

**VNiVERSiDAD
D SALAMANCA**
FACULTAD DE CiENCIAS



DEPARTAMENTO DE FÍSICA APLICADA

**Análisis de Efectos de Carga Superficial en
Nanodispositivos Semiconductores Modelizados
Mediante Simulaciones Monte Carlo**

TESIS DOCTORAL

Ignacio Íñiguez de la Torre Mulas

Salamanca, 2008

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

y

D. Javier Mateos López, Profesor Titular de Electrónica del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Salamanca,

CERTIFICAN:

Que el trabajo de investigación que se recoge en la presente Memoria, titulada *Análisis de Efectos de Carga Superficial en Nanodispositivos Semiconductores Modelizados Mediante Simulaciones Monte Carlo*, y presentada por **Ignacio 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 11 de Julio de 2008

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

Javier Mateos López
Profesor Titular de Electrónica
Departamento de Física Aplicada
Universidad de Salamanca

A mis padres, a mi hermana

AGRADECIMIENTOS

Antes de comenzar la presente Memoria, quisiera expresar mi más sincero agradecimiento a todos aquellos que de alguna manera han contribuido al desarrollo de esta Tesis:

A los directores de la misma, Tomás González Sánchez y Javier Mateos López por sus constantes consejos, dedicación y ayuda a nivel científico, así como por el trato cordial que me han brindado. Su rigor, capacidad de análisis, claridad y orden de ideas han sido modelos a imitar en el desarrollo de mi trabajo.

A Daniel Pardo Collantes cuyos generosos esfuerzos y entusiasmo por mi trabajo han supuesto una motivación adicional y un continuo impulso para la realización del mismo.

A los integrantes del grupo Anode (*Advanced Nanometric DEvices*) del IEMN de Lille (Francia). En especial a Yannick Roelens, Sylvain Bollaert y Cyrille Gardès por hacer fructífera mi estancia en su laboratorio, así como por sus siempre acertadas sugerencias científicas.

Tengo también el placer de agradecer al profesor Aimin Song de la Universidad de Manchester sus interesantes discusiones durante los últimos meses de este trabajo. Agradezco también su amabilidad al aceptarme como invitado para realizar una estancia en su laboratorio justo después de la finalización de mi Tesis.

A los demás compañeros del Área de Electrónica, Susana Pérez, Raúl Rengel, María Jesús Martín, Beatriz García Vasallo, Elena Pascual, Enrique Velázquez, Pedro Manuel Gutiérrez, y en especial a Helena Rodilla (gracias por los *descansos* en la máquina o en el Fray Luis) por la buena atmósfera que ha facilitado enormemente todo el trabajo. Al resto de miembros del Departamento de Física Aplicada,

especialmente a los de las Áreas de Electromagnetismo y de Física de la Materia Condensada, tanto por su ayuda científica como por su amistad, que han hecho agradable mi labor durante este tiempo.

Por último, tengo también que acordarme de todos los compañeros de la *grupeta*, que de una forma u otra han estado siempre apoyándome en este particular *Tour*. Usando el argot del ciclismo, en el transcurso de estos años ha habido momentos en los que todo rodaba viento a favor, otros con *viento lateral* (que no neutro),¹ e incluso ha habido que superar algún *horse categorie*, pero con vuestro ánimo todo me ha resultado más llevadero.

Agradecimiento que hago extensivo a mi familia y amig@s, que han tenido que soportar las consecuencias, a veces poco menos que traumáticas, de mi entusiasmo por esta Tesis.

ÍNDICE

INTRODUCCIÓN	1
<hr/>	
CAPÍTULO PRIMERO	
Nanodispositivos semiconductores: efectos balísticos y de carga superficial	9
<hr/>	
I.1. TRANSPORTE ELECTRÓNICO Y EFECTOS DE SUPERFICIE	10
I.1.1. Transporte electrónico	10
I.1.1.a. Transporte difusivo	10
I.1.1.b. Transporte balístico	12
I.1.2. Efectos de superficie	12
I.2. NANODISPOSITIVOS Y APLICACIONES	14
I.2.1. Revisión de nanodispositivos	14
I.2.1.a. Rectificadores de cuatro terminales	14
I.2.1.b. Uniones de tres terminales	17
I.2.1.c. Diodos autoconmutantes	23
I.2.1.d. Diodos de memoria	27
I.2.2. Simulaciones Monte Carlo de nanodispositivos	28
I.2.2.a. Implementación en un simulador	29
I.2.2.b. Significado y efecto de la carga superficial	30
I.2.2.c. Transporte en canales balísticos	33
I.2.2.d. Rectificador con obstáculo triangular	34
I.2.2.e. Multiplexor/Demultiplexor	35
I.2.2.f. Uniones de tres terminales en forma de T e Y	36

I.2.2.g. Diodos autoconmutantes	37
I.3. HETEROESTRUCTURAS III–V DE ALTA MOVILIDAD	38
I.3.1. Capas y estructura de bandas	38
I.3.2. Gas bidimensional	40
I.3.3. Optimización de los parámetros de la heteroestructura	40
I.4. PROCESOS TECNOLÓGICOS Y CARACTERIZACIÓN DE NANODISPOSITIVOS	42
I.4.1. Epitaxia	42
I.4.2. Descripción del proceso tecnológico	43
I.4.3. Caracterización estática y dinámica	47
I.4.4. Problemas y dificultades tecnológicas	48
I.4.4.a. Capacidades parásitas y alta impedancia	49
I.4.4.b. Adaptación de impedancias	50
 CAPÍTULO SEGUNDO	
Método de Monte Carlo. Modelo de carga superficial	53
<hr/>	
II.1. ¿POR QUÉ? ¿EN QUÉ CONSISTE?	54
II.2. GENERALIDADES DEL SIMULADOR MONTE CARLO DE DISPOSITIVOS	55
II.2.1. Sistema físico, parámetros y condiciones iniciales	55
II.2.2. Mecanismos de scattering	61
II.2.3. Dinámica de portadores	63
II.2.4. Inyección. Modelo físico de los contactos	66
II.2.4.a. Distribución de velocidades	66
II.2.4.b. Estadística de inyección	68
II.2.5. Ecuación de Poisson. Condiciones de contorno	70
II.2.5.a. Método de diferencias finitas	70
II.2.5.b. Condiciones de contorno	72
II.2.6. Cálculo de magnitudes	76
II.3. CARGA SUPERFICIAL. MODELOS	79
II.3.1. Modelo de carga superficial constante	79

Índice	iii
<hr/>	
II.3.1.a. Estimación del vaciamiento lateral	79
II.3.1.b. Problemas del modelo de carga constante	81
II.3.2. Modelo auto-consistente de carga superficial	82
II.3.2.a. Filosofía y necesidad del modelo	82
II.3.2.b. Implementación y diagrama de flujo	82
II.3.2.c. Refinado del modelo. Procesos túnel y efectos de memoria	87
II.4. ANÁLISIS DEL RUIDO	90
II.4.1. Magnitudes básicas	90
II.4.1.a. Función de autocorrelación	90
II.4.1.b. Densidad espectral	91
II.4.2. Mecanismos causantes del ruido	92
II.4.3. Circuito equivalente	94
 CAPÍTULO TERCERO	
Uniones de tres terminales en forma de T	97
<hr/>	
III.1. GEOMETRÍA DEL DISPOSITIVO. MOTIVACIÓN	99
III.1.1. Topología	99
III.1.2. Configuración de polarización	99
III.1.3. Accesos a los dispositivos y condiciones de simulación	100
III.1.4. Resultados previos	103
III.2. MEDIDAS EXPERIMENTALES. PROBLEMAS DEL MODELO DE CARGA SUPERFICIAL CONSTANTE	107
III.2.1. Dispositivos fabricados	107
III.2.2. Resultados experimentales	108
III.2.3. Simulaciones con el modelo de carga superficial constante	109
III.3. RESULTADOS CON EL MODELO AUTO-CONSISTENTE DE CARGA SUPERFICIAL	113
III.3.1. Influencia de los parámetros del modelo	113
III.3.2. Aspectos técnicos del modelo	116
III.3.3. Resultados del modelo auto-consistente	118
III.3.3.a. Simulaciones Monte Carlo	118
III.3.3.b. Comparación con medidas experimentales	119

