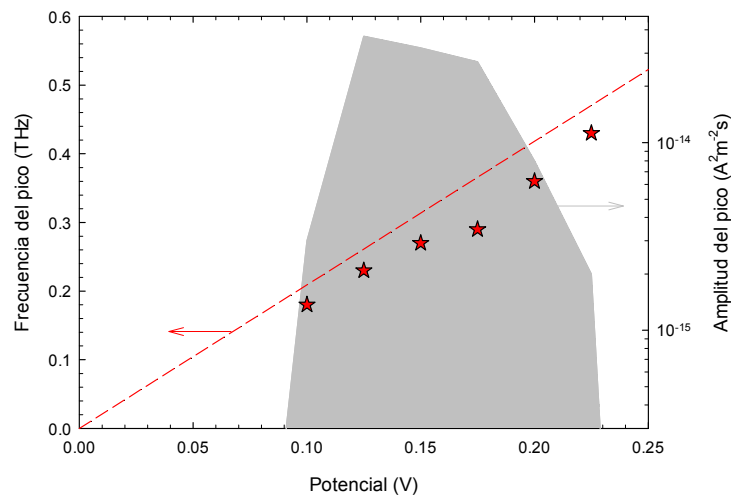


Figura II.38. Frecuencia de la oscilación (recta teórica y resultados de la simulación) y amplitud del pico asociado en la densidad espectral en función del potencial aplicado. La longitud de la zona activa es de $1 \mu m$.

II.5.3.c. Influencia del dopaje de la zona *n*

Una vez estudiada la influencia de la longitud de la zona *n*, analizaremos ahora cómo cambian los resultados si modificamos su dopaje.

Simulamos inicialmente un diodo igual al de referencia salvo en el dopaje de la zona n , que es un orden de magnitud mayor: región activa de longitud $2\ \mu\text{m}$ y dopaje de $10^{16}\ \text{cm}^{-3}$ y zonas n^+ de $50\ \text{nm}$ con dopaje de $10^{17}\ \text{cm}^{-3}$ a una temperatura de $15\ \text{K}$. Como se aprecia en la Figura II.39, las oscilaciones de corriente son muy notables y persisten hasta potenciales aplicados claramente mayores, alcanzando así frecuencias más altas que en la estructura de referencia (Figura II.12).

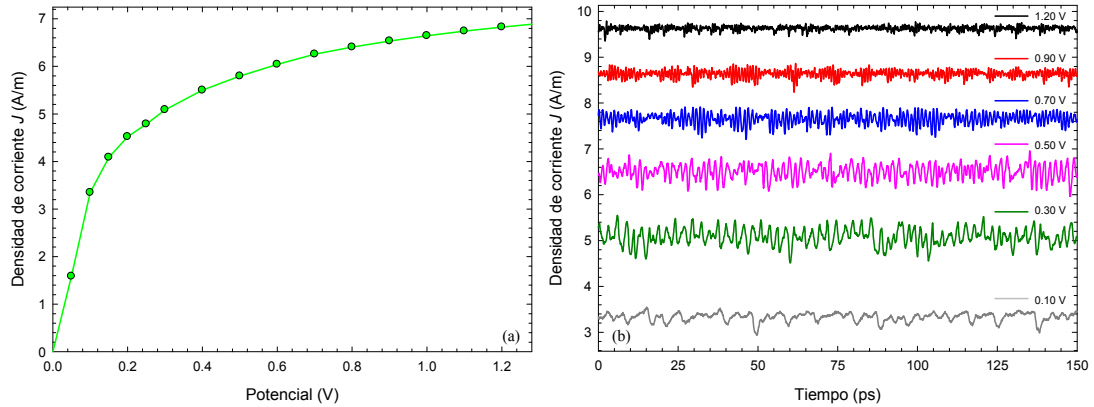


Figura II.39. (a) Densidad de corriente frente al potencial aplicado. (b) Secuencia temporal de la densidad de corriente para diversos potenciales aplicados. Para facilitar su visualización, cada secuencia temporal a partir de $0.5\ \text{V}$ se ha desplazado $0.7\ \text{A/m}$ respecto a la anterior. El dopaje de la región activa es de $10^{16}\ \text{cm}^{-3}$.

El incremento del dopaje de la región activa en un orden de magnitud supone una disminución en la longitud de Debye (ecuación II.12) en un factor de $\sqrt{10}$. En consecuencia, el potencial aplicado y el número de fonones implicados en el fenómeno pueden crecer en ese mismo factor cumpliéndose aún que $\lambda_D \ll l_0$, y teniéndose así oscilaciones. Esto se observa en la Figura II.39 y en la Figura II.40.

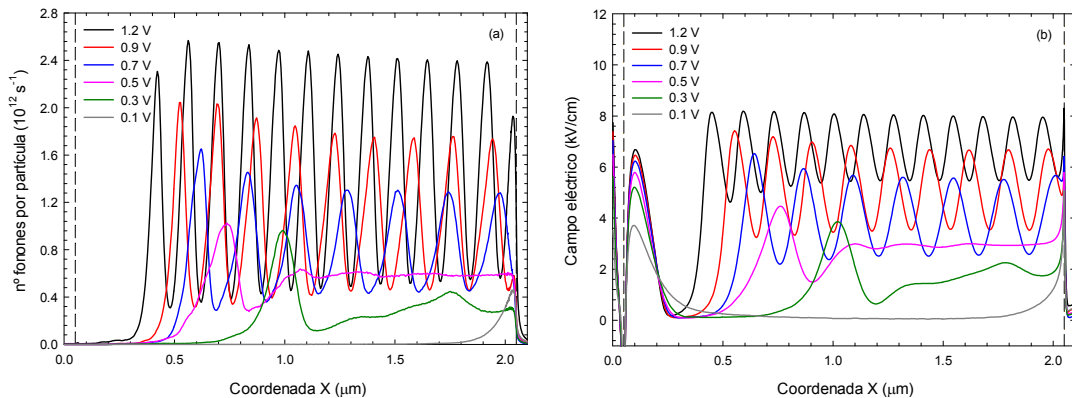


Figura II.40. (a) Número de mecanismos de *scattering* con fonones ópticos polares por partícula y por unidad de tiempo y (b) perfil de campo eléctrico para diversos potenciales aplicados.

Los perfiles mostrados en la Figura II.40 presentan algunas “anomalías” asociadas a la zona de emisión del primer fonón y a que las regiones de emisión y modulación no están claramente definidas hasta que el potencial es mayor que 0.5 V. No es fácil explicar este comportamiento, si bien podría relacionarse con el hecho de que ahora sólo hay un orden de magnitud de variación de dopaje entre las zonas n^+ y la región activa, lo cual reduce la calidad de la inyección de portadores (mayor dispersión en velocidad, condición II.25), aspecto clave en el fenómeno estudiado.

En la Figura II.41 se muestra la frecuencia y la amplitud de las oscilaciones de corriente en función de la polarización, observándose que nuestros resultados se separan de las previsiones teóricas más que en los casos anteriores. Las amplitudes de oscilación son grandes, mayores que en la estructura de referencia, pero su máximo aparece por debajo de la frecuencia de plasma correspondiente a este dopaje, 0.64 THz. Cuando crece la polarización, los valores de frecuencia frente al potencial aplicado se alejan progresivamente de la recta teórica, obteniéndose frecuencias mayores que las previstas. Cabe destacar que, gracias a que las oscilaciones persisten hasta potenciales más elevados, se alcanzan frecuencias de oscilación que superan 1 THz con amplitudes todavía apreciables.

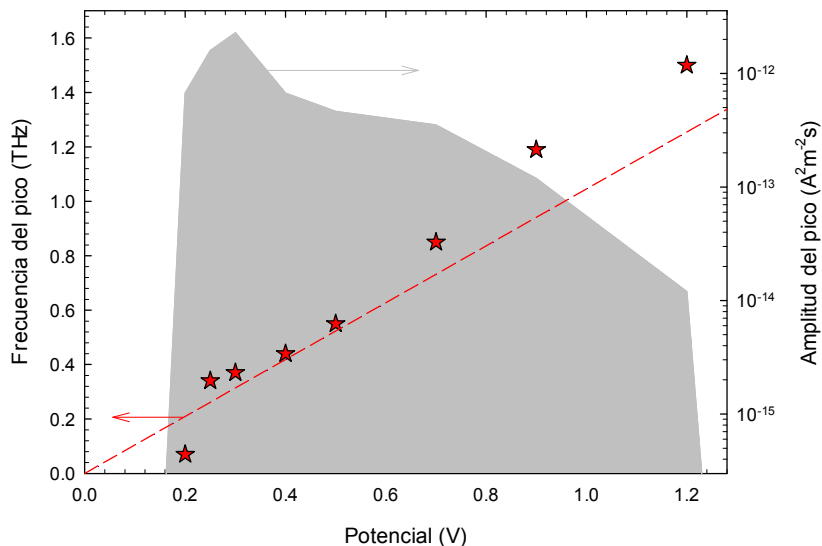


Figura II.41. Frecuencia de la oscilación (recta teórica y resultados de la simulación) y amplitud del pico asociado en la densidad espectral en función del potencial aplicado. El dopaje de la región activa es de 10^{16} cm^{-3} .

Con el fin de profundizar en el estudio del efecto del dopaje en la zona activa, hemos realizado dos nuevas simulaciones. En la primera de ellas aumentamos la temperatura hasta 40 K y en la segunda acortamos la longitud de la zona n hasta $0.5 \mu\text{m}$, manteniendo un dopaje de 10^{16}cm^{-3} .

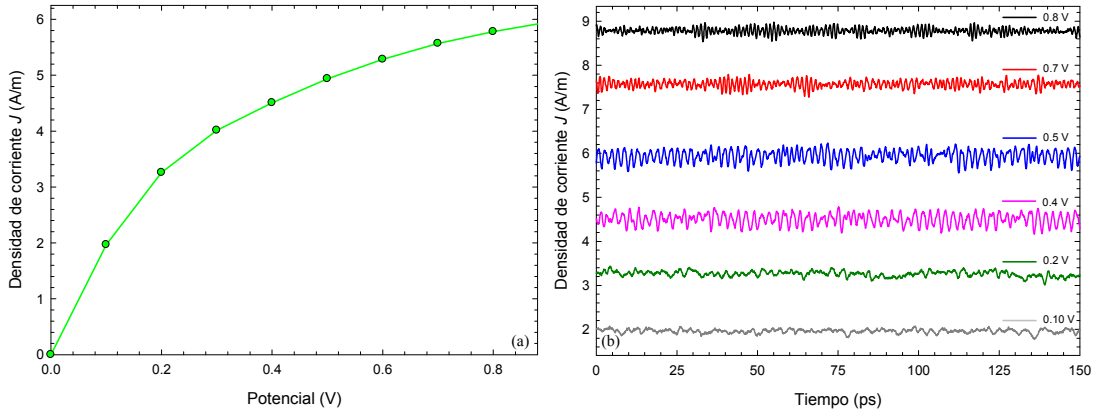


Figura II.42. (a) Densidad de corriente frente al potencial aplicado. (b) Secuencia temporal de la densidad de corriente para diversos potenciales aplicados. Para facilitar su visualización, cada secuencia temporal a partir de 0.5 V se ha desplazado 1 A/m respecto a la anterior. El dopaje de la región activa es de 10^{16}cm^{-3} y la temperatura de simulación de 40 K.

Como se observa en la Figura II.42, correspondiente a la temperatura de 40 K, las oscilaciones de corriente se mantienen hasta potenciales más altos y presentan mayor amplitud que en la estructura de referencia a esa misma temperatura (Figura II.23), como corresponde a la menor longitud de Debye asociada a su mayor dopaje, que intensifica la realimentación ejercida por el campo eléctrico.

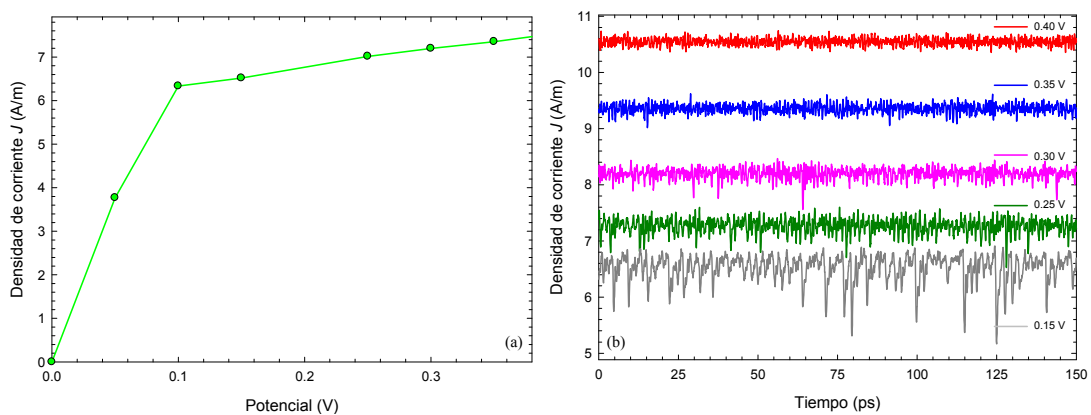


Figura II.43. (a) Densidad de corriente frente al potencial aplicado. (b) Secuencia temporal de la densidad de corriente para diversos potenciales aplicados. Para facilitar su visualización, las secuencias temporales desde la segunda (0.25 V) hasta la quinta (0.4 V) se han desplazado una cantidad de 0.25 A/m, 1 A/m, 2 A/m y 3 A/m, respectivamente. El dopaje de la región activa es de 10^{16}cm^{-3} y su longitud de $0.5 \mu\text{m}$.

En la Figura II.43 se muestran los resultados para la estructura con una zona n de $0.5 \mu\text{m}$. Se puede observar que, debido a la reducción de la longitud de Debye asociada al mayor dopaje de la zona n , es posible encontrar oscilaciones de corriente en la estructura a pesar de su corta longitud. Además, para un potencial dado, éstas son de mayor frecuencia que en casos anteriores (mayor campo eléctrico, ecuación II.30). En una estructura que tuviera esta misma longitud pero un dopaje en la zona n diez veces menor, el potencial necesario para la emisión de un fonón daría lugar a un l_0 mayor que la propia longitud de la región activa, por lo que no resultaría posible la oscilación de corriente.

Finalmente, presentamos los resultados obtenidos para dos diodos con región activa de longitud 1 y $2 \mu\text{m}$ y dopaje de 10^{16}cm^{-3} , y zonas n^+ de 50nm con dopaje de 10^{18}cm^{-3} (diez veces mayor que en los casos anteriores), a la temperatura de 15K . La simulación de estas estructuras implica tiempos de cálculo muy largos como consecuencia de su mayor dopaje, que requiere la consideración de un número más grande de partículas.

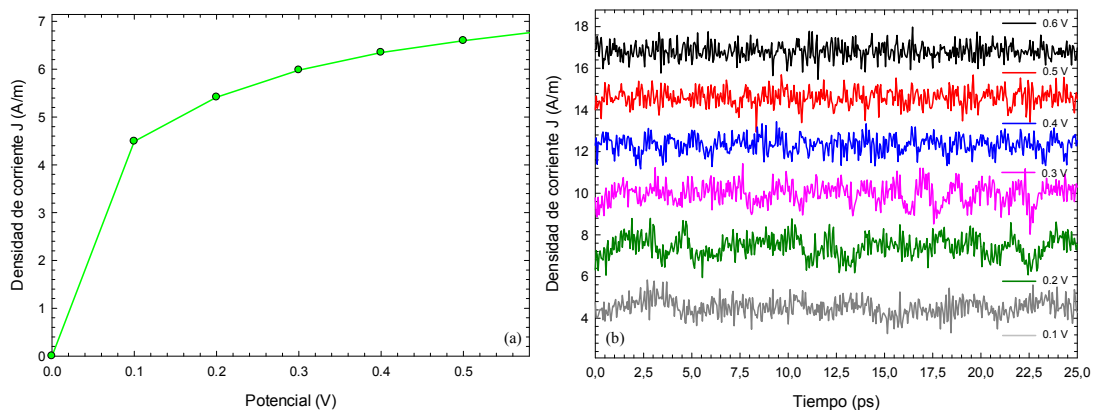


Figura II.44. (a) Densidad de corriente frente al potencial aplicado. (b) Secuencia temporal de la densidad de corriente para diversos potenciales aplicados. Para facilitar su visualización, cada secuencia temporal se ha desplazado 2A/m respecto a la anterior. El dopaje de la región activa es de 10^{16}cm^{-3} y su longitud de $1.0 \mu\text{m}$. El dopaje de las zonas n^+ es de 10^{18}cm^{-3} .

Comenzamos con los resultados del diodo más corto. De nuevo, las oscilaciones de corriente son muy intensas y persisten hasta potenciales aplicados elevados, como se observa en la Figura II.44, dando lugar a frecuencias de oscilación muy altas (nótese que en la Figura II.44(b) se representa un rango temporal menor que en casos anteriores). Si se comparan estos resultados con los obtenidos en la estructura de dimensiones análogas pero con menor dopaje (Figura II.36), se aprecia

que en aquella las oscilaciones prácticamente desaparecían para 0.225 V, mientras que en ésta persisten claramente hasta al menos 0.6 V.

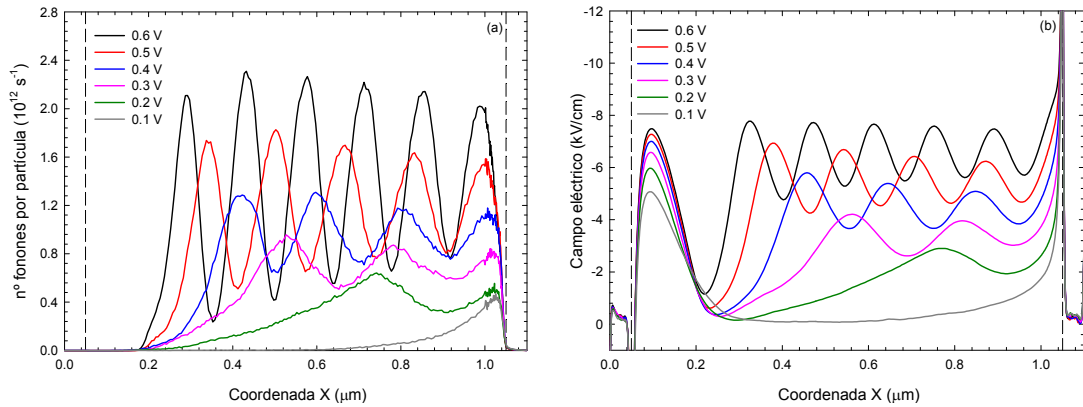


Figura II.45. (a) Número de mecanismos de *scattering* con fonones ópticos polares por partícula y por unidad de tiempo y (b) perfil de campo eléctrico para diversos potenciales aplicados.

Los perfiles de número de fonones y campo eléctrico mostrados en la Figura II.45 son cualitativamente similares a los correspondientes a la estructura de referencia con la zona activa de 1 μm (Figura II.37), si bien, como ya se ha mencionado, el mayor dopaje que presenta esta estructura permite mantener oscilaciones más intensas y hasta potenciales superiores. Obsérvese que, en contraste con lo que ocurría cuando el dopaje de las zonas n^+ era diez veces inferior (Figura II.40), en este caso, gracias a la mejora en la inyección lograda al aumentar dicho dopaje, las zonas de emisión y modulación aparecen bien definidas desde las polarizaciones más bajas.

El espaciado de las zonas de emisión de fonones l_0 coincide como siempre con su valor teórico. Por ejemplo, para un potencial aplicado de 0.4 V se obtiene $l_0 = 0.23 \mu\text{m}$, satisfaciéndose la condición $\lambda_D \ll l_0$ ($l_0 \approx 29\lambda_D$), y dando lugar a apreciables oscilaciones en la corriente.

A pesar de que en las secuencias temporales mostradas en la Figura II.44(b) las oscilaciones asociadas a la OPTTR no se aprecian tan claramente como en casos anteriores (pues da la impresión de existir otra frecuencia inferior superpuesta a la que nos interesa), cuando se calcula la densidad espectral el pico de la oscilación asociado a la OPTTR aparece muy nítidamente. La frecuencia y la amplitud de tales oscilaciones para distintas polarizaciones se muestran en la Figura II.46, apreciándose que, al contrario que en el caso de la Figura II.41, los resultados de la simulación satisfacen plenamente las previsiones teóricas, muy probablemente

gracias a la mejora en la inyección lograda al dopar más las zonas n^+ . La amplitud de las oscilaciones es muy notable, como corresponde al elevado dopaje (mayor realimentación del campo), y se alcanza una frecuencia máxima de 1.3 THz. Se trata pues de una estructura óptima para obtener oscilaciones de cierta intensidad hasta frecuencias elevadas, controlables a través del potencial aplicado.

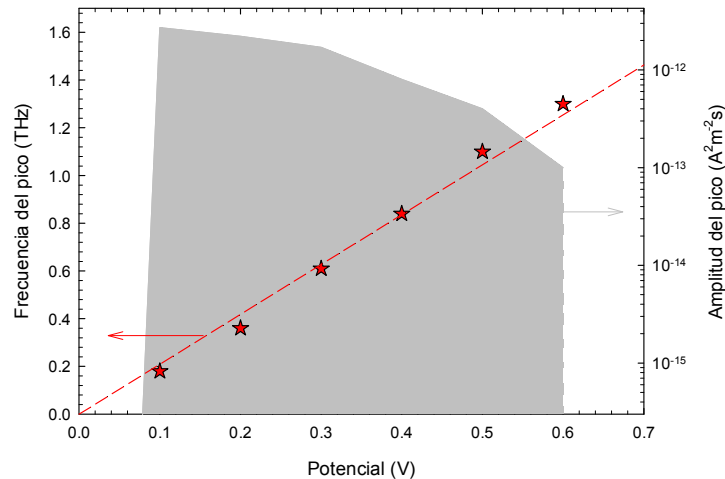


Figura II.46. Frecuencia de la oscilación (recta teórica y resultados de la simulación) y amplitud del pico asociado en la densidad espectral en función del potencial aplicado. El dopaje de la región activa es de 10^{16} cm^{-3} y su longitud de $1 \mu\text{m}$. El dopaje de las zonas n^+ es de 10^{18} cm^{-3} .

No obstante, a la vista de estos resultados se decidió incrementar la longitud de la zona activa hasta $2 \mu\text{m}$ con el objetivo de mantener las oscilaciones en un mayor intervalo de potencial aplicado, como se muestra en la Figura II.47. Nuevamente, si comparamos los resultados con los obtenidos en la estructura de dimensiones análogas pero con menor dopaje (Figura II.21), comprobamos que la mejora en cuanto al rango de potenciales en el que persisten las oscilaciones es verdaderamente importante. Sin embargo, en lo relativo a la amplitud de los picos de los espectros de frecuencia, esta estructura es algo inferior con respecto a la estructura con zona n de $1 \mu\text{m}$ que acabamos de ver (Figura II.46). Esto puede ser debido al hecho de que es más difícil conseguir una perfecta sincronización de tantas zonas de emisión a lo largo de la estructura más larga. Así por ejemplo, para un potencial de 0.9 V observamos que el perfil del número de fonones (Figura II.48) muestra nueve claras zonas de parada, pero la amplitud de las mismas decrece a lo largo de la zona activa y se tornan más extendidas.

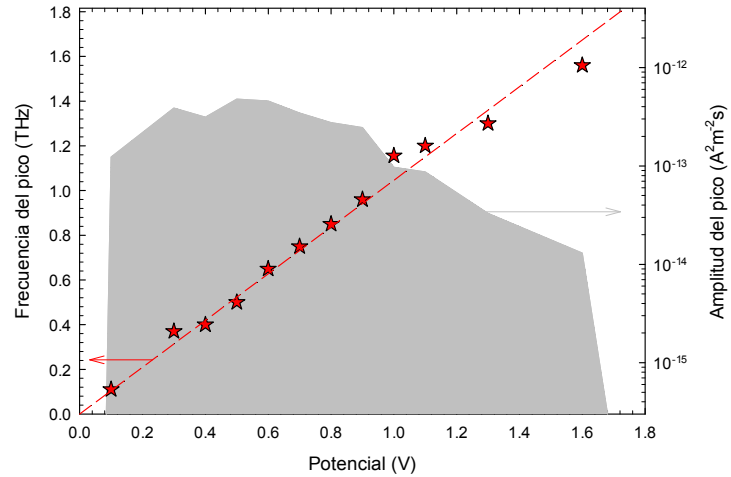


Figura II.47. Frecuencia de la oscilación (recta teórica y resultados de la simulación) y amplitud del pico asociado en la densidad espectral en función del potencial aplicado. El dopaje de la región activa es de 10^{16} cm^{-3} y su longitud de $2.0 \mu\text{m}$. El dopaje de las zonas n^+ es de 10^{18} cm^{-3} .

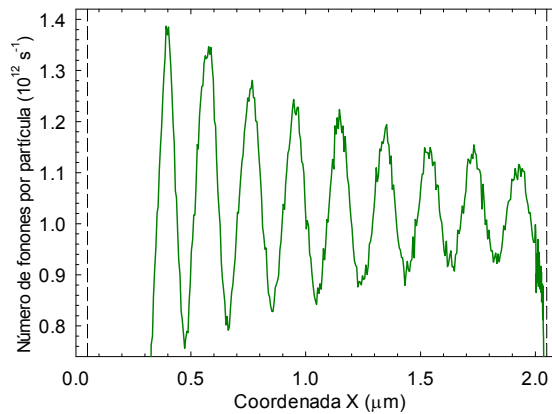


Figura II.48. Número de mecanismos de *scattering* con fonones ópticos polares por partícula y por unidad de tiempo para un potencial aplicado de 0.9 V en el diodo de la Figura II.47.

Finaliza aquí este capítulo dedicado al estudio de la OPTTR, donde se han analizado, desde el punto de vista teórico y de la simulación, las condiciones para tener oscilaciones de corriente de frecuencia elevada en diodos n^+nn^+ de GaN. En el campo experimental, para GaN únicamente hemos encontrado un trabajo de 2010,¹⁵ en el cual encontraron en la característica $I-V$ de una estructura TLM (*Transmission Line Model*) de GaN a 7 K lo que podría ser una evidencia del fenómeno OPTTR. Observaron una pequeña anomalía en la derivada de la curva cuando el potencial aplicado era aproximadamente 0.1 V, valor, como hemos visto, correspondiente a la emisión del fonón óptico polar.

A pesar del evidente interés de este fenómeno, debido al requerimiento de muy baja temperatura, a la escasez de resultados experimentales, y motivado asimismo por la participación de nuestro grupo en el proyecto europeo *ROOTHz* (*Semiconductor Nanodevices for Room Temperature THz Emission and Detection*), se consideró, aproximadamente en el ecuador de este periodo de investigación (mediados del año 2010), desplegar mayores esfuerzos en el estudio de diodos autoconmutantes (SSDs, *Self-Switching Diodes*) basados también en GaN. Como veremos en el capítulo que sigue, se trata de nanodispositivos en cuyo canal las simulaciones MC muestran que debería ser posible encontrar oscilaciones Gunn de muy alta frecuencia (gracias a la elevada velocidad de saturación del GaN), a temperatura ambiente y de potencia suficiente para múltiples aplicaciones.

CAPÍTULO III

OSCILACIONES GUNN EN SSDs DE GaN

Este capítulo, que constituye el otro bloque principal de nuestro trabajo, está dedicado al estudio de los diodos autoconmutantes o *Self-Switching Diodes* (SSDs) como posibles dispositivos osciladores de THz. El SSD consiste en una estructura nanométrica unipolar de dos terminales que, basándose en efectos electrostáticos, proporciona un efecto rectificador de la corriente debido a la asimetría del canal semiconductor, definido por unas zanjais aislantes en forma de L (Figura III.1). Las principales ventajas que poseen los SSDs frente a dispositivos rectificadores tradicionales, como uniones *p-n* o diodos Schottky, son su geometría planar, la sencillez de su fabricación y el hecho de no necesitar barreras ni basar su funcionamiento en la presencia de dopajes o difusión de portadores.

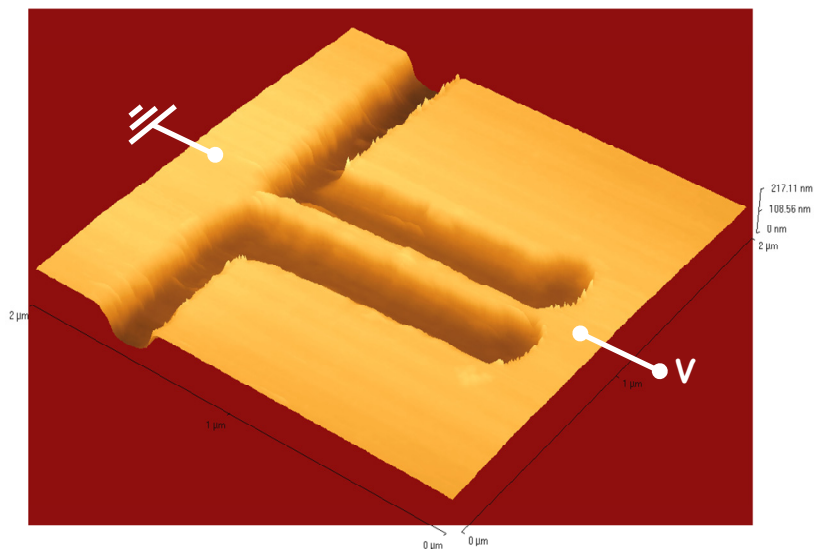


Figura III.1. Topología típica de un SSD. Imagen AFM (*Atomic Force Microscopy*).

El dispositivo, propuesto por A. M. Song,²⁷ estaba inicialmente concebido para realizar operaciones lógicas, pero rápidamente demostró que la alta movilidad de canales III-V como el InGaAs le dota de frecuencias de funcionamiento que pueden llegar incluso a los THz. Así, desde su invención en el año 2003, encontramos un número significativo de publicaciones referentes tanto a medidas experimentales de detección como a simulaciones Monte Carlo (MC) del comportamiento estático, dinámico y de ruido. Es en 2008 cuando la funcionalidad de este diodo aparentemente sencillo se ve aumentada a un nivel más: la posibilidad de generación de potencia por medio de oscilaciones tipo Gunn. Aunque todavía no existen medidas experimentales que lo confirmen, las simulaciones numéricas MC predicen la posibilidad de generación de frecuencias muy elevadas utilizando nitruro de galio (GaN). En este capítulo presentaremos los resultados de simulaciones de SSDs basados en GaN y las medidas realizadas encaminadas a la búsqueda de la emisión de THz a temperatura ambiente.

La estructura de este capítulo es la siguiente. En primer lugar, en similitud con el capítulo anterior, describiremos el fenómeno físico en el que se basa la generación de oscilaciones en los SSDs, el efecto Gunn. A continuación presentaremos el dispositivo, su principio de funcionamiento, una breve revisión bibliográfica, detalles tecnológicos de su fabricación y caracterización, etc. Y en último lugar pasaremos a la presentación de los resultados de las simulaciones, realizadas para una gran variedad de geometrías y parámetros característicos. Conviene señalar que la exposición de los resultados se hará de manera cronológica conforme a cómo fueron calculados. De hecho, incluimos un diagrama de flujo que facilita la identificación de cada sección dentro del progreso de nuestro trabajo y pone de manifiesto que ha existido una realimentación continua de nuestras simulaciones con la fabricación y caracterización experimental de los SSDs realizadas en el IEMN (*Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie*) en Lille (Francia). Así, los resultados reflejarán la evolución de las estrategias de diseño y modelos de simulación usados. Los resultados que mostramos son de todo tipo: características $I-V$, secuencias temporales de corriente, perfiles espaciales de múltiples magnitudes, espectros de frecuencia, imágenes SEM (*Scanning Electron Microscope*), máscaras de los SSDs fabricados, etc.

III.1. EFECTO GUNN

Como vimos en la introducción de este trabajo, otra de las alternativas existentes desde la vía electrónica para conseguir señales de muy alta frecuencia son los dispositivos orientados a generar oscilaciones en la corriente por un mecanismo de transferencia de electrones que acabaría denominándose efecto Gunn. Los diodos SSD, protagonistas de este tercer capítulo de nuestro trabajo, son un posible ejemplo de estos dispositivos.

Consideramos interesante hacer una breve presentación cronológica de los acontecimientos científicos más importantes relativos al descubrimiento de este fenómeno antes de dar paso a su explicación en detalle.^{24,25,110-117}

III.1.1. Búsqueda de NDR y descubrimiento del efecto Gunn

En torno a 1950 se empezó a estudiar la posibilidad de contar con una resistencia diferencial o incremental negativa (NDR del inglés *Negative Differential Resistance*) en dispositivos semiconductores con el propósito de conseguir osciladores y amplificadores de estado sólido. Si bien esta correspondencia entre NDR y capacidad para oscilar, que en la actualidad asumimos sin plantearnos duda alguna, suele justificarse en términos circuitales,^{116,118,119} me permitiré dedicar unas líneas a explicar la cuestión a partir del análisis de la dinámica de los portadores, como ya lo hizo Ridley en 1961 siguiendo una sugerencia de Reik,¹¹⁰ y como han recogido otras publicaciones.^{115,117,120}

La Figura III.2 presenta la característica velocidad-campo (v - E) correspondiente a un semiconductor volúmico tipo n sin especificar, con una densidad n de electrones libres de carga e . Recordemos que la movilidad μ se define como el parámetro que relaciona velocidad y campo eléctrico ($v = \mu E$), y que se llama movilidad diferencial a la pendiente en cada punto de la curva, $\mu_d = \partial v / \partial E$. Así, en el ejemplo mostrado tenemos que a partir de un campo umbral E_{th} el semiconductor presenta una movilidad diferencial negativa. Puesto que la resistencia es proporcional a la resistividad ρ , y ésta a su vez cumple $\rho = 1/en\mu$, se desprende que tener una movilidad diferencial negativa puede equivaler en último término a tener una NDR. Por ello, acorde con la terminología habitual en la literatura, nos referiremos al fenómeno descrito como NDR.

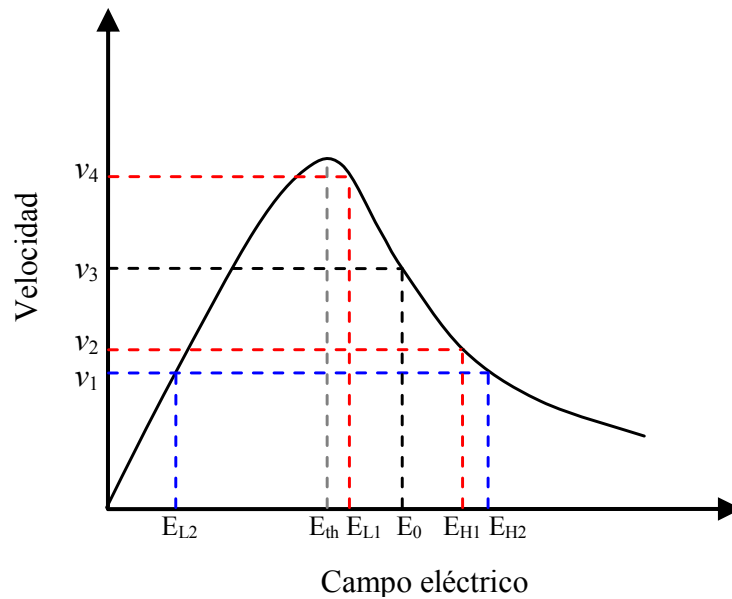


Figura III.2. Característica v - E de un semiconductor que presenta movilidad diferencial negativa a partir de un campo E_{th} .

Sea una muestra de longitud L de ese material, la polarizamos a un potencial de continua V_0 tal que el campo eléctrico, *a priori* uniforme, toma un valor $E_0 = V_0 / L$ dentro del intervalo correspondiente a la NDR (ver Figura III.3).

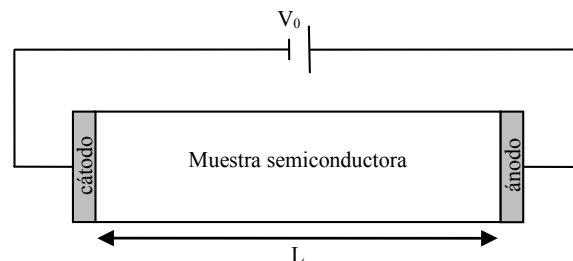


Figura III.3. Muestra de longitud L del material con NDR polarizada a V_0 .

Ahora supongamos que en $t = t_1$, por algún motivo (efectos térmicos, irregularidades geométricas, inhomogeneidades de dopaje, etc.)^{110,112} aparece una pequeña perturbación local en la densidad de carga, como muestra la línea roja de la Figura III.4(a). En la Figura III.4(b), también en color rojo, observamos el correspondiente perfil del campo eléctrico en presencia de la perturbación.

Los electrones en el punto A experimentan un campo E_{L1} menor que E_0 y viajarán hacia el ánodo a velocidad v_4 , que es mayor que la velocidad v_3 correspondiente a E_0 , como refleja la Figura III.2. Por el contrario, los electrones en el punto B experimentan un campo mayor E_{H1} , y se mueven a velocidad v_2 menor

que v_3 y v_4 . De esta manera, a medida que los portadores viajan hacia el ánodo, se irán acumulando electrones entre los puntos A y B, mientras que la zona inmediatamente posterior a B se vacía progresivamente de electrones debido a que viajan a velocidad mayor que v_2 . Ese dominio dipolar se propaga y continúa creciendo hasta que los electrones de los puntos C y D viajen a la misma velocidad v_1 (ver curvas azules de la Figura III.4). Entonces el dominio se dice estable, maduro.

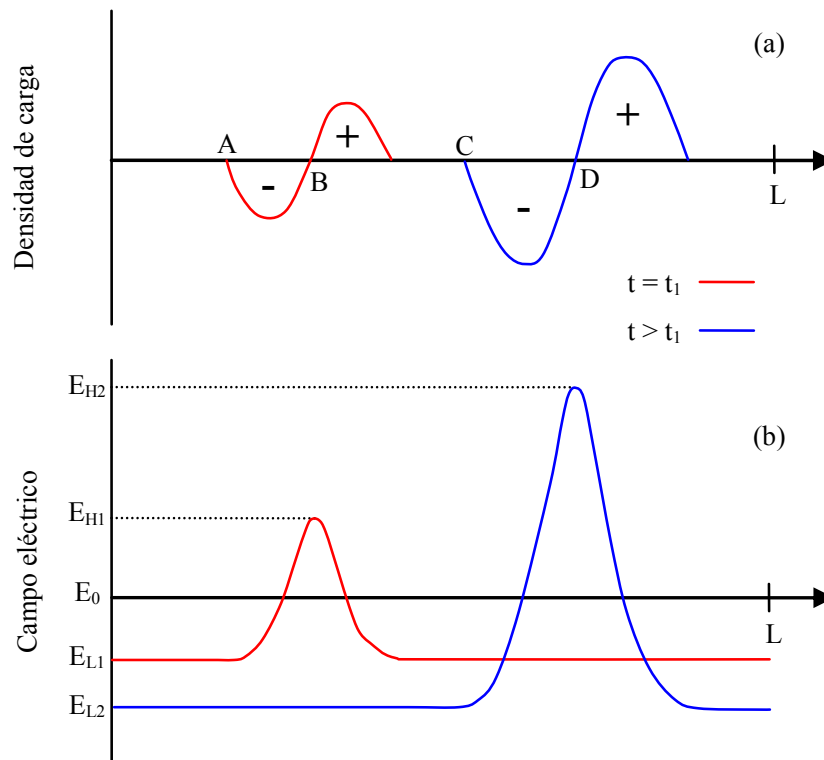


Figura III.4. Perfiles de (a) la densidad de carga y (b) el campo eléctrico en la formación de un dominio a partir de una perturbación inicial en la muestra semiconductor con NDR.

Como vimos en el capítulo anterior cuando explicábamos el teorema de Ramo-Shockley, el transporte de portadores dentro del dispositivo implica corriente en el circuito. Si lo que se desplaza son estos dominios de carga tendremos una corriente variable, es decir, con oscilaciones sobre un valor medio.

Si repitiéramos el razonamiento, esta vez para la zona de movilidad diferencial positiva, concluiríamos que, en ese caso, las posibles perturbaciones locales tienden a reducirse y desaparecer, tal y como era de esperar.

Explicado el interés de contar con una NDR, retomemos la exposición de los estudios que se iniciaron hace medio siglo en la búsqueda de dicha propiedad, donde

acabaremos descubriendo cuál es el fenómeno físico causante de la creación de los dominios en el caso del efecto Gunn.

Tal y como recoge la Ref. 115, vamos a restringirnos a los estudios que buscaban esa NDR a través de propiedades únicamente de los materiales y no de fenómenos asociados a las características de ciertas uniones, como fue el caso de diodo túnel descubierto por Leo Esaki.^{117,119,121} Además, es de señalar que en lo que sigue nos referimos solamente a procesos controlados por potencial aplicado y no por corriente, casos estos últimos en los que se forman filamentos longitudinales de alta intensidad de corriente no estables al añadir un circuito resonante externo.¹¹²

Una de las primeras ideas planteadas se basaba en aplicar campos eléctricos muy elevados para llevar electrones a estados con masa efectiva negativa situados en la parte superior de la banda de conducción. Si esos estados pudieran poblarse suficientemente se obtendría una movilidad diferencial negativa, es decir una NDR. Se emplearon en principio muestras de germanio (Ge) tipo n (Ryder y Shockley en 1951, Ryder en 1953, Shockley y Mason en 1954, Shockley en 1954, Gunn en 1956 y Arthur *et al.* en 1956)¹¹⁵ pero no se alcanzó el objetivo buscado puesto que, como se demostró, su velocidad electrónica no disminuye para campos elevados sino que satura. La esperada ocupación de los estados de masa efectiva negativa no tiene lugar debido a las importantes pérdidas de energía correspondientes a emisiones de fonones ópticos, *scattering* que domina el comportamiento a campos elevados. También se llevaron a cabo estudios similares en Ge tipo p con idénticos resultados (Kroemer en 1959 y Dousmanis en 1960).¹¹⁵

Más adelante, Ridley y Watkins¹¹⁰ en 1961 y, de manera independiente, Hilsum¹¹¹ en 1962, plantearon como posible origen de una NDR la transferencia de electrones desde estados de baja masa efectiva (alta movilidad) a estados de mayor masa efectiva (menor movilidad) al incrementar el campo aplicado. Como materiales recomendables proponían, por ejemplo, algunos semiconductores III-V, debido a que éstos presentan la estructura de bandas multivalle requerida. Desarrollaron estudios teóricos detallados sobre el antimonio de galio y el arsénio de galio. Pero no fue hasta 1963 cuando J. B. Gunn²⁴ observó por vez primera oscilaciones coherentes de corriente a frecuencias de microondas en semiconductores tipo n sometidos a elevados campos eléctricos mediante polarizaciones de continua (ver Figura III.5).

Los experimentos iniciales tuvieron lugar en muestras homogéneas tipo n de arseniuro de galio (GaAs) y fosfuro de indio (InP).

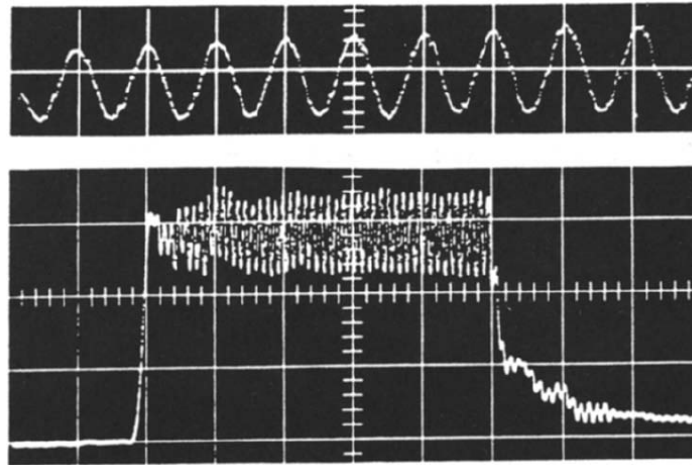


Figura III.5. Imágenes de la pantalla del osciloscopio de la primera comprobación experimental de las oscilaciones de corriente por efecto Gunn. Se aplicó un pulso de 16 V de amplitud y duración de 10 ns a una muestra de GaAs de 25 μm de longitud. La traza superior es simplemente un zoom de la inferior para observar mejor las oscilaciones, que presentan una frecuencia de 4.5 GHz. Imagen extraída de la Ref. 24.

Gunn comprobó que no había efectos significativos en cuanto a la orientación cristalográfica, temperatura o resistividad en un amplio intervalo, y puso de manifiesto que el efecto Gunn está asociado básicamente al material semiconductor del que está hecha la muestra y no tiene que ver con los contactos dispuestos sobre ella. No obstante, en aquellas publicaciones declaró no conocer el mecanismo responsable de ese fenómeno y desestimó que pudiera ser la transferencia de electrones a valles superiores, así como otras posibilidades planteadas (Figura III.6).

The mechanism leading to the oscillations is not yet understood. The fact that the critical electron drift velocity is about 30 times the velocity of sound,⁶ and the absence of orientation effects, make it unlikely that the amplification of piezoelectrically active acoustical waves⁷ is important. It is possible that the fluctuations of current represent non-linear effects of the amplification of polar optical modes,⁸ or of a transfer of electrons to higher minima of the conduction band.⁹ Calculation suggests, however, that the observed critical drift velocity of about 10^7 cm sec.⁻¹ is several times too small to fit either of these mechanisms, and for the present the question remains open.