III.3.3.c. Influencia de la rama vertical	120
III.3.3.d. Perfiles horizontales de potencial, concentración y cargas superficiales	123
III.3.3.e. Perfiles verticales de potencial y concentración	126
III.3.3.f. Explicación teórica de los resultados	129
III.3.3.g. Cargas superficiales	130
III.3.4. Influencia de las dimensiones de la rama horizontal	133
III.4. RESPUESTA EN FRECUENCIA	136
III.4.1. Uniones con rama horizontal estrecha	136
III.4.1.a. Baja frecuencia. Mezclado de señales	136
III.4.1.b. Simulaciones a alta frecuencia. Doblador y detector de fase	144
III.4.2. Uniones con rama horizontal ancha	150
 CAPÍTULO CUARTO	
Diodos autoconmutantes	157
<hr/>	
IV.1. COMPORTAMIENTO ESTÁTICO	159
IV.1.1. Principio de funcionamiento	159
IV.1.1.a. Características $I-V$	160
IV.1.1.b. Mapas de potencial. Barreras	162
IV.1.2. Indicaciones de diseño	164
IV.2. COMPORTAMIENTO DINÁMICO	169
IV.2.1. Respuesta en frecuencia del SSD. Máximo en la rectificación	169
IV.2.2. Anchura de la zanja vertical	172
IV.2.3. Permitividades dieléctricas de las zanjas	180
IV.2.4. Anchura de la zanja horizontal	182
IV.3. ANÁLISIS DEL RUIDO	184
IV.3.1. Análisis microscópico	185
IV.3.1.a. Barreras de potencial	185
IV.3.1.b. Ruido <i>shot</i> y térmico	186
IV.3.1.c. Temperatura de ruido	187
IV.3.1.d. Ocupación del valle L	188
IV.3.1.e. Influencia de la anchura del canal	189

Índice	v
<hr/>	
IV.3.2. Densidad espectral a alta frecuencia	190
IV.3.2.a. Ruido en corriente y función de autocorrelación	190
IV.3.2.b. Influencia de la geometría. Optimización del escalado	192
IV.3.3. Fluctuaciones de plasma y <i>returning carriers</i>	200
IV.3.4. Circuito Equivalente	208
IV.4. OTRAS ESTRUCTURAS BASADAS EN SSDs	213
IV.4.1. <i>Self-Switching Transistor</i>	213
IV.4.2. Puerta lógica	214
IV.4.3. SSD de Silicio	215
CAPÍTULO QUINTO	
Diodos de memoria	217
<hr/>	
V.1. RESULTADOS EXPERIMENTALES	218
V.1.1. Efecto memoria	218
V.1.2. Aplicaciones y principio de funcionamiento	219
V.2. SIMULACIONES MONTE CARLO	223
V.2.1. Histéresis en las características $I-V$	223
V.2.2. Análisis microscópico	227
V.2.3. Influencia de la geometría	230
CONCLUSIONES	233
<hr/>	
BIBLIOGRAFÍA	241
<hr/>	
<hr/>	

INTRODUCCIÓN

En los últimos años la Nanoelectrónica² ha pasado a ocupar un papel muy importante dentro de la investigación científica. Ya en 1959, en una reunión de la Sociedad Americana de Física (APS), Richard P. Feynman^{*} predijo las nuevas y fascinantes aplicaciones que aparecerían como consecuencia del estudio de la Física en dimensiones nanométricas, y no sólo en la Física sino también en casi todas las ramas de la Ciencia.³ De acuerdo con la definición de la Royal Society, la Nanociencia⁴ es el estudio de los fenómenos y manipulación de materiales a escala atómica o nanométrica,[†] cuyas propiedades difieren sustancialmente de las que poseen a escala macroscópica. En las últimas décadas el avance de la Nanotecnología[‡] ha hecho posible la fabricación de un gran número de dispositivos de todo tipo, cuyo funcionamiento está basado en fenómenos físicos directamente relacionados con el carácter de su tamaño nanométrico. Sirva como ejemplo el premio Nobel de Física del 2007[§], otorgado a los descubridores de la Magnetoresistencia Gigante, la cual es sin duda la primera aplicación directa derivada de lo inherente a lo “nano”, y que está presente en la totalidad de los actuales dispositivos de lectura magnética. Ya dentro del campo de la Electrónica,

^{*} El 29 de diciembre de 1959 Richard P. Feynman pronunció en el Caltech (Instituto Tecnológico de California), el célebre discurso titulado “*There's Plenty Room at the Bottom*” que hace referencia a las posibilidades de la Nanociencia, afirmando que ésta permitiría escribir “los 24 volúmenes de la Enciclopedia Británica en la cabeza de un alfiler”.

[†] En función de si usamos una definición más fuerte o más suave en el límite de las dimensiones.

[‡] El término Nanotecnología fue usado como tal por primera vez por el profesor Norio Taniguchi de la Universidad de Ciencia de Tokio en el artículo “On the Basic Concept of 'Nano-Technology'”, *Proc. Intl. Conf. Prod.* London, Part II, British Society of Precision Engineering, 1974.

[§] Premio concedido a Albert Fert y Peter Grünberg.

los avances tecnológicos de los últimos años han sido de una magnitud inimaginable. Desde el descubrimiento del transistor^{**} y el posterior desarrollo de los circuitos integrados se ha evolucionado hasta conseguir alcanzar actualmente definiciones de línea de hasta 5 nm (mediante FIB, *focused ion beam*). En tecnología CMOS se llegan a obtener tamaños de puerta de unos 9 nm, mientras que para HEMTs (*High Electron Mobility Transistors*) los tamaños de puerta mínimos son del orden de 25 nm. Comercialmente las compañías punteras como *Intel* y *AMD* han logrado desarrollar procesadores totalmente operativos basados en transistores de silicio de 45 nm de tamaño de nodo. En esta línea, y de acuerdo con la famosa ley de Moore (que predice que la velocidad de procesado de datos y el número de transistores por circuito integrado se dobla cada dos años), la progresiva reducción del tamaño de los dispositivos permitirá alcanzar cada vez mayores frecuencias en el funcionamiento de los dispositivos electrónicos, con la consecuente repercusión en sus aplicaciones y muy especialmente en el mundo de las telecomunicaciones.

La miniaturización lleva consigo la aparición de fenómenos que no se manifiestan a escala macroscópica. Son muchas las estructuras que los aprovechan, como por ejemplo: transistores de un solo electrón (SET, *Single Electron Transistor*), nanotubos de carbono, nanohilos de semiconductores, dispositivos basados en la cuantización de la conductancia eléctrica, etc. En este trabajo nos dedicamos principalmente al estudio de alguno de estos fenómenos; los efectos de superficie y el transporte balístico de electrones. En efecto, al reducir el tamaño de los dispositivos, la relación superficie/volumen aumenta de manera más significativa a medida que las dimensiones son menores. Cobran por lo tanto especial importancia las superficies de las nanoestructuras. En las fronteras de los semiconductores aparece una carga superficial (electrones que ocupan estados energéticos llamados estados superficiales) que puede modificar en gran medida la respuesta del dispositivo. Por otra parte, la reducción de los tamaños característicos hasta por debajo del recorrido libre medio electrónico hace que el transporte sea diferente al de los dispositivos

^{**} El transistor, descubierto por William Bradford Shockley, John Bardeen y Walter Houser Brattain (premios Nobel de Física en 1956) es hoy en día el producto desarrollado por el hombre más abundante. Se producen anualmente 10^{19} transistores (mil millones de transistores por persona y año), más que el número de caracteres imprimidos en todos los periódicos, revistas, libros y fotocopias; y con un coste menor al de un carácter en el *New York Times* (Gordon Moore).

convencionales.^{††} A este nuevo transporte en el que los electrones viajan de un contacto a otro sin experimentar ningún mecanismo de scattering se le denomina transporte balístico.⁵⁻⁸ En la Figura 1 se esquematiza el movimiento de los electrones en un dispositivo balístico, en donde solamente sufren interacciones con las fronteras físicas del dispositivo, de tal forma que se mueven como “bolas de billar”. Estamos interesados en dispositivos que, superando los límites del escalado tradicional, alcancen dimensiones nanométricas para explotar la presencia del transporte balístico en su interior. La finalidad que se busca es que sean capaces de trabajar a frecuencias submilimétricas (THz) a temperatura ambiente gracias a las altas velocidades (de hasta 10^8 cm/s) que alcanzan los electrones como consecuencia del carácter balístico del movimiento.

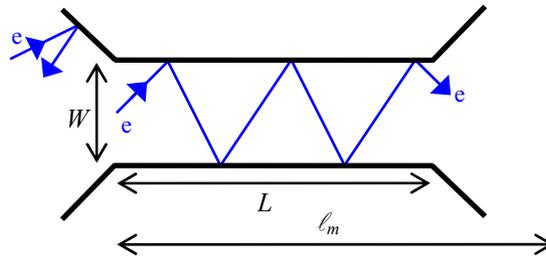


Figura 1. Representación esquemática del transporte balístico en un dispositivo de longitud L menor que el recorrido libre medio ℓ_m . Los electrones sólo sufren interacciones, consideradas elásticas, con las paredes del dispositivo.

Las heterouniones semiconductoras son las mejores candidatas para nuestro fin, y de entre ellas las de InAlAs/InGaAs o InGaAs/InP,^{9,10} ya que el material del canal, el InGaAs, posee una muy alta movilidad, de hasta 15000 cm^2/Vs (para una proporción del 70% de In) a 300 K. En los últimos años, diversos laboratorios han desarrollado técnicas de fabricación de dispositivos balísticos perfectamente compatibles con la tecnología de transistores HEMT construidos exactamente con los materiales anteriormente señalados. De hecho, la madurez de la tecnología podría incluso permitir integrar ambos tipos de dispositivos en el mismo circuito.

Recientemente se han fabricado y caracterizado varios tipos de nanodispositivos con geometrías ingeniosas, en donde los electrones siguen trayectorias balísticas guiados por formas, contornos u obstáculos colocados en su interior.^{11,12} En esta línea de investigación en nanodispositivos balísticos nos encontramos con los rectificadores de cuatro terminales¹³⁻¹⁸ y las uniones de tres

^{††} Entendemos por convencionales aquellos en los que el transporte es óhmico.

ramas o canales en forma de T y de Y (TBJs and YBJs, *Three-Terminal Ballistic Junctions or T- and Y-Branch Junctions*),¹⁹⁻⁴⁷ cuyo funcionamiento se ha demostrado experimentalmente por diferentes autores. Recientemente se ha propuesto también un dispositivo denominado diodo autoconmutante (SSD, *Self-Switching Diode*),⁴⁸⁻⁵⁴ cuya base de funcionamiento reside en la apertura o cierre de un nanocanal como consecuencia de los efectos de la carga superficial en sus fronteras. Además bajo ciertas condiciones de polarización estos diodos presentan fenómenos de histéresis en la característica $I-V$ que pueden utilizarse para fabricar dispositivos de memoria (SSM, *Self-Switching Memory*).⁵⁵⁻⁵⁶ Todos estos dispositivos exhiben efectos no lineales y presentan la importante ventaja de ser estructuras susceptibles de operar a muy altas frecuencias.

Las aplicaciones de estos dispositivos son muy diversas: rectificadores, dobladores de frecuencia, detectores de fase, realización de funciones lógicas, emisión y detección de señales, etc. El desarrollo de estos novedosos dispositivos se encuentra en fase de investigación y por tanto es imprescindible continuar trabajando en su diseño para conseguir circuitos lo más compactos posibles, con bajo consumo y reducido nivel del ruido, con vistas a alcanzar el rango de los THz⁵⁷ en las telecomunicaciones del futuro.

Desde el descubrimiento de los dispositivos balísticos, se han propuesto varios modelos de carácter teórico⁵⁸⁻⁶¹ para explicar las características no lineales encontradas en los resultados experimentales. Estos modelos analíticos están basados en el formalismo de Landauer-Bütiker,^{62,63} que es una descripción del transporte electrónico en términos de coherencia de fase.⁶⁴ Sin embargo, a temperatura ambiente, que es cuando estos dispositivos tienen las aplicaciones más interesantes, el transporte puede considerarse semiclásico (multimodo). Para confirmar esto, nuestro grupo de trabajo propuso un método de estudio numérico para este tipo de nanodispositivos basado en la técnica de simulación Monte Carlo.⁶⁵⁻⁷⁰ Se han realizado diversos trabajos⁷¹⁻⁷⁸ en donde los buenos resultados obtenidos en la comparación con medidas de laboratorio, junto con la correcta explicación de los fenómenos físicos que dan origen a su comportamiento, nos permiten afirmar que, al menos a temperaturas elevadas ($T > 77$ K), los efectos del transporte coherente son de influencia reducida y por ello prescindibles. El método de Monte Carlo posee grandes ventajas frente a otros modelos tradicionales (deriva-difusión,

hidrodinámico). Realiza una correcta descripción del transporte balístico o cuasibalístico que tiene lugar en estos nanodispositivos, incluyendo de forma directa los procesos microscópicos aleatorios causantes del ruido. La simulación por ordenador, técnica de análisis rápido y apenas sin coste alguno, permite, mediante la comparación con medidas experimentales, realimentar de manera muy eficiente los procesos de diseño y fabricación. En nuestro caso, la validez de los resultados relativos a uniones en T se ha confirmado con medidas obtenidas en dispositivos fabricados y caracterizados en el IEMN (*Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie du Nord*, Lille, Francia).

Llegado este punto, el reto de este trabajo de investigación es ahondar en la comprensión del funcionamiento de estos nanodispositivos balísticos para mejorar su eficiencia y respuesta en frecuencia. Para ello, se ha trabajado fundamentalmente en mejorar el algoritmo del que se disponía para el tratamiento de la carga superficial (considerada hasta el momento constante, independiente de la geometría y polarización), que no resulta adecuado cuando las dimensiones de algunas zonas de los dispositivos son excesivamente pequeñas. El núcleo fundamental del presente trabajo será la utilización de un nuevo modelo, que hemos denominado auto-consistente, para la inclusión de los efectos de superficie en el estudio de diferentes nanodispositivos.

La Memoria se organiza en cinco capítulos, cuyos contenidos son los siguientes. El Capítulo I está dedicado a realizar una revisión bibliográfica y situar al lector en el marco del tipo de dispositivos que se van a estudiar posteriormente. Se irán introduciendo paulatinamente los conceptos fundamentales relativos al transporte electrónico y a la carga superficial. Se mostrarán tanto medidas realizadas en diferentes laboratorios (con alguno de los cuales como el IEMN, la UCL *Université Catholique de Louvain* y la Universidad de Manchester, colaboramos estrechamente) como resultados Monte Carlo obtenidos por nuestro grupo. En una segunda parte se detallarán los materiales semiconductores que componen la heteroestructura específica usada en la fabricación de los nanodispositivos, aportándose las ideas básicas para entender cómo es su proceso de fabricación y caracterización.⁷⁹⁻⁸¹

El Capítulo II servirá para explicar las peculiaridades del modelo microscópico que posee el Grupo de Investigación en Dispositivos Semiconductores⁸²⁻⁸⁶ de la

Universidad de Salamanca y que utilizaremos en la simulación de diferentes dispositivos semiconductores. Se trata de un simulador Monte Carlo acoplado de modo autoconsistente con la resolución de la ecuación de Poisson que permite examinar los efectos electrostáticos en los que los dispositivos basan su funcionamiento, y puede analizar su respuesta intrínseca en frecuencia y el ruido generado en ellos. Se prestará especial atención a los aspectos más novedosos que se han añadido al código ya existente. La aportación fundamental es el desarrollo de un modelo auto-consistente para el estudio de los efectos de superficie que tiene en cuenta las magnitudes físicas internas a la hora de calcular la carga superficial. En este modelo la carga superficial se auto-adapta a las condiciones del problema, topología y polarización, reproduciendo de forma mucho más fiel a la realidad la influencia de las fronteras. Una parte importante de este capítulo versará sobre las condiciones de contorno, la inyección de portadores en los contactos, así como el tratamiento de los accesos, por tratarse de aspectos claves en el funcionamiento de los nanodispositivos objeto de nuestro estudio. También dedicaremos una sección a explicar la base teórica para calcular las magnitudes relativas al ruido electrónico.

Los siguientes capítulos se ocuparán ya de exponer propiamente los resultados de las simulaciones obtenidos en nuestro trabajo. En el Capítulo III se llevará a cabo el análisis de uniones en T. En primer lugar explicaremos cómo es la geometría y las condiciones de las simulaciones de estas estructuras. Analizaremos de forma breve algunos de los resultados obtenidos con el modelo de carga superficial constante, explicando los motivos por los que proporciona resultados físicamente erróneos. Después, utilizando ya el nuevo modelo auto-consistente de carga superficial, examinaremos la respuesta del potencial de salida cuando modificamos la anchura de la rama vertical.⁸⁷⁻⁸⁹ La comparación con medidas experimentales realizadas en uniones con las mismas dimensiones es muy satisfactoria y supone una confirmación importante de la validez de nuestro modelo. El origen físico de los resultados será explicado en términos del movimiento balístico de los portadores y del papel clave que juega la carga superficial existente en los contornos. El análisis de las magnitudes microscópicas proporcionadas por el simulador, como perfiles de potenciales eléctricos, concentración de electrones y valores de carga superficial, nos permitirá afirmar que la rama vertical no es un simple elemento pasivo de medida sino que tiene un papel activo muy importante en la respuesta final del potencial de

salida. Además se estudiará la influencia de las dimensiones de la rama horizontal, tanto de su anchura como su longitud. La última parte de este capítulo, y no por ello menos importante, estará dedicada al estudio de la respuesta en frecuencia. Presentamos resultados experimentales y de simulaciones Monte Carlo mostrando la capacidad de estos dispositivos para operar como dobladores, detectores de fase y mezcladores de señales a bajas (<1 MHz) y muy altas (hasta THz) frecuencias.