Figura III.6. Extracto de la publicación de 1963 donde Gunn declaraba no conocer el mecanismo origen de las oscilaciones observadas en la corriente e incluso descartaba que fuera la transferencia de electrones a valles superiores.²⁴

Sin embargo, en 1964 Kroemer¹¹³ (basándose en trabajos anteriores de Hilsum) rebatió los argumentos que Gunn esgrimía para descartar el mecanismo de transferencia electrónica y puntualizó también ciertas simplificaciones que Ridley introdujo al estudiar la dinámica de los dominios que se propagarían a lo largo del material. Un año más tarde, el trabajo experimental de Hutson *et al.* demostró que el campo umbral para la aparición de oscilaciones disminuía al reducir la diferencia energética entre valles cuando se aplica presión a una muestra de GaAs.¹¹⁵ De esta manera se retomó con más fuerza la idea de que, efectivamente, y tal y como pronosticaron años antes Ridley, Watkins y Hilsum, era el mecanismo de transferencia de electrones a valles superiores con menor movilidad el que explicaba las observaciones experimentales. Desde entonces, tanto el proceso de transferencia electrónica como las consecuentes oscilaciones en la corriente, así como los diodos basados en este fenómeno físico, adoptaron el nombre de su “descubridor”, y nos referimos a ellos como efecto, oscilaciones y diodos Gunn, respectivamente.

Fue también Gunn el que, en 1964, comprobó experimentalmente la existencia de dominios viajando a lo largo de las muestras.¹¹⁵ Empleó una sonda capacitiva para explorar tanto la distribución espacial de potencial como su dependencia temporal, aunque la resolución no era suficiente como para determinar la forma de los dominios. Heek *et al.* en 1965 llevaron a cabo medidas similares, corroborando la existencia de estrechos dominios de campo elevado desplazándose por el material.¹¹⁵

Se ha de indicar que en aquellos años se observaron asimismo manifestaciones de NDR consecuencia de otros mecanismos distintos a la transferencia electrónica, como las inestabilidades controladas por trampas o la amplificación piezoeléctrica de fonones ópticos. Sin embargo, la característica diferenciadora del efecto Gunn era la elevada velocidad de propagación de los dominios, del orden de 10^7 cm/s , que se traducía en frecuencias en la región de microondas al emplear muestras de decenas de micras, factor que despertó un gran interés por sus potenciales aplicaciones.

Así, en los años venideros se continuó investigando en este fenómeno y se observaron oscilaciones en muestras de tipo *n* de telururo de cadmio (Foyt y McWhorter en 1966), aleaciones de fosfuro y arseniuro de galio (Allen *et al.* en 1965) y arseniuro de indio bajo tensión uniaxial (Allen, Shyam y Pearson en 1966), y pronto fue posible disponer de osciladores de alta frecuencia que producían cantidades apreciables de potencia de microondas.¹¹⁵ Evidentemente, en la actualidad

el objetivo ha evolucionado y se trabaja para lograr generación de señales de THz. Para ello nuestra apuesta son los SSDs de GaN, que en este capítulo presentamos en detalle.

III.1.2. Estructura de bandas y mecanismo de transferencia de electrones

En general los materiales III-V tipo n en los que tiene lugar el efecto Gunn presentan una estructura similar de bandas de energía, como la mostrada en la Figura III.7. El mínimo de la banda de conducción está situado en el punto Γ (valle Γ) y los siguientes mínimos están habitualmente sobre los puntos L y X (valles L y X, respectivamente). Como se desprende de su menor curvatura, estos valles superiores confieren a los electrones una masa efectiva mayor que la correspondiente al valle Γ , donde los electrones son más rápidos. Las diferencias de energía $\varepsilon_L - \varepsilon_\Gamma$ y $\varepsilon_X - \varepsilon_\Gamma$ son suficientemente pequeñas como para que sea posible la transferencia de electrones desde el valle Γ a los valles satélites, pero a su vez suficientemente grandes ($\gg k_B T$) para que esa transferencia sólo sea posible para campos aplicados elevados. Por otro lado, el *gap* entre la banda de valencia y la de conducción, ε_Γ , ha de ser mayor que las diferencias entre los mínimos de la banda de conducción para que no ocurran mecanismos de ionización por impacto antes que la transferencia intervalle.

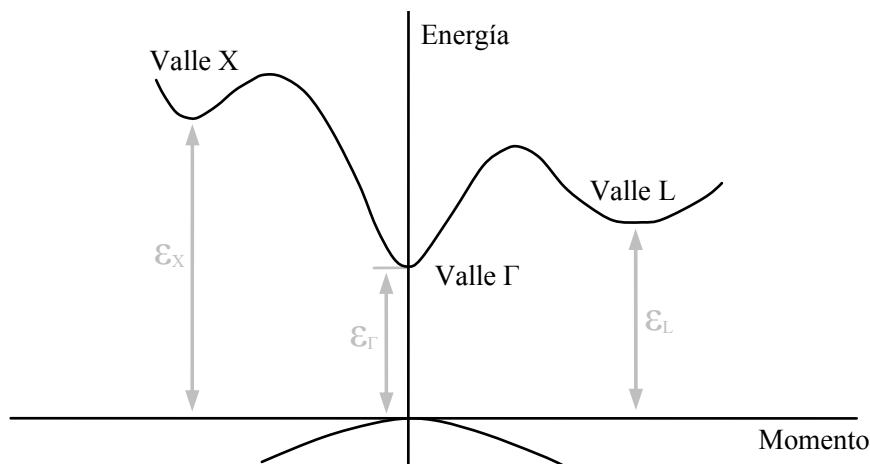


Figura III.7. Estructura multivalle de la banda de conducción típica de los materiales III-V en los que tienen lugar las oscilaciones Gunn.

Éste es el caso del GaAs y el InP, los materiales en los se observaron por primera vez las oscilaciones Gunn. Sin embargo, en el material del canal de nuestros

SSDs, el GaN, el mínimo de la banda de conducción está en el punto Γ (valle Γ_1), el primer mínimo inmediatamente superior está en el punto U (valle U), y a continuación se tiene un mínimo de nuevo en el punto Γ (valle Γ_3), como mostraba la Figura I.7. No obstante, esta diferencia es irrelevante en términos de la validez de la descripción que presentamos.

Para explicar el mecanismo de transferencia electrónica consideramos un modelo simplificado a dos valles en la banda de conducción para un material tipo n (ver Figura III.8).

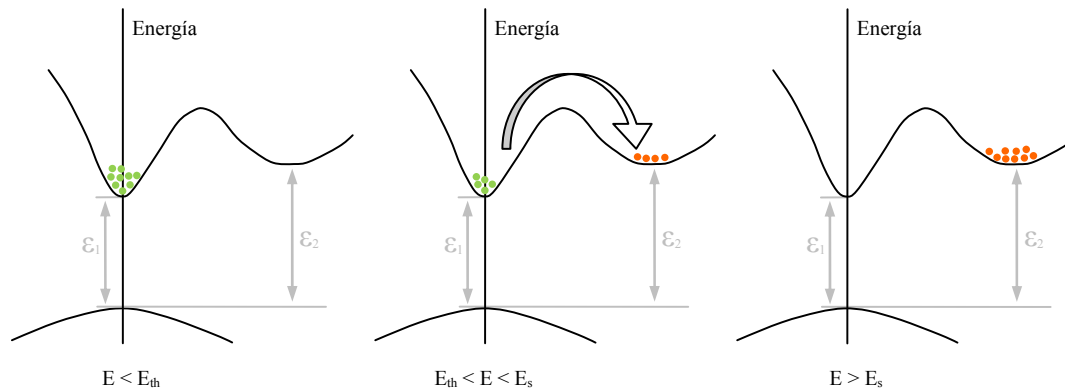


Figura III.8. Mecanismo de transferencia electrónica a un valle superior de menor movilidad al incrementar el campo eléctrico aplicado.

Denotamos por μ_1 la movilidad de los electrones en el valle inferior, el valle 1, y n_1 será su ocupación. De manera equivalente, para el valle superior, el valle 2, empleamos μ_2 y n_2 . Como decíamos, los electrones son más lentos en el valle 2, es decir, se cumple que $\mu_2 < \mu_1$.

Como se observa, para campos débiles, por debajo de un cierto valor umbral E_{th} , todos los electrones, n , se encuentran en el valle 1, es decir, $n_1 = n$, y la movilidad será μ_1 . Cuando el campo aplicado supera ese valor umbral, los electrones comienzan a pasar al valle 2, $n_1 + n_2 = n$, y tendremos una movilidad media dada por

$$\bar{\mu} = \frac{\mu_1 n_1 + \mu_2 n_2}{n_1 + n_2}, \quad (\text{III.1})$$

que disminuye a medida que aumenta el campo debido a la mayor transferencia de electrones al valle superior. Finalmente, cuando el campo supera el valor E_s todos los electrones ya habrían pasado al valle 2, $n_2 = n$, y la movilidad sería μ_2 .

La curva velocidad-campo tendrá, por lo tanto, tres regiones correspondientes a las situaciones que acabamos de citar, como vemos en el esquema de la Figura III.9. Se observan dos zonas de comportamiento óhmico, es decir, rectas de pendiente positiva de valor μ_1 para campos menores que E_{th} , y valor μ_2 para campos mayores que E_s . Y para valores entre E_{th} y E_s , debido a la transferencia de electrones al valle superior, aparece la NDR, es decir, la pendiente de la curva se hace negativa de manera que la movilidad disminuye.

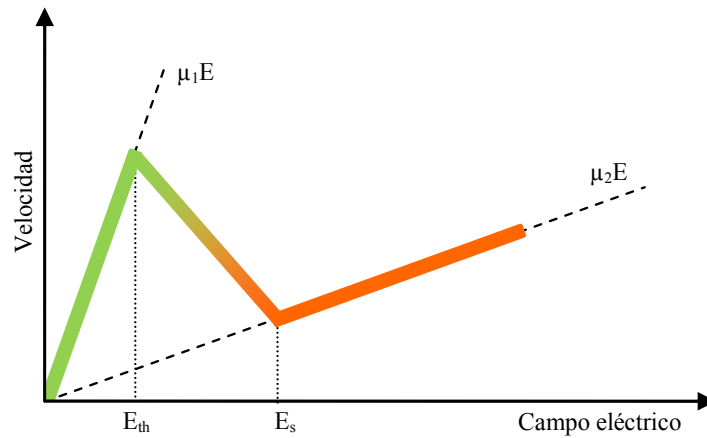


Figura III.9. Esquema de la característica v - E que presenta pendiente negativa, es decir NDR, para campos entre E_{th} y E_s , de acuerdo con la transferencia de electrones mostrada en la Figura III.8.

Evidentemente, la Figura III.9 es una simplificación y en la realidad estas características tienen formas más suavizadas debido a otros mecanismos de *scattering*, como muestra la Figura III.10.

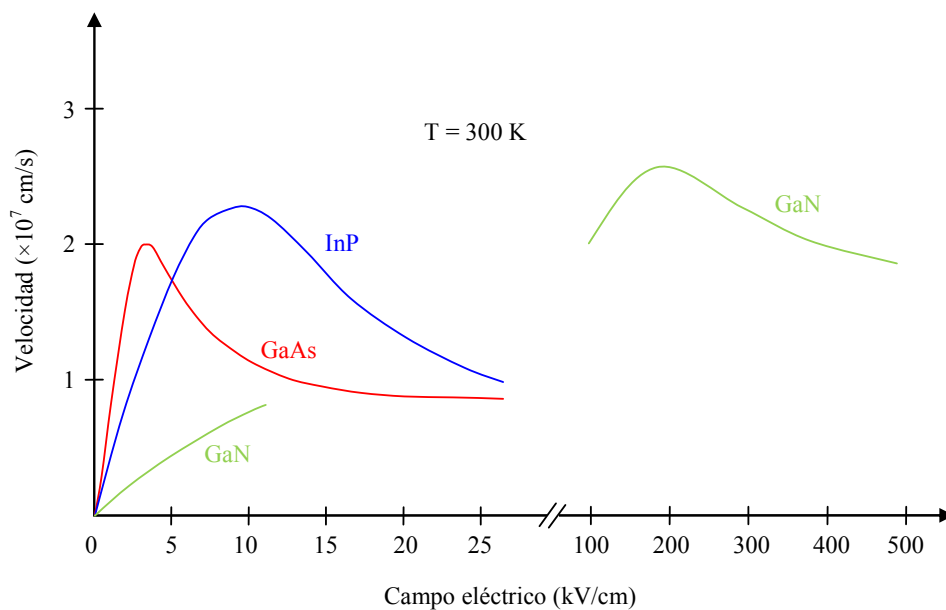


Figura III.10. Curvas velocidad-campo del InP, el GaAs y el GaN a temperatura ambiente.

Se observa además que la última región que decíamos de pendiente positiva no es tal, sino que al incrementar el campo la velocidad tiende a saturar. Asimismo, y como citábamos en el Capítulo I, la gráfica ilustra algunas de las ventajas que, frente a otros materiales, presenta el GaN en relación al efecto Gunn: posibilidad de constituir dispositivos de potencia y alta frecuencia debido a los elevados valores del campo umbral y de ruptura y de la velocidad de saturación.

III.1.3. Dinámica de los dominios: evolución espacio-temporal

Además de justificar de manera cualitativa cómo una fluctuación en la densidad de portadores en un punto del semiconductor con movilidad diferencial negativa es intrínsecamente inestable, procede analizar su evolución espacio-temporal.^{117,122-124} Tres son las ecuaciones que gobiernan el fenómeno: la ecuación de continuidad, la de Poisson y la ecuación de difusión.

Admitiendo un tratamiento unidimensional en la coordenada x , la ecuación de continuidad para la densidad de corriente J se escribe

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{q} \frac{\partial J}{\partial x} = 0, \quad (\text{III.2})$$

donde q representa la carga del portador, $q = -e$ para semiconductores tipo n .

La ecuación de Poisson en términos de la intensidad del campo eléctrico E toma la siguiente forma para una fluctuación local de carga de portadores mayoritarios $(n - n_0)$, siendo n_0 la concentración uniforme de equilibrio

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{q(n - n_0)}{\epsilon}, \quad (\text{III.3})$$

donde ϵ representa la permitividad de la muestra semiconductor.

Por otra parte, la expresión de la densidad de corriente, incluyendo la contribución de la difusión de portadores, obedece a

$$J = qn_0v - qD \frac{\partial n}{\partial x}, \quad (\text{III.4})$$

donde D es el coeficiente de difusión.

Para obtener una ecuación diferencial separada, sólo para la concentración de portadores $n(x,t)$, derivamos respecto de x esta última expresión, de forma que

$$\frac{\partial J}{\partial x} = qn_0\mu_d \frac{\partial E}{\partial x} - qD \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}. \quad (\text{III.5})$$

Finalmente, empleando las ecuaciones III.2 y III.3, eliminamos la densidad de corriente y el campo eléctrico, obteniéndose

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{n - n_0}{\rho\epsilon} - D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = 0, \quad (\text{III.6})$$

donde ρ representa la resistividad eléctrica diferencial, $\rho = (qn_0\mu_d)^{-1}$.

Para resolver esta ecuación por separación de variables conviene escribirla de la forma siguiente

$$\frac{\partial [n(x,t) - n_0]}{\partial t} + \frac{n(x,t) - n_0}{\rho\epsilon} - D \frac{\partial^2 [n(x,t) - n_0]}{\partial x^2} = 0. \quad (\text{III.7})$$

Admitiendo una factorización del tipo

$$n(x,t) - n_0 = n_x(x) n_t(t), \quad (\text{III.8})$$

y operando en la forma usual, se llega a

$$\frac{1}{n_t(t)} \frac{dn_t(t)}{dt} + \frac{1}{\rho\epsilon} - \frac{D}{n_x} \frac{d^2 n_x(x)}{dx^2} = 0, \quad (\text{III.9})$$

que nos permite escribir dos ecuaciones separadas de la forma

$$\frac{dn_t(t)}{dt} = -K_t n_t(t), \quad (\text{III.10})$$

$$\frac{d^2 n_x(x)}{dx^2} = \frac{K_x}{D} n_x(x), \quad (\text{III.11})$$

donde las constantes de separación K_x y K_t , con dimensiones de frecuencia, cumplen

$$\frac{1}{\rho\epsilon} = K_x + K_t. \quad (\text{III.12})$$

Resolviendo ambas ecuaciones se tiene por fin la expresión de la dinámica espacio-temporal del dominio de carga en términos de las condiciones iniciales

$$n(x,t) - n_0 = n_t(0)n_x(0) \exp(-k_t t) \exp(-k_x x), \quad (\text{III.13})$$

que conviene expresar en términos de longitudes y tiempos característicos de la forma siguiente

$$n(x,t) - n_0 = [n(0,0) - n_0] \exp(-t/\tau) \exp(-x/\lambda_D), \quad (\text{III.14})$$

donde $\tau = 1/K_t$ y $\lambda_D = \sqrt{D/K_x}$.

Recordemos que la distancia característica o longitud de Debye λ_D se expresa en la forma

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{k_B T \epsilon}{n_0 q^2}}, \quad (\text{III.15})$$

y representa la distancia a la que el exceso de concentración de portadores cae significativamente, mientras que la constante de tiempo del proceso τ nos informa de la rapidez del fenómeno.

La expresión III.12 se escribe ahora como

$$\frac{1}{\rho \epsilon} = \frac{1}{\tau} + \frac{D}{\lambda_D^2}, \quad (\text{III.16})$$

que relaciona el tiempo de relajación dieléctrica $\tau_d = \rho \epsilon$ de la muestra con la constante de tiempo del fenómeno τ y con el propio mecanismo de difusión.

De acuerdo con la bibliografía,^{25,117,122} la constante de tiempo del proceso τ responde inicialmente (es decir, cuando $n \approx n_0$) y de manera aproximada a la expresión del denominado tiempo diferencial de relajación dieléctrica

$$\tau \approx \frac{\epsilon}{q \mu_d n_0}. \quad (\text{III.17})$$

En el caso de movilidad diferencial μ_d positiva, τ representa la constante de tiempo de la caída hacia la neutralidad eléctrica de la densidad de carga espacial,

mientras que cuando el semiconductor presenta movilidad diferencial negativa, el módulo de τ nos informa de la rapidez de crecimiento del exceso de carga del dominio considerado.

Es de señalar que la formación de dominios intensos en la muestra semiconductor a exige no sólo la disponibilidad de suficiente carga para transferirse a un valle superior, sino también que el dispositivo tenga la longitud L suficiente para que el dominio de carga, que se desplaza a una velocidad media de arrastre v (próxima a la velocidad de saturación), pueda efectivamente formarse por completo dentro de él. Por otro lado, puesto que el crecimiento de la carga espacial en la formación del dominio está gobernado por la constante de tiempo τ , y admitiendo que la relación III.17 es válida durante todo el tiempo de tránsito L/v del dominio, el factor de multiplicación máximo de la acumulación de carga será $\exp(L/v|\tau|)$. Si este factor es grande tendremos un notable crecimiento de los dominios. Así, la condición $L/v|\tau| > 1$, o lo que es lo mismo

$$n_0 L > \frac{\varepsilon v}{q|\mu_d|}, \quad (\text{III.18})$$

significa que es posible el rápido crecimiento y la completa formación de intensos dominios de carga espacial a lo largo de la muestra. El término $n_0 L$ es clave, por tanto, en la formación de dominios de carga, y también lo será en el análisis de los distintos modos de operación posibles.

En los materiales que empleó Gunn inicialmente (InP y GaAs) la condición III.18 resulta¹¹⁷

$$n_0 L \geq 10^{12} \text{ cm}^{-2} \quad (\text{III.19})$$

Es importante recalcar que el razonamiento y cálculos expuestos para encontrar la condición III.18 contienen varias simplificaciones. En la Ref. 25 encontramos un estudio más preciso y detallado de los osciladores basados en NDR, donde se analiza en particular el GaN y se concluye la que condición III.18 para el GaN wurtzita es

$$n_0 L > 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}. \quad (\text{III.20})$$

Los autores de esa publicación consideran que el tiempo de tránsito del dominio a lo largo de la muestra ha de ser al menos tres veces el valor de τ para asegurar su completa formación. Asimismo, hemos de señalar ciertas observaciones hechas en ese trabajo. Muestran que el tiempo de tránsito tiene también una cota superior. Ésta viene determinada por la suma del tiempo necesario para acelerar los electrones hasta alcanzar la energía necesaria para la transferencia al valle superior más el tiempo medio que típicamente transcurre antes de sufrir un mecanismo de relajación de vuelta al valle inferior. Incluyen también una consideración relativa a un límite superior para la concentración de equilibrio n_0 , que de ser sobrepasado permitiría la formación de dominios parásitos estáticos que pueden dar lugar incluso a la ruptura dieléctrica. Y por otro lado, citan la interesante posibilidad de tener NDR en el GaN no por transferencia de electrones al valle U sino por su migración a un punto de inflexión en el mismo valle Γ_1 , punto éste que en el GaN se encuentra por debajo del mínimo del primer valle satélite.

III.1.4. Modos de operación

Para terminar este apartado dedicado al efecto Gunn presentamos a continuación una breve descripción de los distintos modos de operación posibles, determinados principalmente por factores como el dopaje y la longitud de la capa activa de nuestro dispositivo, las propiedades del cátodo, el potencial aplicado y el tipo de circuito al que se conecta la muestra semiconductor. ¹¹⁷ La información e imágenes que se presentan han sido principalmente extraídas de la Ref. 117 y las fuentes que allí se citan.

III.1.4.a. Modo ideal de campo uniforme (*Ideal uniform-field mode*)

Si a lo largo del dispositivo tuviéramos una distribución homogénea del campo eléctrico, es decir, sin presencia de dominios de carga espacial, la posible frecuencia de operación ya no estaría ligada a ningún tiempo de tránsito. En la Ref. 117 se calcula cuál sería la eficiencia de conversión de continua a alterna en un circuito resonante donde se mantiene una señal cuadrada. La Figura III.11 ilustra esta situación sobre una curva $I-V$ (resultado simplemente de escalar la característica $v-E$) que presenta NDR.

Las eficiencias que se obtendrían para los casos del GaAs y el InP están en torno al 30 y 40% respectivamente, valores elevadísimos que, desafortunadamente, nunca se han observado experimentalmente puesto que este modo de operación es, como su nombre indica, ideal.

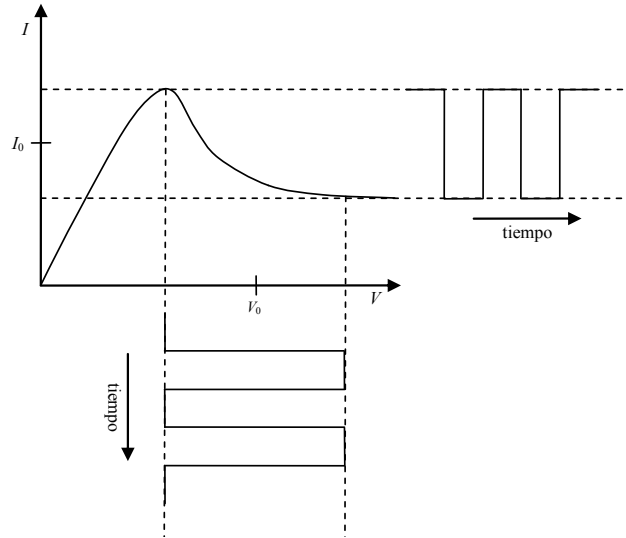


Figura III.11. Modo ideal de campo uniforme. Señales cuadradas del potencial y la corriente en la región de NDR sobre la curva $I-V$ del material.

III.1.4.b. Modo de capa de acumulación (*Accumulation-layer mode*)

Este modo de operación se manifiesta en las muestras cortas y/o poco dopadas, es decir, cuando no se cumple el criterio III.18. Como decíamos, esto se traduce en que una acumulación local inicial se propaga por el dispositivo aumentando de tamaño en todo momento.

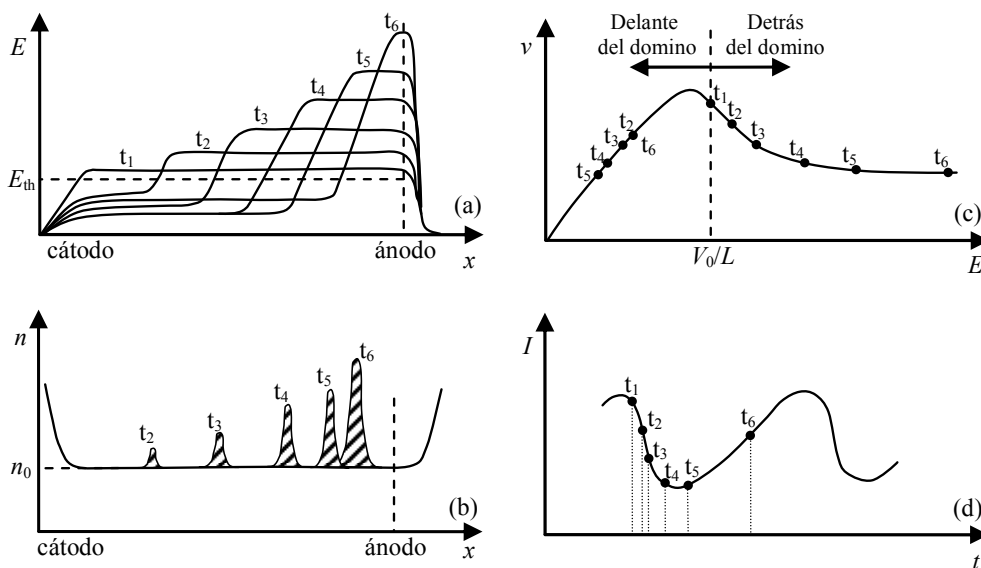


Figura III.12. Modo de capa de acumulación. Evolución de los perfiles de (a) campo eléctrico y (b) concentración electrónica, (c) curva velocidad-campo del material y (d) secuencia de corriente.

Apliquemos un potencial constante V_0 a una muestra tal que el producto de su concentración n_0 por su longitud L no satisfaga la condición III.18. La Figura III.12 muestra la evolución de los perfiles de campo eléctrico, concentración, y las oscilaciones en la corriente que se obtienen, debido todo ello a la NDR presente en la curva velocidad campo.

Este comportamiento permite al diodo un funcionamiento como amplificador estable, pero como oscilador no presenta eficiencias de conversión relevantes.

Nótese que en este modo de operación, la acumulación de carga, que es inyectada por el cátodo y viaja creciendo hasta el ánodo, consiste sólo en un exceso de electrones y no se aprecia una zona de vaciamiento acompañándolo. En términos de campo eléctrico significa que el perfil adopta una forma de escalón, cambiando de valor justo en la ubicación de la acumulación de carga. Ésta es la principal diferencia con el siguiente modo como pasamos a comprobar.

III.1.4.c. Modo de tiempo de tránsito de capa dipolar (*Transit-time dipole-layer mode*)

Si se cumple el criterio III.18 los dominios tienen tiempo suficiente para alcanzar su forma estable y así terminar de propagarse hasta el ánodo. Éste es el caso más habitual cuando se habla de oscilaciones Gunn, y es de hecho el que se observó por primera vez en 1963 y el que acontece usualmente en nuestros diodos SSD.

En este modo el dominio es dipolar, es decir, cuenta con una zona de acumulación de portadores acompañada de una de vaciamiento. Así, el campo eléctrico presenta una perturbación en forma de pico. En la Figura III.4, al principio de este apartado dedicado al efecto Gunn, podemos observar la evolución de la distribución de carga y del perfil del campo eléctrico en la formación del dominio en este modo de operación. Lo que suele ocurrir es que el dominio está ya perfectamente formado cerca del cátodo, donde tienen lugar las fluctuaciones de carga más relevantes, y se propaga hasta desaparecer en el ánodo, permitiendo comenzar de nuevo el ciclo (ver la Figura III.13).

Las secuencias de corriente presentan pulsos o picos sobre un valor medio cuando la anchura de los dominios es considerablemente menor que la longitud del dispositivo. Por el contrario adoptan una forma más sinusoidal cuando se ensanchan

los dominios (incrementando el dopaje) o se acortan las muestras, es decir, cuando se reduce el producto n_0L (acercándose a la situación para la que tendríamos el modo de acumulación). Los valores teóricos para la eficiencia de conversión en los casos del InP y el GaAs suelen ser menores al 10%, si bien es posible mejorarlos forzando un retardo en la formación del nuevo dominio, reajustando el potencial por debajo del umbral, para obtener una forma de onda más cuadrada.¹¹⁷

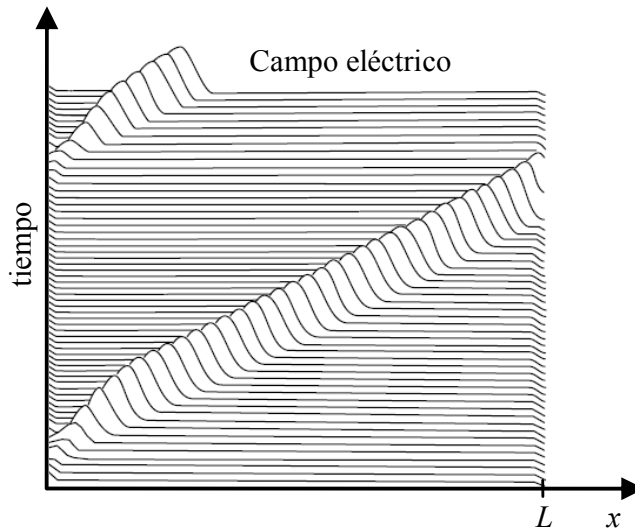


Figura III.13. Evolución del perfil del campo eléctrico en el modo de tiempo de tránsito de capa dipolar. Dos curvas consecutivas están temporalmente separadas 24 ps. Se trata de una simulación numérica de una muestra de GaAs de 100 μm de longitud y un dopaje de $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

Conviene indicar que, aunque este modo es la base del funcionamiento de nuestros SSDs, y el más habitual en los diodos Gunn comerciales, la inclusión de estos dispositivos en circuitos resonantes hace posible la existencia de varios dominios propagándose a lo largo del canal, dando lugar a frecuencias de oscilación elevadas, armónicos superiores de la asociada al tiempo de tránsito.

III.1.4.d. Modo de capa dipolar atenuada (*Quenched dipole-layer mode*)

Este modo de operación es muy parecido al de tiempo de tránsito de capa dipolar, con la diferencia de que en este caso el dominio se atenúa y acaba por extinguirse antes de llegar al ánodo. La distancia del cátodo a la que el dominio desaparece, permitiendo la creación de un nuevo dominio, está determinada por las propiedades de la muestra y por el circuito resonante al que la conectemos. Por ello, la frecuencia de operación está ligada a la de resonancia y no al tiempo de tránsito

del dominio. La eficiencia de conversión podría alcanzar, en teoría, un 13% para InP y GaAs.

La Figura III.14 ilustra este modo de operación. Se muestra la formación, evolución y atenuación de los dominios de campo. En comparación con la Figura III.13 se observa la desaparición de los dominios a una distancia $L/3$ que se traducirá en frecuencias de operación de valor triple.

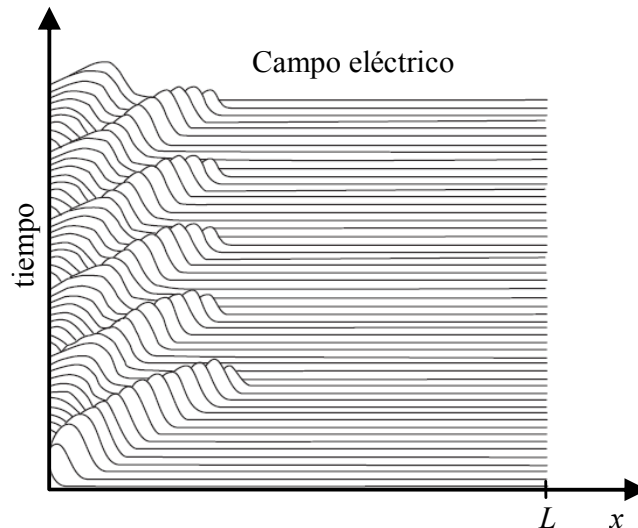


Figura III.14. Evolución del perfil del campo eléctrico en el modo de capa dipolar atenuada. Dos curvas consecutivas están temporalmente separadas 24 ps. Se trata de una simulación numérica de una muestra de GaAs de 100 μm de longitud y un dopaje de $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

III.1.4.e. Modo de acumulación de carga espacial limitada (*Limited-space-charge accumulation mode*)

Si vía un circuito resonante se hace que el campo aplicado varíe rápidamente alrededor del valor umbral que da paso a la NDR, se tendrá que el dominio dipolar no tiene tiempo de terminar de formarse porque empieza antes a atenuarse. En la Ref. 117 se analiza este comportamiento y se dice que, aunque la frecuencia de operación de los dispositivos basado en este modo es baja, son adecuados para la generación de pulsos intensos y cortos.

III.2. DIODOS AUTOCONMUTANTES

III.2.1. Principio de funcionamiento

El diodo autoconmutante posee, en principio, dos interesantes características: una I - V rectificadora y un potencial umbral que, dependiendo de la anchura del canal y otros parámetros, puede tomar valores desde 0 hasta más de 10 V. Utilizaremos la Figura III.15 para ilustrar su funcionamiento.

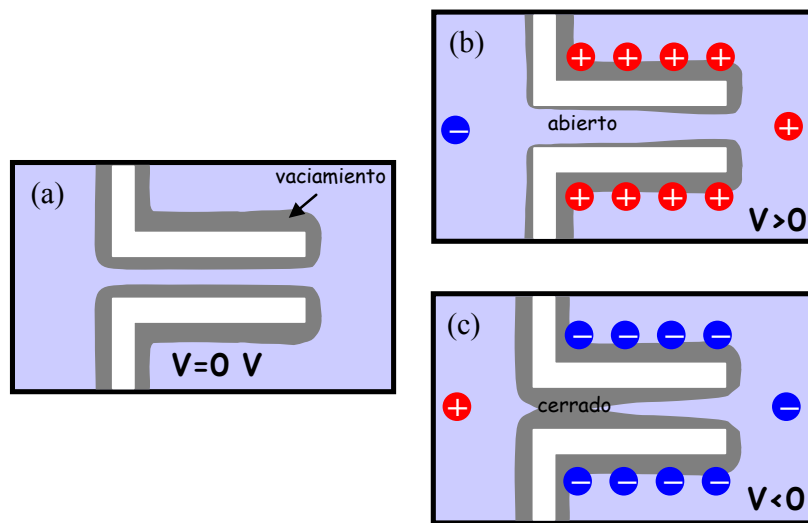


Figura III.15. Comportamiento rectificador de un SSD cuya corriente es debida a electrones. (a) Equilibrio, (b) $V > 0$ canal abierto y (c) $V < 0$ canal cerrado.

Cuando hablábamos en el Capítulo I sobre los estados superficiales que inevitablemente aparecen como consecuencia de las fronteras entre materiales, decíamos que el vaciamiento lateral viene dado por la relación entre la densidad de carga superficial de las interfases y la densidad volúmica de electrones (expresión I.17). Así, en situación de equilibrio el vaciamiento lateral puede hacer que el canal se encuentre completamente cerrado, o no, como en el caso de la Figura III.15(a). Cuando se aplica un potencial V al contacto derecho respecto del izquierdo éste se extiende, sin apenas caída, a ambos lados del canal nanométrico, ya que esas zonas exteriores al canal son las menos resistivas. Si el potencial es positivo [Figura III.15(b)], la anchura efectiva de conducción del canal aumenta, tal y como ocurre en un transistor de efecto de campo (FET). Por el contrario, cuando V es negativo, la anchura efectiva se reduce significativamente al aumentar el vaciamiento, que puede llegar a cerrar el canal [Figura III.15(c)]. De esta forma,

tendremos una característica $I-V$ no lineal, rectificadora. El potencial umbral para el que el canal pasa de corte a conducción depende de lo vaciado que éste se encuentre en equilibrio, es decir, de la anchura física del canal y el vaciamiento lateral provocado por la densidad de carga superficial en las paredes del mismo. No obstante, si el canal está muy abierto en equilibrio, lo cual ocurre cuando su anchura es grande, no llega a cerrarse en inversa, pero la característica será ligeramente asimétrica.

El comportamiento no lineal implica que este dispositivo pueda ser empleado como detector, tal y como se explica en detalle en el Apéndice. Sin embargo, también podría funcionar como emisor de señales de alta frecuencia. Esta posibilidad se fundamenta en lograr oscilaciones Gunn en la corriente que recorre el dispositivo, cuya geometría focaliza el campo a la entrada del canal, teniendo lugar en esa región la formación de los dominios que han de propagarse. Por otro lado, y sumado a la necesaria NDR en la característica $v-E$, ciertas propiedades del GaN que ya hemos citado en múltiples ocasiones, como son los valores elevados del campo umbral y de ruptura y de la velocidad de saturación, justifican la elección de este material para constituir un dispositivo de potencia y alta frecuencia.

Como veremos más adelante, la teórica capacidad rectificadora no aparece de manera clara en las heteroestructuras caracterizadas en nuestro trabajo. No obstante, la ausencia de rectificación no supone problema alguno ya que el fundamento físico de las oscilaciones Gunn no está relacionado en ningún momento con la asimetría de la curva $I-V$ en torno a equilibrio. Es más, como veremos a lo largo del capítulo, las estrategias de diseño de los SSDs se han ido orientando principalmente hacia la emisión en detrimento del comportamiento detector, donde la capacidad rectificadora (o al menos cierto comportamiento asimétrico) sí resulta esencial.

Podríamos establecer una analogía entre este dispositivo novedoso y un diodo n^+nn^+ , que es la estructura más habitual en los estudios de oscilaciones Gunn. En la Figura III.16 se ha incluido una región n^- (*notch*) que se corresponde con la presencia de las zanjás verticales, pues éstas hacen que al comienzo del canal haya menos densidad de portadores. Las zanjás aislantes en forma de L rompen la homogeneidad de la muestra, dando lugar a una zona de campo elevado al principio del canal y a una asimetría de la concentración a lo largo del mismo. Así, como ocurre en un diodo n^+nn^+ , tendremos dos regiones laterales con concentración mayor

que la zona central, que corresponde al canal. Las principales diferencias entre ambos dispositivos son: (i) el diodo n^+nn^+ es una estructura con transporte vertical, mientras que en el SSD el transporte es planar, aspecto fundamental en la fabricación, en la disipación de calor y en el acoplamiento electromagnético con el exterior, y (ii) debido a la posibilidad de alejar los contactos entre sí, en el SSD se evita el riesgo de ruptura dieléctrica existente en los diodos n^+nn^+ . No obstante, se continúan estudiando las estructuras verticales de GaN para lograr oscilaciones Gunn de alta frecuencia, aunque con escaso éxito.¹²⁵

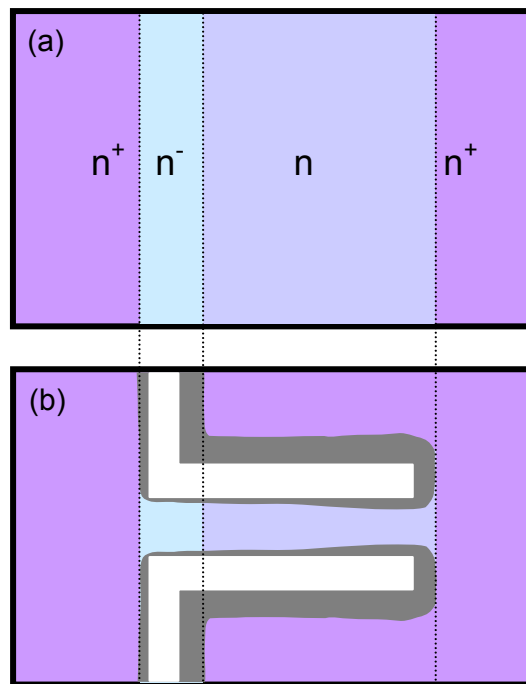


Figura III.16. Similitud relativa a la densidad de portadores entre (a) un diodo $n^+n^-n^+$ y (b) un SSD.

III.2.2. Revisión bibliográfica

Repasamos aquí los avances relativos al SSD que han tenido lugar desde su invención, tanto en el campo experimental como en el de las simulaciones. La Tabla III.1 recopila de manera organizada las principales publicaciones, donde se han resaltado en color rojo las contribuciones referentes a la emisión.

El SSD fue inventado por el profesor A. M. Song²⁷ en el año 2003 en la Universidad de Manchester y estaba diseñado para ser utilizado en múltiples aplicaciones analógicas y digitales. La Figura III.17(a) presenta los primeros resultados experimentales de la forma rectificadora de la curva $I-V$.²⁷

Material	Analítico/Numérico			Experimental		
	Estático	Dinámico	Ruido	Estático	Dinámico	Ruido
GaAs					Balocco C. <i>et al.</i> (Detección 300 mV/mW @ 1.5 THz @ 300 K) ¹³⁴	
InGaAs	Mateos J. <i>et al.</i> (MC: principio de operación) ⁷⁴ y Xu K. Y. <i>et al.</i> (MC: explicación microscópica) ¹³¹	Íñiguez-de- la-Torre I. <i>et al.</i> (MC: detección- plasma) ¹²⁹ y Xu K. Y. <i>et al.</i> (MC: detección- plasma) ¹³⁰	Íñiguez-de- la-Torre I. <i>et al.</i> (MC: geometría) ¹²⁷ y Xu K. Y. <i>et al.</i> (MC: generación de armónicos) ¹²⁸	Song A. M. <i>et al.</i> (primera demostración experimental de un SSD) ²⁷	Balocco C. <i>et al.</i> (Detección 75 mV/mW @ 110 GHz) ¹²⁶ y Balocco C. <i>et al.</i> (Detección 2.5 THz @ 150 K) ¹³⁵	Balocco C. <i>et al.</i> (2000 SSDs en paralelo NEP 65 pW/Hz ^{1/2} @ 110 GHz) ¹³⁶
	Íñiguez-de-la-Torre I. <i>et al.</i> (MC: detección, plasma y temperatura) ¹³²					
	Xu K. Y. <i>et al.</i> (MC: emisión) ¹³³					
InAs y InSb	Íñiguez-de-la-Torre I. <i>et al.</i> (MC: detección, plasma y temperatura) ¹³³					
Silicio	Åberg M. <i>et al.</i> (Analítico- FET) ¹³⁷ y Farhi G. <i>et al.</i> (TCAD-Medici: geometría y permitividad zanjas) ¹³⁹			Farhi G. <i>et al.</i> (SOI, influencia de la temperatura) ¹³⁸		
Polímero/ Policristal				Mustafa Y. <i>et al.</i> (ZnO @ 50 MHz) ¹⁴¹		
				Kettle J. <i>et al.</i> (Polímero) ¹⁴⁰		
GaN	González T. <i>et al.</i> (MC: emisión) ¹⁴³⁻¹⁴⁵ Íñiguez-de-la-Torre A. <i>et al.</i> (MC: emisión) ¹⁴⁶		Íñiguez-de- la-Torre A. <i>et al.</i> (MC: ruido) ¹⁴⁷	Íñiguez-de- la-Torre A. <i>et al.</i> (I-V) ¹⁴⁸	Sangaré P. <i>et al.</i> (30 mV/mW @ 325 GHz @ 300 K) ¹⁴⁸	

Tabla III.1. Principales publicaciones relativas a los estudios tanto experimentales como de modelado en SSDs basados en diversos materiales y para diferentes aplicaciones.

Rápidamente Balocco *et al.*¹²⁶ demostraron que, gracias a la alta movilidad de canales III-V como el InGaAs, el diodo era capaz de detectar señales de hasta 110 GHz a temperatura ambiente y con una responsividad bastante alta, de 75 mV/mW, pese a presentar un enorme *mismatch* dada la elevada impedancia del SSD (centenas de k Ω) [Figura III.17(b)]. Al mismo tiempo, empleando simulaciones MC, desde nuestro Grupo de Investigación en Dispositivos Semiconductores de la Universidad de Salamanca, particularmente en Mateos *et al.*,⁷⁴ se explicó el principio de operación DC de los SSDs y se predijeron frecuencias de corte cercanas a los THz. A partir de este momento otros grupos empiezan a trabajar en este dispositivo usando diferentes materiales, simuladores, técnicas de medida y estudiando en

detalle las características de su funcionamiento. En particular nuestro grupo ha tenido un aporte muy significativo de resultados para diodos basados en InGaAs. En las Refs. 127 y 128 podemos encontrar un estudio del ruido [Figura III.18(a)] y en la Ref. 129 se analiza su conexión con un mecanismo de resonancia en la detección muy ligado a fenómenos de plasma, como también explican otros autores en la Ref. 130 [Figura III.18(b)]. De manera paralela, varios grupos realizaron estudios para comprender mejor el comportamiento microscópico,¹³¹ el dinámico y la influencia de la temperatura¹³² [Figura III.18(c)]. Con el objetivo de aumentar las frecuencias de corte se estudia, por medio de simulaciones, la posibilidad de aprovechar la mayor movilidad de otros materiales como el InAs o InSb¹³³ [Figura III.18(d)].