El estudio del otro dispositivo en el que nos hemos centrado en esta Memoria, el diodo autoconmutante, será abordado en los Capítulos IV y V. En el Capítulo IV, se explicará de forma ilustrativa su principio de funcionamiento, basado en la acumulación de cargas superficiales en las fronteras del canal semiconductor. Mediante el análisis de las magnitudes microscópicas podremos visualizar internamente los efectos que determinan su funcionamiento para poder proporcionar las indicaciones de diseño adecuadas. La parte más importante de este capítulo será el estudio del comportamiento dinámico intrínseco. Hoy en día existe un enorme interés en la tecnología de dispositivos que puedan trabajar en la región de los THz debido al amplio espectro de posibles aplicaciones que residen en ella. Aunque ya existen dispositivos que funcionan a estas frecuencias, son muy caros y voluminosos, y requieren de enfriamiento criogénico. Por ello es preciso investigar nuevos detectores de estado sólido que funcionen a temperatura ambiente y alta frecuencia. Los diodos autoconmutantes, dispositivos muy compactos y sensibles, ya han mostrado capacidad de operación de detección de microondas hasta al menos 110 GHz.⁵¹ En nuestro estudio analizaremos la respuesta en frecuencia de la corriente frente a una excitación sinusoidal aplicada sobre equilibrio, modificando diversos parámetros de la topología de la estructura. Además, como objetivo principal investigaremos a fondo el ruido intrínseco del diodo ya que éste puede suponer una limitación, enmascarando la señal extraída en aplicaciones prácticas a tan alta frecuencia. Presentaremos resultados del espectro del ruido en corriente de diodos autoconmutantes basados en la heteroestructura InAlAs/InGaAs.^{90,91} Veremos cuáles son los mecanismos que contribuyen al ruido para las distintas regiones de polarización. Analizaremos el origen de los máximos que aparecen en el espectro, su amplitud y posición en frecuencia, y estudiaremos su dependencia con los tamaños, permitividades y dopajes de las diferentes regiones de la estructura.

Por último, en el Capítulo V estudiaremos los fenómenos de histéresis de los diodos autoconmutantes que aparecen experimentalmente bajo ciertas condiciones de polarización.^{55,56} Mediante determinadas adaptaciones de nuestro modelo auto-consistente de carga superficial^{92,93} podremos reproducir cualitativamente el comportamiento encontrado experimentalmente. Como en capítulos anteriores, analizaremos distintas magnitudes, en especial la evolución de la carga superficial media con la polarización, para explicar la procedencia del efecto memoria.

Finalmente se extraerán las principales Conclusiones de nuestro trabajo.

CAPÍTULO I

NANODISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES: EFECTOS BALÍSTICOS Y DE CARGA SUPERFICIAL

Este capítulo está dedicado a realizar una revisión bibliográfica de los nanodispositivos semiconductores desarrollados en los últimos años que como consecuencia de la miniaturización explotan el carácter balístico del transporte electrónico. Se realizará una descripción sucinta de los principios físicos de funcionamiento (se explicarán con mayor detalle en sucesivos capítulos) y se expondrán las aplicaciones potenciales de los diferentes dispositivos presentes en la literatura. Debido a las dimensiones tan reducidas, aparecen nuevos fenómenos como son el transporte balístico y los efectos de superficie, que describiremos con detalle ya que su comprensión es clave para analizar sus características. Mostraremos también algunos de los resultados Monte Carlo previos a la realización de este trabajo para demostrar las posibilidades del método en la simulación de este tipo de nanoestructuras. Por otra parte, presentaremos los materiales semiconductores que se utilizan en la fabricación de las heteroestructuras estudiadas en esta Memoria, prestando especial atención a conceptos como movilidad, estructura de bandas, recorrido libre medio y gas de electrones bidimensional (2-DEG). Para terminar, en este capítulo se explicarán las técnicas experimentales específicas para la fabricación y caracterización de los dispositivos objeto de estudio de esta Tesis.

I.1. TRANSPORTE ELECTRÓNICO Y EFECTOS DE SUPERFICIE

En este apartado se describen en líneas generales las peculiaridades del transporte electrónico en los nanodispositivos semiconductores que analizaremos en los capítulos siguientes, así como los efectos ocasionados por las cargas superficiales, que serán claves para entender su funcionamiento.

I.1.1. Transporte electrónico

Uno de los parámetros físicos de mayor interés para describir las propiedades de transporte de un material semiconductor es el recorrido libre medio ℓ_m , que nos informa sobre la distancia media recorrida por un portador de carga entre los diferentes mecanismos de scattering (defectos, impurezas y fonones) que se producen en el material. Dichos fenómenos de scattering pueden ser elásticos o inelásticos y su probabilidad depende de la temperatura. En materiales semiconductores tipo III–V, a temperatura ambiente ($T=300$ K), las interacciones dominantes son las provocadas por fonones, mientras que a baja temperatura ($T=4$ K) son las impurezas las responsables de los fenómenos de scattering más abundantes. Todos los cálculos presentados en este trabajo se efectúan a temperatura ambiente, por ello consideraremos que el recorrido libre medio está limitado por los procesos de scattering inelásticos.

I.1.1.a. Transporte difusivo

Usando la teoría de Drude⁹⁴ (año 1900) se puede dar una explicación adecuada, desde el punto de vista físico, del transporte electrónico y del fenómeno de conducción eléctrica, basándose en un modelo muy sencillo. Consiste en suponer un conjunto de electrones que se mueven en la red cristalina bajo la acción de un campo eléctrico y que ven modificada su energía y dirección de movimiento debido a los mecanismos de scattering. Bajo las siguientes cuatro suposiciones: (i) el movimiento entre colisiones es un “vuelo” libre (ley de Newton), (ii) los fenómenos de scattering se consideran instantáneos, (iii) la probabilidad de sufrir una colisión es el inverso del tiempo de relajación o de recorrido libre τ y (iv) equilibrio térmico de los

electrones con la red cristalina, se puede obtener una expresión para la conductividad eléctrica *

$$\sigma_c = \frac{nq^2\tau}{m}, \tag{I.1}$$

donde n es la densidad, y q y m la carga y masa de los electrones, respectivamente. Esto no es más que la expresión de la ley de Ohm en forma diferencial, $\mathbf{E}=\rho\mathbf{j}$, que liga la densidad de corriente \mathbf{j} y el campo eléctrico \mathbf{E} mediante una relación lineal a través de la resistividad $\rho=1/\sigma_c$. Utilizando la expresión de la densidad de corriente $j=nqv_d$, donde v_d representa la velocidad de arrastre, se define una magnitud denominada movilidad μ , que relaciona la velocidad de arrastre con el campo eléctrico $v_d=\mu E$, que cumplirá

$$\mu = \frac{q\tau}{m}. \tag{I.2}$$

Este tipo de modelo es apropiado para estudiar dispositivos micrométricos, Figura I.1(a), donde el tamaño característico (L, W) es mucho mayor que el recorrido libre medio. En ellos al aplicar un campo eléctrico la redistribución aleatoria (producida por los scatterings) hace que los electrones adquieran una velocidad de arrastre en la dirección del campo aplicado. A este tipo de movimiento se le denomina transporte difusivo.

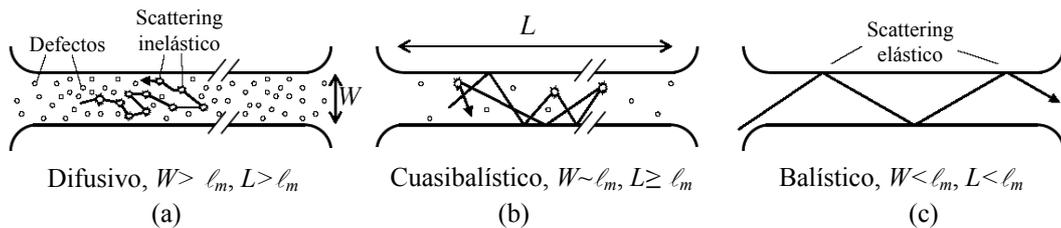


Figura I.1. Representación esquemática de los tipos de transporte electrónico en un semiconductor de longitud L y anchura W . (a) Transporte difusivo en el caso de que el recorrido libre medio sea menor que las dimensiones del dispositivo ($\ell_m < L, W$). (b) Cuasibalístico, situación intermedia donde las dimensiones son del mismo orden de magnitud que el recorrido libre medio. (c) Balístico, cuando las dimensiones del dispositivo son menores que el recorrido libre medio.

* Aunque usualmente se utiliza la letra σ para referirse a la conductividad eléctrica, usaremos aquí σ_c para evitar confusión con la densidad superficial de carga (para la que emplearemos σ).

I.1.1.b. Transporte balístico

En el caso de que las dimensiones del semiconductor sean mucho menores que el recorrido libre medio ($L, W \ll \ell_m$), Figura I.1 (c), la descripción anterior no es aplicable ya que no existen mecanismos de scattering que den lugar a la pérdida de momento y energía. Los electrones sólo experimentarán colisiones con las fronteras geométricas de los dispositivos. A este tipo de transporte se le denomina transporte balístico. Las propiedades derivadas de este transporte balístico son muy diferentes a las de un semiconductor macroscópico en el que se cumple la ley de Ohm. En el caso intermedio entre el transporte difusivo y el balístico se encuentra el transporte denominado cuasibalístico que tiene lugar en dispositivos mesoscópicos en los que no todas las dimensiones son mucho menores que ℓ_m , Figura I.1(b), o simplemente son del orden de ℓ_m . Las enormes dificultades para fabricar un dispositivo en el que todas sus dimensiones se encuentren rigurosamente en la región nanométrica hacen que el transporte real sea cuasibalístico y no estrictamente balístico. Sin embargo, la terminología que se suele utilizar emplea la palabra balístico para referirse a dispositivos en los que aparecen fenómenos derivados del nanoescalado. Nótese además que aquí el transporte balístico es entendido de manera semiclásica y no mediante una descripción basada en términos de coherencia de fase asociada a la naturaleza ondulatoria de los electrones como en el formalismo de Landauer–Büttiker.^{62,63}

I.1.2. Efectos de superficie

En la Física a escala mesoscópica, al reducir las dimensiones, la relación superficie/volumen se incrementa de forma muy notable, por lo que las características de estructuras nanométricas se verán afectadas en gran medida por los fenómenos de superficie. Éste es un aspecto importante en todos los campos de la nanotecnología, ya que las propiedades mecánicas, térmicas y eléctricas de estructuras nanométricas dependen de las características de la superficie, la cual se modifica en el transcurso de su elaboración y puede variar con el tiempo, por ejemplo como consecuencia de la contaminación o la oxidación.

Describamos brevemente algunos de los efectos superficiales en el campo de la electrónica. En superficies metálicas (modelo de *jellium*),⁹⁵ la presencia de la superficie como barrera de potencial infinita, provoca que la densidad de carga

electrónica no sea uniforme a lo largo del cristal y se tenga que adaptar, incluso presentando oscilaciones, para cumplir las condiciones de contorno en la superficie. En un semiconductor, la presencia de un gap de energía entre las bandas de conducción y de valencia proporciona resultados de mayor interés. Debido a la ruptura del potencial periódico de la red cristalina, así como a los defectos producidos en el proceso de fabricación, aparecen estados de energía en la zona prohibida del semiconductor que pueden ocuparse por electrones, alterando la distribución de carga libre en las proximidades de su superficie. En general estos estados se encuentran cerca de la mitad del gap y con una distribución estrecha en energía. Conviene indicar que, además, la rugosidad de la superficie, su posición y la orientación del plano de la superficie respecto a los ejes cristalográficos influirán en la posición del nivel de energía dentro del gap en el que aparecen dichos estados. Parece claro entonces que los fenómenos de superficie son determinantes en el funcionamiento de dispositivos nanométricos, de manera que tendremos que prestar especial atención a ellos en nuestras simulaciones para poder reproducir correctamente los resultados experimentales. En la sección [1.2.2](#) discutiremos con más detenimiento los efectos de superficie, ya dentro del contexto de nuestra técnica de simulación.

I.2. NANODISPOSITIVOS Y APLICACIONES

En esta sección haremos un repaso a los nanodispositivos que aparecen en la literatura reciente similares a los que estudiaremos posteriormente en este trabajo. El carácter balístico del transporte y los fenómenos de superficie derivados de las dimensiones nanométricas, unidos a la presencia de contornos singulares y obstáculos en los dispositivos, hacen posible obtener nuevos y muy interesantes comportamientos. Se describirán de forma breve los principios de funcionamiento y las principales aplicaciones de una serie de nanodispositivos. En un segundo apartado mostraremos algunos de los resultados de simulaciones Monte Carlo de este tipo de dispositivos nanométricos. Aprovechamos también para explicar brevemente los efectos de la carga superficial y cómo los incorporamos a nuestras simulaciones. Como indicábamos en la introducción, el principal objetivo es explotar la presencia del transporte balístico, derivado del escalado nanométrico, para alcanzar frecuencias de funcionamiento submilimétricas a temperatura ambiente. Con esta perspectiva se han diseñado nanodispositivos con formas geométricas innovadoras que exhiben efectos no lineales incluso a frecuencias muy altas y, por ello, con posibles aplicaciones en el campo de las telecomunicaciones analógicas y digitales y en la computación.¹¹

I.2.1. Revisión de nanodispositivos

I.2.1.a. Rectificadores de cuatro terminales

El dispositivo pionero que explota las propiedades no lineales derivadas de la miniaturización llevada a la escala nanométrica fue realizado por A. M. Song *et al.*¹³ en 1998. Se trata de un rectificador balístico de cuatro terminales consistente en la unión de otros tantos canales en forma de cruz con un obstáculo triangular en el centro de la unión que rompe la simetría de la estructura, Figura I.2(a). Está fabricado sobre una heteroestructura de InGaAs/InP.

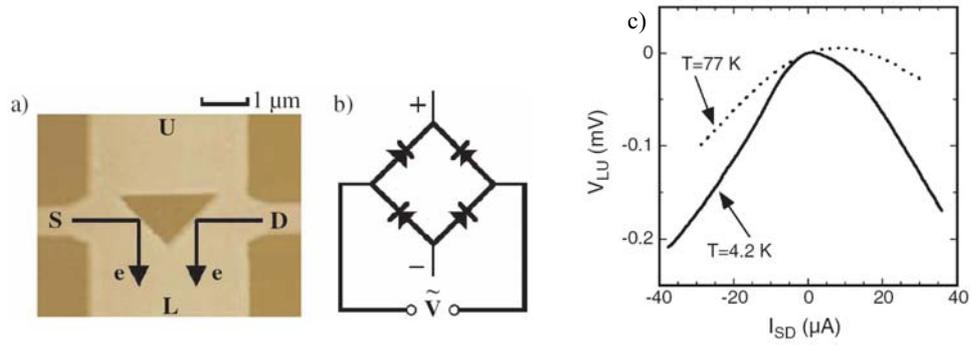


Figura I.2. (a) Imagen AFM (*Atomic Force Microscope*) de la estructura. (b) Circuito equivalente y (c) medidas experimentales a bajas temperaturas del potencial V_{LU} en función de I_{SD} extraídas de la Ref. 13.

Al aplicar una corriente I_{SD} (o diferencia de potencial) entre los terminales izquierdo (S de *source*) y derecho (D de *drain*), la diferencia de potencial que aparece entre la rama inferior (L de *lower*) y la superior (U de *upper*) V_{LU} (medida en circuito abierto) toma siempre valores negativos independientemente de la dirección de la corriente aplicada. Tal y como explica la Ref. 13, esto es el resultado de una mayor inyección de portadores hacia la rama inferior provocada por los rebotes que sufren los electrones con el obstáculo triangular. Aunque no se trate de dimensiones nanométricas, la baja temperatura (nótese que los valores son más negativos para la temperatura más baja) hace que el transporte sea cuasibalístico ($\ell_m \sim 6 \mu\text{m}$ para 4.2 K y $\ell_m \sim 1-2 \mu\text{m}$ para 77K),¹³ ya que si éste fuera difusivo no cabría esperar ninguna diferencia de potencial entre las ramas superior e inferior. El rectificador de cuatro terminales funciona de manera análoga a un puente de diodos como el mostrado en la Figura I.2(b).

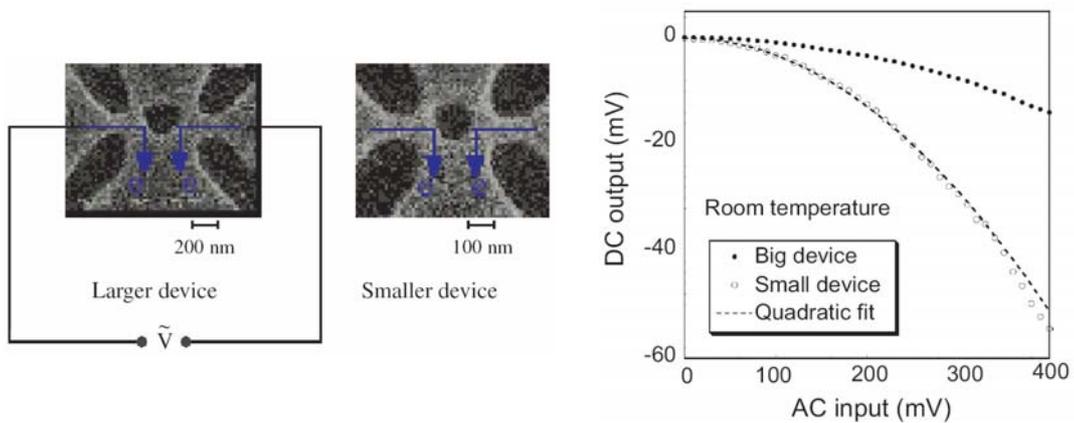


Figura I.3. Medidas experimentales a temperatura ambiente de la componente de continua V_{LU} en función de la amplitud del potencial de entrada V_{SD} alterno a 1 kHz para los dispositivos mostrados a la izquierda de la Figura. Extraído de la Ref. 13.