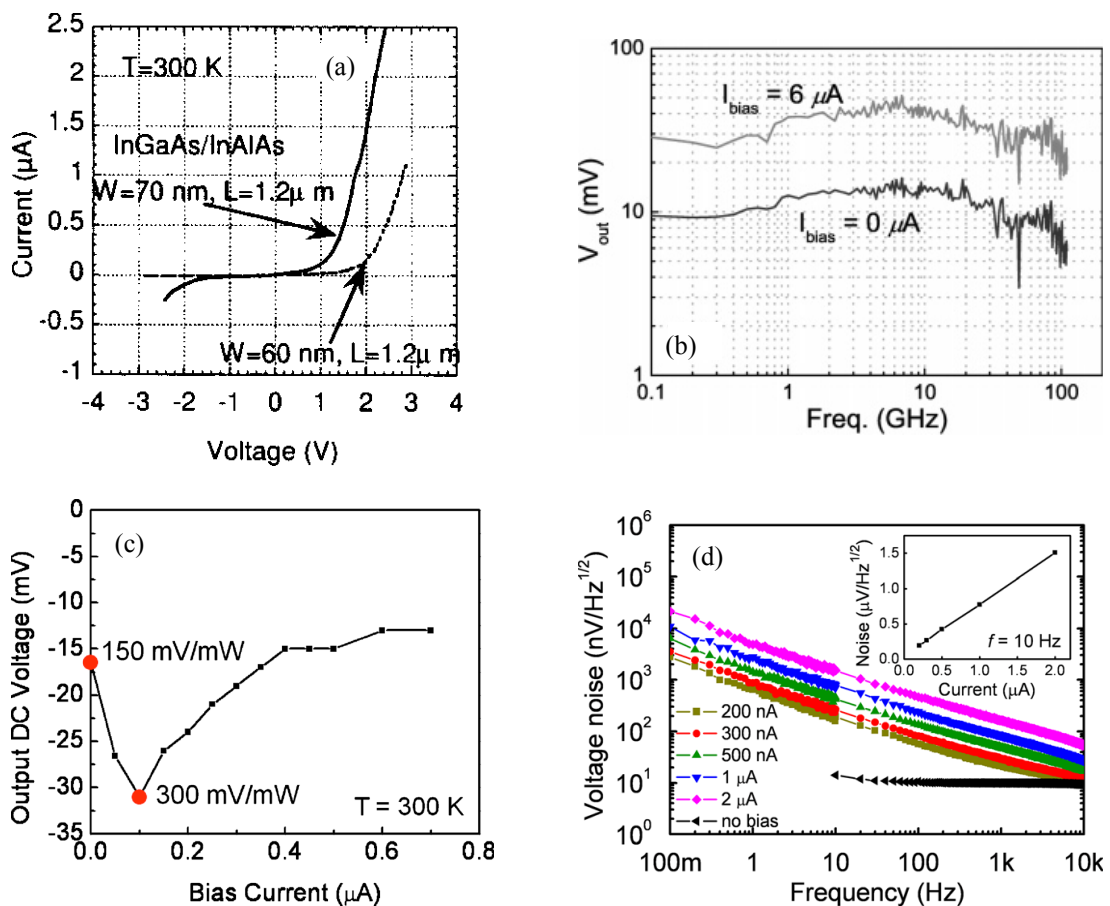


Figura III.17. Resultados experimentales relacionados con la detección en SSDs basados en materiales III-V. (a) Medidas DC de la rectificación en canales de InGaAs de diferente anchura [Ref. 27]. (b) Detección de 100 MHz a 110 GHz para una potencia de $280 \mu\text{W}$ en un SSD de InGaAs [Ref. 126]. (c) Voltaje rectificado de una señal de 1.5 THz y $100 \mu\text{W}$ en función de la corriente de polarización en un SSD de GaAs [Ref. 134]. (d) Espectro del ruido en voltaje a temperatura ambiente para un *array* de 2000 SSDs de InGaAs en paralelo para diferentes polarizaciones [Ref. 136].

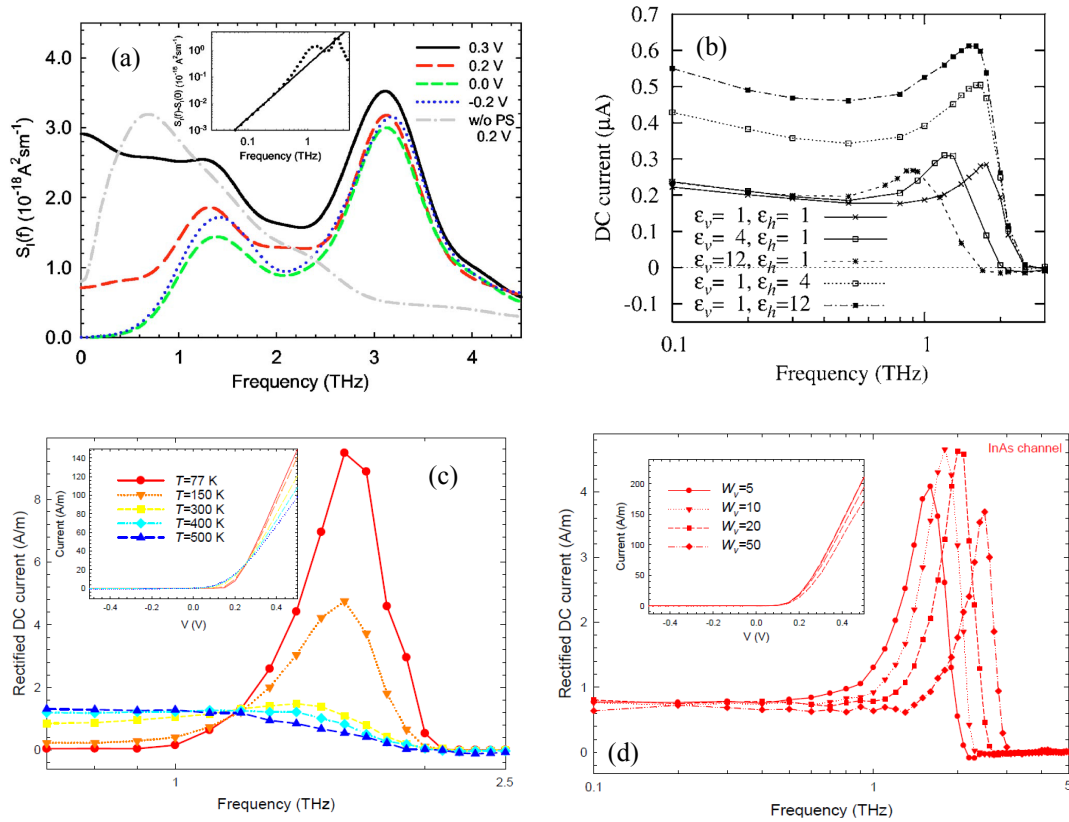


Figura III.18. Resultados numéricos relacionados con la detección en SSDs basados en materiales III-V. (a) Espectro de la corriente para diferentes polarizaciones en un SSD de InGaAs [Ref. 127]. (b) Dependencia con la frecuencia de la corriente media rectificada para SSDs de InGaAs con zanjas de diferentes permitividades [Ref. 130]. (c) Influencia de la temperatura en un SSD de InGaAs [Ref. 132]. (d) Dependencia con la frecuencia de la corriente media rectificada para SSDs de InAs con diferentes anchuras de las zanjas [Ref. 133].

Las predicciones teóricas de detección a muy a altas frecuencias se han ido cumpliendo, siendo los últimos resultados obtenidos de 300 mV/mW a 1.5 THz (en GaAs a 300 K)¹³⁴ [Figura III.17(c)] e incluso respuesta a 2.5 THz (en InGaAs a 150 K).¹³⁵ En cuanto a ruido se han conseguido unos resultados muy competitivos frente a los mejores diodos comerciales (*Virginia Diodes*). Con los valores de ruido en voltaje mostrados en la Figura III.17(d), correspondientes a un *array* de 2000 SSDs con una responsividad de 160 V/W, se obtiene una potencia equivalente de ruido (*NEP*) de $62.5 \text{ pW/Hz}^{1/2}$ a 100 GHz.¹³⁶ Dado que su funcionamiento no está basado en transporte balístico, se han fabricado SSDs en otros materiales como SOI¹³⁷⁻¹³⁹ [Figura III.19(a)] y polímeros termoplásticos¹⁴⁰ [Figura III.19(b)] o materiales policristalinos¹⁴¹ [Figura III.19(c)] con técnicas de nanoimpresión. Huelga decir que la llegada del grafeno a este dispositivo es inminente y de hecho a día de

hoy varios grupos europeos ya se encuentran en fase de petición de proyectos, en los que nuestro grupo también espera participar en los apartados de modelado.

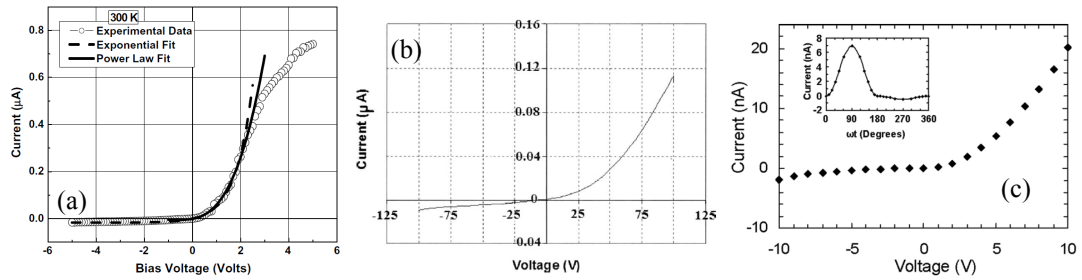


Figura III.19. Resultados experimentales relativos a detección en (a) SSDs tipo p basados en sustrato SOI [Ref. 138], (b) SSDs basados en poli (3-hexiltiofeno) [Ref. 140] y (c) SSDs basados en óxido de Zinc [Ref. 141].

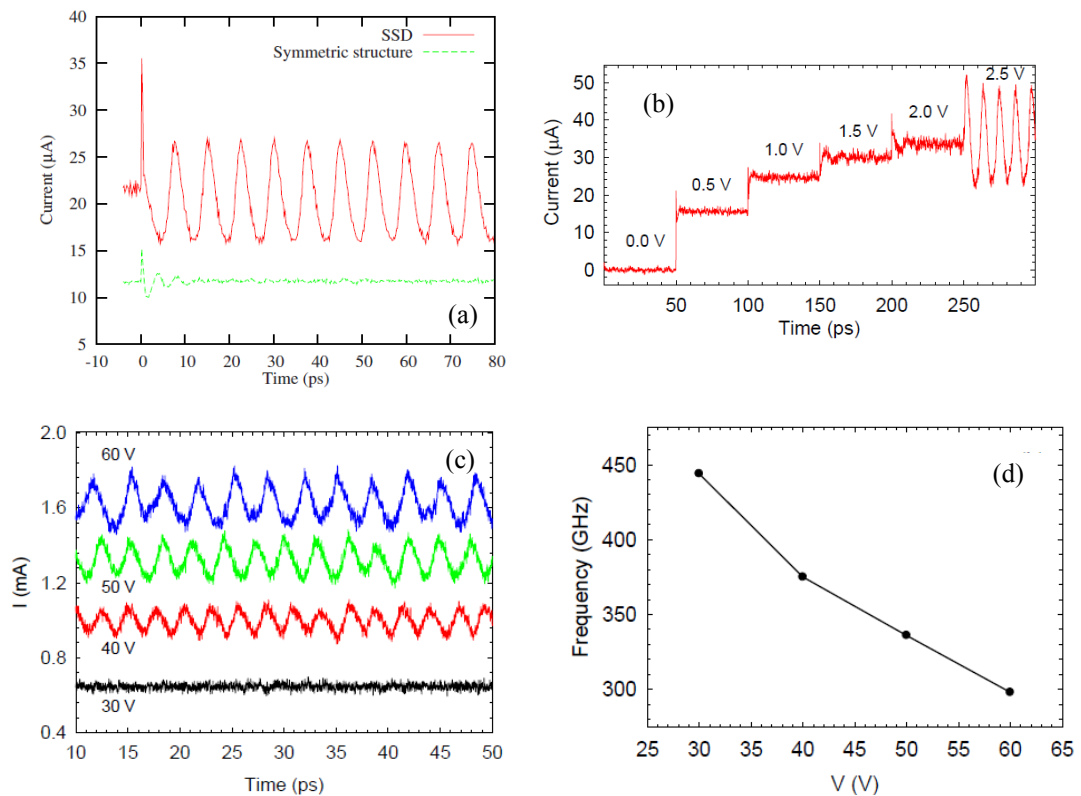


Figura III.20. Resultados MC previos a este trabajo relativos a oscilaciones Gunn en SSDs basados en InGaAs (a) [Ref. 142] y (b) [Ref. 144], y basados en GaN en (c) y (d) [Ref. 144].

En el año 2008 Xu K. Y. *et al.*¹⁴² extienden las posibilidades de la funcionalidad de este dispositivo de dos terminales aparentemente sencillo. Predicen mediante simulaciones MC la generación de potencia por medio de oscilaciones Gunn a 150 GHz para un SSD basado en InGaAs y de 1 μm de longitud de canal [Figura III.20(a)]. A partir de este momento, nuestro grupo comenzó a estudiar estos dispositivos. Así, en congresos internacionales¹⁴³⁻¹⁴⁵ se presentaron cálculos MC

prediciendo igualmente oscilaciones Gunn: oscilaciones de 100 GHz a partir de 2.5 V en un canal de 1.5 μm de InGaAs [Figura III.20(b)], y de 400 GHz a partir de 30 V en un canal de 1 μm , pero en este caso, y por primera vez, en SSDs de GaN [Figura III.20(c) y Figura III.20(d)]. En la actualidad, bajo el marco del proyecto europeo *ROOTHZ* (*Semiconductor Nanodevices for Room Temperature THz Emission and Detection*), nuestro grupo, que es el coordinador, continúa trabajando en esta línea de investigación, a la cual yo me uní a mediados de 2010.

Mi contribución en el citado proyecto partió de los resultados iniciales del grupo y se encuentra recogida en este trabajo. En particular, tal y como refleja la Tabla III.1, ha dado lugar a dos publicaciones científicas, esencialmente en el campo de la modelización, abordando tanto las respuestas estática y dinámica¹⁴⁶ (apartado de resultados de este capítulo) como un análisis del ruido a baja frecuencia¹⁴⁷ (Capítulo IV).

Si bien contamos con múltiples medidas en DC de SSDs de GaN,¹⁴⁶ los numerosos intentos en la búsqueda de la confirmación experimental de la emisión que vaticina nuestras simulaciones no han sido exitosos hasta el momento. Pese a ello, este proyecto está suponiendo un significativo avance en la tecnología en este material, destacando la reducción de la anchura de las zanjas hasta dimensiones de decenas de nanómetros lograda por parte de los compañeros del IEMN. Además los progresos en las medidas experimentales de detección de SSDs de GaN han sido notables. Por ello, y para completar este trabajo, incluimos un Apéndice explicando los principales resultados relativos a la detección.¹⁴⁸ Se ha escogido presentarlo así para no interferir con el objetivo fundamental de esta Tesis, que es el estudio de la emisión, y porque mi participación en las tareas de detección ha sido colateral, si bien no hay que olvidar que el propósito último del proyecto es desarrollar un sistema de estado sólido compacto de emisión/detección de señales THz funcionando a temperatura ambiente.

III.2.3. Fabricación

La fabricación de los SSDs se ha llevado a cabo en el IEMN y aquí se recogen de manera resumida las principales etapas del proceso tecnológico seguido [Figura III.21(a)-(c)].

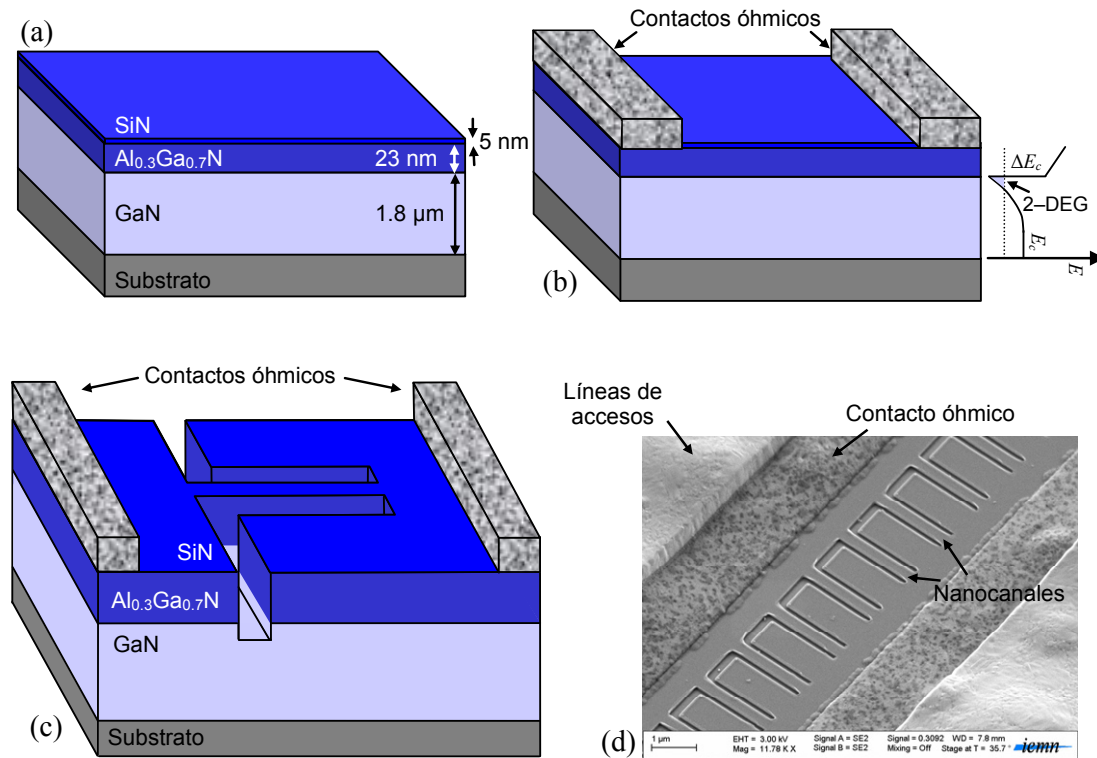


Figura III.21. Etapas en la fabricación de diodos SSD. (a) Estructura epitaxial, (b) depósito de contactos óhmicos y (c) grabado de las zanjas. (d) Imagen SEM de un *array* de 16 SSDs en paralelo. En (b) se ha incluido un esquema del diagrama de bandas asociado a la heterounión AlGa_{0.7}N/GaN.

Sobre un sustrato de silicio (Si) con orientación [111], la estructura epitaxial consiste en 1.8 μm de GaN no dopado hexagonal (orientación [0001]), 23 nm de Al_{0.3}Ga_{0.7}N, y 5 nm de SiN para la pasivación. Pese a poseer una baja conductividad térmica para disipar el calor, se ha decidido usar GaN sobre Si, en lugar de zafiro o diamante, debido a su menor coste. El diseño apropiado de los dispositivos deberá tratar de evitar un calentamiento excesivo. El proceso comienza con el depósito de los contactos óhmicos (Ti/Al/Ni/Au), para los que se ha obtenido una resistencia de 0.3 Ω mm, seguido de implantación iónica (He⁺) para aislar lo que será el dispositivo. El siguiente paso es el grabado o *etching* (con una resina PMMA y tecnología basada en cloro ICP) de la zanjas con una profundidad de 45 nm. Finalmente se depositan los metales (Ti/Pt/Au) en la parte superior y se crean las líneas coplanares de los accesos (CPW, *coplanar waveguides*). En la Figura III.21(d) se muestra una imagen SEM de una agrupación o *array* de 16 SSDs dispuestos en paralelo.

En las primeras pruebas en la sala blanca los esfuerzos estuvieron dirigidos a optimizar al máximo la fabricación. Por ejemplo, se probaron diferentes resinas (PMMA, UV210 y ZEP) para mejorar el tamaño, grosor y profundidad del grabado

de las zanjas (proceso totalmente nuevo, ya que el grabado de GaN no se utiliza para la fabricación de transistores). Ayudados de medidas AFM se eligió la PMMA y se optimizó la tecnología de grabado basada en cloro ICP, dando lugar a un grabado suave con una tasa media de 140 nm/min, que proporciona una excelente definición de la geometría de las zanjas, con una profundidad de 45 nm. Ésta es una profundidad suficiente para asegurar que verdaderamente las zanjas aíslan, puesto que los portadores que van a participar de la conducción se encuentran junto a la interfase AlGaN/GaN, dando lugar a un gas bidimensional (2-DEG, *two-dimensional electron gas*), como muestra el diagrama de bandas de energía asociado a esa heterounión en la Figura III.21(b).

La Figura III.22 corresponde a una imagen de microscopio óptico de un *array* de 32 diodos en paralelo conectado a la línea de acceso coplanar.

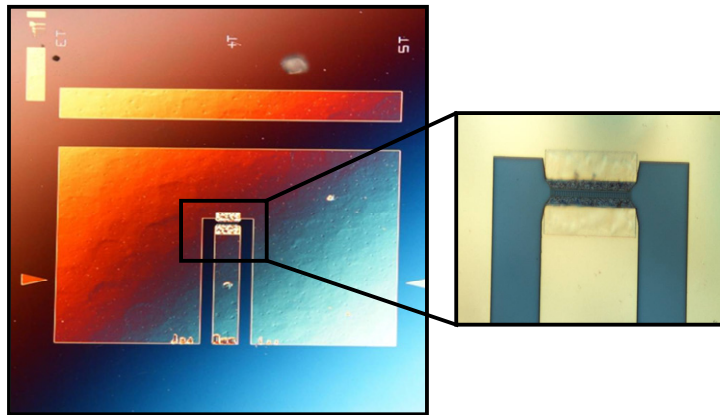


Figura III.22. *Array* de 32 SSDs en paralelo visto al microscopio óptico

III.2.4. Modelo Monte Carlo y geometría de los SSDs

Para modelizar los SSDs basados en GaN, cuya topología volvemos a mostrar en la Figura III.23(a), hemos utilizado el simulador MC de dispositivos que ya presentamos en el Capítulo I. Recordemos que se trata de un simulador *ensemble* MC semiclásico acoplado auto-consistentemente con una resolución bidimensional de la ecuación de Poisson, donde hemos empleado un paso temporal de 1 fs y un mallado de celdas de 10 nm×10 nm. Como el dispositivo es tridimensional, resulta evidente que sería más apropiado disponer de un simulador 3D, pero ello supondría un elevado coste computacional y aportaría poca información adicional.¹⁴⁹ La Figura III.23(b) muestra nuestro dominio de simulación, que se limita a la capa de GaN (incluyendo la zona de accesos), dando lugar a lo que llamamos simulaciones “*top-view*”. No obstante, para tratar de asimilar en lo posible nuestras simulaciones a

la situación que realmente acontece incluimos dos parámetros *ad hoc*: (i) un dopaje de fondo “virtual”, N_{Db} , asignado a la capa simulada (cuyo *scattering* asociado evidentemente no se considera) para tener en cuenta las carga fijas de la heterounión y de la capa de la superficie, y (ii) una densidad de carga superficial negativa, σ , asignada a las interfases semiconductor-dieléctrico (aire) para reflejar, como ya dijimos en el Capítulo I, el efecto de la ocupación de los estados superficiales originados durante los procesos de *etching*. N_{Db} y σ son los dos únicos parámetros de nuestro modelo MC que ajustaremos para la comparación directa de las simulaciones con las medidas experimentales.

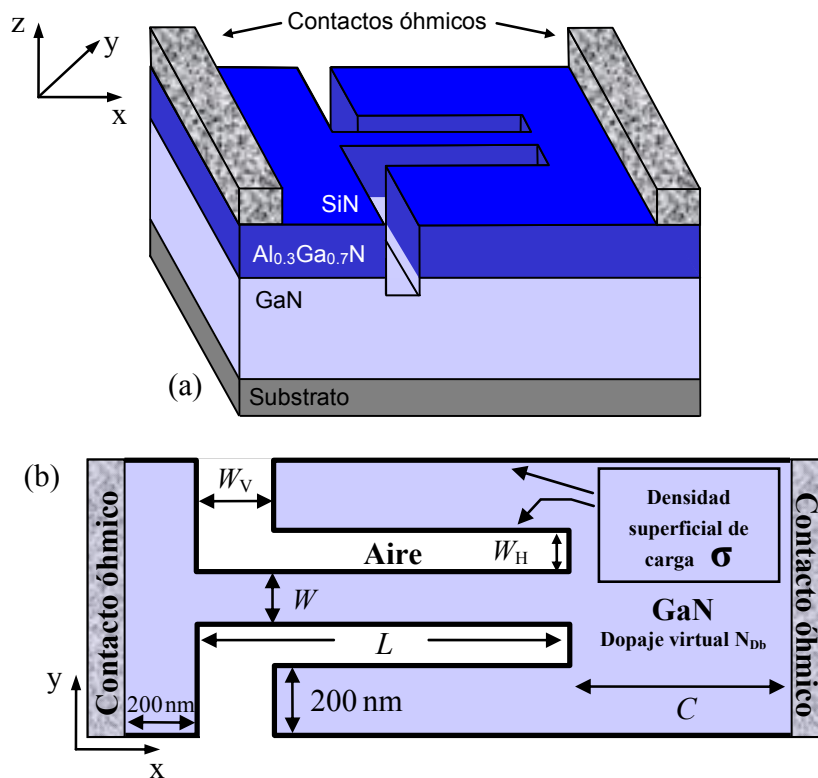


Figura III.23. (a) Geometría 3D típica de un SSD y (b) esquema “top-view” de las simulaciones del canal de GaN con los parámetros involucrados (dopaje de fondo “virtual” N_{Db} y densidad de carga superficial negativa σ). L y W son la longitud y anchura del canal, W_H la anchura de las zanjadas horizontales, W_V la anchura de las zanjadas verticales y C la longitud de la región de acceso del ánodo.

Recordemos que los valores negativos de la carga superficial (asociada a los electrones atrapados en los estados superficiales) implican, como consecuencia de la repulsión coulombiana, que la densidad de portadores cerca de las fronteras disminuya y vacíe el canal. La anchura de vaciamiento a cada lado del canal la estimamos como $W_d = \sigma/N_{Db}$. Por lo tanto, la anchura efectiva de conducción será $W_{ef} = W - 2W_d$. En el modelo más simple, el de carga constante, el valor de σ es

estimado en condiciones de equilibrio y es válido durante toda la simulación, para todos los potenciales aplicados, y no presenta variación espacial. Este modelo es muy útil y relativamente rápido para analizar las bases del funcionamiento de los dispositivos y la influencia de múltiples parámetros. No obstante, con el fin de reproducir de una manera más correcta la influencia de los estados superficiales, se emplea el modelo auto-consistente. Hay que indicar que ello supone un considerable incremento en el tiempo de cálculo, pues actualiza continuamente el valor de σ de acuerdo con la concentración de portadores en las cercanías de la interfase hasta que alcanza un valor estacionario. Cuando describíamos este modelo auto-consistente decíamos que se calcula la concentración de portadores en las proximidades de las fronteras como una media sobre un cierto número de iteraciones N_i , y se comprueba si está en un intervalo $[N_{bajo}, N_{alto}]$ para decidir si se ha de aumentar o disminuir el valor de σ . Para la obtención de los resultados de este modelo que mostraremos más adelante se han empleado los valores siguientes de esos parámetros: $N_i=500$ iteraciones (de 1 fs), $N_{alto}=N_{Db}/20$ y $N_{bajo}=N_{Db}/60$. Es importante señalar que ésta es la primera vez que se valida dicho modelo para GaN.

Dentro de nuestro estudio sistemático de estos dispositivos, mostramos resultados de todo tipo: características I - V , secuencias temporales de corriente, perfiles espaciales de múltiples magnitudes y su evolución en el tiempo, etc. Asimismo, para valorar las posibilidades del dispositivo actuando como emisor, se analiza la eficiencia de conversión de una una señal de continua en alterna, η , superponiendo una señal sinusoidal de amplitud V_{AC} sobre una polarización DC, V_{DC} , y examinando las potencias P_{DC} y P_{AC} , como se explicaba al final del Capítulo I. Recordemos que valores negativos de η indican un comportamiento resistivo del diodo, mientras que los positivos significan una generación de potencia AC. Además, mediante la transformada rápida de Fourier (FFT, *Fast Fourier Transform*), se realiza un análisis espectral de las oscilaciones en las secuencias de corriente, $I(t)$, para calcular su densidad espectral, $S_I(f)$. Nótese que habitualmente presentaremos tanto el valor de I como el de $S_I(f)$ normalizados, de forma que el valor absoluto (en A para I y en A²s para S_I) en un dispositivo en particular se obtendría simplemente multiplicando, en el caso de la corriente, por el valor de la densidad superficial de electrones del canal n_s medido experimentalmente (en unidades de m⁻²), y en el caso de la densidad espectral por este valor al cuadrado.

III.3. RESULTADOS: SIMULACIONES MONTE CARLO Y MEDIDAS EXPERIMENTALES

Este apartado recoge de manera cronológica múltiples resultados de simulación y medidas experimentales realizadas en SSDs basados en GaN. Para facilitar la comprensión global del trabajo realizado y ayudar a identificar cada sección dentro del progreso del mismo, la Figura III.24 muestra un diagrama con las diferentes etapas de modelado, fabricación y medidas, así como su interrelación.

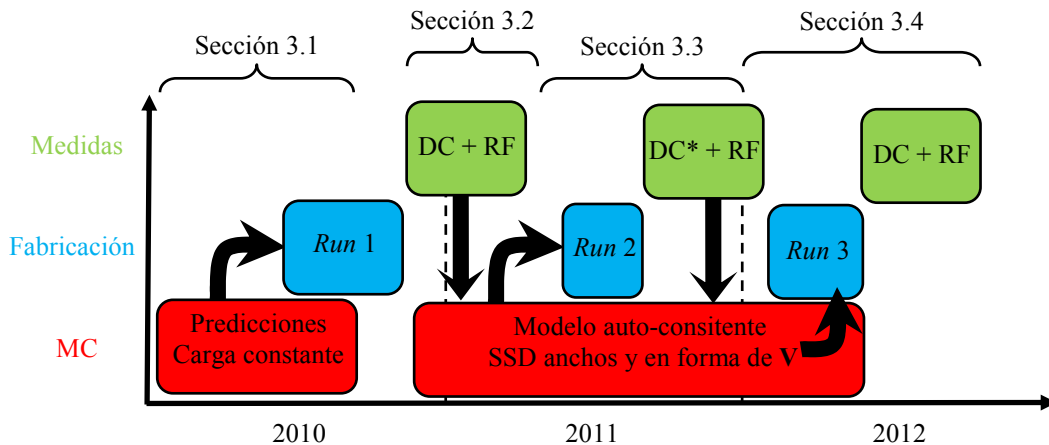


Figura III.24. Diagrama de flujo del trabajo realizado. El asterisco indica que dichas medidas fueron realizadas personalmente por mí durante una estancia de investigación de tres meses en el IEMN.

En primer lugar analizamos la influencia de varios parámetros (tanto geométricos como del modelo de simulación MC) en las características $I-V$, en la presencia de oscilaciones Gunn bajo polarización DC y en la eficiencia de conversión. Estos cálculos iniciales se realizaron con el modelo de carga superficial constante y son previos a la primera fabricación de los dispositivos. Tras el primer *run* comparamos esos resultados preliminares con las primeras medidas experimentales que se obtuvieron. Dicha comparación sugiere la necesidad de usar un modelo mejorado, el de carga auto-consistente, para reproducir correctamente la ocupación de los estados superficiales y la corriente que fluye por los SSDs. Así, la parte final de nuestro trabajo de simulación consiste en dar indicaciones de diseño orientadas a obtener experimentalmente la generación de señales de alta frecuencia. Conviene indicar que aunque este trabajo es esencialmente teórico, con la finalidad de presentar un estudio completo y para ayudar a comprender el progreso de las simulaciones, presentamos también algunos resultados experimentales, tanto medidas de caracterización estática (DC) como medidas de alta frecuencia (RF).

III.3.1. Simulaciones preliminares: influencia de parámetros básicos

Antes de la fabricación de SSDs de GaN se llevaron a cabo una serie de simulaciones con el modelo de carga constante, con el objetivo de estudiar la capacidad de estos dispositivos para generar oscilaciones Gunn a temperatura ambiente. Hemos analizado la influencia en su comportamiento de parámetros geométricos, parámetros del modelo MC y de la temperatura. Consideramos como estructura de referencia un diodo con $L=1\ \mu\text{m}$, $W=150\ \text{nm}$, $W_V=200\ \text{nm}$, $W_H=100\ \text{nm}$, $C=600\ \text{nm}$, dopaje de fondo $N_{Db}=2\times 10^{17}\ \text{cm}^{-3}$ y densidad de carga superficial $\sigma = -0.75\times 10^{12}\ \text{cm}^{-2}$, a $T=300\ \text{K}$ (curvas rojas de la Figura III.25) Esta estructura muestra oscilaciones en la corriente cuando el potencial aplicado es mayor que 50 V. Sin embargo, tanto en este caso como en los demás que veremos, no existe evidencia alguna en las curvas $I-V$ del comienzo de las oscilaciones. Aunque el GaN sí presenta en su curva $v-E$ movilidad diferencial negativa, en las características $I-V$ estáticas no se tiene una zona con pendiente negativa, que se correspondería con una NDR, a pesar de observarse oscilaciones. Esto es debido a que, una vez formados los dominios, a medida que aumentamos el potencial aplicado, tenemos que, aunque su velocidad de propagación es menor porque el valle U les confiere mayor masa efectiva, la inyección de portadores desde los contactos aumenta como consecuencia de la redistribución del campo dentro del dispositivo. No obstante, cuando, para reproducir el comportamiento de los dispositivos dentro de un circuito resonante, estudiemos la eficiencia de conversión, veremos varias bandas de generación AC, que equivalen a la presencia de NDR a frecuencias elevadas.

Los valores de la corriente para las curvas $I-V$ se obtienen como media temporal sobre simulaciones muy largas, de manera que, en el caso de presencia de oscilaciones, incluyen un gran número de periodos.

III.3.1.a. Influencia de los parámetros del modelo (σ y N_{Db})

Dado que los dos parámetros de nuestro modelo son σ y N_{Db} , el primer conjunto de simulaciones está destinado a analizar su influencia. La comparación con medidas experimentales nos ayudará más adelante a la determinación final de estos parámetros. En la Figura III.25 se muestran las curvas $I-V$ y las secuencias temporales de corriente para un potencial de 50 V obtenidas con varios valores de σ y N_{Db} . En algunas estructuras aparecen oscilaciones Gunn de amplitud no

especialmente importante pero de frecuencias en torno a 300 GHz. Como era de esperar, cuanto mayor es el valor de σ , el nivel de corriente disminuye ya que el vaciamiento lateral inducido en el canal aumenta [ver Figura III.25(a)]. La frecuencia y amplitud de las oscilaciones se reducen, llegando éstas incluso a desaparecer para los valores más altos de σ debido al excesivo vaciamiento del canal.

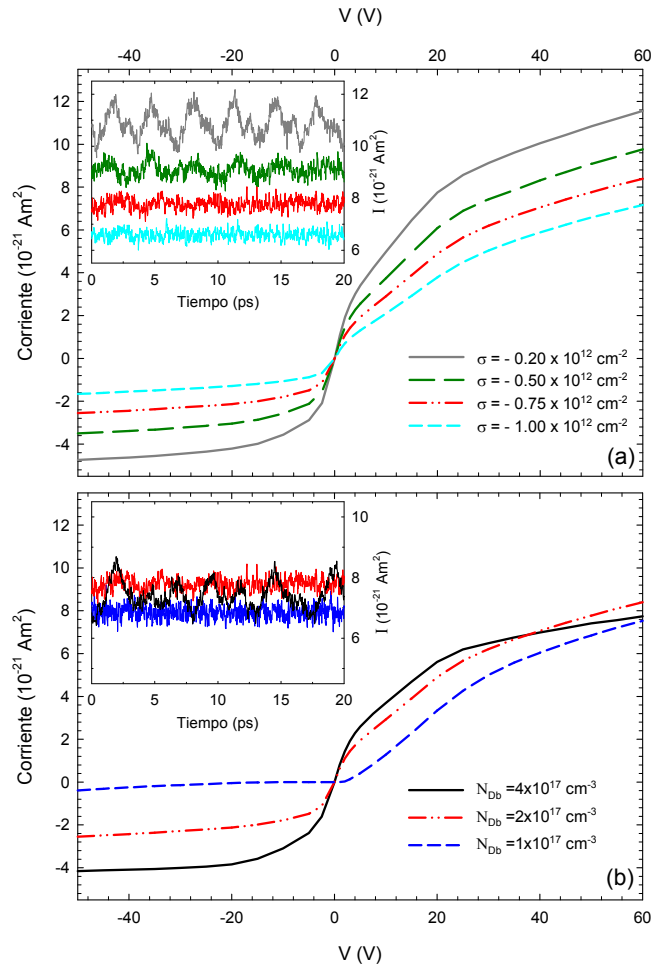


Figura III.25. Curvas I - V de SSDs de GaN ($L=1 \mu\text{m}$, $W=150 \text{ nm}$, $W_V=200 \text{ nm}$, $W_H=100 \text{ nm}$ y $C=600 \text{ nm}$) cuando modificamos (a) la densidad de carga superficial σ (para $N_{Db}=2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) y (b) el dopaje de fondo N_{Db} (para $\sigma = -0.75 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). El valor de la corriente se obtiene como media temporal en simulaciones muy largas, incluyendo un gran número de periodos cuando las oscilaciones están presentes. El *inset* muestra secuencias de corriente para un potencial aplicado de 50 V.

En lo relativo a la influencia de N_{Db} , para un mismo valor de σ , en la Figura III.25(b) vemos que la corriente aumenta con N_{Db} ya que hay más electrones en el canal al ser menor el vaciamiento originado por σ . Además, el *inset* muestra que las oscilaciones Gunn crecen en amplitud y aparecen reforzadas para valores altos de N_{Db} debido a una realimentación mayor del campo eléctrico que facilita la creación y evolución de los dominios de carga. Y es que, precisamente al aumentar

N_{Db} , estamos asegurando más ampliamente el cumplimiento de la condición III.20 sobre el producto n_0L (entendiendo que $n_0 = N_{Db}$), necesaria para tener las oscilaciones Gunn en el modo de capa dipolar, esto es, la formación y propagación hacia el ánodo de dominios estables. También se aprecia un ligero aumento de la frecuencia de oscilación con N_{Db} . Sin embargo, no está claro cómo se ha operado en términos de fabricación para tener la situación correspondiente a un mayor valor de N_{Db} . Como ya se dijo, en nuestro modelo este parámetro está asociado a las cargas fijas presentes en la heteroestructura de capas (básicamente serían las cargas negativas σ_{sup} en la interfase entre el AlGaIn y el aislante, y la carga positiva piezoeléctrica P en la unión AlGaIn/GaN). Como consecuencia de la conservación de carga en la heteroestructura, la densidad superficial de electrones del canal n_s viene dada por $P - \sigma_{sup}$. Por lo tanto, un valor elevado del parámetro N_{Db} , que favorece las oscilaciones en nuestras simulaciones, ha de estar ligado con una mayor n_s . Sin embargo, esta relación no es tan evidente, puesto que diferentes configuraciones de P y σ_{sup} darían lugar al mismo n_s pero con diferentes perfiles de campo eléctrico y por tanto diferentes escenarios para la propagación y difusión de los dominios. La implementación de un modelo MC 3D o un análisis más detallado de la estructura de capas serían muy interesantes para una futura optimización del diseño y de la fabricación de estos dispositivos.

III.3.1.b. Influencia de la temperatura y de parámetros geométricos

La influencia de la longitud del canal, la región de acceso del ánodo y la temperatura de operación se muestra en la Figura III.26(a). Se observa que la frecuencia de oscilación esencialmente escala con el inverso de la longitud del canal L (150 GHz para $2 \mu\text{m}$), mientras que la curva $I-V$ apenas se ve afectada. Solamente podemos apreciar un ligero cambio en la pendiente a potenciales bajos, pero la corriente de saturación alcanzada para potenciales altos de directa es la misma. Por otro lado, vemos que la longitud de la zona de acceso del ánodo C apenas influye ni en la curva $I-V$ ni en las oscilaciones, ya que se trata simplemente de una zona óhmica con resistencia mucho menor que la del canal. En lo relativo a la temperatura de operación se tiene que las oscilaciones Gunn persisten incluso con un calentamiento significativo, lo cual supone un buen resultado, pues se espera que estos dispositivos nanométricos operen en este tipo de condiciones al ser sometidos a potenciales muy

elevados. Considerando una temperatura de 500 K en todo el dispositivo y a potenciales altos, siguen obteniéndose oscilaciones. No obstante, se tiene una disminución en la velocidad de los electrones, de forma que el nivel de corriente se reduce ligeramente y la frecuencia de oscilación cae de 300 a 260 GHz.

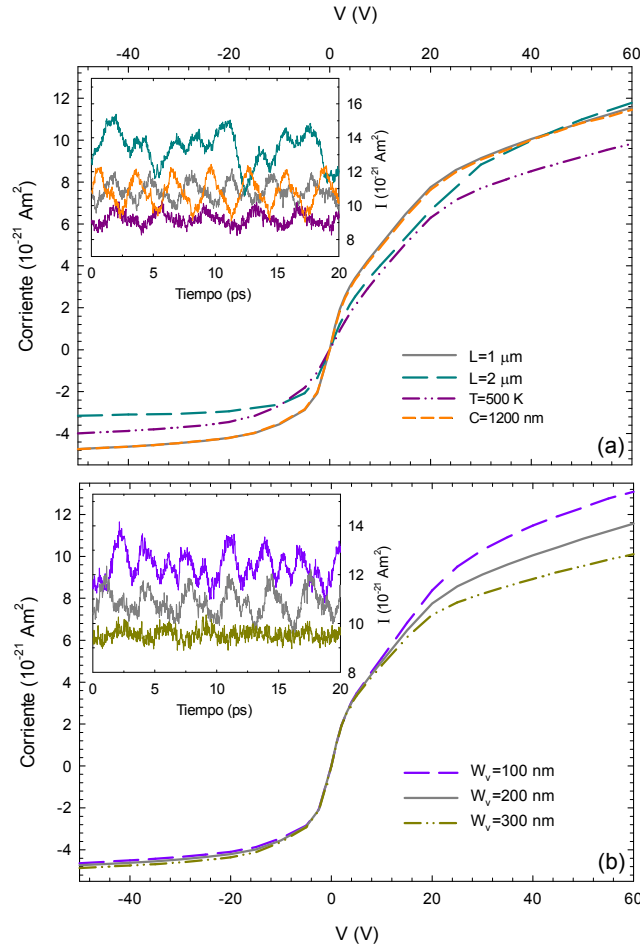


Figura III.26. Curvas I - V de SSDs de GaN ($\sigma = -0.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_{\text{Db}} = 2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $W = 150 \text{ nm}$, $W_{\text{H}} = 100 \text{ nm}$ y $C = 600 \text{ nm}$) cuando modificamos (a) la longitud del canal L (con $W_{\text{V}} = 200 \text{ nm}$) y (b) la anchura de las zanjas verticales W_{V} (con $L = 1 \mu\text{m}$). El *inset* muestra las secuencias de corriente para un potencial aplicado de 50 V (100 V para $L = 2 \mu\text{m}$). Los casos de $T = 500 \text{ K}$ (con $L = 1 \mu\text{m}$ y $W_{\text{V}} = 200 \text{ nm}$), y $C = 1200 \text{ nm}$ (con $L = 1 \mu\text{m}$ y $W_{\text{V}} = 200 \text{ nm}$) también se representan en (a).

La anchura de las zanjas verticales también influye en los resultados obtenidos, como muestra la Figura III.26(b). Para $W_{\text{V}} = 300 \text{ nm}$ el nivel de corriente baja y prácticamente no se aprecian oscilaciones debido a que no se focaliza bien el campo que ha de formar los dominios en la zona de entrada al canal y además la longitud que queda para su propagación es muy corta. Al reducir la anchura de las zanjas verticales aparecen las oscilaciones e incluso aumenta su frecuencia. No obstante, hemos de señalar que W_{V} no puede ser reducida sobremanera por limitaciones tecnológicas y para evitar el aumento de la corriente de pérdidas.

III.3.1.c. Estudio de la eficiencia

Analizamos ahora la dependencia de la eficiencia de conversión de DC a AC, η , con la frecuencia de la excitación AC al modificar varios parámetros. En primer lugar hemos considerado cuatro valores de la amplitud de la señal sinusoidal V_{AC} (1, 5, 10 y 20 V) manteniendo constante la polarización $V_{DC} = 50$ V [Figura III.27(a)], y después hemos variado V_{DC} (40, 50 y 60 V) para V_{AC} fijado a 10 V [Figura III.27(b)]. Podemos apreciar varias bandas de generación AC, con un máximo de la eficiencia entre 0.1% y 0.5%, a una frecuencia fundamental y también alrededor de una frecuencia doble. Pese a que estos valores no son muy elevados, como los diodos de GaN son capaces de soportar una gran potencia en DC, la potencia AC generada puede considerarse todavía dentro de los límites prácticos, sobre todo al tratarse de frecuencias tan altas.

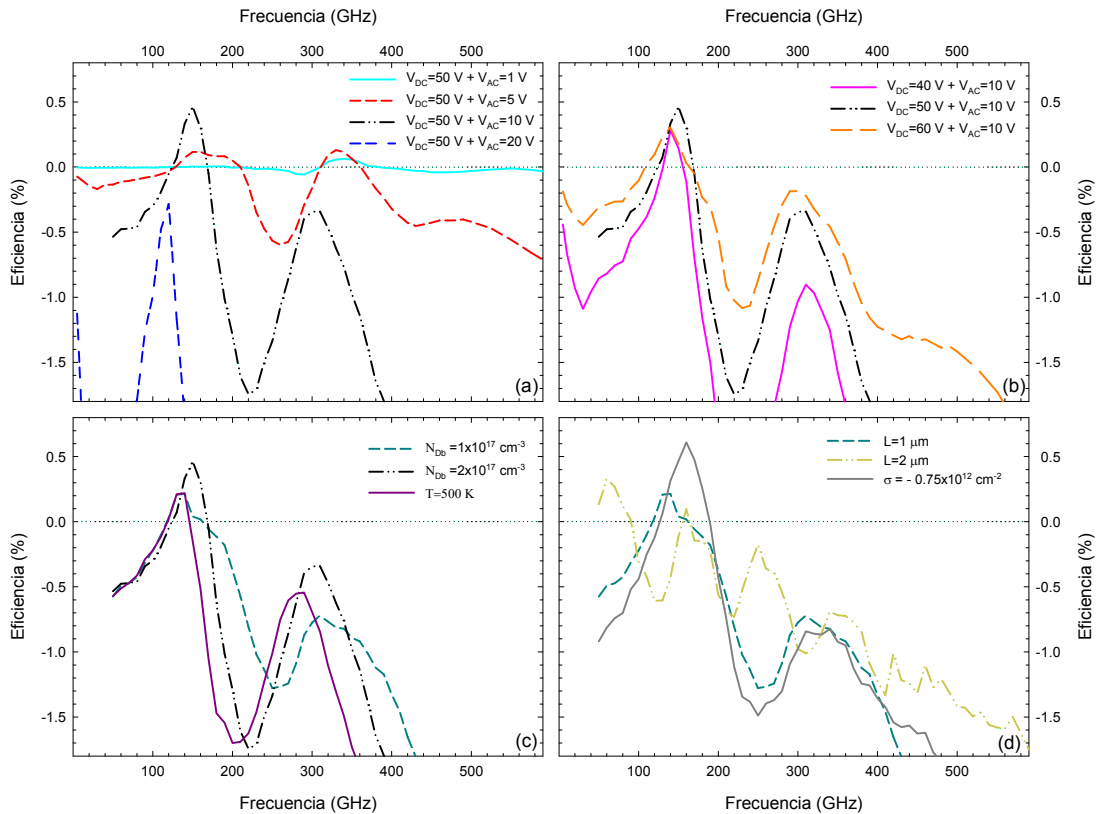


Figura III.27. Eficiencia de conversión de DC a AC en función de la frecuencia de la excitación AC modificando (a) la amplitud AC ($V_{DC}=50$ V), (b) la polarización DC ($V_{AC}=10$ V), (c) el dopaje de fondo N_{Db} y la temperatura T y (d) la longitud L del canal y la carga superficial σ ($N_{Db}=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). Si no se indica explícitamente, $L=1 \mu\text{m}$, $W=150 \text{ nm}$, $W_V=200 \text{ nm}$, $W_H=100 \text{ nm}$, $C=600 \text{ nm}$, $\sigma = -0.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_{Db}=2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, y $T=300$ K. En (c) y (d) $V_{DC}=50$ V y $V_{AC}=10$ V (excepto para el caso de $L=2 \mu\text{m}$, donde $V_{DC}=100$ V y $V_{AC}=20$ V).

Como era de esperar, la eficiencia depende tanto del nivel de DC como de la amplitud de la excitación AC. En particular observamos que la eficiencia disminuye en las bandas de alta frecuencia cuando la amplitud AC aumenta [Figura III.27(a)]. Por el contrario, en el caso de aumentar la polarización DC, la eficiencia de emisión aumenta en las bandas de alta frecuencia [Figura III.27(b)].

La influencia de N_{Db} , L , T y σ en la eficiencia aparece reflejada en la Figura III.27(c)-(d). Análogamente a lo que observábamos en los resultados previos, cuando sólo aplicamos una excitación DC, Figura III.25(b), para valores mayores de N_{Db} las oscilaciones son mayores y por lo tanto la eficiencia mejora. Al aumentar la temperatura las bandas de emisión se desplazan ligeramente a frecuencias menores debido a la menor velocidad de deriva de los electrones, pero la eficiencia no se degrada notablemente. Si comparamos la eficiencia para diodos con diferentes longitudes observamos que las bandas de emisión son más anchas para los canales cortos y escalan en frecuencia como $1/L$. Este resultado significa que si disminuimos más la longitud del canal del SSD podremos aumentar la frecuencia de emisión. Finalmente, vemos que un aumento de la densidad de carga superficial σ , que da lugar a una menor W_{ef} , sorprendentemente proporciona eficiencias mayores.

Es curioso igualmente el hecho de que la frecuencia de oscilación observada cuando el SSD sólo se polariza en DC (~ 300 GHz para $L=1 \mu\text{m}$) se encuentra en torno a la segunda banda de emisión y no en la banda fundamental (~ 150 GHz) de las oscilaciones que aparecen en presencia de la excitación AC.

III.3.1.d. Evolución temporal de magnitudes microscópicas

Para explicar de manera más visual los resultados mostrados hasta ahora y tratar de comprender la presencia de diferentes bandas en las curvas de eficiencia, llevamos a cabo un análisis a nivel microscópico del caso particular de un diodo donde aparecen claramente identificadas cuatro bandas de generación, como muestra la Figura III.28.

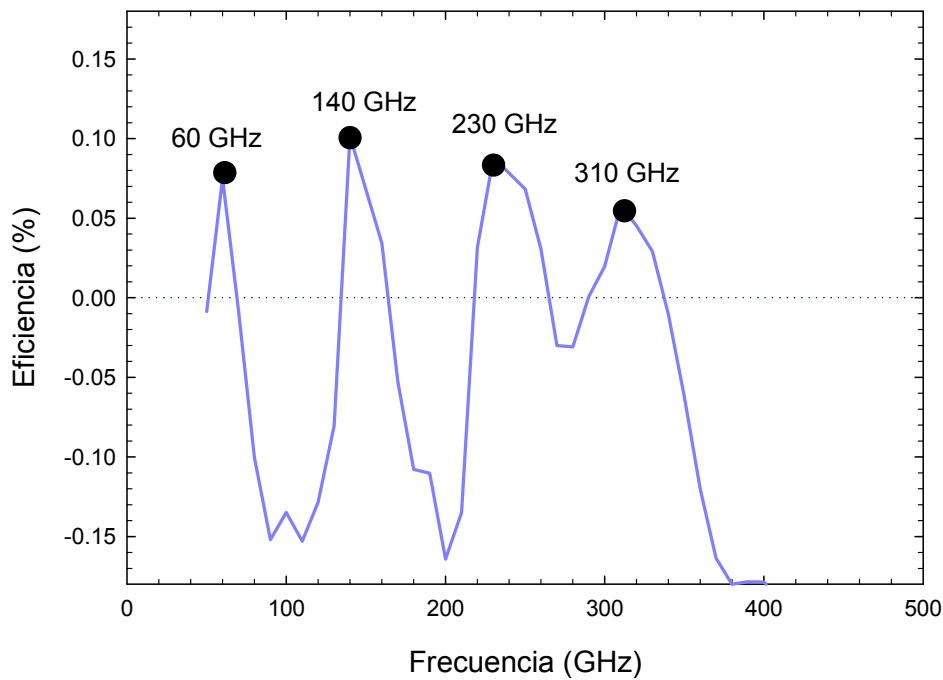


Figura III.28. Eficiencia de conversión de DC a AC en función de la frecuencia de la excitación AC para un diodo con $L=2\ \mu\text{m}$, $W=150\ \text{nm}$, $W_V=300\ \text{nm}$, $W_H=100\ \text{nm}$, $C=600\ \text{nm}$, $\sigma = -0.2 \times 10^{12}\ \text{cm}^{-2}$, $N_{\text{Db}}=2 \times 10^{17}\ \text{cm}^{-3}$, y $T=300\ \text{K}$. $V_{\text{DC}}=100\ \text{V}$ y $V_{\text{AC}}=7\ \text{V}$.

En la Figura III.29 presentamos los perfiles de concentración de electrones y de campo eléctrico a lo largo del centro del canal para: (i) un instante de tiempo y diferentes frecuencias de la excitación AC (correspondientes al centro de cada banda de la Figura III.28), Figura III.29(a)-(b), y (ii) para diferentes tiempos equidistantes durante un periodo de excitación con una señal AC de 310 GHz (correspondiente al centro de la cuarta banda de generación), Figura III.29(c)-(d). Se observa que a medida que se incrementa la frecuencia de la excitación AC, aumenta el número de dominios de carga (de 1 a 4) o zonas de campo alto moviéndose a lo largo del canal. Estos dominios, como ya explicamos al principio del capítulo, se crean como consecuencia de la transferencia de electrones desde el valle Γ_1 al valle U (de mayor masa efectiva) de la banda de conducción del GaN, de manera similar a como ocurre por ejemplo en los diodos Gunn de GaAs tradicionales. Nótese también que la frecuencia central de las bandas no es exactamente un múltiplo entero de la frecuencia fundamental de oscilación, ya que la formación de más de un dominio de acumulación aumenta el llamado “*dead space*” (distancia necesaria para la formación de un domino) a la entrada del SSD.

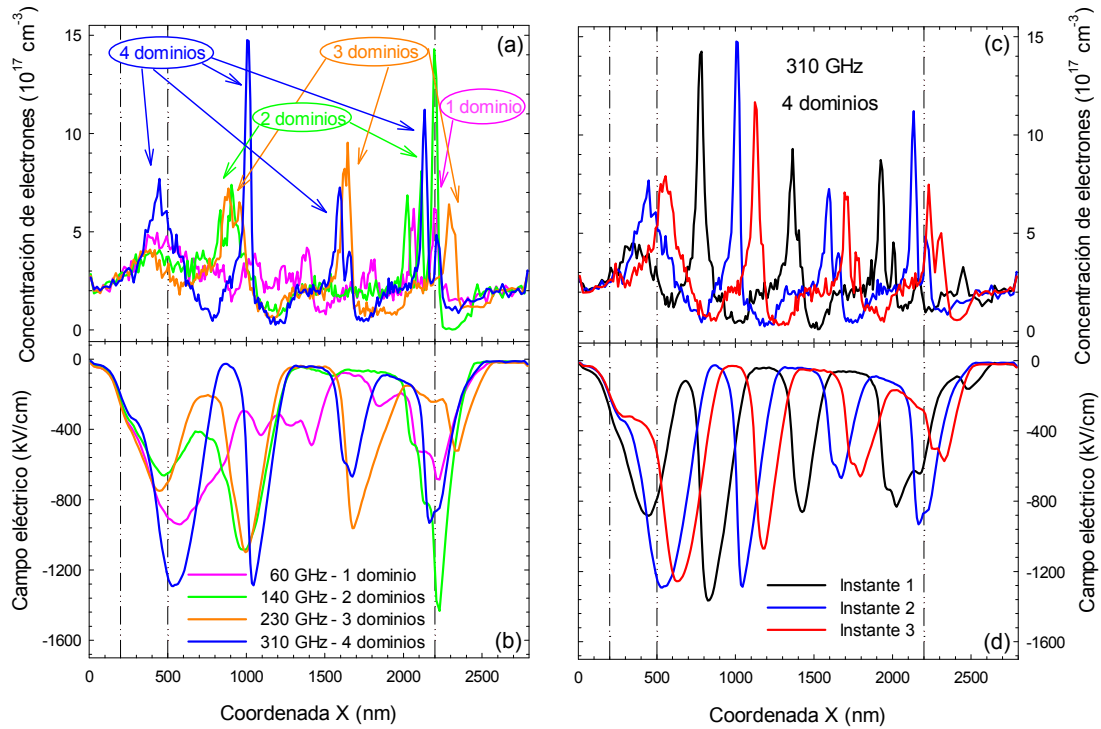


Figura III.29. Perfiles de (a) y (c) concentración de portadores y (b) y (d) campo eléctrico a lo largo del centro del canal de un SSD a temperatura ambiente para $V_{DC}=100$ V y $V_{AC}=7$ V. Las curvas en (a) y (b) corresponden a un determinado instante de tiempo dentro de un periodo de la señal AC para las frecuencias centrales de las bandas de emisión observadas en la Figura III.28 (60, 140, 230 y 310 GHz). En (c) y (d) corresponden a tiempos equidistantes durante un periodo de la excitación AC con frecuencia de 310 GHz. El diodo tiene $L=2$ μm , $W=150$ nm, $W_V=300$ nm, $W_H=100$ nm, $C=600$ nm, $\sigma = -0.2 \times 10^{12}$ cm^{-2} y $N_{Db}=2 \times 10^{17}$ cm^{-3} . Las líneas verticales indican la posición de las zanjas verticales y el final del canal.

Se ha de indicar que los altos valores del campo eléctrico que se llegan a alcanzar puntualmente no han de considerarse como un problema para la correcta simulación de la dinámica de portadores, incluso si el modelo MC no incluye procesos de ionización por impacto, ya que la energía de los electrones no es lo suficientemente grande para crear un número significativo de pares electrón-hueco. De hecho, tales campos eléctricos son holgadamente inferiores al campo de ruptura del GaN tipo wurtzita (Tabla I.1).

III.3.2. Comparación con resultados experimentales del *Run 1*

III.3.2.a. Primeras medidas experimentales

Siguiendo indicaciones de los resultados preliminares de simulación MC, en el IEMN se lanzó el *Run 1* de fabricación de los primeros SSDs de GaN. Los valores medidos de la densidad de portadores n_s en la heteroestructura de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ están en el intervalo $[5-10] \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, con una movilidad alrededor de $1200 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Como ya dijimos, tras un gran esfuerzo tecnológico, se consiguió una profundidad del grabado de zanjas de 45 nm. Se procesaron diferentes topologías y se analizó también el aislamiento de las zanjas (*recess*) variando su anchura entre 50 y 200 nm, valores significativamente pequeños que no son fáciles de conseguir desde el punto de vista tecnológico. Se fabricaron canales de 1 y 2 μm de longitud y de anchuras de 75 y 150 nm. Con la finalidad de aumentar la potencia de salida se diseñaron agrupaciones o *arrays* de varios SSDs en paralelo, con la ventaja, en términos de elementos parásitos extrínsecos, de que no se necesitan interconexiones. Además, simulaciones previas a este trabajo indican que con un diseño adecuado las oscilaciones en los distintos canales se sincronizan.^{143,145} Computando el total de las retículas se fabricaron 204 dispositivos funcionales (60 simples, 24 *arrays* de 4 SSDs, 72 *arrays* de 16 SSDs y 48 *arrays* de 32 SSDs).

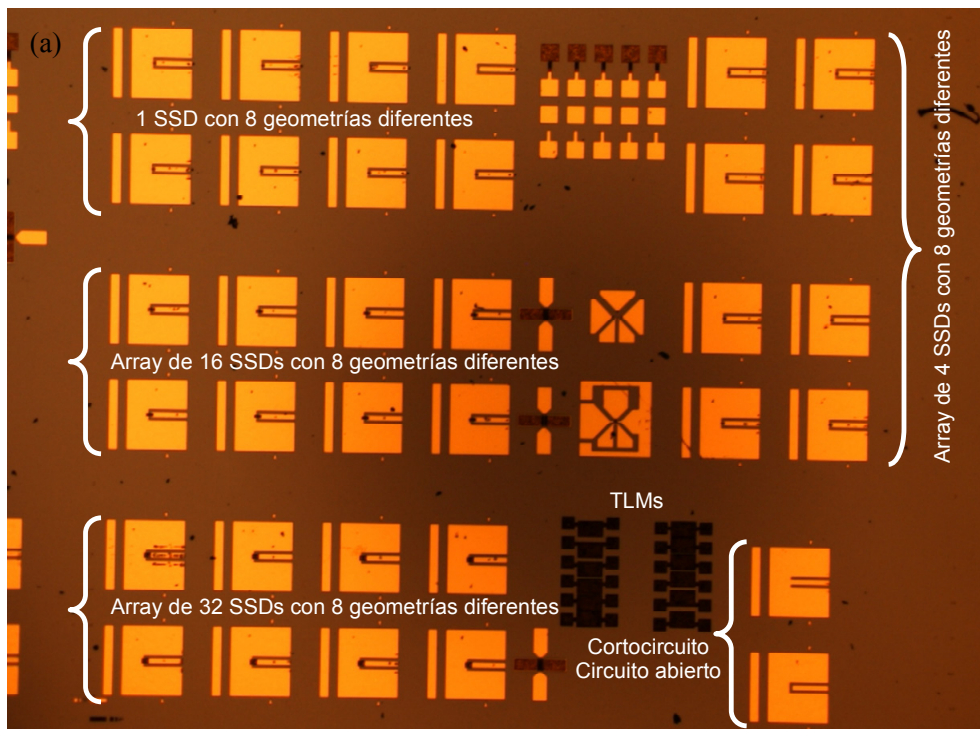


Figura III.30. Máscara usada en el primer *run* de fabricación de SSDs de GaN.

En la Figura III.30 se muestra la máscara usada para este primer *run* y en la Figura III.31 una imagen SEM de un *array* de 16 SSDs en paralelo y un corte FIB (*Focused Ion Beam*) donde se aprecia la forma de las zanjas.

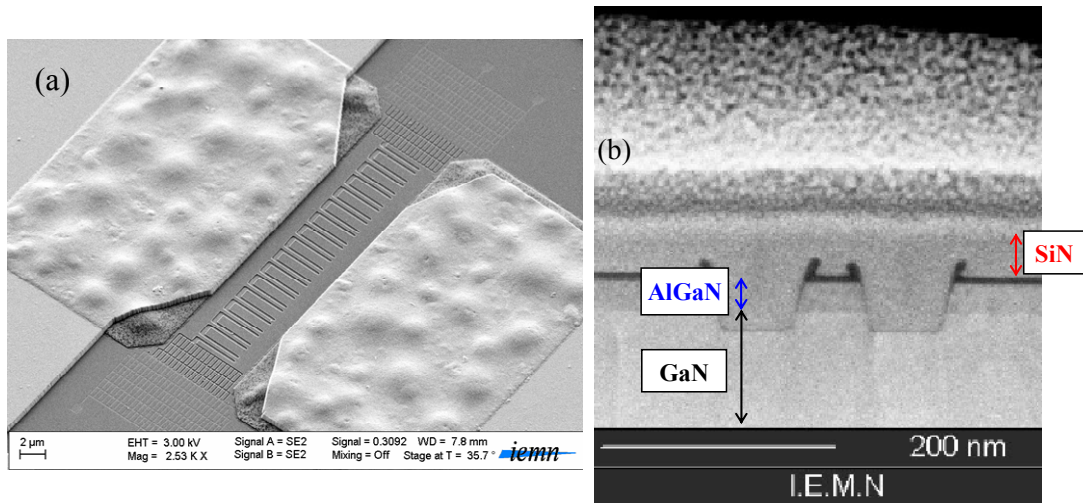


Figura III.31. (a) Imagen SEM de un *array* de 16 SSDs en paralelo. (b) Corte FIB mostrando la forma del *recess*.

Para la caracterización eléctrica tanto de los diodos simples como de los *arrays* de SSDs en paralelo se ha usado una mesa de puntas (ver Figura III.32) y un analizador de semiconductores Keithley (modelo 4200-SCS).

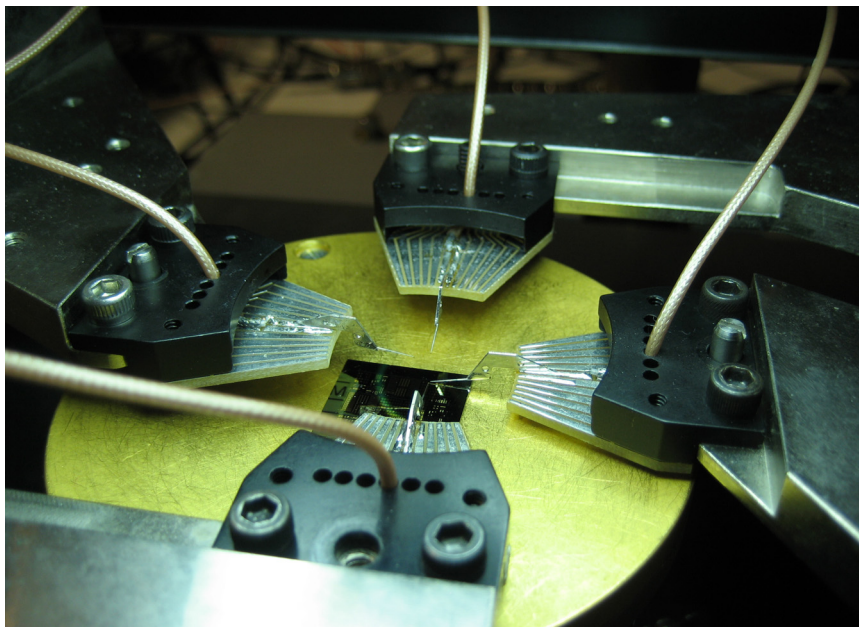


Figura III.32. Mesa de puntas para la caracterización eléctrica de los dispositivos.

Algunos de los resultados de las medidas $I-V$ están recogidos en la Figura III.33. En el *inset* de la Figura III.33(a) vemos que el aumento de corriente es lineal con el número de SSDs en paralelo, lo que significa por un lado que tenemos la

misma densidad de corriente por dispositivo, denotando un alto grado de fiabilidad en la fabricación, y por otro que no existe limitación térmica asociada al sustrato de Si. La dependencia de las curvas I - V con la longitud y anchura de los canales [Figura III.33(b)] sigue el comportamiento observado en las simulaciones.

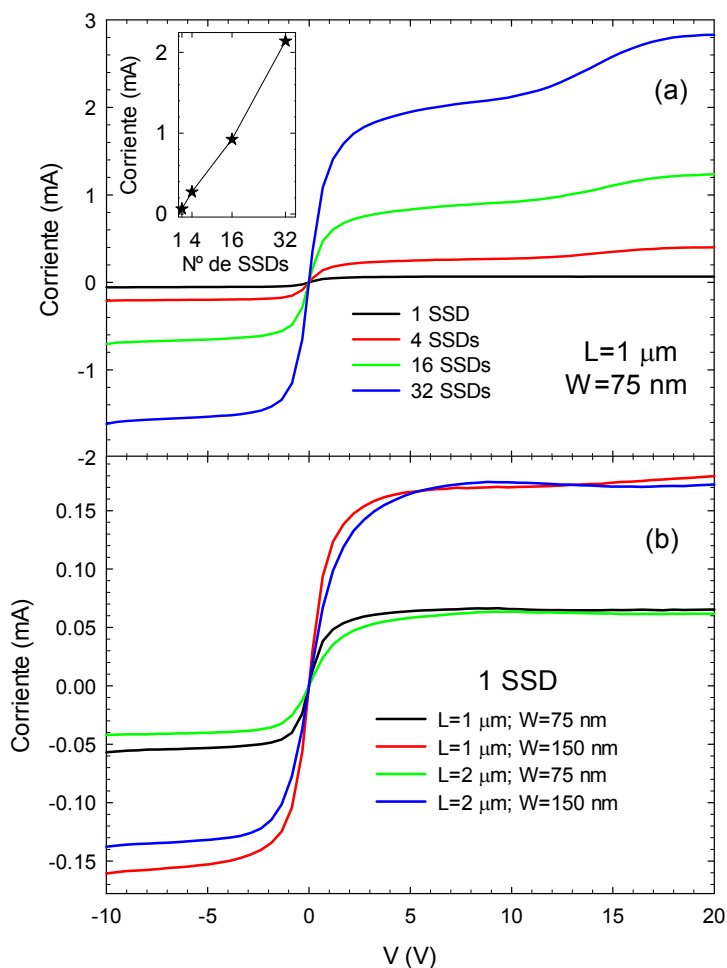


Figura III.33. Características I - V experimentales para (a) *arrays* de SSDs con diferente número de diodos en paralelo (con $L=1 \mu\text{m}$ y $W=75 \text{ nm}$), y (b) para un sólo SSD modificando su longitud y anchura (siempre $W_V=100 \text{ nm}$, $W_H=50 \text{ nm}$ y $C=400 \text{ nm}$). El *inset* en (a) muestra la corriente para un potencial aplicado de 10 V en función del número de diodos en paralelo.

Siguiendo el método indicado en el Capítulo I hemos estimado la anchura de vaciamiento W_d y la resistencia de los contactos R_C a partir de estas primeras medidas experimentales. En la Figura III.34(a) se representa la resistencia R en equilibrio frente a la longitud L del canal para una anchura W constante y se determina el valor de R_C extrapolando a una longitud nula del canal. Los valores obtenidos de $2R_C$ son 930 y 2600 Ω para las anchuras de 75 y 150 nm, respectivamente. Una vez conocido R_C representamos $1/(R-2R_C)$ en función de la anchura W para una longitud L constante, y de la extrapolación a cero podemos

estimar el vaciamiento W_d [Figura III.34(b)]. Se obtiene un valor de 25 ± 5 nm para ambos canales (1 μm y 2 μm) en equilibrio.

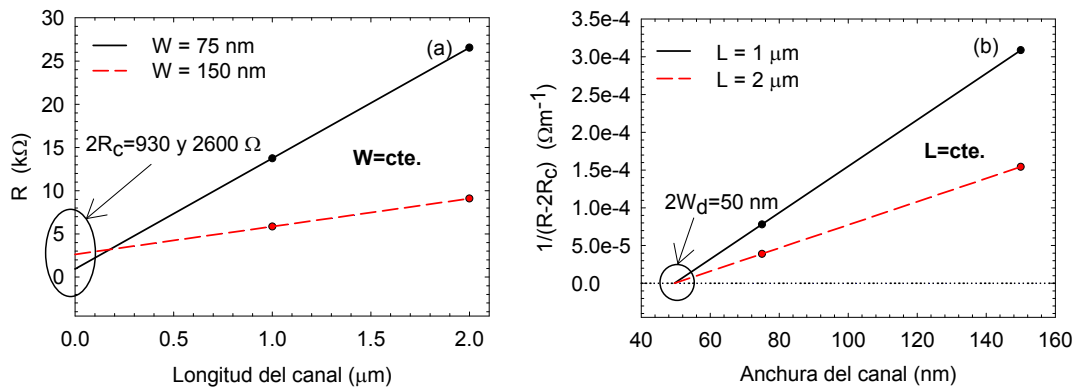


Figura III.34. (a) Resistencia en equilibrio de SSDs con diferente anchura del canal en función de la longitud del canal. (b) Representación de $1/(R-2R_C)$ en función de la anchura del canal para diodos con diferentes longitudes.

En este primer estadio del desarrollo del proyecto europeo se caracterizó el suelo de ruido del montaje para la detección eléctrica de la emisión en RF (-90 dBm) y se llevaron a cabo medidas de parámetros S hasta 325 GHz en diferentes estructuras, algunas con una corriente total elevada (un *array* de 32 SSDs) y otras con corriente muy baja (un único SSDs de 75 nm de anchura). Sin embargo, no se detectó evidencia alguna de generación de oscilaciones ni de resistencia incremental negativa en ese rango de frecuencias. La Figura III.35 esquematiza la configuración experimental usada para esas medidas.

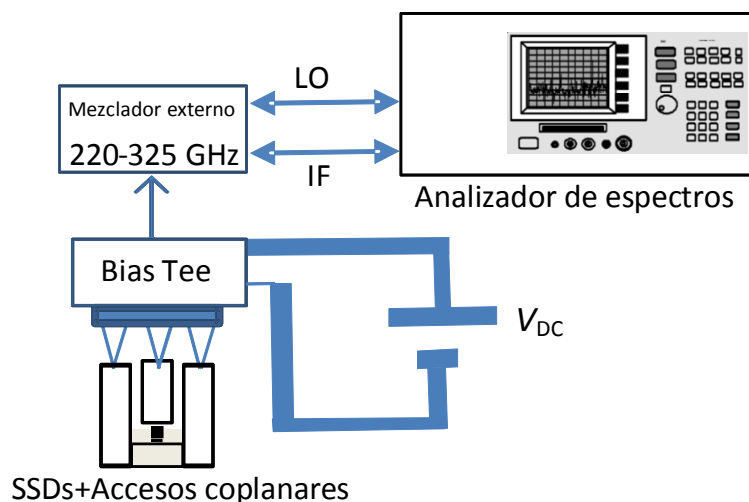


Figura III.35. Montaje experimental para la medida de emisión en oblea con un analizador de espectros.

III.3.2.b. Comparaciones con el modelo de carga superficial constante

El siguiente paso a seguir es lanzar nuevas simulaciones, todavía con el modelo de carga constante, empleando parejas de los parámetros ajustables del modelo (σ y N_{Db}) cuyos valores presenten una relación de 25 nm ($W_d = \sigma/N_{Db}$), acorde con la estimación realizada del vaciamiento lateral, y así tratar de reproducir las curvas I - V experimentales. La comparación de nuestros resultados con las medidas se muestra en la Figura III.36, donde ha de indicarse que hemos transformado los resultados de simulación (los cuales vienen dados en A/m por tratarse de un simulador 2D) a unidades de A multiplicando por el espesor que nos proporciona el valor real de la densidad superficial de electrones n_s en el canal de nuestras estructuras, dimensión que se calcula como n_s/N_{Db} (con $n_s=10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, un valor dentro del intervalo que establecieron las medidas).

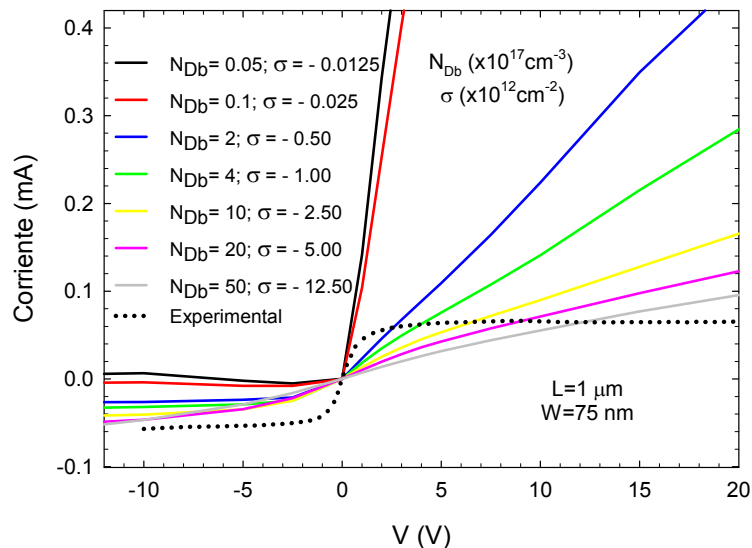


Figura III.36. Comparación entre curvas I - V simuladas y la medida experimentalmente para un diodo con $L=1 \mu\text{m}$ y $W=75 \text{ nm}$. Todas las parejas de valores de N_{Db} y σ proporcionan el mismo vaciamiento lateral $W_d=\sigma/N_{Db}=25 \text{ nm}$. Se ha empleado $n_s=10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Se observa que para los valores menores de σ y N_{Db} se reproduce correctamente la conductancia óhmica (pendiente a bajo potencial) mientras que valores altos de σ y N_{Db} permiten reproducir mejor la corriente de saturación (tanto en directa como en inversa). Sin embargo, no se encuentra una pareja de valores capaz de reproducir correctamente la curva I - V por completo (incluso sin mantener la relación para los 25 nm de vaciamiento lateral, como se muestra en la Figura III.37). Esto indica que el esquema simplificado de carga superficial constante empleado en las simulaciones mostradas hasta ahora no es adecuado para modelizar correctamente

estos dispositivos, si bien proporciona información muy útil en cuanto a la influencia de múltiples parámetros.

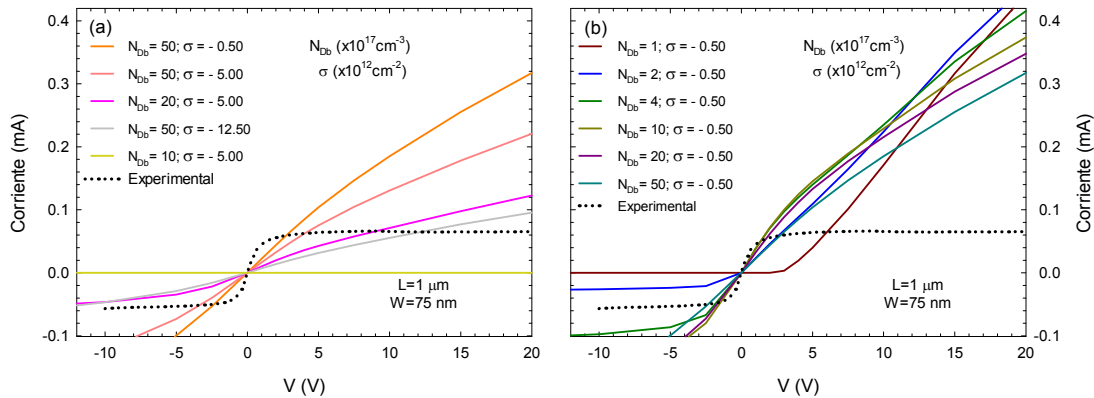


Figura III.37. Comparación entre curvas I - V simuladas y la medida experimentalmente para un diodo con $L=1 \mu\text{m}$ y $W=75 \text{ nm}$. Se han usado sin éxito múltiples parejas de valores de N_{Db} y σ para tratar de reproducir los resultados experimentales con el modelo de carga constante.

El hecho de que el modelo de carga superficial constante sea incapaz de reproducir los resultados experimentales parece indicar que la densidad de carga superficial a lo largo de las fronteras de las zanjas es fuertemente no homogénea y/o que depende del voltaje aplicado. Para tener esto en cuenta, hemos empleado el modelo de carga auto-consistente, que permite la adaptación local de la carga de superficie en las paredes de las zanjas de acuerdo con la concentración de portadores dentro del canal. Así, la anchura efectiva del canal resulta modulada localmente, y de forma diferente para cada potencial aplicado.

Los posibles efectos de auto-calentamiento también podrían ser causa del mal ajuste de los resultados, pero éstos no han sido aún incorporados de forma auto-consistente en nuestros modelos MC.

III.3.2.c. Comparaciones con el modelo de carga auto-consistente

La Figura III.38 compara las medidas I - V para SSDs con $L=1$ y $2 \mu\text{m}$ y $W=75$ y 150 nm con los resultados MC obtenidos con el modelo auto-consistente (usando un valor de $N_{\text{Db}}=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). Las simulaciones ahora sí son capaces de reproducir satisfactoriamente el comportamiento encontrado experimentalmente en la corriente, tanto para bajo potencial como para alto (saturación), para varios SSDs con diferentes longitudes y anchuras de canal. No obstante, probablemente se obtendría un mejor acuerdo si considerásemos las dimensiones reales exactas en lugar de los

valores nominales usados en el software de diseño CAD, pues se ha comprobado con imágenes SEM que existe un *underetch* de unos 20 nm.

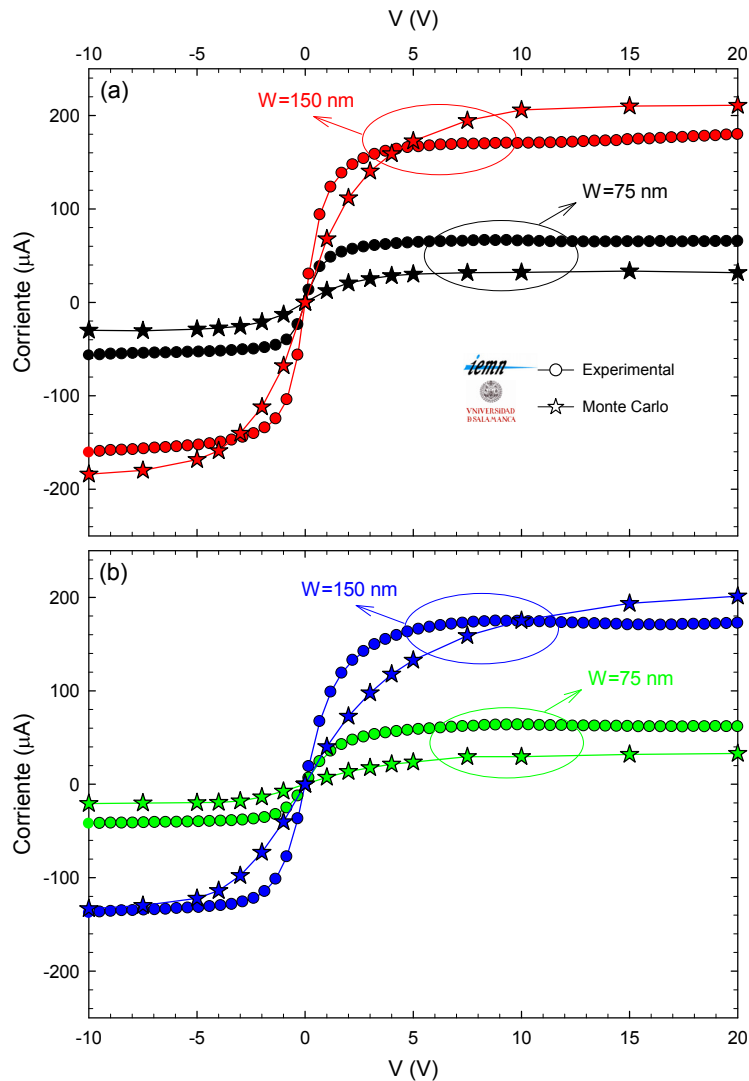


Figura III.38. Comparación entre curvas I - V medidas y las simuladas con el modelo auto-consistente para diodos con longitud de canal (a) $1\ \mu\text{m}$ y (b) $2\ \mu\text{m}$ ($W_V=100\ \text{nm}$, $W_H=50\ \text{nm}$, $C=400\ \text{nm}$), y las anchuras de canal indicadas. Además $N_{DB}=1\times 10^{17}\ \text{cm}^{-3}$ y se ha considerado $n_s=8\times 10^{12}\ \text{cm}^{-2}$.

En cuanto a las secuencias de corriente, al igual que sucedía en las medidas experimentales, las simulaciones con el modelo de carga auto-consistente no muestran oscilaciones para estas estructuras, contrariamente a lo que ocurría con el modelo de carga constante. A través de la información que nos proporciona el simulador trataremos de entender por qué no se tiene generación de señales, para así justificar el diseño de las estructuras fabricadas en el siguiente *run*.

III.3.2.d. Estudio de varias magnitudes

Para justificar hasta qué punto el modelo auto-consistente es más adecuado que el de carga constante en la simulación de estos dispositivos, y a su vez comprender la ausencia de oscilaciones, analizamos la variación de varias magnitudes en el diodo.

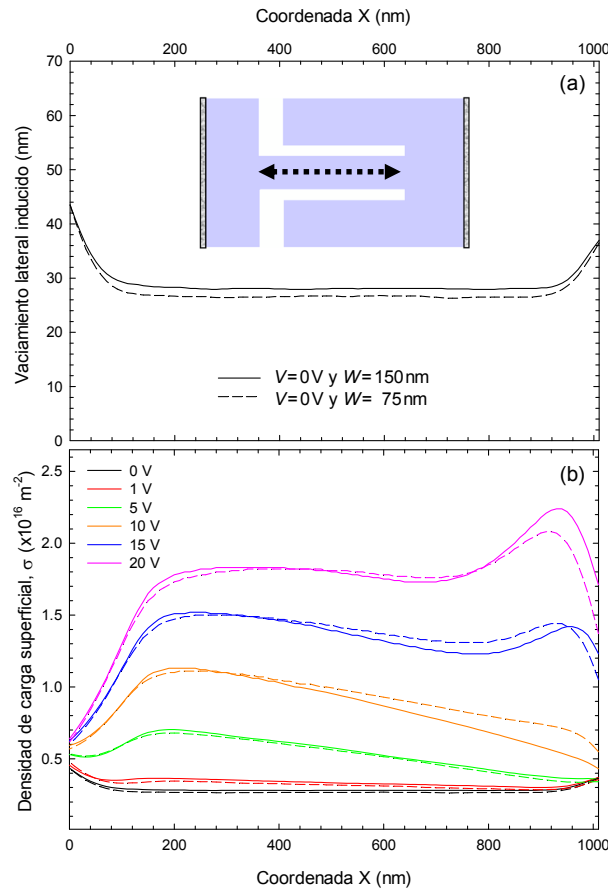


Figura III.39. (a) Perfil del vaciamiento originado en el canal por la densidad de carga superficial en equilibrio. (b) Perfil de la carga superficial para varios potenciales aplicados. Se trata de diodos de $1\ \mu\text{m}$ de longitud y dos anchuras diferentes ($W=75$ y 150 nm).

A partir del perfil de carga superficial en las paredes del canal en equilibrio, en la Figura III.39(a) representamos el vaciamiento a lo largo del mismo para un diodo con $W=75\text{ nm}$ y otro con $W=150\text{ nm}$, ambos con $L=1\ \mu\text{m}$. En ambos casos se obtienen valores similares a los extraídos de las curvas $I-V$ experimentales (W_d en torno a $25\text{-}30\text{ nm}$), lo cual da soporte y validez física a nuestro modelo. En la Figura III.39(b) se muestra el perfil de la densidad de carga superficial en las paredes del canal de esos mismos dispositivos, ahora para varios potenciales aplicados. Observamos que la densidad de carga superficial, y con ella el vaciamiento, son claramente no homogéneos a lo largo del canal y fuertemente dependientes del potencial aplicado. La evolución de estos perfiles con el potencial aplicado explica

que la corriente sature a potenciales menores que cuando usábamos el modelo de carga constante. El perfil de σ es también no homogéneo a lo largo del canal. Para potenciales bajos el valor de la densidad carga superficial es más importante a la entrada del canal, mientras que para potenciales mayores es más significativo al final del canal, en presencia de frecuentes mecanismos intervale, de carácter isótopo.⁷¹

Resulta igualmente interesante y muy ilustrativo observar las diferencias entre ambos modelos en los respectivos mapas de potencial y concentración que proporcionan. Estos mapas son el resultado de un promedio temporal durante un tiempo suficientemente extenso, lo cual es un aspecto clave a la hora de analizar la información que se puede extraer de ellos. Por ejemplo, en el caso de tener oscilaciones, el hecho de haber promediado nos imposibilita observar los dominios propagándose.

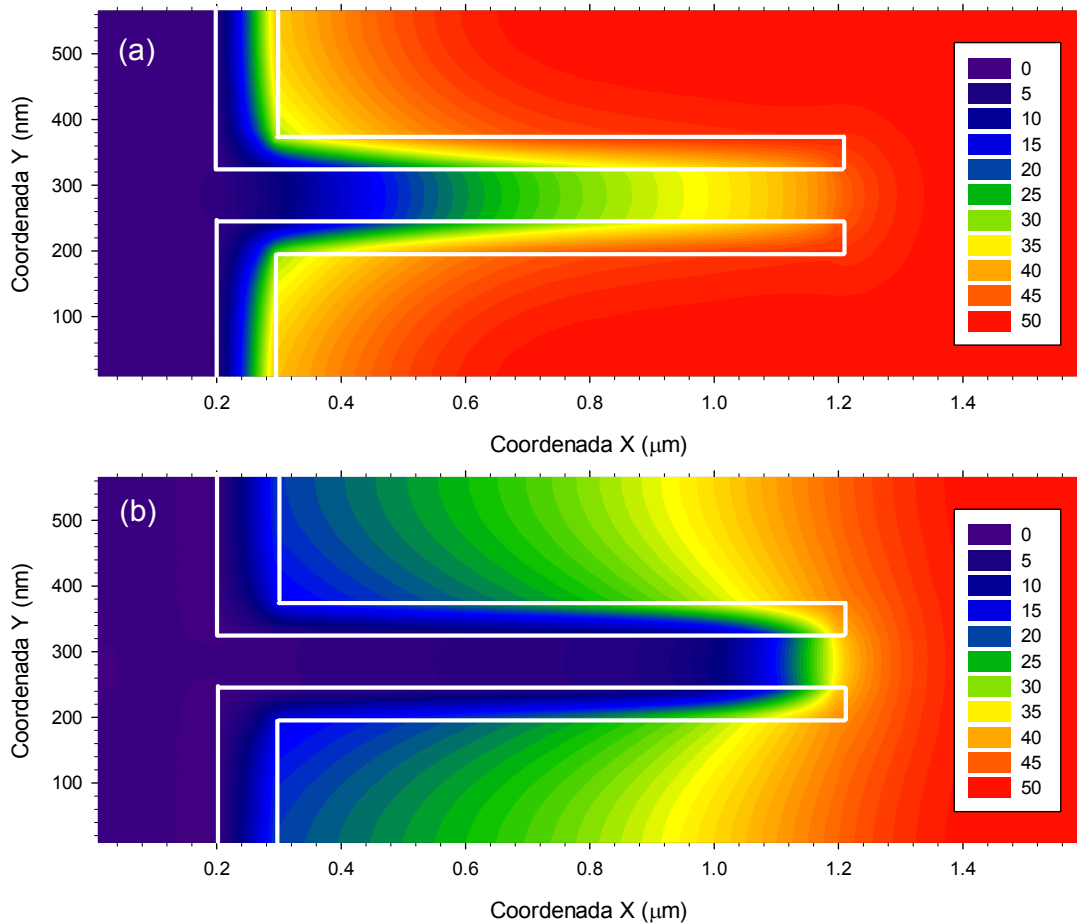


Figura III.40. Mapas bidimensionales del potencial eléctrico (en unidades de V y promediados en el tiempo) en un diodo con $L=1 \mu\text{m}$, $W=75 \text{ nm}$ y un potencial aplicado de 50 V, usando (a) el modelo de carga superficial constante ($N_{\text{Db}}=2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $\sigma = 0.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) y (b) el modelo auto-consistente ($N_{\text{Db}}=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). En los dos casos $W_{\text{V}}=100 \text{ nm}$, $W_{\text{H}}=50 \text{ nm}$ y $C=400 \text{ nm}$.