En la Figura I.3 se muestran las medidas a temperatura ambiente de estructuras fabricadas posteriormente, ya con tamaños nanométricos, donde aparece la respuesta rectificadora (valores negativos) del potencial entre las ramas verticales en función del potencial alterno de frecuencia 1 kHz aplicado a las ramas laterales.¹⁴ Este comportamiento es más acusado para el dispositivo más pequeño (100 nm), pues a temperatura ambiente el recorrido libre medio del InGaAs es del orden de $\ell_m=140$ nm. Además, las medidas experimentales confirman que este dispositivo es capaz de actuar como rectificador hasta 50 GHz a temperatura ambiente. La sensibilidad real estimada es del orden de unos pocos mV en salida por mW de potencia aplicada (menores que los 1000 mV/mW de diodos de microondas comerciales) debido especialmente al problema de desadaptación de impedancias.

A partir de esta geometría y basándose en resultados teóricos obtenidos con el formalismo de Landauer–Bütiker,^{62,63} R. Fleischmann y T. Geisel¹⁵ proponen otro rectificador similar pero con un obstáculo de forma romboidal, fabricado poco después por S. de Haan *et al.*^{16,17} La respuesta rectificadora mostrada en la Figura I.4 es evidentemente consecuencia del transporte de carácter balístico, de los efectos electrostáticos y de la diferente apertura de los canales existentes entre las distintas ramas. Sin embargo los resultados de las predicciones teóricas no fueron completamente confirmados por las medidas.

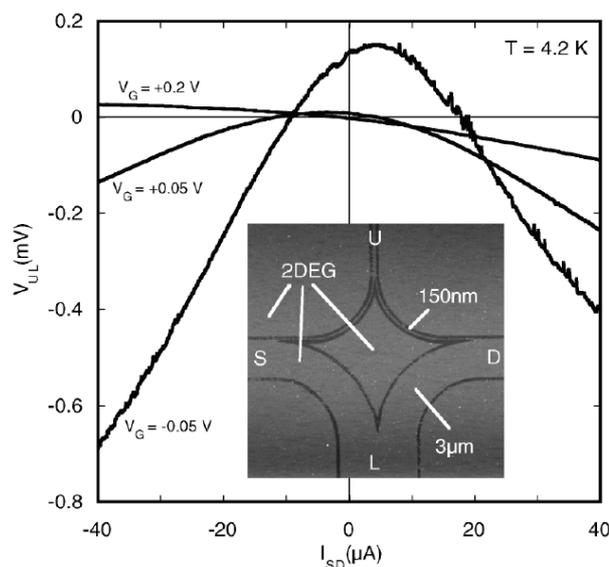


Figura I.4. Características I - V del rectificador mostrado en la imagen AFM del *inset*, que combina dos canales de 150 nm con dos de $3 \mu m$ de anchura, medidas a 4.2 K para diferentes voltajes de puerta. Extraído de la Ref. 16.

En la misma línea, T. González *et al.*⁷⁷ propusieron aumentar la sensibilidad de este rectificador modificando el ángulo de ataque α de las ramas laterales de una unión de cuatro terminales, incluso sin necesidad de usar un obstáculo triangular en su centro. Poco después M. Knop *et al.*¹⁸ confirmaban experimentalmente dichas predicciones. En la Figura I.5 se muestran tales resultados.

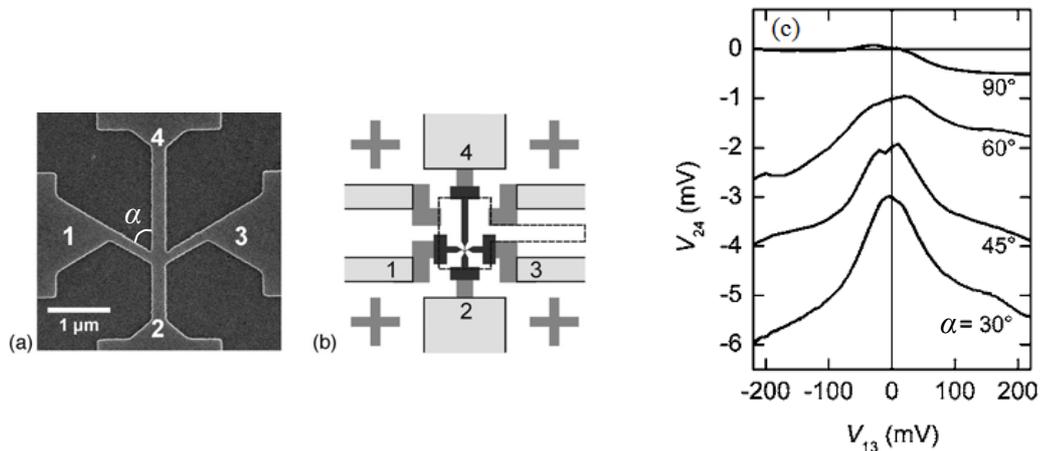


Figura I.5. (a) Imagen SEM (*Scanning Electron Microscope*) de una unión en cruz en donde el ángulo entre las dos ramas laterales es $\alpha=60^\circ$. Las ramas 1 y 3 por donde circula la corriente tienen 140 nm de anchura y las ramas 2 y 4 que funcionan como sondas de voltaje son de 200 nm. (b) Esquema de la muestra, nanoestructura (negro), mesa (gris) y área de los contactos (blanco). (c) Señal rectificadora V_{24} en función de V_{13} para diferentes ángulos de ataque α . Las curvas están desplazadas con un *offset* de 1 mV. $T=4.2$ K. Extraído de la Ref. 18.

I.2.1.b. Uniones de tres terminales

Otros dispositivos con capacidad de originar rectificación a alta frecuencia e incluso realizar operaciones lógicas son las uniones balísticas de tres terminales en forma de T y de Y (TBJs *T-Branch Junctions* y YBJs *Y-Branch Junctions*). Se trata de excelentes candidatos para ser los cimientos básicos de la fabricación de futuros componentes dentro de la nanoelectrónica.

En lo referente a uniones en T (consistentes en tres canales unidos en forma de T), el primer resultado experimental fue presentado por Shorubalko *et al.*¹⁹ en 2001, Figura I.6. En su artículo se explica un fenómeno muy interesante que consiste en que al polarizar los extremos izquierdo y derecho (V_L y V_R , respectivamente) de las ramas de una unión en T en modo *push-pull*, es decir, con $V_0=V_L=-V_R$, la medida del potencial de la rama central en circuito abierto, V_C , no es nula como cabría esperar si el transporte fuera difusivo. El resultado obtenido, Figura I.6(b), es que

este potencial toma siempre valores negativos y presenta una dependencia parabólica con la polarización aplicada, en contraposición con lo que uno esperaría atendiendo a un transporte difusivo, en el que el potencial en la rama central sería cero de acuerdo con la ley de Ohm.

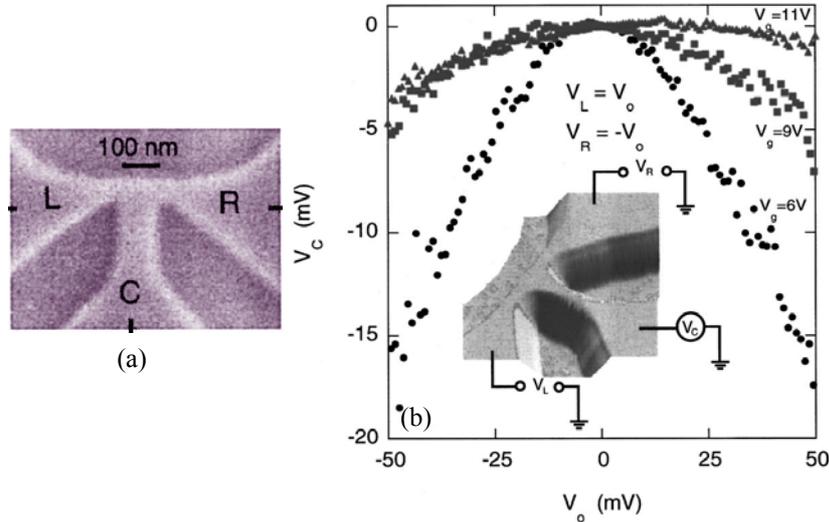


Figura I.6. (a) Imagen SEM de una unión en T y (b) potencial medido en la rama central V_C en función del potencial aplicado en las ramas laterales $V_0 = V_L = -V_R$ para diferentes polarizaciones V_g de una puerta superior y $T = 200$ K (*Inset*: imagen AFM de esta unión en T y configuración empleada en las medidas). Figura extraída de la Ref. 19.