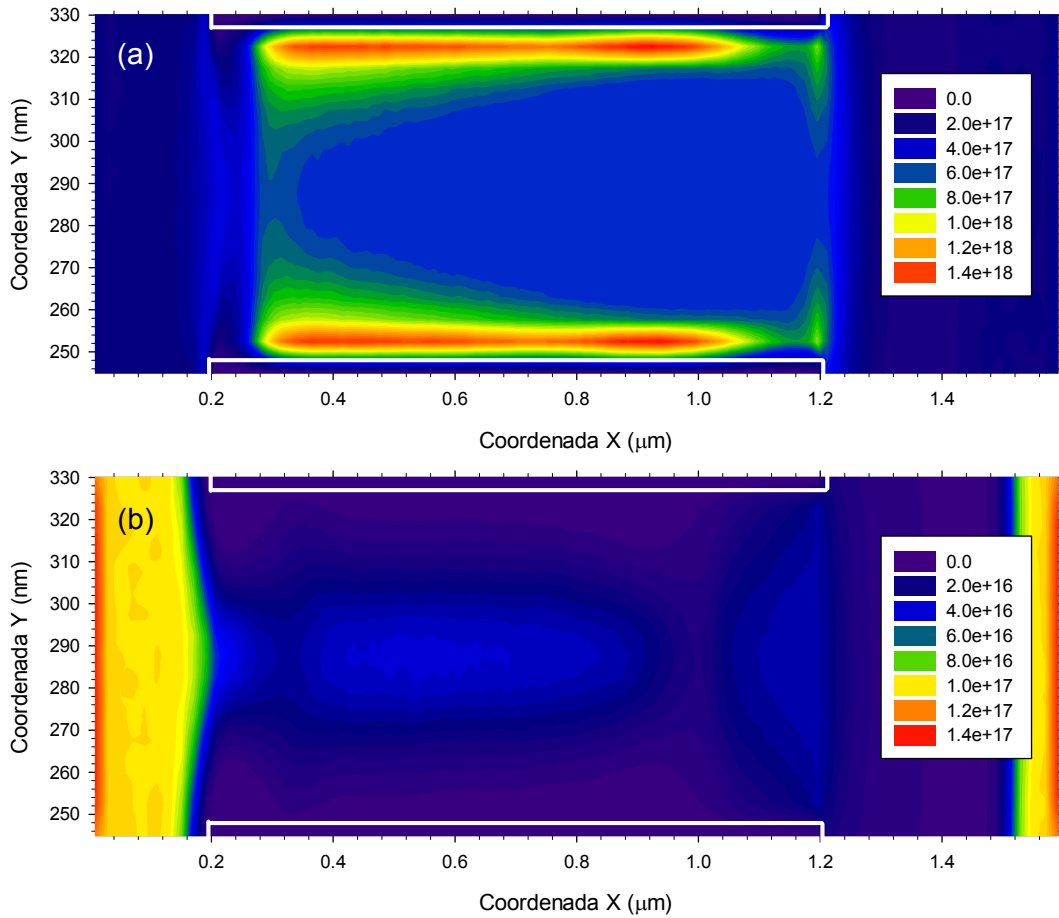


Figura III.41. Mapas bidimensionales de la concentración de portadores (en cm^{-3} y promediados en el tiempo) en el canal de un diodo con $L=1 \mu\text{m}$, $W=75 \text{ nm}$ y un potencial aplicado de 50 V usando (a) el modelo de carga superficial constante ($N_{\text{Db}}=2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $\sigma = 0.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) y (b) el modelo auto-consistente ($N_{\text{Db}}=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). En los dos casos $W_{\text{v}}=100 \text{ nm}$, $W_{\text{H}}=50 \text{ nm}$ y $C=400 \text{ nm}$.

En el modelo de carga constante el potencial aplicado en el ánodo, V_{bias} , alcanza, sin apenas caída, las paredes laterales de las zanjas que rodean el canal [Figura III.40(a)]. Así, aumentando V_{bias} la concentración de portadores en el canal aumenta y da lugar al incremento de corriente con el potencial aplicado que vemos en las curvas I - V . De hecho, la concentración de portadores es máxima en los laterales del canal, junto a las zanjas horizontales [Figura III.41(a)]. Sólo para valores muy altos de V_{bias} , que hicieran alcanzar la velocidad de saturación de la curva v - E , se tendría que la corriente deja de crecer y tiende a saturar. Sin embargo, con el modelo auto-consistente el mapa de potencial se ve muy influenciado por las cargas superficiales [Figura III.40(b)]. En esta ocasión, el potencial que se tiene en las paredes laterales de las zanjas no es próximo a V_{bias} , sino que disminuye gradualmente y de manera significativa al alejarnos del ánodo, haciendo que la

concentración en el canal, en particular junto a las zanjas, sea menor [Figura III.41(b)]. Cuando la concentración de portadores tiende a aumentar (al aumentar V_{bias}), la carga superficial, y a su vez el vaciamiento, también aumentan [Figura III.39(b)] debido a la presencia de más portadores en las proximidades de las zanjas. Así, el flujo de corriente en esta ocasión tiene lugar por la zona central del canal [Figura III.41(b)], pero la concentración no es suficiente para lograr las oscilaciones Gunn. Además, debido a que la influencia de un aumento de V_{bias} se compensa relativamente con un incremento de σ , el régimen de saturación se alcanza antes, para valores mucho menores de V_{bias} que con el modelo de carga constante.

III.3.3. Nuevas estrategias de diseño y fabricación del *Run 2*

Aunque se conocía que el papel que juegan las cargas de las superficies grabadas no era despreciable en el comportamiento de los SSDs, los resultados en estos diodos de GaN muestran una influencia mucho más significativa de lo que pensábamos. Tanto es así que la geometría escogida para el *Run 1* se basó en canales de 75 y 150 nm que han resultado ser demasiado estrechos. Como hemos explicado, los elevados valores de carga superficial al aumentar el potencial vacían excesivamente el canal, provocan una saturación muy temprana de la corriente e impiden la presencia de las oscilaciones que sí teníamos en el modelo de carga constante. Vamos por tanto a ver cuáles fueron las nuevas estrategias de diseño para el *Run 2*.

III.3.3.a. Indicaciones con el modelo de carga constante

Dado que las simulaciones con el modelo auto-consistente llevan un considerable incremento del tiempo de computación requerido, hemos compaginado éstas con algunas pruebas más empleando el modelo de carga constante, con el propósito de explorar ciertas posibilidades orientadas siempre a conseguir oscilaciones en la corriente. Los resultados mostrados en la Figura III.42 corresponden a estudios de varias situaciones que nos llevan a concluir: (i) si el canal está totalmente vaciado en equilibrio (usando una σ muy grande) se necesitan voltajes muy elevados para tener oscilaciones, (ii) el aumento de la anchura del canal favorece que las oscilaciones aparezcan a menores potenciales y (iii) al aumentar el dopaje de fondo también beneficiamos la aparición de las oscilaciones.

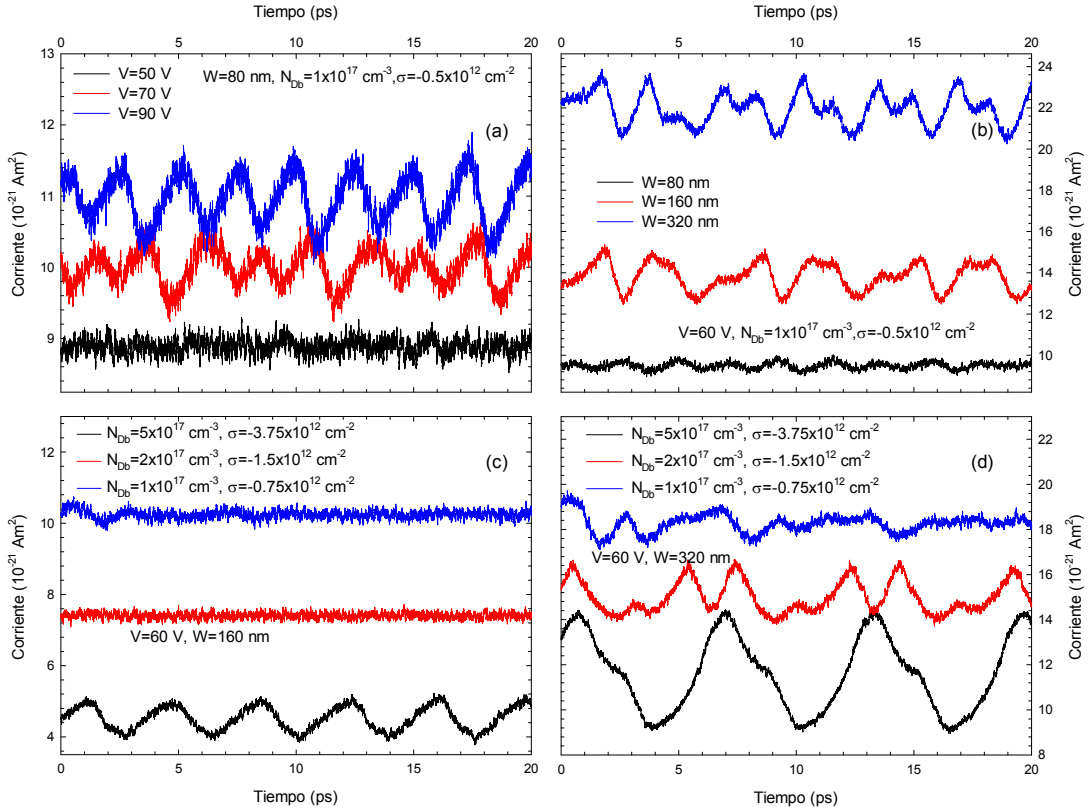


Figura III.42. Secuencias de corriente para varios SSDs simulados con el modelo de carga constante. En todos los casos: $L=1 \mu\text{m}$, $W_V=100 \text{ nm}$, $W_H=50 \text{ nm}$ y $C=400 \text{ nm}$. (a) $W=80 \text{ nm}$, $\sigma = -0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_{Db}=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ($2W_d=100 \text{ nm}$) y diferentes voltajes. (b) $V=60 \text{ V}$ y varias W con $\sigma = -0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $N_{Db}=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ($2W_d=100 \text{ nm}$). (c) $V=60 \text{ V}$, $W=160 \text{ nm}$ y varias parejas de N_{Db} y σ ($2W_d=150 \text{ nm}$). (d) Equivalente a (c) pero para $W=320 \text{ nm}$.

En la Figura III.42(a), que corresponde a un diodo con $W=80 \text{ nm}$ y vaciamiento lateral de $W_d=50 \text{ nm}$ en equilibrio, observamos que las oscilaciones solamente aparecen cuando el potencial aplicado es superior a 50 V , lo que significa que incluso con un canal totalmente vaciado sería posible obtener oscilaciones a expensas de subir mucho la polarización. La siguiente alternativa para facilitar la aparición de dominios es ensanchar el canal, tal y como se muestra en la Figura III.42(b), ya que para un mismo nivel de carga superficial se obtiene una mayor concentración de portadores. Finalmente hemos vuelto a estudiar la influencia del dopaje de fondo para $W=160 \text{ nm}$ y $W=320 \text{ nm}$, y un vaciamiento $W_d=75 \text{ nm}$ [Figura III.42(c)-(d)]. Los valores mayores de N_{Db} (y canales más anchos) favorecen la aparición de oscilaciones en la corriente.

III.3.3.b. Indicaciones con el modelo de carga auto-consistente

Pasemos ahora a ver la información que nos puede aportar el modelo auto-consistente para orientar el diseño en el *Run 2*.

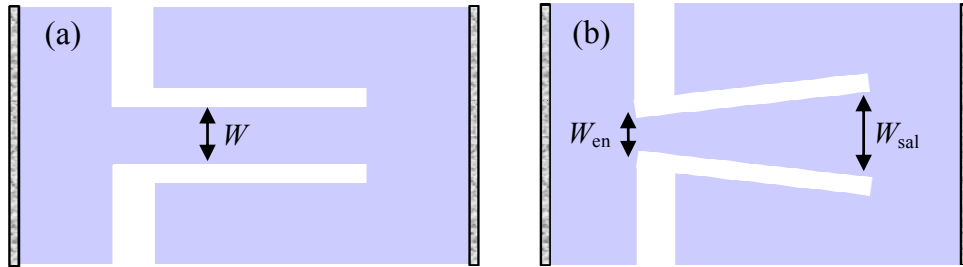


Figura III.43. Geometría de los diodos simulados (a) con la clásica forma rectangular y anchura W , y (b) con forma de V o de embudo y anchuras a la entrada y a la salida, W_{en} y W_{sal} , respectivamente.

A la luz de la inhomogeneidad de los perfiles de carga superficial que vimos en la Figura III.39, que nos reveló cuán importante es el papel que ésta juega, decidimos diseñar unos nuevos diodos en los que inclinamos las zanjas horizontales, dando lugar a una forma de embudo o en V. Con ello se trata de facilitar la formación de dominios y que éstos no desaparezcan mientras abandonan el canal.

Recapitulando, las nuevas estrategias de diseño en el *Run 2* han sido, por una parte, aumentar la anchura W del canal de los clásicos diodos SSD rectangulares [Figura III.43(a)] y, por otra, elegir una geometría más adecuada en forma de V [Figura III.43(b)], donde denominamos W_{en} y W_{sal} a las anchuras a la entrada y salida del canal, respectivamente.

Las secuencias de corriente obtenidas con el modelo auto-consistente se muestran en la Figura III.44. Para diodos rectangulares [Figura III.44(a)] hemos aumentado la anchura del canal hasta 750 nm, siempre con longitud de 1 μm . Aparecen claras oscilaciones de alrededor de 300 GHz, pero solamente para los canales más anchos (≥ 500 nm) y para potenciales en torno a 45-50 V. En el caso de la geometría en forma de V [Figura III.44(b)] la aparición de oscilaciones se ve favorecida. Por ejemplo, para 200 nm de anchura en la entrada del canal y 300 nm en la salida se aprecian claras oscilaciones ya desde 30 V. El conseguir oscilaciones con anchuras de entrada tan bajas, donde el nivel de corriente de DC es pequeño, abre la posibilidad de tener eficiencias mayores y menos problemas de calentamiento.

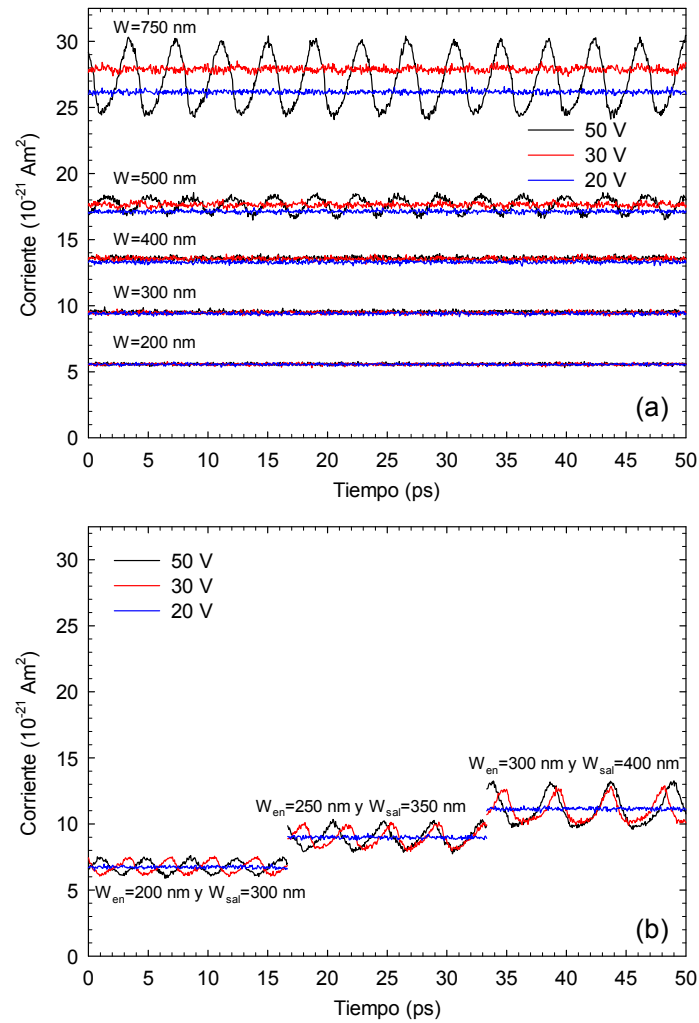


Figura III.44. Secuencias de corriente para varios diodos (a) rectangulares y (b) con forma de V, y voltajes aplicados de 20, 30 y 50 V. En todos los casos $L=1 \mu\text{m}$, $W_V=100 \text{ nm}$, $W_H=50 \text{ nm}$ y $C=400 \text{ nm}$. El valor usado para el dopaje virtual es de $N_{\text{Db}}=5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

Recurrimos nuevamente a mapas bidimensionales (promediados en el tiempo) de la concentración de carga para visualizar la mejora que ambas estrategias de diseño suponen. En la Figura III.45 se comprueba que aumentando la anchura del canal en los diodos rectangulares se evita el problema de una acumulación excesiva y un posterior vaciamiento al final del mismo. Además, al principio del canal habrá el campo suficiente para la formación de los dominios. Éstos podrán propagarse y abandonar fácilmente el canal para alcanzar el ánodo, dando lugar a oscilaciones en la corriente.

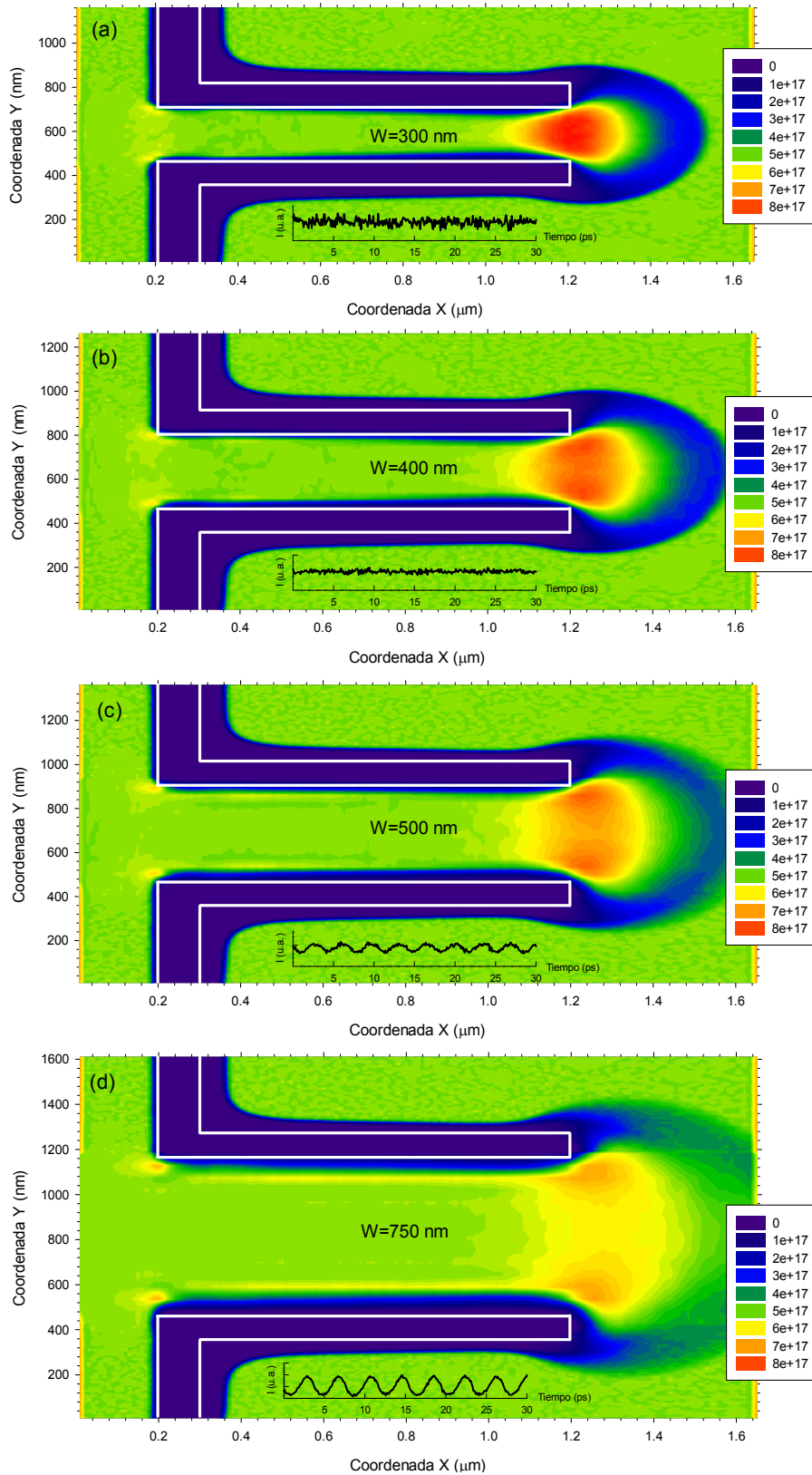


Figura III.45. Mapas bidimensionales de la concentración de portadores (en cm^{-3} y promediados en el tiempo) para todos los diodos rectangulares de la Figura III.44(a) salvo el más estrecho. El potencial aplicado es 50 V. Los *insets* muestran las secuencias de corriente correspondientes.

Igualmente, en el caso de los diodos en forma de V de la Figura III.46 se comprueba que la inclinación de las zanjas abre el canal, compensando el efecto de la acumulación y el vaciamiento que hay al final del mismo en los diodos rectangulares estrechos, y permite obtener oscilaciones a partir de 30 V.

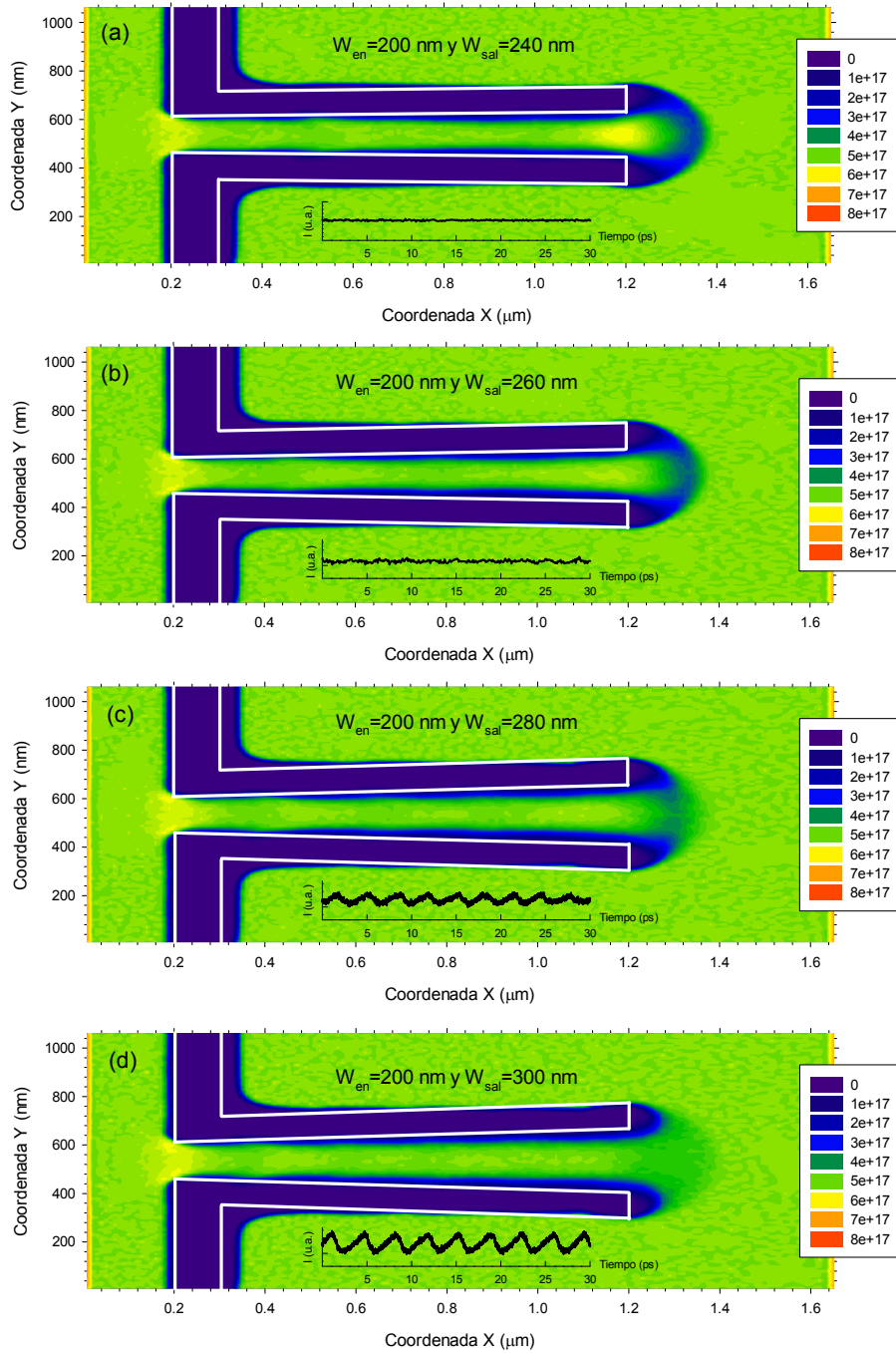


Figura III.46. Mapas bidimensionales de la concentración de portadores (en cm^{-3} y promediados en el tiempo) para varios diodos en forma de V con $L=1$ μm y un potencial aplicado de 30 V. Siempre se tiene $W_{en}=200$ nm con diferentes anchuras de la salida del canal: (a) $W_{sal}=240$ nm, (b) $W_{sal}=260$ nm, (c) $W_{sal}=280$ nm y (d) $W_{sal}=300$ nm. En todos los casos $N_{Db}=5 \times 10^{17}$ cm^{-3} , $W_V=100$ nm, $W_H=50$ nm, $C=400$ nm. Los *insets* muestran las secuencias de corriente correspondientes.

El siguiente paso es realizar un análisis espectral mediante la FFT de las secuencias de corriente presentadas. En la Figura III.47 y la Figura III.48 se representa la frecuencia de los máximos de la densidad espectral (que aparecen como *inset* en la Figura III.47) en función del potencial aplicado. El tamaño de las “burbujas” es proporcional a la amplitud de esos máximos.

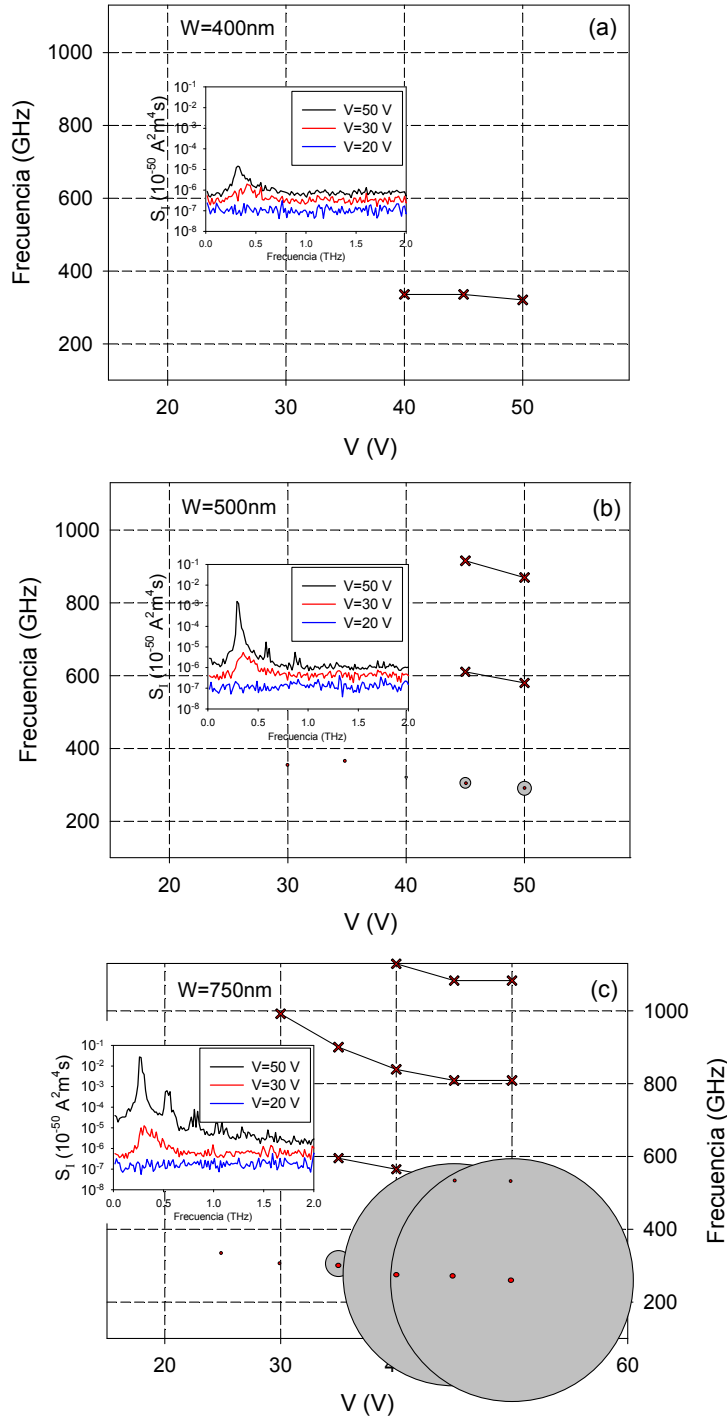


Figura III.47. Frecuencia de los máximos de las densidades espectrales (en el *inset*) en función del voltaje aplicado para los tres diodos rectangulares más anchos de la Figura III.44(a). El tamaño de las “burbujas” es proporcional a la amplitud de los máximos.

En el caso de los diodos rectangulares (Figura III.47) confirmamos que para canales más anchos la amplitud de los máximos aumenta considerablemente (apareciendo incluso más armónicos) aunque su frecuencia disminuye sensiblemente. Las oscilaciones empiezan a aparecer para $V \sim 40$ V y se observa que la frecuencia de oscilación disminuye ligeramente a medida que el voltaje aplicado aumenta. Nótese que aunque la frecuencia fundamental de las oscilaciones toma valores de unos 250-300 GHz, también hay armónicos a frecuencias muy elevadas. Tal es el caso del cuarto armónico a 40 V en el diodo más ancho, cuya frecuencia es de 1.2 THz (aunque su potencia es bastante pequeña).

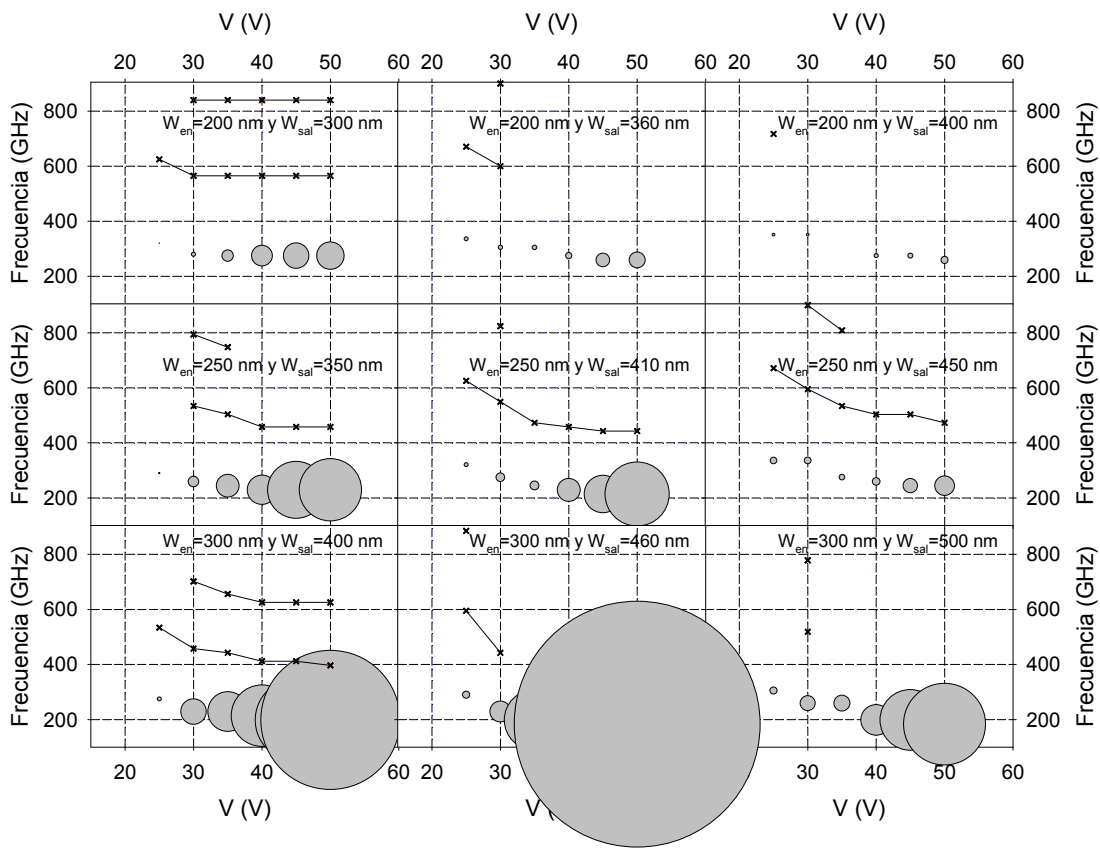


Figura III.48. Frecuencia de los máximos de las densidades espectrales en función del voltaje aplicado para diferentes diodos en forma de V con $L=1 \mu\text{m}$. El tamaño de las “burbujas” es proporcional a la amplitud de los máximos.

En el caso de diodos en V (Figura III.48) comprobamos que esta geometría favorece la aparición de oscilaciones para potenciales menores que en los diodos rectangulares y que éstas se mantienen en el mismo rango de frecuencias. Al igual que ocurre para los diodos rectangulares, cuanto más ancho sea el canal las oscilaciones Gunn son de mayor amplitud pero de menor frecuencia. Por otro lado, dada una anchura de entrada, parece existir un valor óptimo de la anchura de la salida

para obtener oscilaciones con densidad espectral máxima. Por ejemplo, para un valor $W_{en}=300$ nm, la anchura óptima a la salida sería $W_{sal}=460$ nm. Estos valores significan un ángulo de apertura de 4.5° , aparentemente muy pequeño pero con un efecto muy significativo en el espectro en frecuencia.

III.3.3.c. Resultados experimentales

De manera paralela a la simulación se lanzó el *Run 2* de fabricación. En esa segunda oblea se tuvieron 138 dispositivos funcionando correctamente. La Tabla III.2 y la Tabla III.3 recogen las dimensiones de los dispositivos fabricados con geometría rectangular y en forma de V, respectivamente, y la Figura III.49(a) la máscara usada para la fabricación. Recordando que el objetivo último en el proyecto en el que se ha desarrollado este trabajo es lograr tanto emisión como detección, se explica que se fabricaran diodos con anchuras entre 75 y 200 nm, que son demasiado estrechas para oscilar pero sí presentan capacidad de detección, como se muestra en el Apéndice.


		L	W	W_H	W_V	Antena	n° diodos en paralelo
SSD-1-0	01	500	500	100	200		16, 32
	02	500	750	100	200		16, 32
	03	500	500	50	100		16, 32
	04	500	750	50	100		16, 32
SSD-1-1	01	1000	75	50	100		1, 4, 16, 32
	06	1000	150	50	100		16, 32
	07	1000	150	100	200		16, 32
	08	1000	75	50	100		16, 32
	09	1000	100	50	100		16, 32
	10	1000	125	50	100		16, 32
	11	1000	150	50	100	SÍ	16, 32
	12	1000	175	50	100		16, 32
	13	1000	200	50	100		16, 32
	14	1000	150	50	100		16, 32
	15	1000	150	50	100		16, 32
	16	1000	150	50	100		16, 32
	17	1000	150	50	100		16, 32
SSD-1-2	02	2000	150	100	200		16, 32
	03	2000	150	50	100		16, 32
	04	2000	500	50	100		16, 32
	05	2000	150	100	200	SÍ	16, 32
	06	2000	75	50	100		16, 32

Tabla III.2. Geometría de los diodos rectangulares. En todos ellos $C=600$ nm.


		L	W_{en}	W_{sal}	W_H	W_V	Antena	n° diodos en paralelo
SSD-1-3	01	500	250	350	50	100		16, 32
	02	500	250	400	50	100		16, 32
	03	500	350	450	50	100		16, 32
	04	500	350	500	50	100		16, 32
	05	1000	250	450	50	100		1, 4, 16, 32
	06	1000	250	550	50	100		16, 32
	07	1000	350	550	50	100		16, 32
	08	1000	350	650	50	100		16, 32
	09	2000	250	650	50	100	SÍ	16, 32
	10	2000	250	850	50	100		16, 32
	11	2000	350	750	50	100		16, 32
	12	2000	350	850	50	100		16, 32

Tabla III.3. Geometría de los diodos en forma de V. En todos ellos $C=600$ nm.

Como también se indica en las tablas, en este *run* se fabricaron algunos dispositivos con antenas tipo *bow-tie* para realizar medidas *free-space* tanto de detección (con los SSDs estrechos) como de emisión (con los SSDs anchos). La Figura III.49(b) muestra la máscara para la fabricación. Se integran 6 u 8 antenas con 64 SSDs en paralelo en cada una para disminuir la impedancia total y con ello el *mismatch*, incrementar la potencia generada en el caso de emisores y mejorar la *NEP* de los detectores. En la Figura III.49(c) vemos la disposición interdigitada para la integración con las antenas. Finalmente en la Figura III.49(d)-(e) se muestran imágenes SEM de los diodos rectangulares y en forma de V.

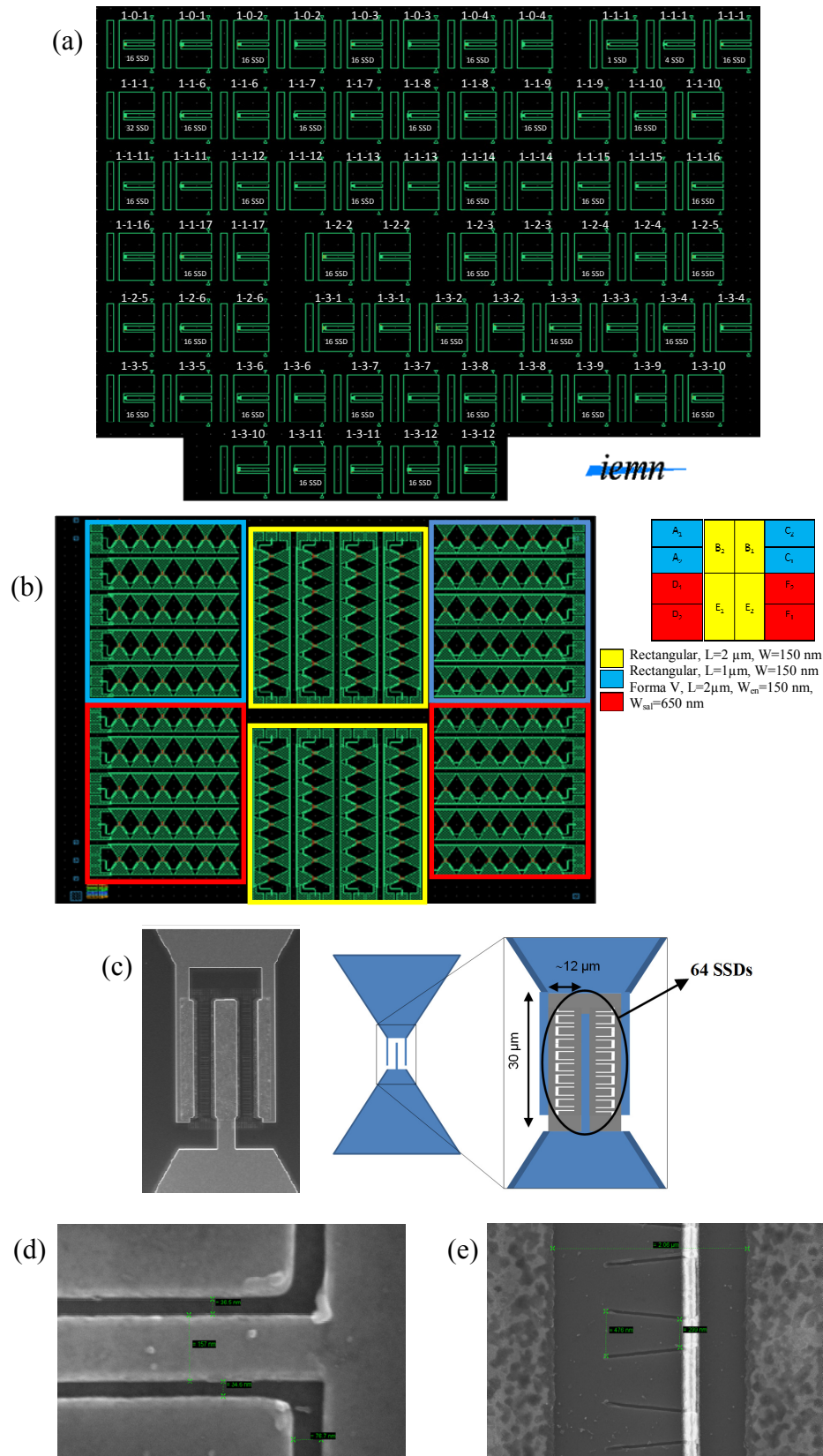


Figura III.49. (a) Máscara para la fabricación de los SSDs con las geometrías indicadas en las tablas anteriores. (b) Máscara para los SSDs integrados con antenas *bow-tie*. (c) Estructura interdigitada para adaptar 64 SSDs en las antenas. Imágenes SEM de (d) un SSD rectangular y (e) otros en forma de V.

Aunque prácticamente la totalidad de esta Memoria se fundamenta en trabajo de simulaciones por ordenador, también he realizado medidas experimentales. La posibilidad de realizar una estancia breve en el IEMN durante los tres últimos meses del año 2011 me permitió conocer la dinámica de trabajo en este laboratorio, en el cual se lleva a cabo la fabricación y caracterización de los dispositivos bajo estudio. A continuación se presentan las principales medidas experimentales (caracterización DC) que yo misma realicé durante ese periodo sobre los SSDs de este *Run 2*.

En primer lugar, y al igual que se hizo en el *Run 1*, se analiza el nivel de corriente en función del número de diodos (de geometría rectangular en la Figura III.50) y se vuelve a comprobar que el aumento es lineal; escala con el número de SSDs.

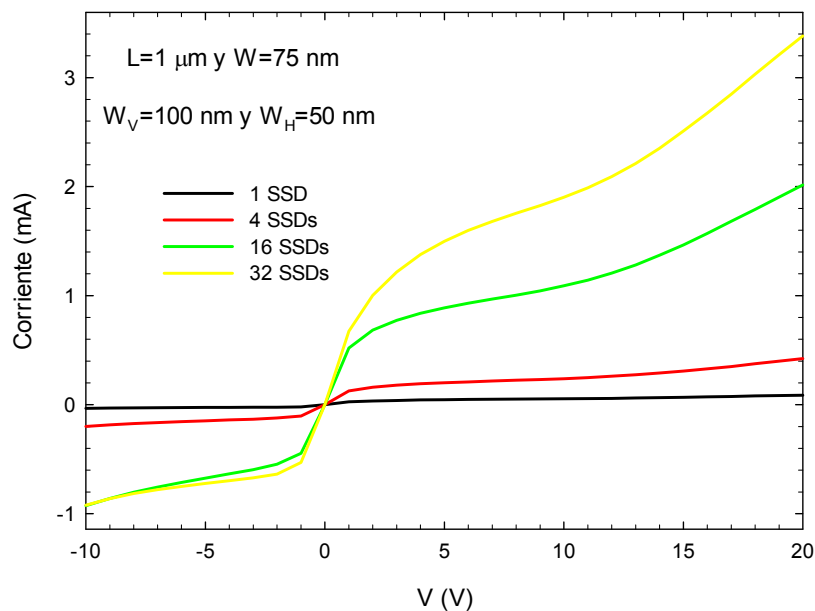


Figura III.50. Características $I-V$ experimentales para *arrays* de SSDs con diferente número de diodos rectangulares en paralelo, con $L=1 \mu\text{m}$ y $W=75 \text{ nm}$.

En la Figura III.51(a) hemos analizado la repetibilidad de los valores en dispositivos rectangulares teóricamente idénticos. Se obtienen resultados muy similares, que confirman la reproducibilidad de la fabricación. En la Figura III.51(b) se comparan las curvas $I-V$ en función de la anchura del canal del SSD con geometría rectangular, y se observa, como era de esperar, que el nivel de corriente escala con la anchura. A partir de estas medidas hemos estimado el vaciamiento lateral. En la Figura III.52 representamos la corriente a diferentes voltajes aplicados para anchuras desde 75 a 200 nm. De la extrapolación hasta corriente nula se obtiene, para

equilibrio, un vaciamiento en torno a 17.5 nm. A 15 V, debido al aumento del potencial aplicado, compensado sólo en cierta medida por el incremento de σ que sabemos tiene lugar [Figura III.39(b)], el vaciamiento es menor que en equilibrio como cabe esperar. La Figura III.51(c) muestra características I - V para los canales más anchos (diodos rectangulares diseñados para emisión). Se vuelve a encontrar que el valor de la corriente aumenta al hacer lo propio la anchura, y también se aprecia que cuando la longitud aumenta, la pendiente en el origen de la curva I - V disminuye ya que la resistencia en equilibrio es ligeramente mayor. Y ya en la Figura III.51(d) analizamos el efecto de la anchura de las zanjas como se hizo en las simulaciones preliminares con el modelo de carga constante. Al disminuir la anchura del *recess* se ejerce un mejor control sobre el canal, lo que produce un aumento de la corriente.

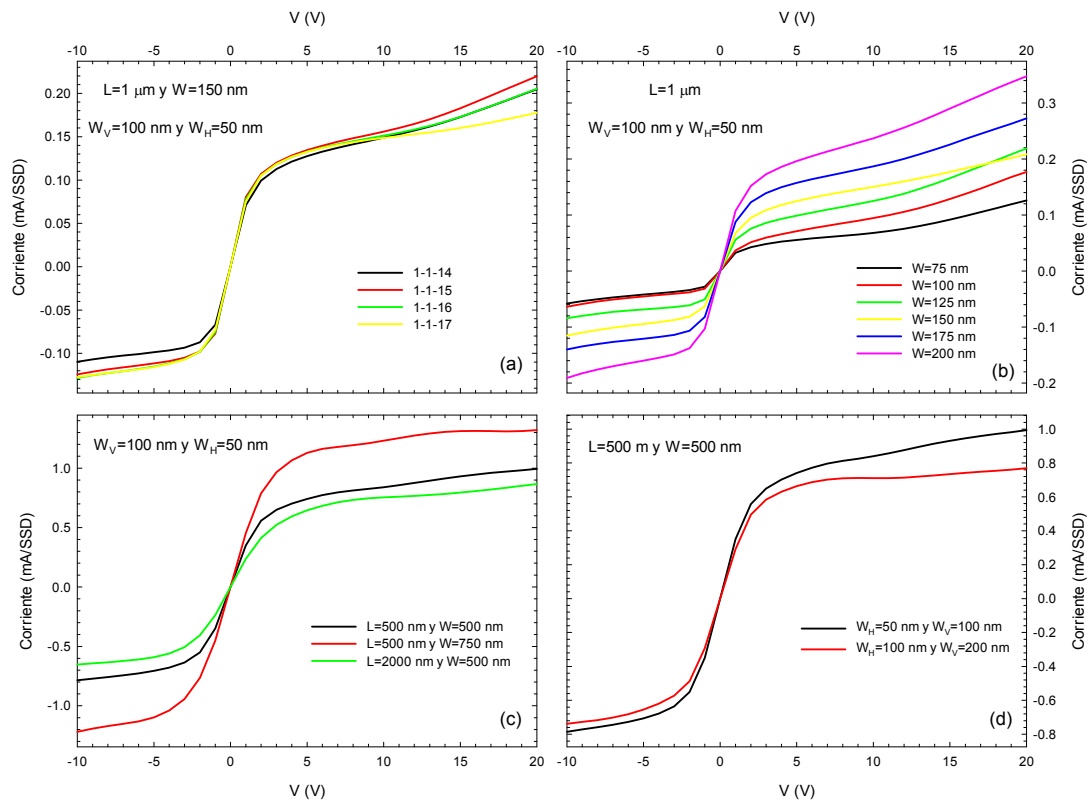


Figura III.51. Características I - V experimentales para *arrays* de 16 SSDs en paralelo, normalizadas para un SSD, modificando (a) la posición del diodo en la oblea, (b) la anchura del canal desde 75 nm hasta 200 nm para $L=1 \mu\text{m}$, (c) la anchura con $L=500 \text{ nm}$ y también la longitud en el caso de $W=500 \text{ nm}$, y (d) la anchura de las zanjas aislantes.

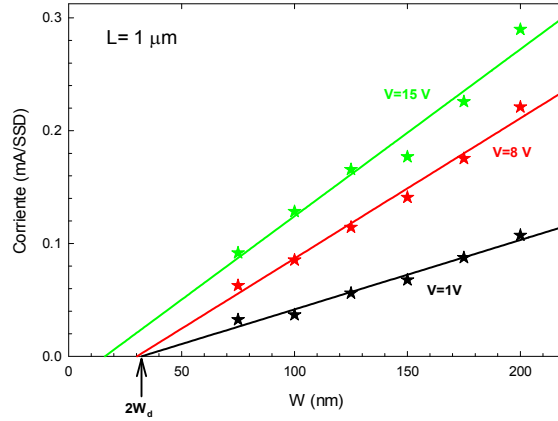


Figura III.52. Estimación del vaciamiento mediante la extrapolación a corriente nula. Se representa la corriente en función de la anchura del canal para los diodos de la Figura III.51(b), a 1, 8 y 15 V.

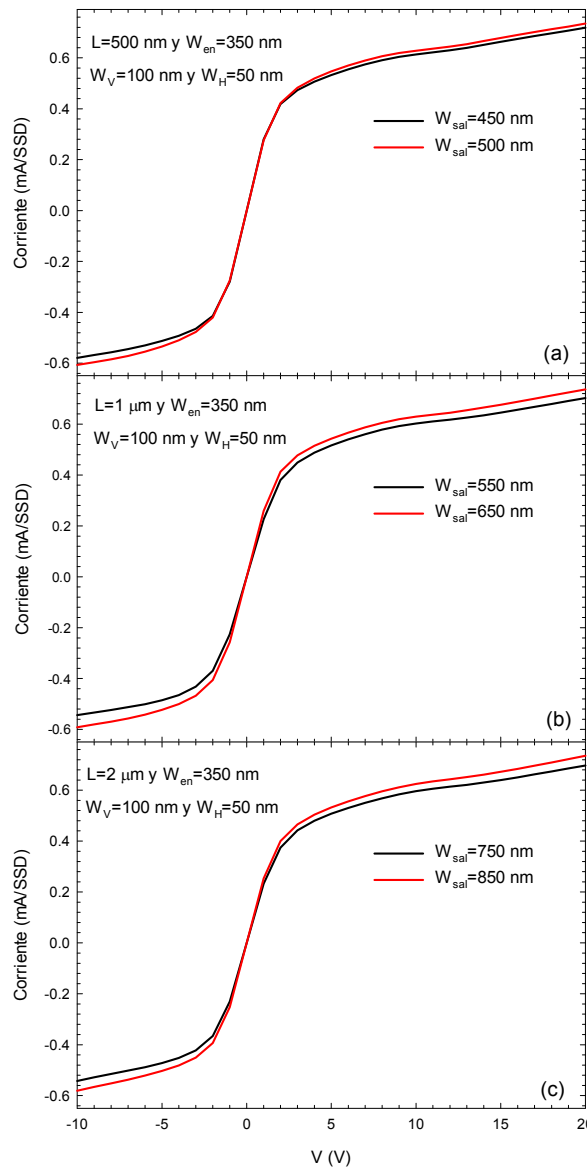


Figura III.53. Características I - V experimentales para varios SSDs en forma de V. Las curvas están normalizadas para un único diodo pero corresponden a *arrays* de 16 SSDs en paralelo.

Las características $I-V$ pertenecientes a algunos diodos en forma de V se recogen en la Figura III.53. En los casos representados la apertura del canal está dada por unos ángulos de inclinación de las zanjas de 5.7° y 8.5° . Se observa un ligero aumento en el nivel de corriente para mayor ángulo de apertura.

Tras la caracterización DC, los compañeros del IEMN llevaron a cabo medidas de emisión, principalmente en los diodos de la Figura III.51(b). Aunque las simulaciones indicaban que estos diodos parecen ser demasiado estrechos para oscilar, ha de mencionarse que realmente la fabricación y las medidas del *Run 2* no fueron posteriores al establecimiento de todas las estrategias de diseño que se obtuvieron de las simulaciones, sino que ambos procesos se solaparon en el tiempo como muestra la Figura III.24. Por el contrario, en el *Run 3* sí se aprovechará toda la información que ofrecieron las simulaciones.

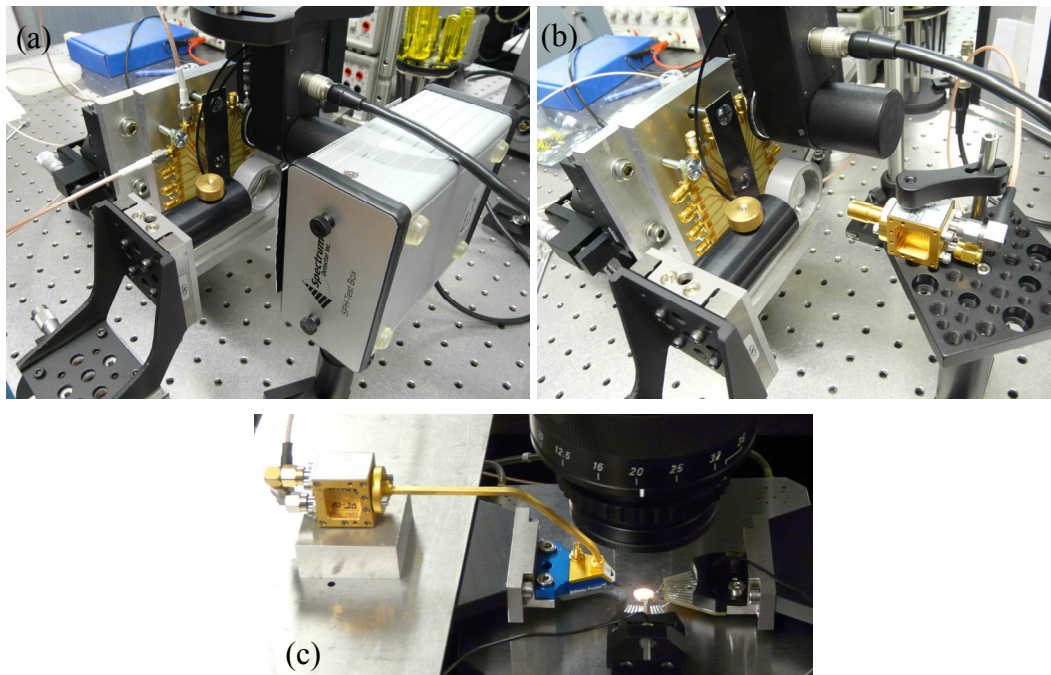


Figura III.54. Diferentes montajes experimentales para medida de la emisión: (a) con un detector pirométrico, (b) con un detector Schottky y (c) en oblea con disipador de calor.

Las muestras se montaron en una tarjeta de circuito impreso o PCB (del inglés *Printed Circuit Board*) para realizar medidas *free-space*. En primer lugar se utilizó un sensor pirométrico calibrado hasta 300 GHz (la banda de frecuencias esperada) [Figura III.54(a)]. Se detectaron unas decenas de mV en el *lock-in*, pero se comprobó, usando un filtro de infrarrojos, que no eran señales de THz las que se estaban detectando, sino que dicha respuesta provenía de la disipación térmica de los dispositivos. Además la señal también aparecía a potenciales bajos (<10 V) donde no

se esperan oscilaciones. En segundo lugar se usó, sin resultado, un detector Schottky (operativo en la banda 220-325 GHz y con responsividad de 1 kV/W) [Figura III.54(b)]. El mayor inconveniente fueron los problemas de calentamiento debido a los elevados valores de corriente total que se tienen cuando hay muchos dispositivos en paralelo. Se quemaron bastantes dispositivos al aplicar potenciales entre 20 y 30 V al alcanzarse valores de corriente entre 150 y 370 mA. Por ello, se decidió que en el siguiente *run* debería reducirse el número de SSDs en paralelo, separándolos más, y se empezó a trabajar en diseñar medidas pulsadas para evitar ese excesivo calentamiento. En un último intento se realizaron medidas con puntas conectando la oblea a un disipador de calor [Figura III.54(c)], pero todas las muestras (*arrays* de 16 y 32 SSDs, rectangulares y en forma de V) se quemaron al aplicar entre 30 y 35 V de continua y, nuevamente, en ninguna medida se detectó emisión. Incluso se quemaron las puntas de RF.

III.3.4. Simulaciones y medidas experimentales del *Run 3*

III.3.4.a. Diseño y fabricación de los SSDs

Después de las medidas del *Run 2*, y teniendo en cuenta la información que nos proporcionan las simulaciones MC, se diseñó el proceso de una tercera oblea donde se trataron de optimizar también aspectos relativos a las antenas y a los contactos.

El material expuesto en este sub-apartado es notablemente menos extenso que el relativo a las etapas anteriores, puesto que el *Run 3* tuvo lugar ya en los últimos meses de mi trabajo dentro de nuestro grupo de investigación y por ende de mi contribución en el proyecto europeo.

Las principales indicaciones relativas tanto a la geometría de los diodos como a aspectos tecnológicos han sido:

- i. Dar total prioridad a diodos anchos para emisión frente a los estrechos de detección. En particular, prelación a los canales en forma de V respecto a los rectangulares, ya que en ellos las oscilaciones aparecen a potenciales menores y para menores anchuras.
- ii. Fabricar canales más cortos con la finalidad de reducir el potencial umbral y en el caso de medir oscilaciones que éstas sean de frecuencia mayor.

- iii. Reducir el número de SSDs en paralelo (máximo 32) y aumentar la separación entre ellos para disminuir los efectos térmicos. Se optó por usar una sola antena tipo *bow-tie* (emisión en el plano) y se redujo la separación entre sus brazos triangulares disminuyendo la región de acceso al ánodo. La nueva configuración no requiere las estructuras interdigitadas [Figura III.55(a)-(b)].
- iv. Asimismo, y también desde el IEMN, se planteó emplear antenas en espiral (posibilidad de emisión perpendicular al plano y mayor ancho de banda) como la mostrada en la Figura III.55(a).
- v. Usar lentes de silicio para tratar de mejorar las medidas de la emisión *free-space* [Figura III.55(c)].

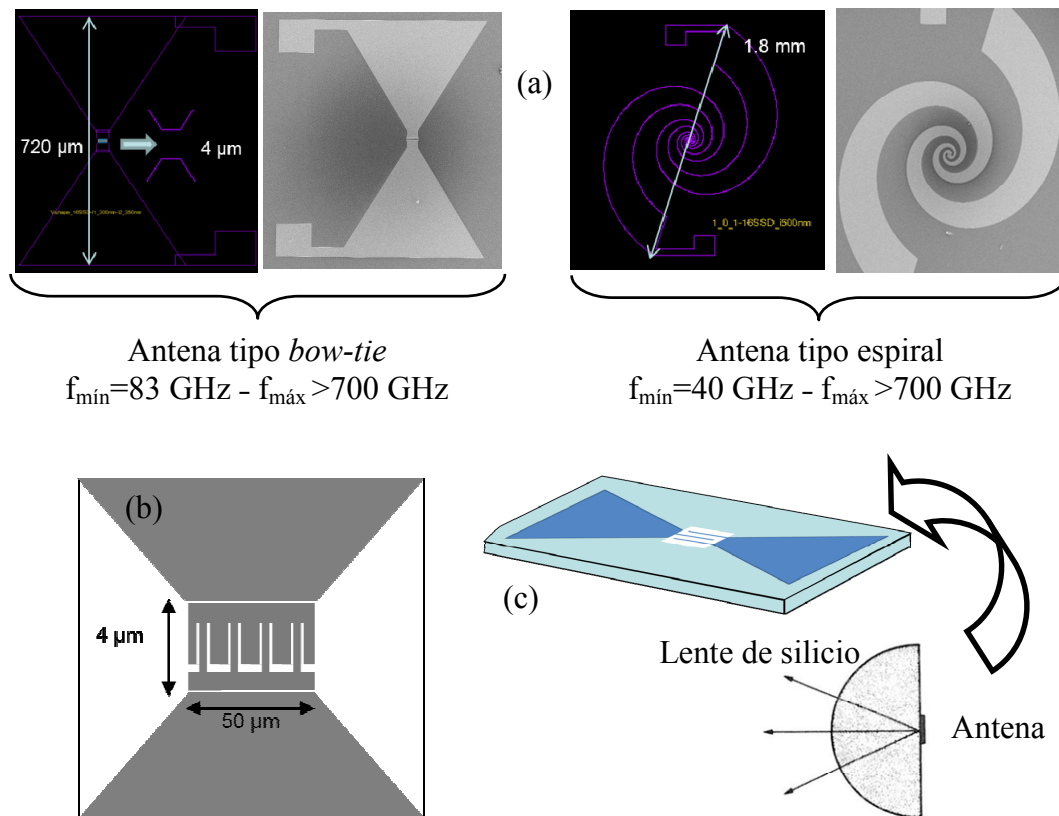


Figura III.55. (a) Antena tipo *bow-tie* y en espiral, (b) Disposición de los SSDs sin estructuras interdigitadas, y (c) lente de silicio para mejorar las medidas emisión.

En la Tabla III.4 y la Tabla III.5 se recoge la información relativa a la longitud y anchura del canal de los diodos fabricados (rectangulares y en forma de V) en el tercer *run*.


 Anchura del canal	Longitud del canal		
	$L=500$ nm	$L=1000$ nm	$L=2000$ nm
$W=500$ nm	X*	X*	X
$W=750$ nm	X*	X	

Tabla III.4. Geometrías de los diodos rectangulares. El símbolo X* significa que se han fabricado tanto con zanjas de $W_H=100$ nm y $W_V=50$ nm, como con $W_H=200$ nm y $W_V=100$ nm. El símbolo X significa que sólo contamos con $W_H=100$ nm y $W_V=50$ nm.


 Anchura de entrada del canal	Longitud del canal		
	$L=500$ nm	$L=1000$ nm	$L=2000$ nm
$W_{en}=250$ nm	$W_{sal}=350$ nm	$W_{sal}=450$ nm	$W_{sal}=650$ nm
	$W_{sal}=450$ nm	$W_{sal}=550$ nm	$W_{sal}=850$ nm
$W_{en}=350$ nm	$W_{sal}=450$ nm	$W_{sal}=550$ nm	$W_{sal}=750$ nm
	$W_{sal}=500$ nm	$W_{sal}=650$ nm	$W_{sal}=850$ nm

Tabla III.5. Geometrías de los diodos en forma de V. Siempre $W_H=100$ nm y $W_V=50$ nm.

La Figura III.56 muestra la máscara correspondiente a este *Run 3* e imágenes SEM de los dos tipos de diodos fabricados, rectangulares y en forma de V.

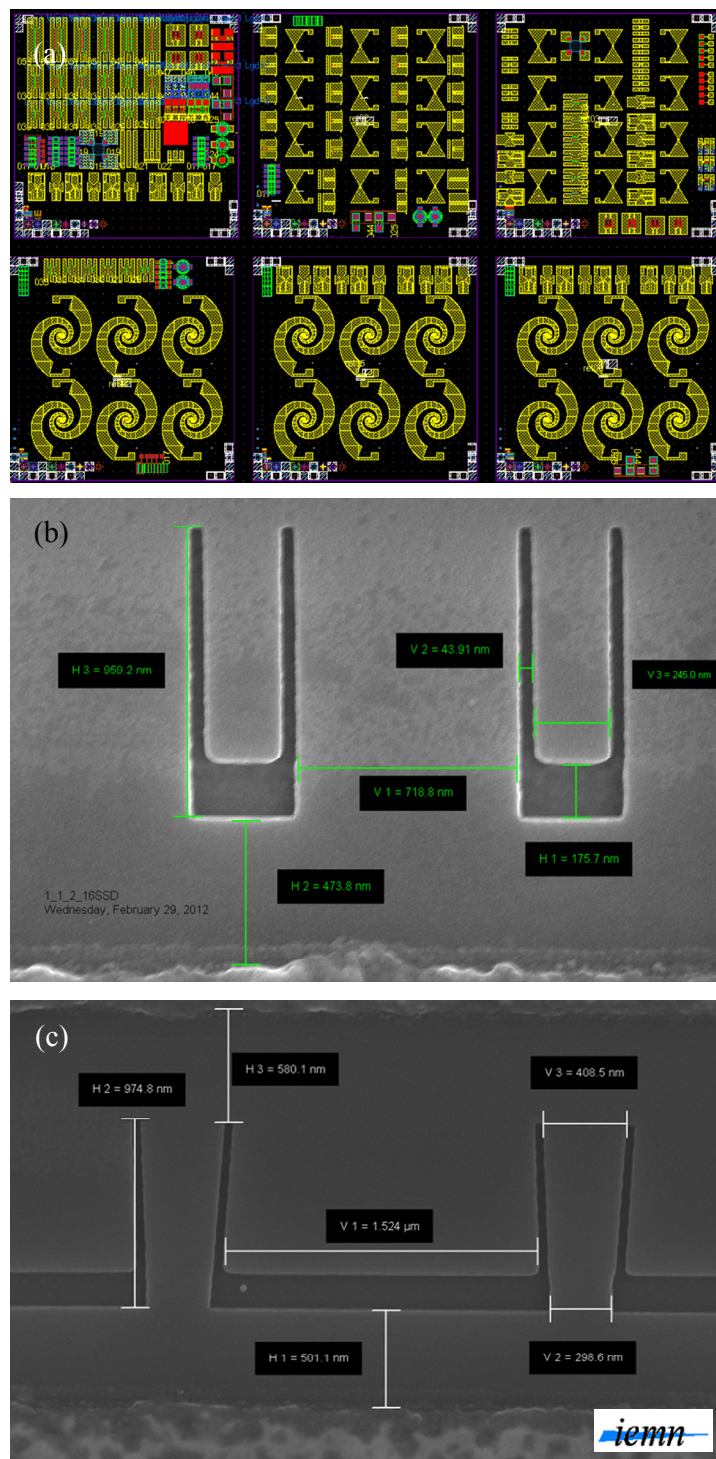


Figura III.56. (a) Máscara del *Run 3* e imágenes SEM de (b) diodos rectangulares y (c) diodos en forma de V.

III.3.4.b. Simulaciones y medidas experimentales

En lo relativo a comparaciones entre medidas experimentales de este *run* y resultados MC, hemos de señalar que, hasta el momento, sólo contamos con los resultados correspondientes a las simulaciones de los tres dispositivos cuya geometría se muestra en la Figura III.57. Tienen $L=500$ nm, dos de ellos son rectangulares, con anchuras de 500 nm y 750 nm, y el tercero es en forma de V con 350 nm a la entrada y 450 nm a la salida del canal. Se trata de tres casos que también fueron fabricados en el *Run 2*.

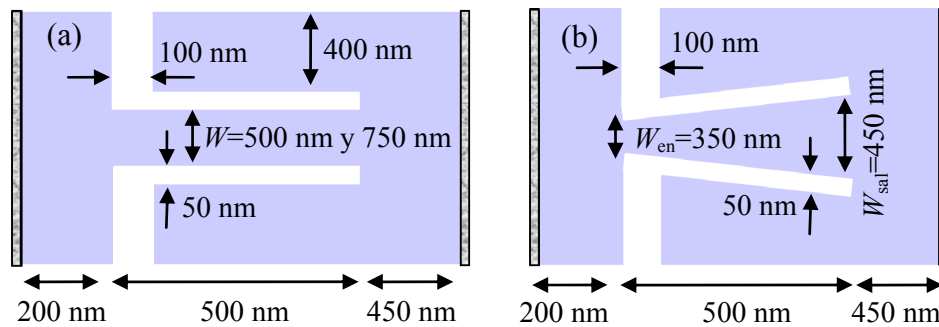


Figura III.57. Geometrías de los diodos simulados para comparar con medidas del *Run 3*.

Como muestra la Figura III.58(a)-(c), hemos obtenido un acuerdo bastante bueno de las curvas $I-V$ simuladas con las medidas experimentales. Aunque la corriente en saturación la ajustamos satisfactoriamente, hemos de seguir trabajando para solucionar el desacuerdo que aparece en la región de bajo potencial. Nótese que las características no muestran apenas carácter rectificador, ya que se trata de canales muy anchos diseñados para emisión y no para detección. Asimismo, es de señalar que tanto en el *Run 2* como en el *Run 3* encontramos las mismas densidades de corriente, corroborando la madurez del proceso de fabricación.

Una vez que hemos reproducido las curvas $I-V$, analizamos la presencia de oscilaciones en las simulaciones MC. En la Figura III.58(d)-(f) mostramos las secuencias temporales de corriente de los tres diodos para varios valores del potencial aplicado. Se vuelve a observar que el canal en forma de V es la geometría más favorable para la aparición de oscilaciones, puesto que aparecen para menores potenciales aplicados. De hecho, tenemos claras oscilaciones ya para 20 V, mientras que para los diodos rectangulares son necesarios 30 V. El incremento de la anchura al pasar de una geometría a otra, y dentro de los diodos rectangulares al pasar de 500 nm a 750 nm, conlleva un aumento importante del consumo de potencia.

Polarizando con 30 V se consumen aproximadamente 21 mW en el diodo en forma de V, y 27 y 42 mW en los SSDs rectangulares de anchura 500 nm y 750 nm, respectivamente. El tener menos potencia DC disipada en los diodos en forma de V significa, por un lado, una ventaja en términos de calentamiento y, por otro lado, permite mejorar la eficiencia. La frecuencia de oscilación es similar en los tres diodos, alrededor de 370 GHz, mayor que en todos los diodos simulados en apartados anteriores, como corresponde a su menor longitud (500 nm).

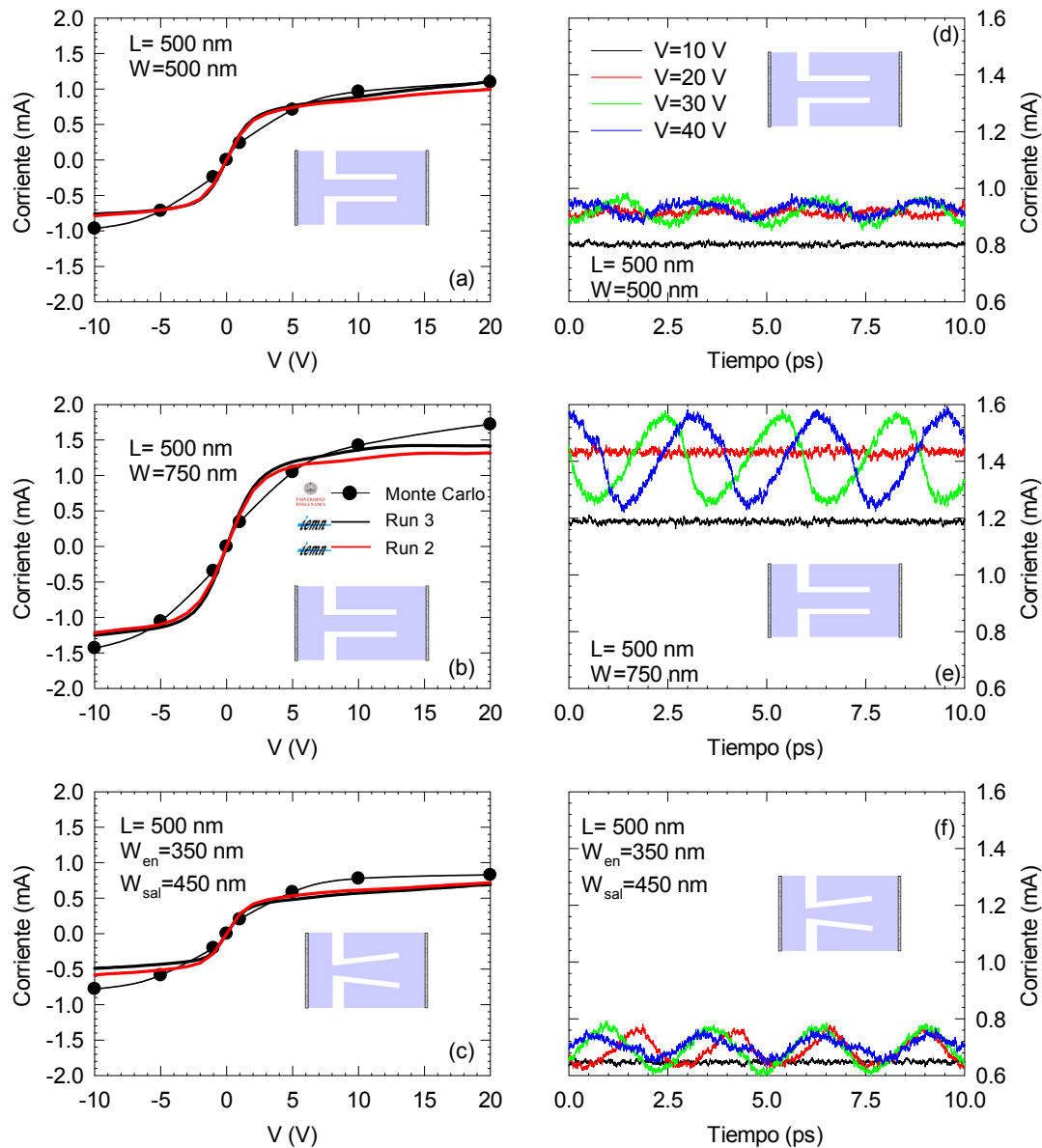


Figura III.58. (a)-(c) Comparación entre las curvas I - V medidas experimentalmente en el Run 2 y el Run 3 y las simulaciones MC. (d)-(f) Simulaciones MC de las secuencias de corriente para diferentes potenciales aplicados. El valor usado para el dopaje virtual es $N_{Db}=5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y para la densidad superficial de electrones del canal $n_s=6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Por último, para evaluar la influencia del posible calentamiento de los dispositivos, hemos simulado un diodo rectangular con $W=750$ nm como el de la Figura III.58(e), pero fijando la temperatura de operación a 500 K (Figura III.59). Cuando aumentamos la temperatura, las oscilaciones todavía aparecen, pero el potencial umbral aumenta hasta 40 V y la frecuencia de oscilación disminuye a 290 GHz (como es de esperar por la reducción en la velocidad de saturación).

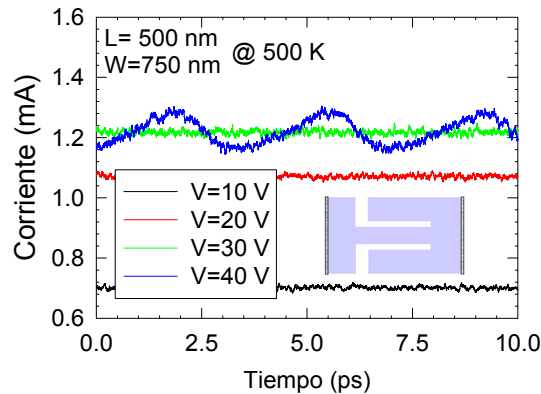


Figura III.59. Secuencias de corriente simuladas para un diodo rectangular como el de la Figura III.58(e) aumentando la temperatura a 500 K.

Para evitar un calentamiento excesivo durante las medidas al aplicar los elevados potenciales para los cuales las simulaciones MC predicen las oscilaciones Gunn, se está desarrollando un montaje de medidas pulsadas. No obstante, hasta la fecha, contamos únicamente con algunas medidas de caracterización DC como las que se han mostrado, y esperamos que las medidas de emisión que más adelante se lleven a cabo revelen, esta vez sí, generación de alta frecuencia a temperatura ambiente.

Pese a que este capítulo parece de alguna manera terminar en punto y seguido, pues resta aún mucho trabajo por realizar en busca del ambicioso objetivo planteado en el proyecto, aquí acaba mi contribución hasta el momento de la redacción de esta Memoria que inicié a mediados del 2012 (ver diagrama de flujo de la Figura III.24). No obstante, los grupos colaboradores en el proyecto continuamos trabajando en múltiples asuntos pendientes y nuevas líneas de investigación como:

- i. Introducción de los efectos de calentamiento mediante dos alternativas. Una de ellas consiste simplemente en tener en cuenta la disipación por medio de una resistencia térmica. Y la otra, más compleja, resolviendo la ecuación de calor auto-consistentemente con la simulación MC.

- ii. Simulación MC con el modelo de carga auto-consistente de todas las geometrías fabricadas en el *Run 3*: análisis DC, estudio de la eficiencia de conversión de DC a AC y análisis espectral de las secuencias de corriente.
- iii. Estudio MC sistemático de la emisión para dos y cuatro diodos en paralelo, analizando la posibilidad de que las oscilaciones en los diferentes diodos no estén perfectamente sincronizadas y la influencia de la separación entre ellos sobre tal sincronización.
- iv. Incorporación de un circuito externo RLC acoplado auto-consistentemente a la simulación MC para el estudio de bandas de emisión como método alternativo al que hemos empleado en este trabajo al analizar la eficiencia de conversión. Permitiría examinar con detalle si los elementos parásitos son los responsables de la ausencia de emisión en las medidas experimentales. Los valores de la impedancia compleja obtenidos en las simulaciones MC se usarán asimismo en simulaciones ADS (*Advanced Design System*) con el fin de analizar de manera rápida cuál es la influencia de los elementos parásitos en la respuesta del dispositivo.
- v. Estudio comparativo de SSDs de GaN con uniones n^+nn^+ de GaAs, InP y GaN para comprobar hasta qué punto la geometría planar del SSD equivale, en términos de focalización de campo e inhomogeneidad de la concentración, a las uniones verticales n^+nn^+ .
- vi. Desarrollo de un montaje experimental para llevar a cabo medidas pulsadas permitiendo alcanzar potenciales elevados y ciclos de trabajo cortos.
- vii. En cuanto a la detección también se está llevando a cabo un estudio MC sistemático de la influencia de la anchura y longitud del canal, así como de las condiciones de polarización DC en un SSD rectangular.
- viii. Estudio de la capacidad de detección heterodina de señales de THz de SSDs basados en GaN. Las medidas experimentales están siendo realizadas por un grupo de investigación de la Universidad de Montpellier liderado por L. Varani y J. Torres. En nuestro grupo analizamos el mezclado de señales mediante simulaciones MC y la dependencia de la señal de frecuencia intermedia con la geometría y con las condiciones de polarización DC.
- ix. Por último, se está planteando que la ausencia de emisión en las medidas experimentales pueda ser debida a que la concentración de portadores en el canal no sea lo suficientemente alta. Por ello, sería recomendable intentar

optimizar vía simulaciones MC la estructura de capas AlGaIn/GaN. Como última alternativa se propone la fabricación de SSDs en únicamente una capa *bulk* de GaN, en este caso dopado. No obstante, esto supondría un nuevo reto tecnológico cuya viabilidad podría analizarse en proyectos futuros, en los que también podría explorarse el uso de sustratos de SiC (con mucha mejor conductividad térmica) para optimizar las posibilidades de obtención de oscilaciones Gunn.

El siguiente capítulo, último de esta Memoria, presenta un breve estudio que llevé a cabo de manera paralela al trabajo presentado tanto en el Capítulo II como en el Capítulo III. Se trata de analizar la relación entre el aumento del ruido en corriente a baja frecuencia y la aparición de oscilaciones a muy alta frecuencia, tanto en el fenómeno de la OPTTR (*Optical Phonon Transit Time Resonance*) como en las oscilaciones Gunn en los SSDs. Así, la medida del ruido a baja frecuencia se puede convertir en una herramienta muy útil para detectar indirectamente esas oscilaciones tan difíciles de comprobar experimentalmente pero que sí predicen las simulaciones MC.

CAPÍTULO IV

AUMENTO DEL RUIDO A BAJA FRECUENCIA COMO INDICADOR DE LAS OSCILACIONES

En este último capítulo abordamos un procedimiento, consistente en analizar el ruido en corriente a baja frecuencia, para tratar de predecir oscilaciones a frecuencias cercanas a los THz. Presentaremos un análisis espectral de secuencias temporales de la corriente, calculadas mediante simulaciones Monte Carlo (MC), tanto para el fenómeno estudiado en el Capítulo II, la OPTTR (*Optical Phonon Transit Time Resonance*) en diodos n^+nn^+ de nitruro de galio (GaN), como para el desarrollado en el Capítulo III, las oscilaciones Gunn en diodos autoconmutantes o SSDs (*Self-Switching Diodes*) basados también en GaN. Existe una correlación entre el comportamiento del ruido a baja frecuencia y la aparición de las oscilaciones de alta frecuencia, de forma que se produce un significativo aumento en el primero a los potenciales umbrales para la obtención de oscilaciones (incluyendo la aparición de armónicos en la densidad espectral).

En esta ocasión presentaremos primeramente los resultados relativos a los SSDs, que fueron sustancialmente publicados en la Ref. 147, con la intención de facilitar la lectura de esta Memoria, ya que el capítulo anterior ha estado dedicado a estos dispositivos. Y finalmente completamos el estudio haciéndolo extensivo al caso de la OPTTR.

IV.1. MOTIVACIÓN

Dado que las técnicas experimentales a frecuencias de centenas de GHz aún resultan notablemente complicadas, se plantea la necesidad de disponer de procedimientos alternativos para detectar la presencia de oscilaciones en el rango de THz o sub-THz en dispositivos electrónicos. Un posible indicador está relacionado con los *kinks* que en algunas ocasiones aparecen en las curvas I - V para potenciales aplicados correspondientes a la aparición de inestabilidades, indicando la transición de un estado pasivo a un estado de generación. Sin embargo, en los casos que nosotros hemos estudiado, esos *kinks* son o bien poco claros (en las curvas I - V de la OPTTR [ver Figura II.12(a), Figura II.23(a), Figura II.33(a), etc.]) o hasta inexistentes (para los SSDs). Esto es así incluso cuando las oscilaciones en las secuencias de corriente, resultado de las simulaciones MC, son muy notables y dan lugar a valores negativos de la admitancia de pequeña señal en diferentes bandas de frecuencia. Otro método alternativo, ya sugerido por otros autores,^{150,151} consiste en estudiar el ruido a baja frecuencia de la corriente $S_I(0)$ como indicador de la aparición de oscilaciones, ya que éste presenta un significativo aumento cuanto el potencial aplicado se aproxima al umbral para el comienzo de las mismas.

Por lo tanto, el objetivo de este estudio es comprobar, mediante simulaciones MC, si este comportamiento aparece tanto en las oscilaciones Gunn en los SSDs como en la OPTTR en diodos n^+nn^+ (ambos dispositivos basados en GaN), para poder detectar indirectamente la presencia de las oscilaciones de tan alta frecuencia que predicen las simulaciones pero que aún no han sido corroboradas experimentalmente.

Recordemos que para hacer el análisis espectral de las fluctuaciones de la corriente eléctrica y detectar la presencia de oscilaciones, se parte de las secuencias temporales de la corriente obtenidas con el simulador MC, se resta el valor medio DC, y se realiza su transformada rápida de Fourier (FFT, *Fast Fourier Transform*), cuyo módulo al cuadrado es la densidad espectral en corriente $S_I(f)$, que nos informa de la respuesta en el dominio de la frecuencia. El ruido a frecuencia cero, $S_I(0)$, corresponde al ruido medido en experimentos en el *plateau* por encima del ruido $1/f$ y el asociado a los mecanismos de generación-recombinación. Este valor $S_I(0)$, asociado al ruido de difusión, se usa como indicador de la aparición de oscilaciones.

IV.2. RUIDO A BAJA FRECUENCIA EN LOS SSDs

Tomemos como geometría de partida un SSD de GaN rectangular con $L=1\ \mu\text{m}$, $W=80\ \text{nm}$, $W_V=100\ \text{nm}$, $W_H=50\ \text{nm}$, zonas de acceso al cátodo y al ánodo de 200 y 400 nm, respectivamente [ver la Figura III.23(b)]. El dopaje de fondo escogido es $N_{\text{Db}}=2\times 10^{17}\ \text{cm}^{-3}$. En este primer diodo (SSD1) vamos a considerar un valor bajo para la densidad de carga superficial, $\sigma = -0.25\times 10^{12}\ \text{cm}^{-2}$, de manera que en equilibrio el canal está abierto y a partir de 36 V aparecen oscilaciones Gunn que presentan armónicos entre 100 GHz y 1 THz. Nótese que tanto esta geometría como las otras dos que veremos a continuación se simularon con el modelo de carga constante. Si bien sería más adecuado emplear el modelo auto-consistente, con el que un diodo de canal tan estrecho no presenta oscilaciones, hemos optado por el modelo más sencillo y rápido ya que nos proporciona unos resultados cualitativamente similares y válidos para nuestro propósito, requiriendo mucho menor tiempo de simulación. La Figura IV.1 presenta el ruido a baja frecuencia en función del voltaje aplicado. En los *insets* se muestran las secuencias de corriente y sus densidades espectrales para varios valores del potencial, que como veremos corresponden a ciertos cambios en el comportamiento del diodo, pero que no suponen ningún *kink* en la curva I - V [Figura IV.2(a)].

Tanto la densidad espectral como los valores de corriente que se presentan en la Figura IV.1 y la Figura IV.2 se han normalizado de forma tal que para obtener su valor en A^2s y A respectivamente, sólo se ha de multiplicar por la densidad superficial de electrones del canal n_s de un dispositivo real.

Observamos que el umbral para las oscilaciones Gunn está alrededor de unos 36 V. Por debajo de ese potencial y empezando por el valor de Nyquist en equilibrio ($4k_bT/R$), el ruido presenta un ligero crecimiento con el potencial aplicado debido al “calentamiento” (agitación) electrónico. Para potenciales mayores que 36 V se produce un significativo aumento del ruido a baja frecuencia, a la vez que tiene lugar una transición en el comportamiento del dispositivo desde un estado pasivo a otro de generación, como muestran las oscilaciones en la secuencia temporal de corriente y su correspondiente densidad espectral a 45 V. Una vez que las oscilaciones están presentes y bien establecidas (potenciales superiores a 45 V), $S_I(0)$ disminuye, y luego, alrededor de 53 V, aumenta de nuevo ya que aparecen nuevos armónicos,

como se observa para 60 V. Para potenciales aún mayores, encontramos una vez más lo que acabamos de explicar, esto es, una ligera disminución en el ruido hasta 75 V debido a que las oscilaciones son nítidas, seguida de un nuevo aumento relacionado con la aparición de más armónicos, tal y como ocurre en 100 V.

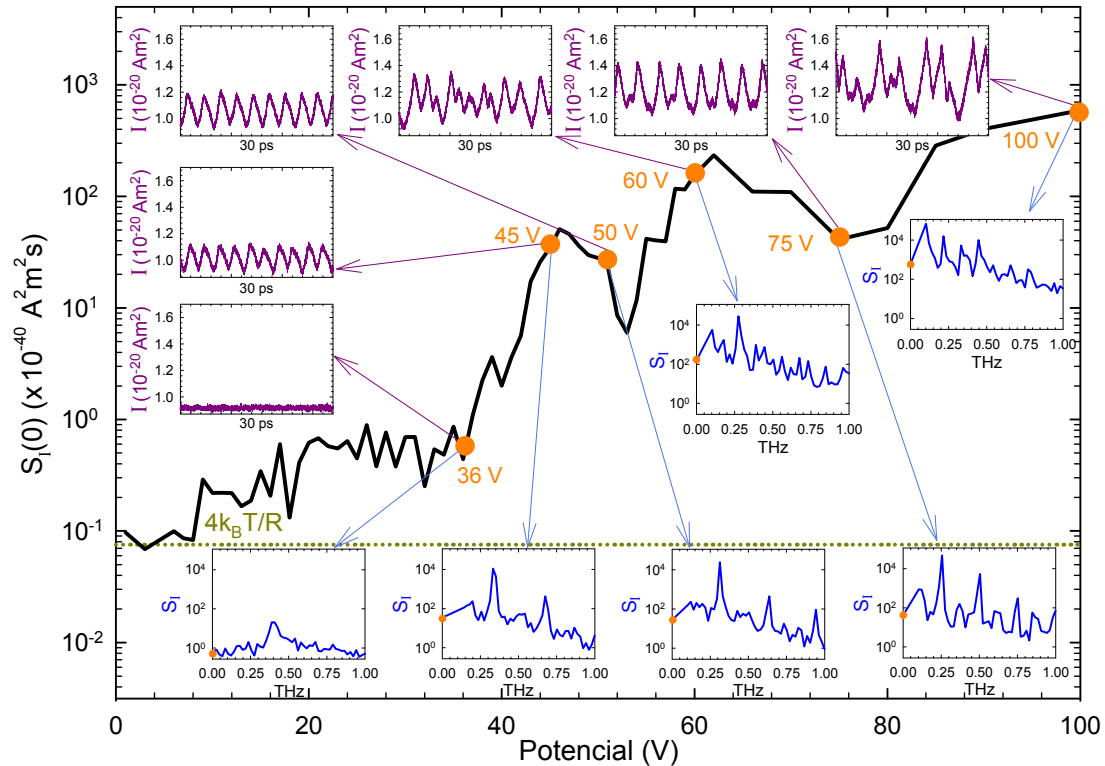


Figura IV.1. Densidad espectral de la corriente a baja frecuencia en función del potencial aplicado para el SSD1 ($\sigma = -0.25 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Los *insets* muestran las secuencias de corriente y sus densidades espectrales, para varios potenciales aplicados significativos.