Para esta unión en T polarizada en *push-pull*, H. Q. Xu, usando el formalismo de Landauer-Büttiker,^{62,63} demuestra que el potencial de la rama central es cuadrático con el potencial aplicado siguiendo la expresión⁵⁹

$$V_C = -\frac{1}{2} \alpha V_0^2 + O(V_0^4). \quad (\text{I.3})$$

El comportamiento no lineal mostrado por este tipo de dispositivos puede aprovecharse para varias aplicaciones de gran interés como

(i) La rectificación de una señal alterna aplicada en terminales de un dispositivo simétrico en forma de T, ya que el potencial de salida de la rama central es siempre negativo. Es importante señalar que estos dispositivos no basan su funcionamiento en barreras de energía ni en uniones tipo $p-n$, sino que explotan el carácter no lineal intrínseco del transporte balístico. Se encuentran resultados similares, mostrados en la Figura I.7, para medidas a temperatura ambiente sin potencial aplicado a la puerta.¹⁹ En la figura se ha representado en línea continua un ajuste cuadrático de los puntos experimentales.

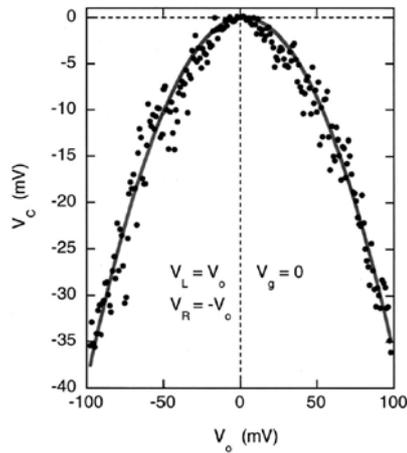


Figura I.7. Operación a temperatura ambiente de una unión en T y ajuste parabólico (línea continua) de los puntos experimentales. Extraído de la Ref. 19.

(ii) La generación de armónicos. Una respuesta parabólica del tipo $V_C = -\alpha V_0^2 + O(V_0^4)$ implica que, frente a una señal de la forma $V_0 = A \cos(\omega_0 t)$ aplicada entre los contactos derecho e izquierdo de un dispositivo en forma de T, tengamos como salida en el fondo de la rama vertical una señal del tipo $V_C = a + b \cos(2\omega_0 t) + c \cos(4\omega_0 t) + O(6\omega_0)$. Los primeros resultados experimentales que confirman este comportamiento aparecen en la Ref. 20. Se trata de una unión en T cuya rama central (C) sirve como entrada para otro contacto formando un canal unidimensional controlado por una puerta lateral (1-D lateral FET) que proporciona la amplificación de la señal, Figura I.8(a). Utilizando un circuito electrónico para obtener un desfase de 180° y así realizar la polarización *push-pull*, se observa cómo la salida presenta una frecuencia doble (74 Hz), además de una cierta ganancia, Figura I.8(b).

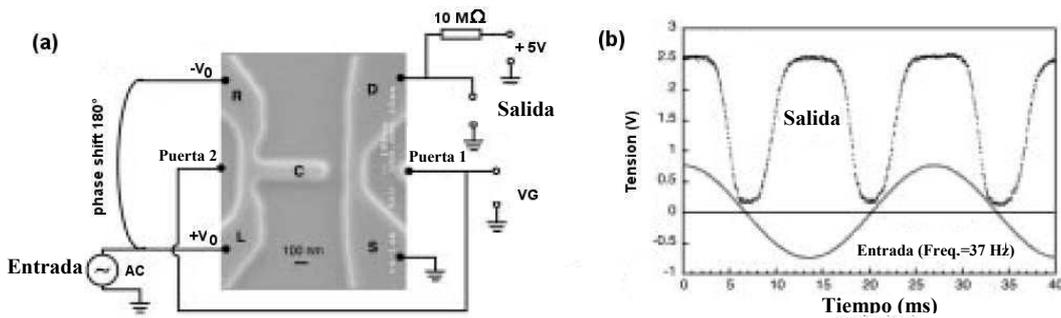


Figura I.8. (a) SEM imagen de la parte central del dispositivo junto al esquema del circuito usado para la demostración del doblado de frecuencia, rectificación y ganancia representada en (b). Extraído de la Ref. 20.

R. Lewén *et al.*²⁶ realizaron medidas experimentales del doblado de frecuencia para señales aplicadas en el rango de 20 MHz–1 GHz, confirmando así las expectativas de funcionamiento a alta frecuencia pese a los problemas de capacidades parásitas y de desadaptación de impedancias debidos a la alta impedancia de entrada de la unión. Éstas son las principales dificultades que presentan estos nanodispositivos a la hora de su caracterización experimental. Las comentaremos con más detalle en la sección I.4.4.

Dentro de las aplicaciones de respuesta en frecuencia se encuentran también el mezclado de señales (*Mixing*) y la detección de fase (*Phase Detection*). Los resultados más recientes⁴³ muestran las posibilidades a baja frecuencia (MHz) y temperatura ambiente.

(iii) Por último, una de las aplicaciones más interesantes es la utilización de estos dispositivos para efectuar operaciones lógicas.^{28,29,33,42,46} Por ejemplo, en la Figura I.9 mostramos los resultados experimentales de un TBJ funcionando como puerta AND a temperatura ambiente. El punto de contacto de la puerta de salida (que conecta con la rama central de la T) opera como inversor por lo que el dispositivo funciona como una puerta lógica tipo NAND.

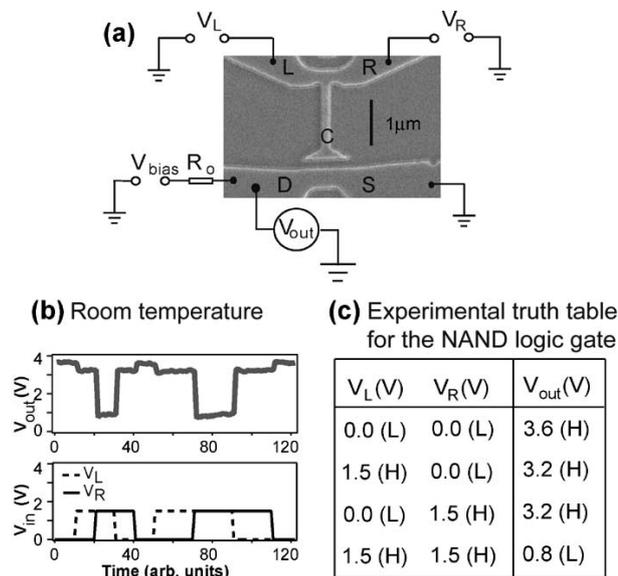


Figura I.9. Puerta lógica NAND basada en una unión en T a temperatura ambiente. (a) Imagen SEM de la puerta NAND y montaje para su caracterización. (b) Voltaje de salida medido y potenciales de entrada correspondientes (V_R en línea continua y V_L en discontinua) en función del tiempo. En las medidas se ha usado $V_{bias}=10$ V y $R_0=2.3$ MΩ. Las entradas tienen un valor de 0 y 1.5 V, mientras que la salida se encuentra en el rango de 0.8 a 3.2 V. (c) Tabla de verdad de los resultados experimentales. Figura extraída de la Ref. 33.

En cuanto a las uniones en Y, diremos que la filosofía de funcionamiento y aplicaciones son esencialmente las mismas, ya que se trata del mismo tipo de estructura pero con un ángulo de apertura entre las ramas derecha e izquierda menor de 180°. K. Hieke y M. Ulfward²² presentaron por primera vez el funcionamiento de una unión en Y basada en canales de InGaAs/InP. La forma de campana que presenta el potencial central (V_S stem) de la Figura I.10(b) es consecuencia del transporte balístico en la dirección horizontal (efecto puramente electrostático e idéntico al de uniones en T) sumado a la penetración vertical de electrones en la rama central, que depende del ángulo α que forman las ramas derecha e izquierda. Esto hace que la salida decrezca de manera más pronunciada a medida que disminuye α ($\alpha=180^\circ$ sería el correspondiente a una unión en T).⁷²

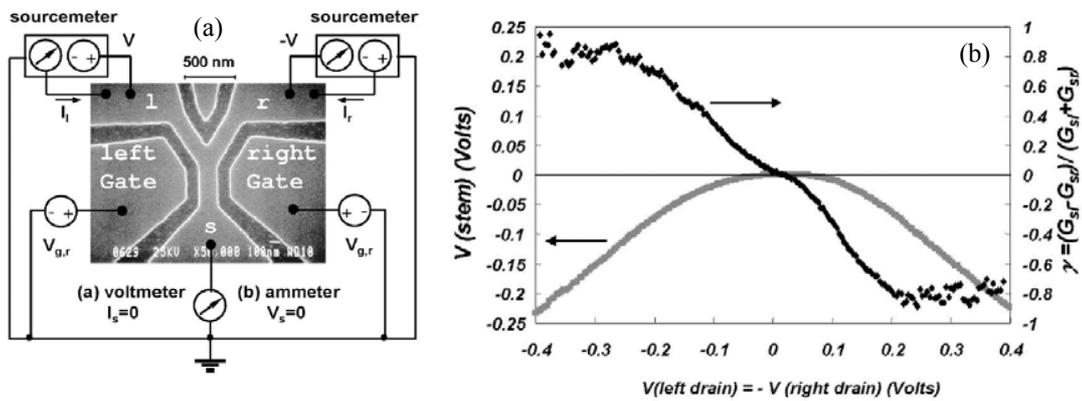


Figura I.10. (a) Imagen SEM de una unión en Y experimental con ramas de 200 nm de anchura y ángulo de apertura entre ramas superiores de 30° (también se muestra la configuración empleada en las medidas), y (b) medidas realizadas del potencial central V_S y coeficiente $\gamma=dV_C/dV$ cuando $V_L=V_R$ a $T=77$ K (manteniendo el potencial de las puertas laterales a $V_{g,r}=0$). Figuras extraídas de la Ref. 22.