Para confirmar que el aumento en el ruido de baja frecuencia es ciertamente debido a la aparición de oscilaciones y a nuevas componentes espectrales, llevamos a cabo el mismo estudio sobre dos SSDs más, y comparamos los resultados en la Figura IV.2. La única variación entre los diodos es el valor de la densidad de carga superficial, siendo $\sigma = -1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para el SSD2, y $\sigma = -1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para el SSD3. Como ya sabemos, cuanto mayor es σ más vaciado está el canal, lo que hace que se necesite un mayor voltaje, primero, para que el diodo conduzca y, segundo, para que aparezcan oscilaciones Gunn [Figura IV.2(a)]. En el diodo SSD2, la aparición de oscilaciones en la corriente sucede a partir de 80 V, un potencial umbral mucho mayor que el del SSD1. Y para el SSD3 la anchura efectiva del canal no es suficiente para lograr oscilaciones de corriente incluso para 100 V y, de hecho, el nivel de corriente es mucho menor que en los otros diodos. Con respecto al ruido a

baja frecuencia [ver Figura IV.2(b)] la curva correspondiente al SSD2 permanece aproximadamente constante (presenta un ligero crecimiento debido al “calentamiento” electrónico) hasta 80 V, y a partir de ese valor aumenta considerablemente coincidiendo con la aparición de las oscilaciones. Para un valor aún mayor de σ , caso del SSD3, $S_I(0)$ es prácticamente constante ya que no existen oscilaciones.

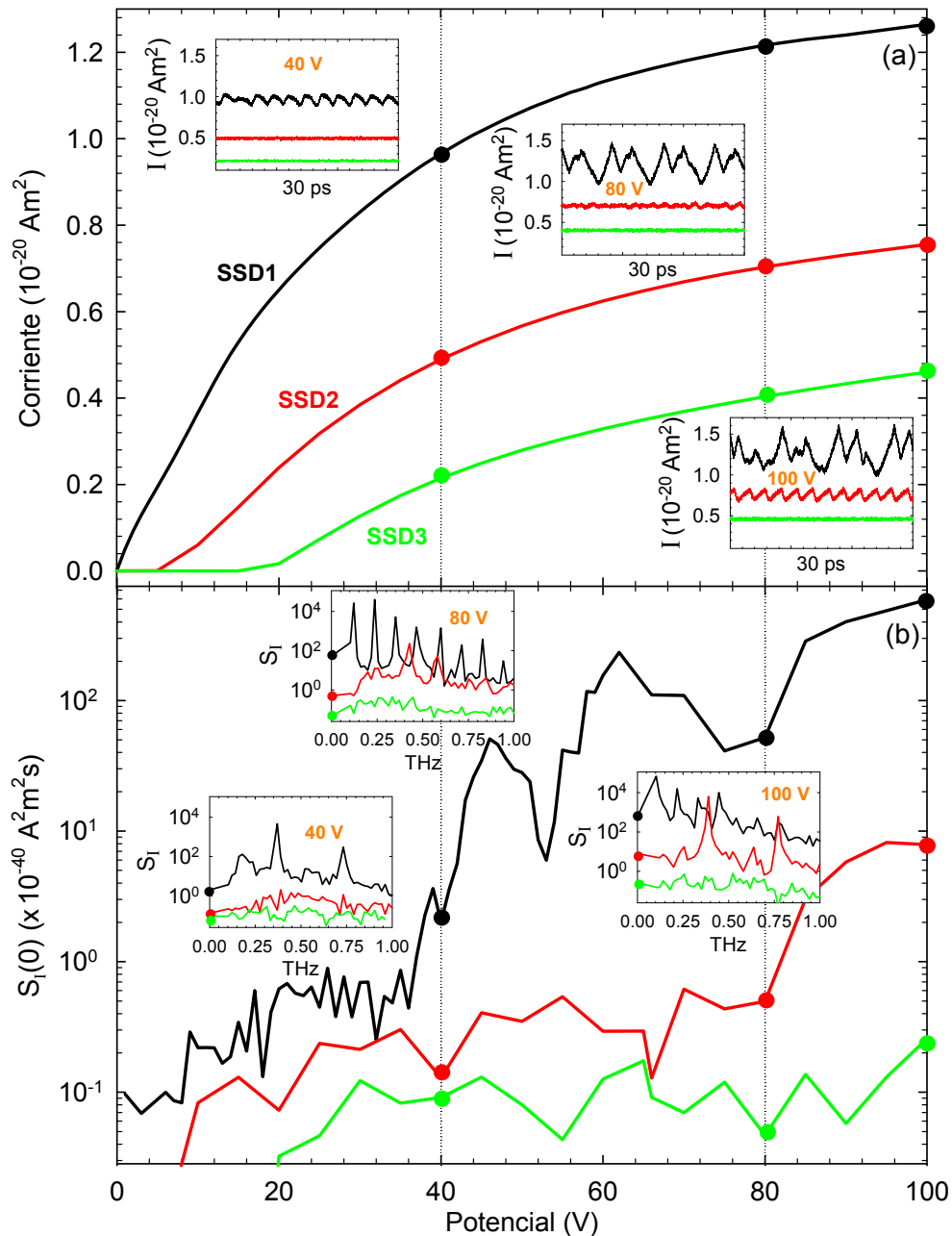


Figura IV.2. (a) Curvas I - V y (b) densidad espectral de la corriente a baja frecuencia en función del potencial aplicado para el SSD1 (Figura IV.1), que tiene $\sigma = -0.25 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y dos diodos más, el SSD2 y el SSD3, con $\sigma = -1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $\sigma = -1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, respectivamente. Los *insets* muestran en (a) las secuencias de corriente y en (b) las densidades espectrales para 40, 80 y 100 V.

IV.3. RUIDO A BAJA FRECUENCIA EN LA OPTTR

En el caso de las oscilaciones debidas al fenómeno de la OPTTR en diodos n^+nn^+ de GaN, vamos a analizar tres situaciones estudiadas en el Capítulo II y comparar sus resultados en la Figura IV.3. Se trata del diodo de referencia (Figura II.11), que era simulado a 15 K, y la misma estructura a 40 y 150 K. En esta ocasión mostramos los valores de intensidad y densidad espectral de corriente normalizados a la dimensión no simulada en nuestro simulador 2D, la profundidad del diodo.

Recordemos que las oscilaciones en la corriente, en el caso de aparecer, empiezan a observarse una vez se ha superado el umbral para la emisión del fonón óptico polar (0.091 V), pero éstas se mantienen sólo hasta cierto potencial aplicado (variable según la estructura), pues a valores mayores dejan de cumplirse las condiciones necesarias para la sincronización del proceso de emisiones a lo largo del dispositivo. Por ello, en esta ocasión observamos por ejemplo que a 15 K [Figura IV.3(a)] la densidad espectral a baja frecuencia presenta un aumento al aparecer las oscilaciones (aproximadamente a 0.1 V), pero para potenciales algo superiores la densidad espectral disminuye, ya que las oscilaciones terminan por desaparecer (aproximadamente a 0.5 V). Para $T=40$ K [Figura IV.3(b)] también aparecen oscilaciones a 0.1 V, aunque de menor amplitud y pureza espectral. Además, éstas desaparecen a potenciales menores que para 15 K debido, como vimos, a que entran en juego otros mecanismos de *scattering* y a que aumenta la longitud de Debye, imposibilitando la secuencia coherente de aceleraciones y paradas de los portadores a lo largo de la región activa. Mientras que en los SSDs teníamos que al aumentar el potencial aplicado aparecían armónicos de amplitud importante, dando lugar a nuevos incrementos en $S_f(0)$, en el caso de la OPTTR lo que ocurre es que tenemos más zonas de emisión de fonones y la frecuencia de las oscilaciones aumenta. Así, aunque no muy evidente, podemos observar por ejemplo para 40 K un segundo y tercer aumento en el ruido a baja frecuencia a 0.2 y 0.3 V. Finalmente, en la Figura IV.3(c) comprobamos que puesto que a 150 K ya no tenemos oscilaciones, la densidad espectral a baja frecuencia permanece prácticamente constante e igual al nivel de ruido térmico.

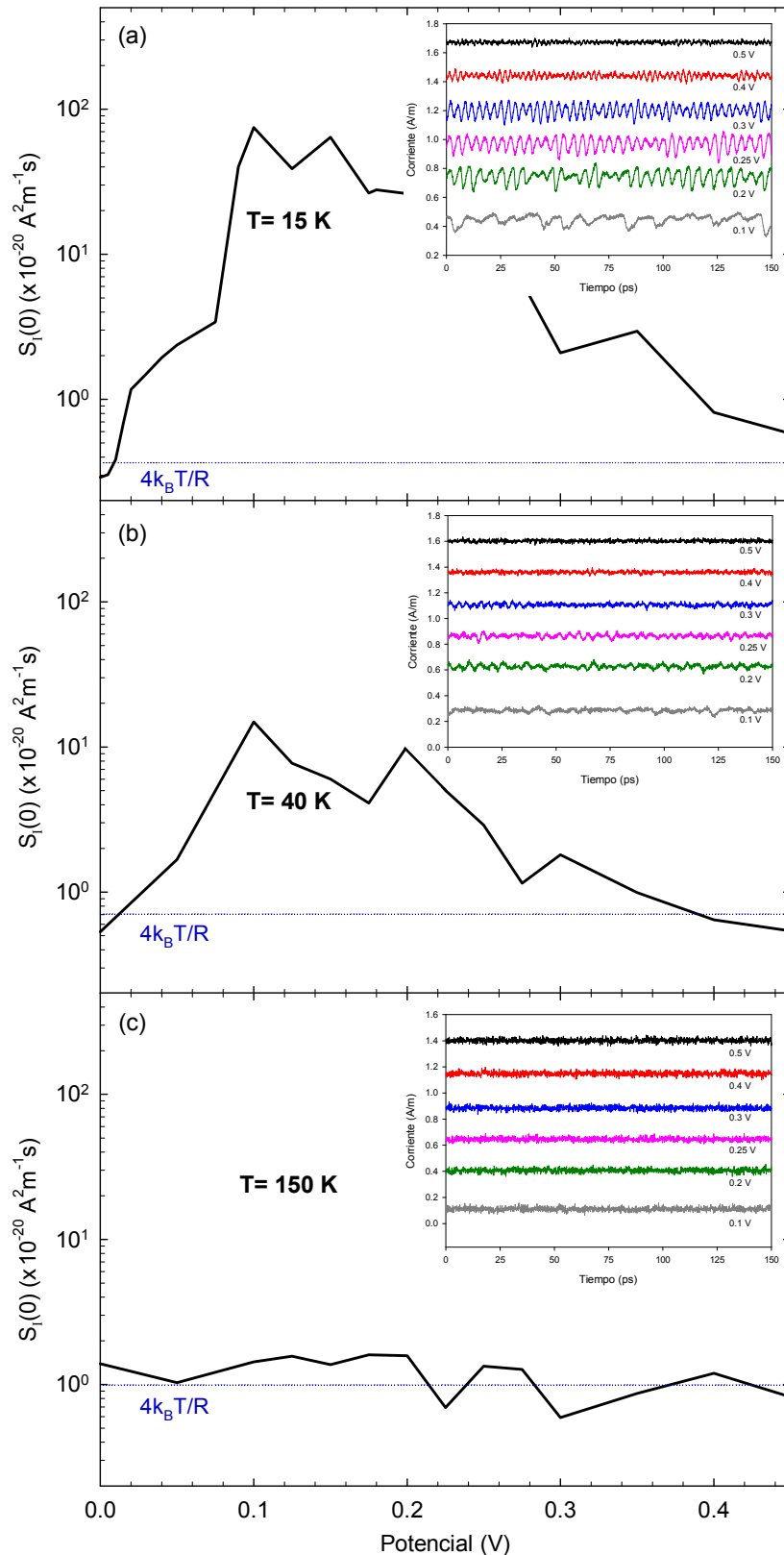


Figura IV.3. Densidad espectral de la corriente a baja frecuencia en función del potencial aplicado para un diodo n^+nm^+ de GaN (Figura II.11) a 15, 40 y 150 K. Los *insets* presentan secuencias temporales de corriente para varios potenciales, algunas de las cuales muestran oscilaciones debidas a la OPTTR. Tal y como se hacía en el Capítulo II, las secuencias de corriente se han desplazado para facilitar su visualización.

Podemos concluir que el análisis del ruido en corriente a baja frecuencia es de gran utilidad para detectar indirectamente oscilaciones de alta frecuencia tanto de tipo Gunn en los SSDs de GaN como debidas a la OPTTR en diodos n^+nn^+ de GaN, ya que, según nuestras simulaciones MC, ese ruido de baja frecuencia presenta un aumento notable justo para los voltajes correspondientes a la aparición de oscilaciones de corriente y también cuando emergen nuevos armónicos de mayor frecuencia en el espectro. Es por tanto ahora el momento de emplear en la práctica lo que indican las simulaciones, y así, aunque a través del indicador del ruido a baja frecuencia, ser capaces de detectar la existencia de oscilaciones de frecuencia en el rango de sub-THz e incluso THz. En el IEMN (*Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie*) en Lille, donde se fabrican y caracterizan los SSDs de GaN a los que nos hemos referido en el Capítulo III, se llevarán a cabo medidas experimentales en esta línea, debido a la enorme problemática que están suponiendo las medidas de emisión a tan alta frecuencia.

CONCLUSIONES

Esta Memoria presenta un análisis numérico y experimental de dos fenómenos físicos para la generación de señales de frecuencia de THz dentro de la vía de los dispositivos electrónicos: (i) las oscilaciones coherentes de plasma inducidas por la emisión de fonones ópticos (OPTTR, *Optical Phonon Transit Time Resonance*) en diodos micrométricos de nitruro de galio (GaN) y (ii) las oscilaciones Gunn a temperatura ambiente en diodos nanométricos autoconmutantes (SSDs, *Self-Switching Diodes*) basados en GaN. Los fundamentos de la herramienta de simulación Monte Carlo (MC) utilizada para el análisis se detallan en el primer capítulo, donde se presentan también las principales propiedades electrónicas del GaN. Los SSDs simulados se han fabricado y caracterizado en el IEMN (*Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie*) en Lille (Francia).

A la vista de los resultados obtenidos, se desprenden las conclusiones que pasamos a mencionar.

○ OPTTR en diodos n^+nn^+ de GaN

➤ Cuando la temperatura de operación T es suficientemente baja para que el mecanismo más probable de *scattering* con la red sea la emisión de fonones ópticos polares, la dinámica de los electrones en su transporte a través de la zona activa del diodo consta de vuelos libres, de longitud l_0 , acelerados por el campo eléctrico, truncados por súbitas ralentizaciones en el momento de emitir el fonón. En su recorrido de cátodo a ánodo, los electrones emitirán un cierto número de fonones que dependerá del potencial aplicado para acelerarlos. La frecuencia característica de este fenómeno f_E , inverso del tiempo de vuelo

entre las emisiones de fonones, es proporcional a la polarización aplicada. Su expresión viene dada por

$$f_E = \frac{qE}{\sqrt{2m_0 m^* \hbar \omega_0}},$$

siendo q la carga del electrón, E el campo eléctrico, m_0 y m^* la masa del electrón libre y la masa efectiva del electrón, respectivamente, y $\hbar \omega_0$ la energía del fonón óptico, cuyo elevado valor (91 meV) para el GaN hace que el fenómeno se presente de manera relevante.

➤ El proceso cíclico de aceleraciones y paradas del conjunto de portadores da lugar a acumulaciones de carga en las zonas de frenado. De esta forma se tiene una región activa que presenta una sucesión de acumulaciones alternativas de carga positiva y negativa. La frecuencia natural de oscilación de tal densidad de carga es la frecuencia de plasma f_p , que sólo depende de parámetros del material bajo estudio y de su impurificación N ,

$$f_p = \frac{q}{2\pi} \sqrt{\frac{N}{m^* m_0 \epsilon_0 \epsilon_r}},$$

siendo ϵ_0 la constante dieléctrica del vacío y ϵ_r la permitividad relativa.

➤ Si la frecuencia f_E es próxima a f_p , las oscilaciones de plasma son potenciadas por el aporte cuasi-síncrono de electrones procedentes de las acumulaciones de carga, y ello da lugar a oscilaciones de corriente de muy alta frecuencia, próximas a f_E , a través del dispositivo. Para que esto ocurra, es necesario además que el espaciado entre las acumulaciones de carga, l_0 , sea mucho mayor que la longitud de Debye

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{k_B T \epsilon_0 \epsilon_r}{N q^2}},$$

donde k_B es la constante de Boltzmann.

➤ A potenciales elevados, el perfil del campo eléctrico, además de presentar una forma ondulatoria asociada a las acumulaciones de carga, tiende hacia valores crecientes al acercarnos al ánodo. Esto provoca que los tiempos y longitudes de vuelo entre emisión de fonones sean distintos a lo largo de la

estructura, destruyéndose así la coherencia del fenómeno e implicando, por tanto, la ausencia de oscilaciones en la corriente.

➤ Los espectros en frecuencia característicos del fenómeno, estimados mediante la densidad espectral de las fluctuaciones de corriente, muestran máximos bien definidos correspondientes a oscilaciones a frecuencias de sub-THz. Tales frecuencias caen siempre en un amplio rango en torno a la frecuencia de plasma de la región activa, y en la mayoría de los casos reproducen fielmente la estimación teórica.

➤ Para potenciales aplicados altos (cuando no hay oscilaciones), los perfiles instantáneos de las magnitudes microscópicas proporcionadas por el simulador apenas varían en el tiempo, mientras que para polarizaciones débiles se aprecian variaciones espaciales y temporales significativas asociadas a su continua adaptación a las oscilaciones de corriente.

➤ Al aumentar la temperatura por encima de 40 K desaparecen las oscilaciones de corriente, ya que aumenta la longitud de Debye y entran en juego otros mecanismos de *scattering*, de modo que la periodicidad espacial de los perfiles de carga se diluye considerablemente.

➤ La frecuencia máxima de oscilación en una estructura viene determinada fundamentalmente por el campo eléctrico más alto compatible con la condición $\lambda_D \ll l_0$. Las estructuras con región activa más larga (en torno a algunos μm) resultan óptimas en cuanto a amplitud de las oscilaciones y rango de frecuencia cubierto por las mismas.

➤ Cuando aumenta el dopaje de la zona activa del diodo, se reduce la longitud de Debye y crece la frecuencia de plasma, por lo que se consiguen oscilaciones de corriente de mayor frecuencia y amplitud. En particular, operando con impurificaciones de 10^{18} cm^{-3} en las zonas n^+ y de 10^{16} cm^{-3} en la región activa, se logra superar ampliamente la frontera del THz con oscilaciones de amplitud significativa.

○ **Oscilaciones Gunn en SSDs basados en GaN**

Como otros materiales III-V, el GaN presenta, a partir de un campo umbral en torno a 200 kV/cm, una zona de movilidad incremental negativa. Su origen es la

transferencia de electrones desde el valle Γ_1 al valle U, el cual les confiere una mayor masa efectiva y, por tanto, los ralentiza, pudiendo formar acumulaciones de carga que se propagan por el material a la velocidad de saturación ($\sim 1.5 \times 10^7$ cm/s). Conocido como efecto Gunn, este fenómeno puede ser aprovechado para obtener oscilaciones en la corriente. El hecho de que el GaN presente valores muy elevados, por un lado, del campo umbral y del campo de ruptura y, por otro, de la velocidad de saturación, le convierte en un prometedor elemento constitutivo de dispositivos de potencia y alta frecuencia que exploten el efecto Gunn. La sencilla geometría de los diodos SSD, dispositivos de transporte planar donde unas zanjas aislantes en forma de L rompen la asimetría del canal, es favorable para la emisión de señales de THz por efecto Gunn a temperatura ambiente.

La utilización inicial de un **modelo de carga superficial constante** ha permitido confirmar el principio de operación de estos diodos basados en GaN y analizar la dependencia de las oscilaciones Gunn con varios parámetros geométricos y físicos, encontrándose:

- En diodos con canales de 1 μm de longitud, a partir de unos 30 V aplicados aparecen oscilaciones en la corriente de frecuencias en torno a 300 GHz a temperatura ambiente.
- El análisis las curvas $I-V$ y las secuencias de corriente permite concluir que:
 - La frecuencia de oscilación escala esencialmente con el inverso de la longitud del canal.
 - La longitud de la zona de acceso al ánodo apenas influye ni en el nivel de corriente ni en las oscilaciones que ésta presenta.
 - Una menor anchura de las zanjas verticales proporciona oscilaciones de mayor amplitud y frecuencia.
 - Aunque con menor amplitud y frecuencia, las oscilaciones persisten a una temperatura de 500 K.
 - El aumento de la carga superficial σ asignada a las interfases reduce el nivel de corriente, ya que el vaciamiento inducido en el canal aumenta. La frecuencia y la amplitud de las oscilaciones disminuyen, llegando éstas incluso a desaparecer.

- Un mayor valor del parámetro N_{Db} , dopaje de fondo “virtual” que trata de dar cuenta de las carga fijas de la heterounión y de la capa de la superficie, refuerza las oscilaciones Gunn.

➤ Las eficiencias de conversión de DC a AC presentaron varias bandas de generación, con un máximo entre 0.1% y 0.5%, a una frecuencia fundamental y también alrededor de una frecuencia doble. Pese a que estos valores no son muy elevados, como los diodos de GaN son capaces de soportar una gran potencia en DC, la potencia AC generada puede considerarse todavía dentro de los límites prácticos, sobre todo al tratarse de frecuencias tan altas. Las bandas de generación superiores corresponden a la existencia de más de un dominio de carga propagándose por el diodo.

La fabricación de estos dispositivos ha significado un gran reto tecnológico por sus dimensiones tan reducidas y por ser la primera vez que se han basado en GaN. En el primer proceso de fabricación (*Run 1*) se incluyeron canales de 1 y 2 μm de longitud y de anchuras de 75 y 150 nm, con anchuras de *recess* entre 50 y 200 nm, todos ellos realizados con éxito. Asimismo, con el objetivo de aumentar la potencia de salida se dispusieron agrupaciones o *arrays* de varios SSDs en paralelo. La comparación de las simulaciones con las medidas experimentales en estos diodos constata la necesidad de utilizar **un modelo de carga auto-consistente**.

➤ Las curvas $I-V$ experimentales presentaron las mismas tendencias con los parámetros geométricos que las mostradas por las simulaciones con el modelo de carga constante, pero al compararlas resultó imposible lograr un ajuste aceptable. Además, en las medidas realizadas no se encontró emisión. Las discrepancias con los resultados de las simulaciones se atribuyen esencialmente a la influencia de la carga superficial que, inesperadamente, resulta ser claramente no homogénea a lo largo del canal y fuertemente dependiente del potencial aplicado.

➤ El nuevo modelo de carga auto-consistente sí es capaz de ajustar satisfactoriamente las curvas $I-V$ de los diodos fabricados, pero no se observan oscilaciones en las secuencias de corriente, tal y como ocurre en las medidas experimentales.

- La información aportada por las simulaciones lleva a reconsiderar el diseño de los dispositivos con objeto de conseguir oscilaciones. Las nuevas estrategias de diseño consisten en aumentar la anchura del canal de los clásicos SSDs rectangulares y elegir una geometría más adecuada, abriendo el canal en forma de V. Así se evita el problema de una acumulación excesiva de carga y un posterior vaciamiento al final del canal, y se logra que el valor del campo al principio del mismo sea suficiente para la formación de los dominios.
- Las secuencias de corriente simuladas con estos diseños sí presentan oscilaciones claras. Para diodos rectangulares con longitud de $1\ \mu\text{m}$ y anchura $W \geq 500\ \text{nm}$ aparecen oscilaciones de alrededor de $300\ \text{GHz}$ al aplicar potenciales en torno a $45\text{-}50\ \text{V}$.
- La geometría en forma de V favorece la aparición de oscilaciones. Por ejemplo, para $200\ \text{nm}$ de anchura en la entrada del canal y $300\ \text{nm}$ en la salida se aprecian oscilaciones claras ya desde $30\ \text{V}$. El conseguir oscilaciones con anchuras de entrada bajas, siendo por tanto pequeño el nivel de corriente de DC, abre la posibilidad de tener eficiencias mayores y menos problemas de calentamiento.
- Del análisis espectral de las secuencias de corriente se desprende que:
 - Cuanto más ancho sea el canal, las oscilaciones Gunn son de mayor amplitud (apareciendo incluso más armónicos) pero de menor frecuencia.
 - La frecuencia de oscilación disminuye ligeramente a medida que el voltaje aplicado aumenta.
 - En los canales en forma de V, para cada anchura de entrada parece existir un valor óptimo de la anchura de salida (para generar oscilaciones) que proporciona un ángulo de inclinación de las zanjas horizontales entre 5 y 10° .

Siguiendo algunas de las reglas de diseño extraídas de las simulaciones, en un segundo proceso (*Run 2*) se fabricaron numerosos dispositivos e incluso se integraron algunos con antenas *bow-tie*.

➤ La caracterización DC (medidas que realicé yo personalmente durante una estancia en Lille) corroboró nuevamente la dependencia esperada con los parámetros geométricos y confirmó la reproducibilidad de la fabricación.

Sin embargo, puesto que este segundo proceso de fabricación se llevó a cabo de manera paralela a las simulaciones, la mayor parte de los dispositivos fueron demasiado estrechos, más orientados a detección que a emisión. Las medidas *free-space* realizadas mediante varias técnicas distintas, en las que muchos dispositivos se quemaron, tampoco confirmaron la presencia de emisión.

El tercer proceso de fabricación (*Run 3*) sí ha podido tener en cuenta todas las indicaciones de las simulaciones. Se ha dado total prioridad a los dispositivos para emisión: diodos rectangulares anchos ($W=500$ nm y 750 nm) y múltiples diodos en forma de V. Para disminuir los efectos térmicos, se ha limitado a 32 el número máximo de SSDs en cada agrupación, aumentando la separación entre ellos, y se han dispuesto en una sola antena, reduciendo además la separación entre sus brazos. Asimismo se han integrado antenas en espiral debido a su mayor ancho de banda y su emisión perpendicular al plano.

➤ Las medidas de caracterización DC, único resultado disponible hasta el momento, son reproducidas satisfactoriamente por el simulador MC de carga auto-consistente, el cual predice oscilaciones Gunn.

Para confirmar la presencia de tales oscilaciones se realizarán medidas de emisión pulsadas para evitar un calentamiento excesivo cuando se apliquen los elevados potenciales que teóricamente son necesarios para lograr oscilaciones, y se emplearán lentes de silicio para mejorar las medidas emisión.

○ **Aumento del ruido a baja frecuencia como indicador de las oscilaciones**

Dado que las técnicas experimentales a frecuencias de centenas de GHz aún resultan notablemente complicadas, se plantea la necesidad de disponer de procedimientos alternativos para detectar la presencia de las oscilaciones en el rango de THz o sub-THz que predicen las simulaciones MC.

➤ Los *kinks* asociados a la aparición de inestabilidades, que en algunas ocasiones se detectan en las curvas $I-V$ de dispositivos osciladores indicando la transición de un estado pasivo a un estado de generación, en los diodos

estudiados en este trabajo son poco claros (en los diodos n^+nn^+ para la OPTTR) o incluso inexistentes (en los SSDs).

➤ Sin embargo, los resultados de las simulaciones MC para la densidad espectral del ruido en corriente a baja frecuencia $S_I(0)$ evidencian que ésta presenta un aumento muy notable cuando el potencial aplicado se aproxima al umbral para la aparición de las oscilaciones. El ruido a baja frecuencia (por encima del ruido $1/f$ y de generación-recombinación) puede constituir por lo tanto un indicador indirecto excelente para detectar el comienzo de las oscilaciones.

➤ En el caso de los SSDs basados en GaN, tras el significativo aumento de $S_I(0)$ cuando empiezan a aparecer oscilaciones en la corriente, al elevar más el potencial, cuando éstas ya son claras y espectralmente más definidas, $S_I(0)$ disminuye. Pero vuelve a aumentar cuando empiezan a observarse nuevos armónicos en la densidad espectral, y a disminuir cuando las oscilaciones son nítidas.

➤ De igual manera, en el caso de la OPTTR en diodos n^+nn^+ de GaN se observa un aumento de $S_I(0)$ a los 0.1 V necesarios para emisión del fonón óptico. Sin embargo, puesto que para potenciales mayores las oscilaciones desaparecen al no ser posible la sincronización del proceso de emisiones a lo largo del dispositivo, la densidad espectral disminuye.

Esta Tesis Doctoral se ha realizado con la ayuda de una beca de **Formación de Personal Investigador** del Ministerio de Ciencia e Innovación (BES-2008-003434).

Forma parte del trabajo desarrollado por el **Grupo de Investigación en Dispositivos Semiconductores de la Universidad de Salamanca** en los siguientes **proyectos de investigación**:

- Modelización de HEMTs avanzados para aplicaciones de alta frecuencia: nuevos materiales, estructuras y conceptos (TEC2007-61259/MIC). Ministerio de Educación y Ciencia - Dirección General de Investigación.
- Dispositivos semiconductores para aplicaciones en el rango de THz: nuevos materiales y arquitecturas (GR270). Junta de Castilla y León - Consejería de Educación - Grupos de Excelencia.
- Semiconductor nanodevices for room temperature THz emission and detection. ROOTHZ (ICT-2009-243845). European Commission.
- Estudio de los fenómenos de ionización por impacto en dispositivos electrónicos avanzados de semiconductores III-V para aplicaciones en el rango de frecuencias milimétricas y submilimétricas (FS/18-2010). Fundación Memoria D. Samuel Solórzano Barruso.
- Diodos y transistores avanzados para generación, detección y procesado de señales milimétricas y submilimétricas (TEC2010-15413). Ministerio de Ciencia e Innovación - Dirección General de Investigación.
- Nanodispositivos semiconductores para la emisión y detección de radiación de THz a temperatura ambiente (SA183A12-1). Junta de Castilla y León - Consejería de Educación.

Parte de los resultados que se han presentado en esta Memoria se encuentran publicados en los siguientes **artículos en revistas científicas**:

- Íñiguez-de-la-Torre A., Mateos J. and González T., “Terahertz current oscillations assisted by optical phonon emission in GaN n^+nn^+ diodes: Monte Carlo simulations”, *J. Appl. Phys.* **107**, 053707 (2010).

-
- Íñiguez-de-la-Torre A., Íñiguez-de-la-Torre I, Mateos J. and González T., “Correlation between low-frequency current-noise enhancement and high-frequency oscillations in GaN-based planar nanodiodes: A Monte Carlo study”, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 062109 (2011).
 - Íñiguez-de-la-Torre A., Íñiguez-de-la-Torre I., Mateos J., González T., Sangaré P., Faucher M., Grimbert B., Brandli V., Ducournau G. and Gaquière C., “Searching for THz Gunn oscillations in GaN planar nanodiodes”, *J. Appl. Phys.* **111**, 113705 (2012).
 - Sangaré P., Ducournau G., Grimbert B., Brandli V., Faucher M., Gaquière C., Íñiguez-de-la-Torre A., Íñiguez-de-la-Torre I., Millithaler J. F., Mateos J. and González T., “Experimental Demonstration of Direct Terahertz Detection at Room-Temperature in AlGaIn/GaN Asymmetric Nanochannels”. *Nano Lett.* Enviado para su publicación (2012).

Igualmente, parte de los resultados se han presentado en las siguientes **comunicaciones en congresos nacionales e internacionales** y están recogidos en los correspondientes **proceedings**:

- Íñiguez-de-la-Torre A., González T. and Mateos J., “Current oscillations excited by optical phonon emission in GaN n^+nn^+ diodes: Monte Carlo simulations”, 16th International Conference on Electronic Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (EDISON). Póster. Montpellier (Francia), Agosto 2009. Publicado en *J. Phys.: Conf. Series* **193**, 012023 (2009).
- Íñiguez-de-la-Torre A., Mateos J. and González T., “OPTTR induced THz current oscillations in Monte Carlo simulated GaN diodes”, Journées Nationales du Réseau Doctoral de Micro-électronique (JNRDM). Oral. Montpellier (Francia), Junio 2010.
- Íñiguez-de-la-Torre A., Mateos J. and González T. “OPTTR induced current oscillations in GaN diodes. Monte Carlo simulations”, 8th Spanish Conference on Electron Devices (CDE). Póster. Palma de Mallorca (España), Febrero 2011. Publicado en *IEEE Conference Publications*, DOI: 10.1109/SCED.2011.5744233.

-
- Íñiguez-de-la-Torre A., Mateos J., Íñiguez-de-la-Torre I. and González T. “Toward THz Gunn Oscillations in Planar GaN Nanodiodes”, 8th Spanish Conference on Electron Devices (CDE). Oral Invitada. Palma de Mallorca (España), Febrero 2011. Publicado en *IEEE Conference Publications*, DOI: 10.1109/SCED.2011.5744219.
 - Gaquière C., Ducournau G., Sangaré P., Grimbert B., Faucher M., Íñiguez-de-la-Torre I., Íñiguez-de-la-Torre A., González T. and Mateos J. “Wide band gap self switching nanodevices for THz applications at room temperature”, 41st European Microwave Conference (EuMC). Oral. Manchester (Reino Unido), Octubre 2011. Publicado en *IEEE Conference Publications*, 1150 (2011).
 - Íñiguez-de-la-Torre A., Mateos J., Íñiguez-de-la-Torre I. and González T. “Room Temperature THz Gunn Oscillations in GaN Nanodiodes”, 20th Heterosctructure Technology (HeTECH). Oral. Villeneuve d'Ascq. Lille (Francia), Noviembre 2011.
 - Gaquière C., Ducournau G., Sangaré P., Faucher M., Grimbert B., Íñiguez-de-la-Torre I., González T., Íñiguez-de-la-Torre A. and J. Mateos, “THz Applications at Room Temperature Based on Self Switch Diodes Using wide Bandgap Material”, IEEE International Microwave Symposium (IMS), Oral, Montréal, Québec (Canadá), Junio 2012.
 - Mateos J., Millithaler J. F., Íñiguez-de-la-Torre I., Íñiguez-de-la-Torre A., Vasallo B. G., Pérez S., Sangaré P., Ducournau G., Gaquière C., Alimi Y., Zhang L., Rezazadeh A., Song A. M., Westlund A., Grahm J. and González T., “Room Temperature THz Detection and Emission with Semiconductor Nanodevices”. 9th Spanish Conference on Electron Devices (CDE), Valladolid (España), Febrero 2013. Enviado.

Se ha efectuado una estancia de tres meses de duración (20/09/2011-20/12/2011) en el IEMN (*Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie*) en Lille (Francia).

Para la realización de las simulaciones de esta Memoria se han empleado dos cluster Linux. El más antiguo consta de 8 nodos con 2 CPUs Intel Xeon 5140 con 2 cores a 2.33 GHz (1 GB RAM), otros 8 con 2 CPUs Intel Xeon 5520 con 4 cores a 2.26 GHz (1 GB RAM) y 2 nodos más con 2 CPUs Intel Xeon 5650 con 6 cores a 2.66 GHz (2 GB RAM). El cluster adquirido más recientemente tiene 3 nodos con 2 CPUs Intel Xeon ES-2680 con 8 cores a 2.7 GHz (32 GB RAM). Así, es posible realizar simultáneamente más de 150 procesos ($8 \times 2 \times 2 + 8 \times 2 \times 4 + 2 \times 2 \times 6 + 3 \times 2 \times 8$). El compilador es el Intel ® Fortran Compiler 10.1.011 para Linux.

APÉNDICE

DETECCIÓN EN SSDs DE GaN

En este apéndice exponemos de manera resumida aspectos relativos a la detección en los diodos autoconmutantes o *Self-Switching Diodes* (SSDs) basados en nitruro de galio (GaN). Recordemos que nuestro grupo de trabajo participa en el proyecto europeo *ROOTHz* (*Semiconductor Nanodevices for Room Temperature THz Emission and Detection*) iniciado en 2010 con el ambicioso propósito de conseguir un sistema compacto de emisión/detección de señales de THz a temperatura ambiente. Por ello, aunque esta Memoria está dedicada al estudio de la generación de señales, hemos considerado lógico completar este trabajo con un pequeño apéndice sobre la detección con SSDs de GaN. En primer lugar aportamos una descripción teórica de los conceptos básicos sobre detección de señales alternas y seguidamente se presentan cuáles son hasta la fecha los logros en detección con nuestros diodos. Se muestran algunos de los resultados experimentales más recientes obtenidos en el IEMN (*Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie*) en Lille (Francia), que aparecen en la Ref. [148](#), y su comparación con nuestras simulaciones Monte Carlo (MC).

1. CONCEPTOS BÁSICOS

1.a. Detección de señales alternas

Un dispositivo electrónico que posea una característica $I-V$ no lineal puede ser empleado como rectificador de una señal de entrada AC a una salida DC. La Figura 1 muestra de forma esquemática el principio de la detección.

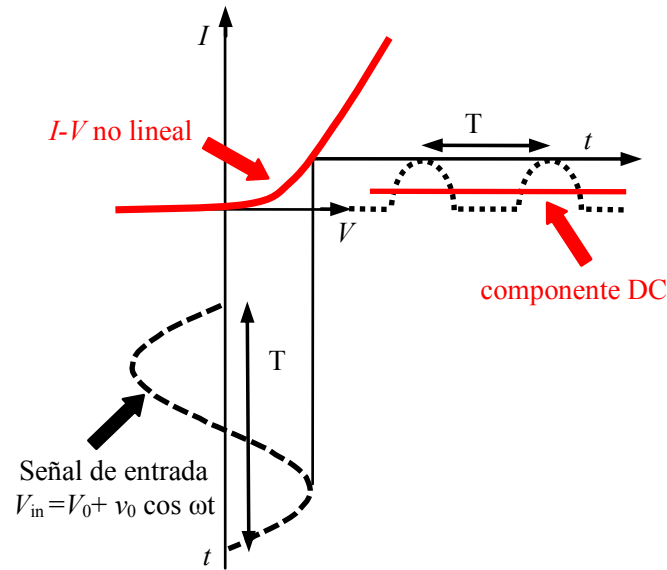


Figura 1. Detección de señales AC con una característica $I-V$ no lineal. Se ha tomado $V_0=0$.

Imaginemos la señal de entrada con una dependencia senoidal,

$$V = V_0 + v_0 \cos \omega t, \quad (1)$$

siendo V_0 el potencial de polarización DC y v_0 la amplitud de la señal oscilante de frecuencia $f = \omega/2\pi$. En cuanto a la intensidad, dado que la respuesta $I-V$ es no lineal, expandimos en serie de Taylor la corriente de pequeña señal

$$I = I_0 + v_0 \left. \frac{dI}{dV} \right|_{V=V_0} \cos \omega t + \frac{v_0^2}{2} \left. \frac{d^2I}{dV^2} \right|_{V=V_0} \cos^2 \omega t + \dots = \left(I_0 + \frac{v_0^2}{4} N_d \right) + v_0 G_d \cos \omega t + \frac{v_0^2}{4} N_d \cos 2\omega t + \dots \quad (2)$$

donde I_0 es la corriente correspondiente a la polarización DC, V_0 . En esta expresión podemos identificar $R_d^{-1} = \left. \frac{dI}{dV} \right|_{V=V_0}$, que es el inverso de la resistencia diferencial (o conductancia G_d) del dispositivo en el punto de operación, y $\frac{dR_d^{-1}}{dV} = \left. \frac{d^2I}{dV^2} \right|_{V=V_0} \equiv N_d$, segunda derivada que indica el nivel de no linealidad N_d , también en el punto de operación. Si escribimos $\cos^2 \omega t = \frac{1 + \cos 2\omega t}{2}$ en la expresión de la corriente, ésta contiene tres términos: uno de frecuencia igual a la de la entrada, otro de frecuencia doble (generación de armónicos), y, el más importante desde el punto de vista de la detección, una componente DC extra como se ha señalado en la Figura 1. Si no tenemos en cuenta I_0 , la corriente media rectificada

$$\bar{I}_d = \frac{v_0^2}{4} N_d, \quad (3)$$

y el voltaje medido en circuito abierto

$$\bar{V}_d = \frac{v_0^2}{4} N_d R_d, \quad (4)$$

son proporcionales al coeficiente de no linealidad N_d .

1.b. Responsividad

Se define la responsividad S_d de un detector como el cociente entre la señal eléctrica de salida del detector (en amperios o voltios) y la potencia de entrada $P_{en} = v_0^2/2R_d$ al dispositivo

$$S_d = \frac{\bar{I}_d}{P_{en}} \left[\frac{A}{W} \right] \text{ o } \frac{\bar{V}_d}{P_{en}} \left[\frac{V}{W} \right]. \quad (5)$$

1.c. Potencia equivalente de ruido

Otra magnitud muy interesante, también figura de mérito de un detector, es la potencia equivalente de ruido (*Noise Equivalent Power, NEP*). Se define como el valor mínimo de la potencia de la señal de entrada por raíz cuadrada del ancho de banda para que ésta sea discernible del ruido del detector. Se calcula como el cociente entre la raíz del ruido en voltaje o corriente del detector a una determinada frecuencia f_0 y la responsividad a esa misma frecuencia

$$NEP = \frac{\sqrt{\text{Ruido}}}{S_d} \Bigg|_{f_0} . \quad (6)$$

Se mide en $W/\sqrt{\text{Hz}}$ y cuanto menor sea su valor mejor será el detector.

1.d. Cálculos Monte Carlo

En las medidas experimentales, típicamente se polariza el dispositivo en corriente mediante una red de polarización y se mide el voltaje de salida. Sin embargo, en nuestras simulaciones MC polarizamos aplicando un potencial y calculamos la corriente media rectificada, como muestra la Figura 1. Además, nuestros resultados son intrínsecos, es decir, no tienen en cuenta la reflexión de la potencia eléctrica de entrada al dispositivo. Debemos por tanto incluir el *mismatch* entre las impedancias características del dispositivo y de la guía coplanar (CPW, *coplanar waveguide*). Pasamos a explicar el procedimiento seguido para calcular la responsividad extrínseca a partir de nuestras simulaciones intrínsecas y así poder compararlas con las medidas experimentales.

En primer lugar convertimos la corriente media rectificada MC, $\overline{I_{MC}}$, en voltaje sin más que multiplicar por la resistencia R_d calculada en torno al potencial de polarización

$$\overline{V_{MC}} = \overline{I_{MC}} \frac{dV}{dI} \Bigg|_{V=V_0} = \overline{I_{MC}} R_d . \quad (7)$$

La responsividad intrínseca es

$$S_d^{in} = \frac{\overline{V_{MC}}}{P_{en}} = \frac{\overline{I_{MC}} R_d}{v_0^2 / 2R_d}, \quad (8)$$

y la responsividad extrínseca (a comparar con la experimental) será simplemente la intrínseca corregida por el desacople entre el dispositivo y la guía coplanar (de impedancia típica $R_{CPW} \sim 50 \Omega$)

$$S_d^{ex} = S_d^{in} (1 - |\Gamma|), \quad (9)$$

donde Γ es el coeficiente de reflexión, y viene dado por $\Gamma = (R_d - R_{CPW}) / (R_d + R_{CPW})$. Dado que $R_d \sim k\Omega$, el factor Γ es próximo a 1 y la variación será muy significativa al pasar de valores intrínsecos a extrínsecos.

En cuanto a la *NEP*, también debemos transformar los cálculos intrínsecos en extrínsecos. Para frecuencias lo suficientemente altas como para poder despreciar el ruido $1/f$, el ruido generado por el dispositivo se debe a fluctuaciones térmicas en el canal (ruido tipo Johnson-Nyquist) con una densidad espectral de potencia de $\sqrt{4k_B T R_d}$ (k_B la constante de Boltzmann y T la temperatura). Así, tenemos

$$\begin{aligned} NEP^{in} &= \sqrt{4k_B T R_d} / S_d^{in} \\ NEP^{ex} &= \sqrt{4k_B T R_d} / S_d^{ex}. \end{aligned} \quad (10)$$

Nótese que el cálculo exacto del coeficiente de reflexión debería hacerse con los valores de las impedancias complejas del dispositivo y de la guía coplanar, y no sus valores DC, como hacemos aquí en una primera aproximación. Esto permitiría tener en cuenta la dependencia con la frecuencia del *mismatch* que, en último término, podría afectar a los valores extrínsecos tanto de la responsividad como de la *NEP*.

2. RESULTADOS EXPERIMENTALES Y MONTE CARLO PARA DETECCIÓN EN SSDs DE GaN

En la Figura 2 recordamos la geometría de los SSDs. La fabricación de los diodos para detección es la misma que la que se explicó en el Capítulo III. De hecho, son aquellos SSDs más estrechos del *Run 2* los que se diseñaron para detección. Los resultados que se presentan corresponden a un diodo con $L = 1 \mu\text{m}$, $W = 90 \text{ nm}$, $W_V = 100 \text{ nm}$ y $W_H = 30 \text{ nm}$. Las medidas experimentales para un diodo como éste revelan una impedancia en torno a $15 \text{ k}\Omega$ en equilibrio, mientras que para una configuración de 16 diodos en paralelo se obtiene $1.5 \text{ k}\Omega$, evidenciando que existe cierta dispersión en la fabricación.

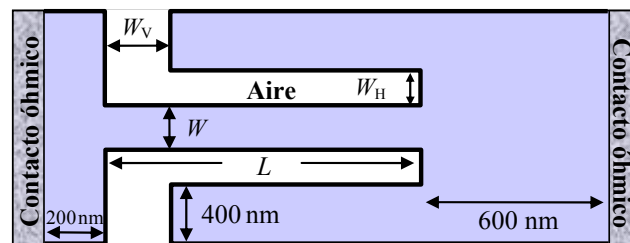


Figura 2. Geometría de un diodo SSD.

La Figura 3 muestra la comparación entre una curva $I-V$ medida experimentalmente y la correspondiente a nuestras simulaciones MC con el modelo de carga auto-consistente. El acuerdo es muy satisfactorio en la región tanto de bajos como de altos potenciales aplicados (saturación).

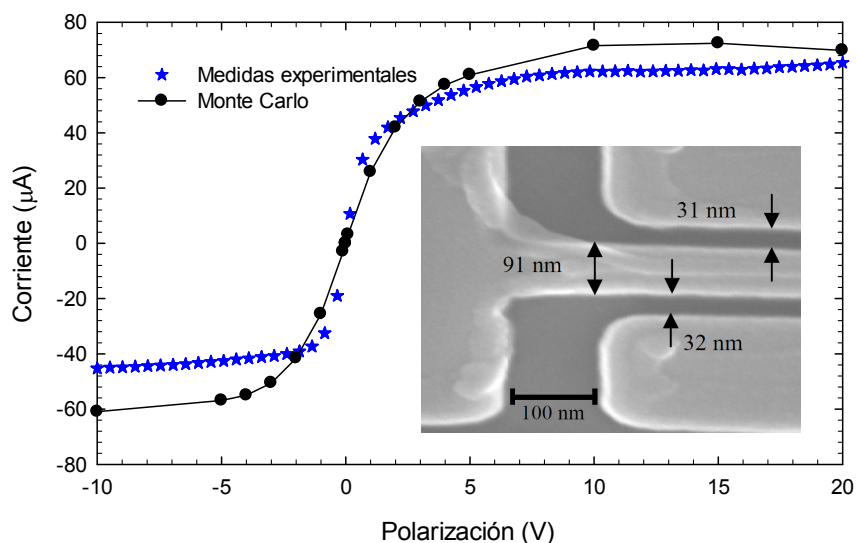


Figura 3. Comparación entre la curva $I-V$ medida experimentalmente y la obtenida mediante simulación MC correspondientes al SSD de GaN cuya imagen SEM aparece en el *inset*.

Una vez caracterizado el diodo en régimen estático, para evaluar la capacidad de detección se utiliza un analizador vectorial de redes (VNA, *Vector Network Analyzer*) Rohde & Schwarz (ZVA-24) con extensores para las bandas de frecuencia G (140-220 GHz) y J (220-325 GHz). La potencia de salida del VNA se calibra por medio de un calorímetro PM4 de la firma Erickson Instruments. La señal generada por el extensor de frecuencia se aplica sobre los nanocanales de los SSDs por medio de puntas coplanares de alta frecuencia tipo Cascade Microtech Infinity en la configuración tierra-síñal-tierra (GSG, *ground-signal-ground*). Las pérdidas de transmisión de la puntas se miden por separado para determinar la potencia inyectada en el dispositivo (alrededor de -25dBm). El voltaje detectado en el dispositivo se mide a través de la red de polarización.

La Figura 4 presenta las medidas de la responsividad en función de la frecuencia incluyendo resultados de simulación MC. Experimentalmente, bajo polarización DC nula ($V_0 = 0$), se obtiene una responsividad de 80 V/W para frecuencias menores de 100 GHz y de unos 30 V/W hasta 325 GHz, límite del equipo de medida. No podemos identificar claramente una frecuencia de corte, pero las simulaciones muestran que el dispositivo es todavía operativo a frecuencias por encima de los 600 GHz.

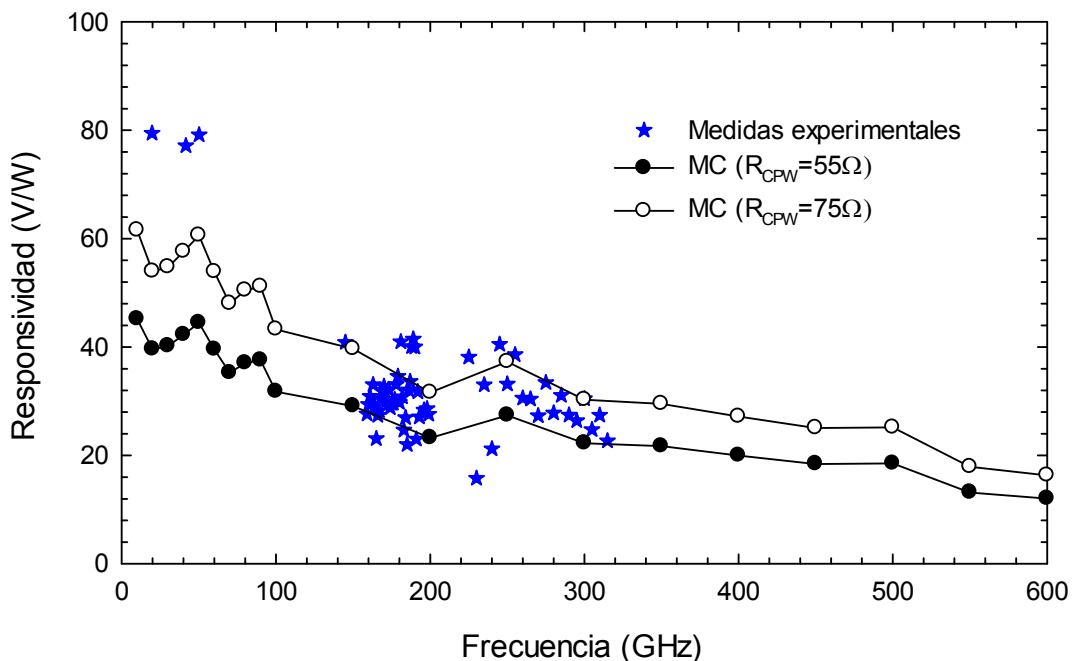


Figura 4. Comparación entre las medidas experimentales y simulaciones MC de la responsividad extrínseca del SSD de GaN cuya característica $I-V$ se muestra en la Figura 3.

Para realizar la comparación de medidas experimentales con resultados de simulaciones MC se ha procedido como se explicó anteriormente. En este caso hemos aplicado señales armónicas $V = V_0 + v_0 \cos \omega t$ de diferente frecuencia sin nivel de continua ($V_0 = 0$) y con $v_0 = 0.25$ V. Inicialmente hemos considerado el valor experimental de $R_{CPW} = 55 \Omega$. Aunque el acuerdo entre medidas experimentales y resultados de simulación es bueno, se observa que los valores MC son algo menores debido a la sobre-estimación de la resistencia en equilibrio (menor pendiente en el origen en la curva $I-V$ de la Figura 3), lo que significa un peor acoplamiento. Por otro lado, si el valor de R_{CPW} fuera aumentado hasta 75Ω , los valores MC serían mayores y el acuerdo mejor. Esto es un claro indicativo de que la responsividad puede aumentarse mejorando el acople de impedancias mediante un diseño correcto de las guías coplanares.

Estos son los primeros resultados experimentales de detección en diodos de GaN. A partir de ellos, mediante simulaciones MC, se está buscando optimizar la geometría. Las líneas principales en las que se está trabajando son:

- i. Reducir la anchura del canal para aumentar la sensibilidad.
- ii. Reducir la longitud del canal para incrementar la frecuencia de corte.
- iii. Analizar la influencia de las dimensiones y el dieléctrico de las zanjas aislantes.
- iv. Estudiar la posible mejora en la detección que se podría lograr aprovechando la no linealidad más acusada que presentan las características $I-V$ a mayores potenciales, en particular, en torno al codo de saturación.
- v. Fabricar *arrays* de SSDs en paralelo y optimizar las guías coplanares.

En lo relativo a reducir la anchura de los canales hay que señalar que mediante la técnica empleada para el grabado de zanjas no se ha conseguido bajar de los 90 nm. Por ello, desde el IEMN se propuso considerar otras alternativas tecnológicas como la implantación iónica con Ar^+ de energía 150 keV.¹⁴⁸

Por último, veamos qué implica la configuración de varios dispositivos en paralelo en cuanto a la posible mejora de varios parámetros de interés relativos a la detección.

Primeramente se ha de señalar que la fabricación de *arrays* de SSDs en paralelo no significa un inconveniente en términos de elementos parásitos

extrínsecos, tan problemáticos a altas frecuencias, pues no requieren interconexiones. Por otro lado, de manera simplificada, podemos asemejar la configuración de diodos en paralelo a un circuito formado por una capacidad C y un resistencia R en paralelo, en el cual la frecuencia de corte está dada por $(2\pi RC)^{-1}$. Así encontramos que esa frecuencia aumentará al disminuir la constante RC , vía la disminución de la resistencia R , asumiendo que la capacidad pueda mantenerse aproximadamente constante mediante una disposición óptima de los dispositivos entre los contactos.

Para cada valor de frecuencia, al pasar de un único SSD a una configuración de N de ellos en paralelo, tenemos una reducción en la resistencia total en un factor N [Figura 5(a)]. En consecuencia, el nivel de corriente aumenta en un factor N y, como el ruido en corriente únicamente se incrementa en un factor \sqrt{N} , se tiene una mejora de la relación señal/ruido en un factor \sqrt{N} .

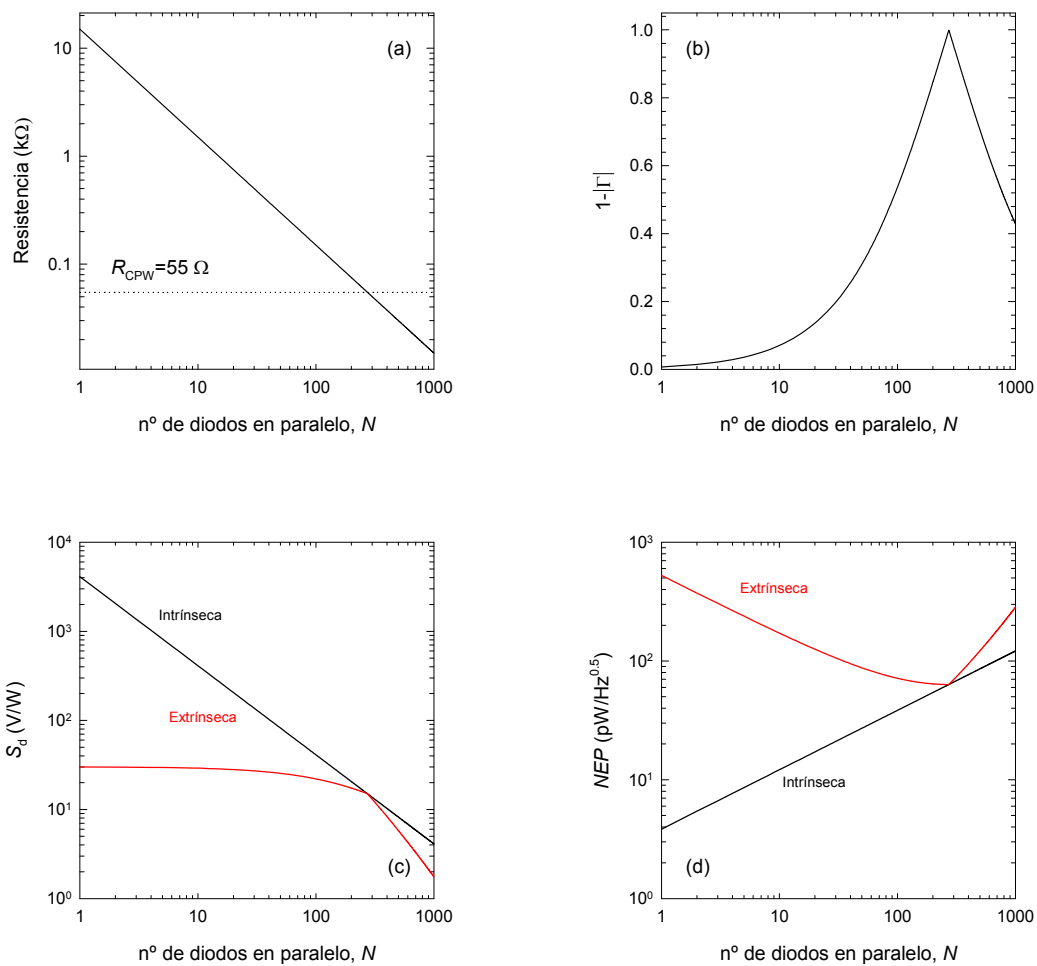


Figura 5. Dependencias teóricas aproximadas de varias magnitudes con el número de SSDs en paralelo. (a) Resistencia equivalente, (b) factor $(1 - |\Gamma|)$, (c) responsividad y (d) NEP, tanto intrínsecas como extrínsecas, considerando para 1 SSD $R_d = 15 \text{ k}\Omega$, responsividad de 30 V/W (a centenas de GHz), $T = 300 \text{ K}$ y $R_{CPW} = 55 \Omega$.

Asimismo, como la resistencia R_d disminuye al aumentar N , tenemos que el factor de corrección por reflexión $(1 - |\Gamma|)$ aumenta [ver la Figura 5(b)], de manera que valdrá la unidad cuando el acople de impedancias sea perfecto. Aunque la responsividad intrínseca S_d^{in} es proporcional a $1/N$ (se necesita una potencia N veces mayor para generar el mismo $\overline{V_{MC}}$), S_d^{ex} se mantiene aproximadamente constante mientras el factor $(1 - |\Gamma|)$ sea suficiente pequeño [Figura 5(c)]. De hecho, analizando la ecuación 9, se encuentra que S_d^{ex} cae un factor 2 para el número de diodos en paralelo que dan lugar a $\Gamma=0$, mientras que a partir de ese valor S_d^{ex} cae como $1/N$ y ya no interesaría incluir más diodos.

Mientras S_d^{ex} sea aproximadamente constante al aumentar N , la principal ventaja de fabricar *arrays* de diodos en paralelo es que NEP^{ex} es proporcional a $1/\sqrt{N}$ (aunque NEP^{in} aumenta con el factor \sqrt{N}), tal y como se observa en la Figura 5(d).

Podemos concluir que la configuración de múltiples SSDs en paralelo resulta muy aconsejable desde el punto de vista de la detección, siempre y cuando la cantidad de dispositivos no sobrepase la situación de acople perfecto de impedancias.

Un último factor a considerar sería la optimización del diseño de las guías coplanares para que el desacople de impedancias sea el menor posible a la frecuencia de interés del detector.¹⁵²

BIBLIOGRAFÍA

- ¹Bryant John H., *Heinrich Hertz, the beginning of microwaves: discovery of electromagnetic waves and opening of the electromagnetic spectrum by Heinrich Hertz in the years 1886-1892* (New York: Institute of Electrical and Electronics Engineers, 1988).
- ²Mueller E. R., “Terahertz Radiation: Applications and Sources”, *The Industrial Physicist, American Institute of Physics* **9**, 27 (2003).
- ³Beard M. C., Turner G. M. and Schmuttenmaer C. A., “Progress toward two-dimensional biomedical imaging with THz spectroscopy”, *Phys. Med. Biol.* **47**, 3841 (2002).
- ⁴Siegel P. H., “Terahertz Technology”, *IEEE Trans. Microwave Theory and Techniques* **50**, 910 (2002).
- ⁵Siegel P. H., “Terahertz Technology in Biology and Medicine”, *IEEE Trans. Microwave Theory and Techniques* **52**, 2438 (2004).
- ⁶Crowe T. W., Bishop W. L., Porterfield D. W., Hesler J. L. and Weikle R. M., “Opening the Terahertz Window With Integrated Diode Circuits”, *IEEE J. Solid-State Circuits* **40**, 2104 (2005).
- ⁷Federici J. F., Schulkin B., Huang F., Gary D., Barat R., Oliveira F. and Zimdars D., “THz imaging and sensing for security applications-explosives, weapons and drugs”, *Semicond. Sci. Technol.* **20**, S266 (2005).
- ⁸Shur M., “Terahertz technology: devices and applications”, Proceedings of the 35th European Solid-State Device Research Conference (ESSDERC), *IEEE*, 13 (2005).

-
- ⁹Mann C., “Practical Challenges for the Commercialisation of Terahertz Electronics”, *IEEE MTT-S Int. Microwave. Symp.*, 1705 (2007).
- ¹⁰Tonouchi M., “Cutting-edge terahertz technology”, *Nature Photon.* **1**, 97 (2007).
- ¹¹Kibis O. V., da Costa M. R. and Portnoi M. E., “Generation of Terahertz Radiation by Hot Electrons in Carbon Nanotubes”, *Nano Lett.* **7**, 3414 (2007).
- ¹²Rangel N. L. and Seminario J. M., “Graphene Terahertz Generators for Molecular Circuits and Sensors”, *J. Phys. Chem. A* **112**, 13699 (2008).
- ¹³Tsujimoto M., Minami H., Delfanazari K., Sawamura M., Nakayama R., Kitamura T., Yamamoto T., Kashiwagi T., Hattori T. and Kadowaki K., “Terahertz imaging system using high- T_c superconducting oscillations devices”, *J. Appl. Phys.* **111**, 123111 (2012).
- ¹⁴Offranc O., “Composants pour la génération et la détection d’impulsions térahertz”, *Tesis Doctoral* (Université des Sciences et Technologies de Lille, 2010).
- ¹⁵Laurent T., “Theoretical and experimental investigation of a new a GaN based solid state terahertz MASER”, *Tesis Doctoral* (Université Montpellier 2, 2010).
- ¹⁶Faist J., Capasso F., Sivco D. L., Sirtori C., Hutchinson A. L. and Cho A. Y., “Quantum Cascade Laser”, *Science* **264**, 553 (1994).
- ¹⁷Varani L, Palermo C., Millithaler J. F., Vaissière J. C., Starikov E., Shiktorov P., Gružinskis V., Mateos J., Pérez S., Pardo D. and González T., “Numerical modeling of TeraHertz electronic devices”, *J. Comput. Electron.* **5**, 71 (2006).
- ¹⁸Keyes R. W., “Logevidad del transistor”, *Investigación y Ciencia* **392**, 41 (2009).
- ¹⁹Fert A., “Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics”, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1517 (2008).
- ²⁰Goldhaber-Gordon D., Montemerlo M. S., Love J. C., Opiteck G. J. and Ellenbogen J. C., “Overview of Nanoelectronics Devices”, *Proceedings of the IEEE* **85**, 521 (1997).
- ²¹Kustov V. L., Ryzhiĭ V. I. and Sigov Yu. S., “Nonlinear plasma instabilities in semiconductors subjected to strong electric fields in the case of inelastic scattering of electrons by optical phonons”, *Sov. Phys. JETP* **52**, 1207 (1980).

-
- ²²Ryzhiĭ V. I., Bannov N. A. and Fedirko V. A., *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* **18**, 769 (1984).
- ²³Starikov E., Shiktorov P., Gružinskis V., Varani L., Palermo C., Millithaler J-F. and Reggiani L., “Terahertz generation in nitrides due to transit-time resonance assisted by optical phonon emission”, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 384209 (2008).
- ²⁴Gunn J. B., “Microwave oscillations of current in III-V semiconductors”, *Solid State Commun.* **1**, 88 (1963).
- ²⁵Alekseev E. and Pavlidis D., “Large-signal microwave performance of GaN-based NDR diode oscillators”, *Solid-State Electron.* **44**, 941 (2000).
- ²⁶Sevik C. and Bulutay C., “Simulation of Millimeter-Wave Gunn Oscillations in Gallium Nitride”, *Turk. J. Phys.* **28**, 369 (2004).
- ²⁷Song A. M., Missous M., Omling P., Peaker A. R., Samuelson L. and Seifert W., “Unidirectional electron flow in a nanometer-scale semiconductor channel: A self-switching device”, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 1881 (2003).
- ²⁸Hao Y., Yang L. A. and Zhang J. C., “GaN-based Semiconductor Devices for Terahertz Technology”, *Terahertz Science and Technology* **1**, 51 (2008).
- ²⁹Starikov E., Shiktorov P., Gružinskis V., Reggiani L., Varani L., Vaissière J. C. and Zhao J. H., “Monte Carlo simulation of the generation of terahertz radiation in GaN”, *J. Appl. Phys.* **89**, 1161 (2001).
- ³⁰Jacoboni C. and Lugli P., *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation* (Springer-Verlag, Wien-New York, 1989).
- ³¹Tomizawa K., *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices* (Artech House, Boston-London, 1993).
- ³²Moglestue C., *Monte Carlo simulation of semiconductor devices* (Chapman & Hall, London-New York, 1993).
- ³³González T., “Análisis del ruido electrónico en materiales y dispositivos semiconductores unipolares mediante el método de Monte Carlo”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 1994).

-
- ³⁴Martín M. J., “Análisis del transporte de carga y de los fenómenos del ruido electrónico en estructuras Si/Si_{1-x}Ge_x bipolares”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 1996).
- ³⁵Mateos J., “Modelización microscópica del ruido electrónico en estructuras MESFET y HEMT submicrométricas. Análisis numérico y experimental.”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 1997).
- ³⁶Rengel R., “Análisis de los fenómenos de transporte y ruido electrónico en transistores MOSFET y SOI submicrométricos”, *Tesis Doctoral* (Universidad de Salamanca, 2002).
- ³⁷Vasallo B. G. “Transporte electrónico en estructuras de heterounión InAlAs/InGaAs: HEMTs y dispositivos balísticos de dimensiones nanométricas”, *Tesis Doctoral* (Universidad de Salamanca, 2005).
- ³⁸Iñiguez-de-la-Torre I. “Análisis de Efectos de Carga Superficial en Nanodispositivos Semiconductores Modelizados Mediante Simulaciones Monte Carlo”, *Tesis Doctoral* (Universidad de Salamanca, 2008).
- ³⁹Rodilla H. “Estudio de HEMTs basados en semiconductores de gap estrecho. Desde los materiales al dispositivo”, *Tesis Doctoral* (Universidad de Salamanca, 2010).
- ⁴⁰Metropolis N., “The beginning of the Monte Carlo method”, *Los Alamos Science* **15**, 125 (1987).
- ⁴¹Eckhardt R., “Stan Ulam, John von Neumann, and the Monte Carlo method”, *Los Alamos Science* **15**, 131 (1987).
- ⁴²Warnock T., “Random-number generators”, *Los Alamos Science* **15**, 137 (1987).
- ⁴³Kurosawa T., Proceedings of the International Conference on the Physics of Semiconductors (Kyoto), *J. Phys. Soc. Japan Suppl. A* **49**, 345 (1966).
- ⁴⁴Kurosawa T., “Monte Carlo calculation of hot electron problems”, *J. Phys. Soc. Japan Suppl.* **21**, 424 (1966).
- ⁴⁵Snowden C. M., *Introduction to semiconductor device modelling* (World Scientific, Singapore, 1986).

-
- ⁴⁶Constant E., “Modelling of sub-micron devices”, in *Solid State Devices*, edited by J.E. Carrol, *IOP Conf. Series* **57**, 141 (1980).
- ⁴⁷Matulionis A., Požela J. and Reklaitis A., “Monte Carlo treatment of electron-electron collisions”, *Solid State Com.* **16**, 1133 (1975).
- ⁴⁸Mansour N. S., Diff K. and Brennan K. F., “Ensemble Monte Carlo study of electron transport in degenerate bulk GaAs”, *J. Appl. Phys.* **70**, 6854 (1991).
- ⁴⁹Ashcroft N. W. and Mermin N. D., *Solid State Physics* (Saunders, Philadelphia, PA, 1976).
- ⁵⁰Nag B. R., *Electron Transport in Compound Semiconductors* (Springer-Verlag, Berlin-New York-Heidelberg, 1980).
- ⁵¹Ferry D. K. and Grondin R. O., *Physics of Submicron Devices* (Plenum Press, New York, 1991).
- ⁵²Mateos J., González T., Pardo D., Hoel V., Happy H. and Cappy A., “Improved Monte Carlo Algorithm for the Simulation of δ -Doped AlInAs/GaInAs HEMTs”, *IEEE Trans. Electron Devices* **47**, 250 (2000).
- ⁵³Kemerley R. T., Wallace H. B. and Yoder M. N., “Impact of Wide Bandgap Microwave Devices on DoD Systems”, *Proceedings of the IEEE* **90**, 1059 (2002).
- ⁵⁴Foutz B. E., O’Leary S. K., Shur M. S. and Eastman L. F., “Transient electron transport in wurtzite GaN, InN, and AlN”, *J. Appl. Phys.* **85**, 7727 (1999).
- ⁵⁵Goano M., Bellotti E., Ghillino E., Ghione G. and Brennan K. F., “Band structure nonlocal pseudopotential calculation of the III-nitride wurtzite phase materials system. Part I. Binary compounds GaN, AlN, and InN”, *J. Appl. Phys.* **88**, 6467 (2000).
- ⁵⁶Madelung O., *Semiconductors: Data Handbook* (Springer, Berlin, 2004).
- ⁵⁷Barker J. M., Akis R., Ferry D. K., Goodnick S. M., Thornton T. J., Koleske D. D., Wickenden A. E. and Henry R. L., “High-field transport studies of GaN”, *Physica B* **314**, 39 (2002).

-
- ⁵⁸Barker J. M., Ferry D. K., Koleske D. D. and Shul R. J., “Bulk GaN and AlGaN/GaN heterostructure drift velocity measurements and comparison to theoretical models”, *J. Appl. Phys.* **97**, 063705 (2005).
- ⁵⁹Hockney R. W. and Eastwood J. W., *Computer simulation using particles* (IOP, Bristol, 1988).
- ⁶⁰Tiwari S., *Compound semiconductor device physics* (Academic Press, New York, 1992).
- ⁶¹González T. and Pardo D., “Physical models of ohmic contact for Monte Carlo device simulation”, *Solid-State Electron.* **39**, 555 (1996).
- ⁶²Press W. H., Flannery B. P., Teukolski S. A. and Vetterling W. T., *Numerical recipes. The art of scientific computing* (Cambridge University Press, New York, 1989).
- ⁶³Mateos J., González T., Pardo D., Hoël V. and Cappy A., “Monte Carlo Simulator for the Design Optimization of Low-Noise HEMTs”, *IEEE Trans. Electron Devices* **47**, 1950 (2000).
- ⁶⁴Mateos J., Pérez S., Pardo D. and González T., “Monte Carlo analysis of thermal effects in GaN HEMTs”, Proceedings of the 7th Spanish Conference on Electron Devices (CDE), *IEEE Catalog CFP09589*, 459 (2009).
- ⁶⁵Mateos J., Pérez S., Cuerdo R., Muñoz E., Calle F. and González T., “Monte Carlo Simulation of GaN HEMTs: Influence of GaN p-type Doping and High Temperature of Operation”, Proceedings of the 33rd Workshop on Compound Semiconductor Devices and Integrated Circuits (WOCSDICE), 2009.
- ⁶⁶Mateos J., Pérez S., Pardo D. and González T., “High Frequency Noise in GaN HEMTs”, Proceedings of the 20th International Conference on Noise and Fluctuations (ICNF), *AIP Conference Proceedings* **1129**, 237 (2009).
- ⁶⁷Rodilla H., González T., Pardo D. and Mateos J., “High-mobility heterostructures based on InAs and InSb: A Monte Carlo study”, *J. Appl. Phys.* **105**, 113705 (2009).
- ⁶⁸Rodilla H., González T., Moschetti G., Grahn J. and Mateos J., “Dynamic Monte Carlo study of isolated-gate InAs/AlSb HEMTs”, *Semicond. Sci. Technol.* **26**, 025004 (2011).

-
- ⁶⁹González T., Vasallo B. G., Pardo D. and Mateos J., “Room temperature nonlinear transport in ballistic nanodevices”, *Semicond. Sci. Technol.* **19**, S125 (2004).
- ⁷⁰Mateos J., Vasallo B. G., Pardo D., González T., Pichonat E., Galloo J. -S., Bollaert S., Roelens Y. and Cappy A., “Nonlinear Effects in T-Branch Junctions”, *IEEE Electron Device Lett.* **25**, 235 (2004).
- ⁷¹Iñiguez-de-la-Torre I., Mateos J., González T., Pardo D., Galloo J. S., Bollaert S., Roelens Y. and Cappy A., “Influence of the surface charge on the operation of ballistic T-branch junctions: a self-consistent model for Monte Carlo simulations”, *Semicond. Sci. Technol.* **22**, 663 (2007).
- ⁷²Iñiguez-de-la-Torre I., González T., Pardo D., Gardès C., Roelens Y., Bollaert S. and Mateos J., “Influence of the branches width on the nonlinear output characteristics of InAlAs/InGaAs-based three-terminal junction”, *J. Appl. Phys.* **105**, 094504 (2009).
- ⁷³Kaushal V., Iñiguez-de-la-Torre I., Irie H., Guarino G., Donaldson W. R., Ampadu P., Sobolewski R. and Margala M., “A Study of Geometry Effects on the Performance of Ballistic Deflection Transistor”, *IEEE Trans. Nanotechnol.* **9**, 723 (2010).
- ⁷⁴Mateos J., Vasallo B. G., Pardo D. and González T., “Operation and high-frequency performance of nanoscale unipolar rectifying diodes”, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 212103 (2005).
- ⁷⁵Iñiguez-de-la-Torre I., González T., Rodilla H., Vasallo B. G. and Mateos J., *Monte Carlo Simulation of Room Temperature Ballistic Nanodevices, Applications of Monte Carlo Method in Science and Engineering* (Ed. Mordechai S., *InTech*, 2011).
- ⁷⁶Ramo S., “Currents induced by electron motion”, *Proc. IRE* **27**, 584 (1939).
- ⁷⁷Shockley W., “Currents to conductors induced by a moving point charge”, *J. Appl. Phys.* **9**, 635 (1938).
- ⁷⁸De Visschere P., “The validity of Ramo’s theorem”, *Solid-State Electron.* **33**, 455 (1990).
- ⁷⁹Kim H., Min H. S., Tang T. W. and Park Y. J., “An extended proof of the Ramo-Shockley theorem”, *Solid-State Electron.* **34**, 1251 (1991).

- ⁸⁰Babiker S., Asenov A., Cameron N., Beaumont S. P. and Barker J. R., “Complete Monte Carlo RF Analysis of “Real” Short-Channel Compound FET’s”, *IEEE Trans. Electron Devices* **45**, 1644 (1998).
- ⁸¹Yoder P. D., Gärtner K. and Fichtner W., “A generalized Ramo-Shockley theorem for classical to quantum transport at arbitrary frequencies”, *J. Appl. Phys.* **79**, 1951 (1996).
- ⁸²Yoder P. D., Gärtner K., Krumbein U. and Fichtner W., “Optimized Terminal Current Calculation for Monte Carlo Device Simulation”, *IEEE Trans. Computer-Aided Design* **16**, 1082 (1997).
- ⁸³Jefimenko O. D., *Electricity and Magnetism* (Appleton-Century-Crofts, New York, 1966).
- ⁸⁴Shannon C. E., “Communication in the presence of noise”, *Proc. IRE* **37**, 10, (1949). Reprint as Classic Paper in: *Proc. IEEE* **86**, 447 (1998).
- ⁸⁵Sevik C. and Bulutay C., “Gunn Oscillations in GaN channels”, *Semicond. Sci. Technol.* **19**, S188 (2004).
- ⁸⁶Sevik C. and Bulutay C., “Efficiency and harmonic enhancement trends in GaN-based Gunn diodes: Ensemble Monte Carlo analysis”, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 3908 (2004).
- ⁸⁷Macpherson R. F. and Dunn G. M., “The use of doping spikes in GaN Gunn diodes”, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 062103 (2008).
- ⁸⁸Shiktorov P., Gružinskis V., Starikov E., Reggiani L. and Varani L., “A novel GaAs structure for terahertz generators driven by plasma instability”, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 1331 (1997).
- ⁸⁹Íñiguez-de-la-Torre A., Mateos J. and González T., “Terahertz current oscillations assisted by optical phonon emission in GaN n^+nn^+ diodes: Monte Carlo simulations”, *J. Appl. Phys.* **107**, 053707 (2010).
- ⁹⁰Jackson J. D., *Electrodinámica Clásica* (Ed. Alhambra, Madrid, 1980).
- ⁹¹Dendy R. O., *Plasma Dynamics* (Oxford University Press, New York, 1990).
- ⁹²Bonch-Bruевич V. L. and El-Shamuby M. A., *Vestn. Moscow State Univ.* **13**, 616 (1972).

- ⁹³Andronov A. A. and Kozlov V. A., “Low-temperature Negative Differential Microwave Conductivity in Semiconductors Following Elastic Scattering of Electrons”, *JETP Lett.* **17**, 87 (1973).
- ⁹⁴Gulyaev Yu. V. and Chusov I. I., “High-frequency effects in semiconductors at strongly anisotropic distribution of electrons”. *Fiz. Tverd. Tela* **20**, 2637 (1978).
- ⁹⁵Matulis A. and Chenis A., “Differential conductivity of semiconductors with elastic scattering of electrons”, *Sov. Phys. JETP* **50**, 572 (1979).
- ⁹⁶Brennan K. and Hess K., “High field transport in GaAs, InP and InAs”, *Solid-State Electron.* **27**, 347 (1984).
- ⁹⁷Starikov E., Shiktorov P., Gružinskis V., Reggiani L., Varani L., Vaissière J. C. and Zhao J. H., “Monte Carlo Simulation of THz Maser Based on Optical Phonon Transit Time Resonance in GaN”, *IEEE Trans. Electron Devices* **48**, 438 (2001).
- ⁹⁸Starikov E., Shiktorov P., Gružinskis V., Reggiani L., Varani L. and Vaissière J. C., “Terahertz Generation from Dynamic Free-Carrier Superlattice in n^+nn^+ InN Structures”, *J. Comput Electron.* **2**, 465 (2003).
- ⁹⁹Gružinskis V., Shiktorov P., Starikov E., Reggiani L., Varani L. and Vaissière J. C., “Free-carrier grating and terahertz generation from InN n^+nn^+ structures under streaming plasma instability”, *Semicond. Sci. Technol.* **19**, S173 (2004).
- ¹⁰⁰Gružinskis V., Starikov E. and Shiktorov P., “Small and Large Signal Analysis of Terahertz Generation from InN n^+nn^+ Structures with Free-Carrier Grating”, *Acta Phys. Polon. A* **107**, 163 (2005).
- ¹⁰¹Gružinskis V., Starikov E. and Shiktorov P., “Free-carrier grating due to the optical phonon emission in InP n^+nn^+ structures”, *J. Comput. Electron.* **6**, 11 (2007).
- ¹⁰²Gružinskis V., Shiktorov P. and Starikov E., “Plasma Instability Noise in InP n^+nn^+ Structures: Monte Carlo simulation”, *Acta Phys. Polon. A* **113**, 947 (2008).
- ¹⁰³Starikov E., Shiktorov P., Gružinskis V., Varani L., Palermo C., Sabatini G., Marinchio H., Laurent T. and Reggiani L., “Anomalous behavior of electronic

- noise related to the onset of current instabilities in n^+nn^+ diodes”, *J. Stat. Mech.* P01035 (2009).
- ¹⁰⁴Katayama Y. and Komatsubara K. F., “Oscillatory Tunnel Conductance Induced by Longitudinal Optic Phonons in InSb-Oxide-Metal Structure”, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1421 (1967).
- ¹⁰⁵Hickmott T. W., Solomon P. M., Fang F. F., Stern F., Fischer R. and Morkoç H., “Sequential Single-Phonon Emission in GaAs-Al_xGa_{1-x}As Tunnel Junctions”, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 2053 (1984).
- ¹⁰⁶Lu P.-F., Tsui D. C. and Cox H. M., “Optical-Phonon Emission in Ballistic Transport through Microchannels of InGaAs”, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1563 (1985).
- ¹⁰⁷Lu P.-F., Tsui D. C. and Cox H. M., “LO-phonon oscillations and electron freeze-out in transport through In-InP and Sn-InP contacts”, *Phys. Rev. B* **35**, 9659 (1987).
- ¹⁰⁸Vorob’ev L. E., Danilov S. N., Tulupenko V. N. and Firsov D. A., “Generation of Millimeter Radiation Due to Electric-Field-Induced Electron-Transit-Time Resonance in Indium Phosphide”, *JETP Lett.* **73**, 219 (2001).
- ¹⁰⁹Gružinskis V., Shiktorov P. and Starikov E., “Analysis of Conditions for Free-Carrier Grating Formation in InP n^+nn^+ Structures using Monte Carlo Technique”, *Acta Phys. Polon. A* **103**, 943 (2008).
- ¹¹⁰Ridley B. K. and Watkins T. B., “The Possibility of Negative Resistance Effects in Semiconductors”, *Proc. Phys. Soc.* **78**, 293 (1961).
- ¹¹¹Hilsum C., “Transferred Electron Amplifiers and Oscillators”, *Proceedings of the IRE* **50**, 185 (1962).
- ¹¹²Ridley B. K., “Specific Negative Resistance in Solids”, *Proc. Phys. Soc.* **82**, 954 (1963).
- ¹¹³Kroemer H., “Theory of the Gunn effect”, *Proceedings of the IEEE (Correspondence)* **52**, 1736 (1964).
- ¹¹⁴Butcher P. N., Fawcett W. and Hilsum C., “A simple analysis of stable domain propagation in the Gunn effect”, *Brit. J. Appl. Phys.* **17**, 841 (1966).

-
- ¹¹⁵Butcher P. N., “The Gunn effect”, *Rep. Prog. Phys.* **30**, 97 (1967).
- ¹¹⁶Kurokawa K., “Some Basic Characteristics of Broadband Negative Resistance Oscillator Circuits”, *The Bell System Technical Journal* **48**, 1937 (1969).
- ¹¹⁷Sze S. M. and K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices* (Ed. Wiley-Interscience, New Jersey, 2007).
- ¹¹⁸Brophy J. J., *Basic electronics for scientists* (McGraw-Hill, New York, 1972).
- ¹¹⁹Solymar L. and Walsh D., *Electrical Properties of Materials* (Oxford University Press, New York, 2010).
- ¹²⁰Yu P. Y. and Cardona M., *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties* (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2010).
- ¹²¹Esaki L., “New Phenomenon in Narrow Germanium p - n Junctions”, *Phys. Rev.* **109**, 603 (1958).
- ¹²²Torrens A. B., “Negative differential conductivity effects in semiconductors”, *Tesis Doctoral* (University of British Columbia, 1969).
- ¹²³Pardo D. y Bailón L.A., *Elementos de Electrónica* (Universidad de Valladolid, 1999).
- ¹²⁴Millithaler J. F., “Modélisation de la génération TeraHertz dans des dispositifs nanométriques”, *Tesis Doctoral* (Université Montpellier 2, 2006).
- ¹²⁵Yilmazoglu O., Mutamba K., Pavlidis D. and Karaduman T., “First Observation of Bias Oscillations in GaN Gunn Diodes on GaN Substrate”, *IEEE Trans. Electron Devices* **55**, 1563 (2008).
- ¹²⁶Balocco C., Song A. M., Åberg M., Forchel A., González T., Mateos J., Maximov I., Missous M., Rezazadeh A. A., Saijets J., Samuelson L., Wallin D., Williams K., Worschech L. and Xu H. Q., “Microwave Detection at 110 GHz by Nanowires with Broken Symmetry”, *Nano Lett.* **5**, 1423 (2005).
- ¹²⁷Iñiguez-de-la-Torre I., Mateos J., Pardo D. and González T., “Monte Carlo analysis of noise spectra in self-switching nanodiodes”, *J. Appl. Phys.* **103**, 024502 (2008).

- ¹²⁸Xu K. Y., Lu X. F., Song A. M. and Wang G., “Terahertz harmonic generation using a planar nanoscale unipolar diode at zero bias”, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 163503 (2008).
- ¹²⁹Íñiguez-de-la-Torre I., Mateos J., Pardo D., Song A. M. and González T., “Noise and terahertz rectification linked by geometry in planar asymmetric nanodiodes” *Appl. Phys. Lett.* **94**, 093512 (2009).
- ¹³⁰Xu K. Y., Lu X. F., Song A. M. and Wang G. “Enhanced terahertz detection by localized surface plasma oscillations in a nanoscale unipolar diode”, *J. Appl. Phys.* **103**, 113708 (2008).
- ¹³¹Xu K. Y., Lu X. F., Wang G. and Song A. M. “Strong Spatial Dependence of Electron Velocity, Density, and Intervalley Scattering in an Asymmetric Nanodevice in the Nonlinear Transport Regime”, *IEEE Trans. Nanotechnol.* **4**, 451 (2008).
- ¹³²Íñiguez-de-la-Torre I., Mateos J., Pardo D., Song A. M. and González T., “Enhanced Terahertz detection in self-switching diodes”, *Int. J. Numer. Model.: Electron. Netw., Devices and Fields* **23**, 301 (2009).
- ¹³³Íñiguez-de-la-Torre I., Rodilla H., Mateos J., Pardo D., Song A. M. and González T., “Terahertz tuneable detection in self-switching diodes based on high mobility semiconductors: InGaAs, InAs and InSb”, *J. Phys.: Conf. Series* **193**, 012082 (2009).
- ¹³⁴Balocco C., Kasjoo S. R., Xiaofeng F. Lu, Zhang L. Q., Alimi Y., Winnerl S. and Song A. M., “Room-temperature operation of a unipolar nanodiode at terahertz frequencies”, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 223501, (2011).
- ¹³⁵Balocco C., Halsall M., Vinh N. Q. and Song A. M., “THz operation of asymmetric-nanochannel devices”, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 384203 (2008).
- ¹³⁶Balocco C., Kasjoo S. R., Zhang L. Q., Alimi Y. and Song A. M., “Low-frequency noise of unipolar nanorectifiers”, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 113511 (2011).
- ¹³⁷Åberg M., Saijets J., Song A. M. and Prunnila M., “Simulation and Modeling of Self-switching Devices”, *Physica Scripta* **T114**, 123 (2004).

- ¹³⁸Farhi G., Saracco E., Beerens J., Morris D., Charlebois S. A. and Raskin J.-P., “Electrical characteristics and simulations of self-switching-diodes in SOI technology”, *Solid-State Electron.* **51**, 1245 (2007).
- ¹³⁹Farhi G., Morris D., Charlebois S. A. and Raskin J.-P., “The impact of etched trenches geometry and dielectric material on the electrical behaviour of silicon-on-insulator self-switching diodes”, *Nanotechnology* **22**, 435203 (2011).
- ¹⁴⁰Kettle J., Whitelegg S., Song A. M., Madec M. B., Yeates S., Turner M. L., Kotacka L. and Kolarik V., “Fabrication of poly(3-hexylthiophene) self-switching diodes using thermal nanoimprint lithography and argon milling”, *J. Vac. Sci. Technol. B* **27**, 2801 (2009).
- ¹⁴¹Irshaid Mustafa Y., Balocco C., Luo Y., Bao P., Brox-Nilsen C. and Song A. M., “Zinc-oxide-based planar nanodiodes operating at 50 MHz”, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 092101 (2011).
- ¹⁴²Xu K. Y., Wang G. and Song A. M., “Gunn oscillations in a self-switching nanodiode”, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 233506 (2008).
- ¹⁴³González T., Iñiguez-de-la-Torre I, Pardo D., Mateos J. and Song A. M. “Gunn Oscillations in Asymmetric Nanodiodes Based on Narrow and Wide Band-Gap Semiconductors: Monte Carlo Simulations”, *Proceedings* of the 33rd Workshop on Compound Semiconductor Devices and Integrated Circuits (WOCSDICE), 2009.
- ¹⁴⁴González T., Iñiguez-de-la-Torre I, Pardo D., Mateos J. and Song A. M., “Monte Carlo analysis of Gunn oscillations in narrow and wide band-gap asymmetric nanodiodes”, *J. Phys.: Conf. Series* **193**, 012018 (2009).
- ¹⁴⁵González T., Iñiguez-de-la-Torre I, Pardo D, Song A. M. and Mateos J., “THz Generation Based on Gunn Oscillations in GaN Planar Asymmetric Nanodiodes”, 22nd International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (IPRM), *IEEE*, (2010).
- ¹⁴⁶Iñiguez-de-la-Torre A., Iñiguez-de-la-Torre I, Mateos J., González T., Sangaré P., Faucher M., Grimbert B., Brandli V., Ducournau G. and Gaquière C., “Searching for THz Gunn oscillations in GaN planar nanodiodes”, *J. Appl. Phys.* **111**, 113705 (2012).

- ¹⁴⁷Íñiguez-de-la-Torre A., Íñiguez-de-la-Torre I, Mateos J. and González T., “Correlation between low-frequency current-noise enhancement and high-frequency oscillations in GaN-based planar nanodiodes: A Monte Carlo study”, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 062109 (2011).
- ¹⁴⁸Sangaré P., Ducournau G., Grimbert B., Brandli V., Faucher M., Gaquière C., Íñiguez-de-la-Torre A., Íñiguez-de-la-Torre I., Millithaler J. F., Mateos J. and González T., “Experimental Demonstration of Direct Terahertz Detection at Room-Temperature in AlGaIn/GaN Asymmetric Nanochannels”. *Nano Lett.* Enviado para su publicación (2012).
- ¹⁴⁹Sadi T., Dessenne F. and Thobel J.-L., “Three-dimensional Monte Carlo study of three-terminal junctions based on InGaAs/InAlAs heterostructures”, *J. Appl. Phys.* **105**, 053707 (2009).
- ¹⁵⁰Starikov E., Shiktorov P., Gružinskis V., Reggiani L., Varani L. and Vaissière J. C., “Noise Enhancement as Indicator of Instability Onset in Semiconductor Structures”, Proceedings of the 18th International Conference on Noise and Fluctuations (ICNF), *AIP Conference Proceedings* **780**, 791 (2005).
- ¹⁵¹Shiktorov P., Starikov E., Gružinskis V., Varani L. and Reggiani L., “Giant enhancement of low-frequency noise as precursor for the onset of a high-frequency instability”, Proceedings of the 20th International Conference on Noise and Fluctuations (ICNF), *AIP Conference Proceedings* **1129**, 179 (2009).
- ¹⁵²Bednarz L., Rashmi, Farhi G., Hackens B., Bayot V. and Huynen I., “Solutions for input impedance matching of nanodevices: Application to Y-branch junction HF to DC rectifier”, *1st European Microwave Integrated Circuits Conference*, 5 (2006).

VNIVERSITAS
STVDII
SALAMANTINI