Usando este tipo de uniones se han realizado diferentes circuitos lógicos como un semi-sumador^{25,30} o un disparador de Schmitt³¹ a baja temperatura ($T=4.2$ K). Además, se ha demostrado que circuitos basados en YBJs pueden funcionar como puertas lógicas de tipo AND/NAND a temperatura ambiente.²⁸

En lo que respecta a las aplicaciones a alta frecuencia, Worschech *et al.*²⁴ estudian la dependencia de la corriente rectificadora a través de la rama central en función del potencial aplicado a las ramas horizontales en modo *push-fix* ($V_L=V$, $V_R=0$), Figura I.11(a).

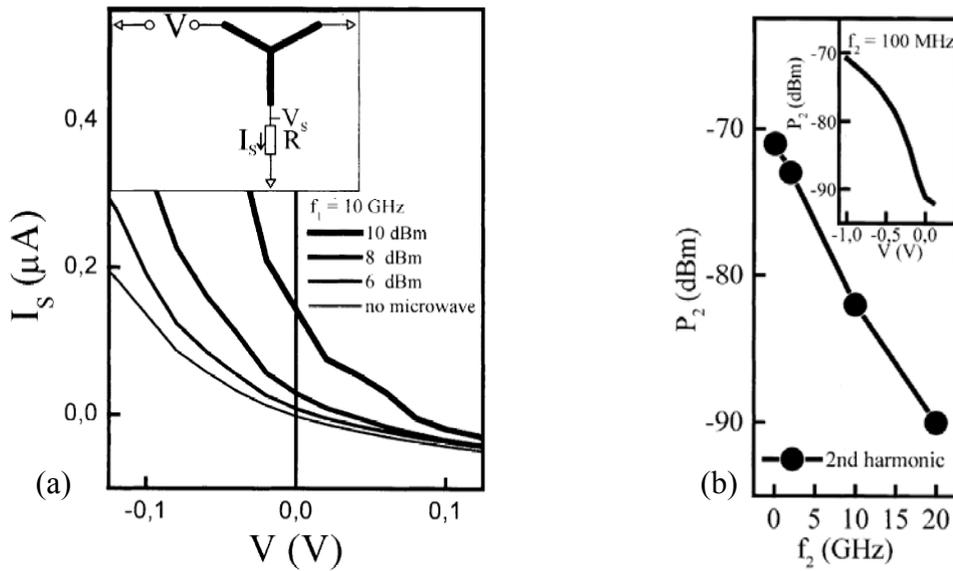


Figura I.11. (a) Dependencia de la corriente I_S a través de la rama central cuando se polariza la unión en modo *push-fix* (ver *inset*) sin y con inyección de microondas. (b) Evolución de la potencia de microondas del segundo armónico P_2 frente a la frecuencia de detección $f_2=2f_1$. *Inset*: Dependencia de la potencia de microondas P_2 del segundo armónico en función del potencial aplicado V para $f_2=100$ MHz. Figuras extraídas de la Ref. 24.

Para una señal aplicada de frecuencia de 10 GHz y una amplitud V_{ac} sobre el nivel de continua, $V_t=V+V_{ac} \cos(\omega_1 t)$, se observa cómo, para V constante, la corriente crece cuando la potencia incidente aumenta. Incluso cuando no se polariza la unión, $V=0$, se detecta corriente en la rama central, ya que en primera aproximación la dependencia no lineal cuadrática de la salida $V_S=cV^2+O(V^4)$ predice una respuesta del tipo $V_S = \frac{cV_{ac}^2}{2} + \frac{cV_{ac}^2}{2} \cos\left(\frac{f_2}{2\pi} t\right) + \dots$ con una componente de continua además de una oscilación de frecuencia doble $f_2=2f_1$ respecto a la señal de entrada. En el *inset* de la Figura I.11(b) se muestra la dependencia de la potencia de microondas detectada para el segundo armónico P_2 (con una potencia incidente de $P_1=10$ dBm a 50 MHz en el contacto izquierdo) respecto al potencial aplicado V . Se observa una caída de 20 dBm en P_2 cuando V cambia de -1.0 V a 0 V. La potencia P_2 disminuye cuando se aumenta la frecuencia de la señal de entrada, siendo todavía detectable el segundo armónico a $f_2=20$ GHz.

Por último mostramos los resultados más recientes referentes a la posibilidad de rectificación.⁴¹ La Figura I.12 muestra los resultados del potencial de salida en función de la frecuencia de la señal aplicada en una unión en Y doble. El sistema de medida consiste en la aplicación de una señal de alta frecuencia mediante accesos

coplanares (*on-wafer*) en el rango 3–40 GHz. El punto de 94 GHz se obtuvo mediante un montaje que usa un diodo Gunn como fuente de entrada. Las medidas experimentales se comparan (Figura I.12) con los resultados proporcionados por simulaciones desarrolladas con la herramienta ADS de Agilent usando un modelo no lineal para representar el conjunto de la dos uniones en forma de Y.³⁷

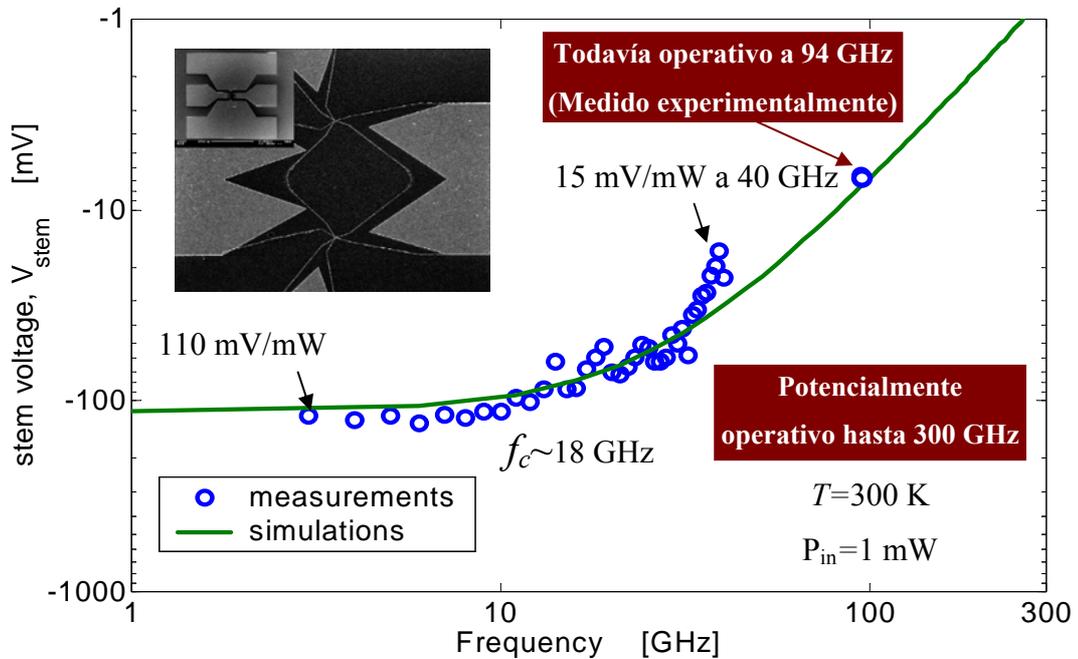


Figura I.12. Salida dc de una unión Y doble mostrando rectificación hasta 94 GHz.⁴¹ La potencia de entrada está limitada a 0.1 mW para evitar mecanismos de scattering intervalo. *Inset*: Doble unión en Y con accesos coplanares usada para las medidas de microondas.

I.2.1.c. Diodos autoconmutantes

Recientemente A. M. Song *et al.*^{48,49} han propuesto un dispositivo denominado diodo auto-conmutante (SSD, *Self-Switching Diode*), realizado mediante un nanocanal en donde se rompe la simetría de forma intencionada mediante zanjas aislantes en forma de L, ver *inset* de la Figura I.13, para proporcionar una respuesta fuertemente no lineal en la característica corriente voltaje ($I-V$). Las expectativas de funcionamiento a muy alta frecuencia son muy buenas.^{50,51} Esto es debido a que se trata de un dispositivo con arquitectura planar, lo que significa que los contactos eléctricos están situados lateralmente en lugar de estar en la superficie y el sustrato. Así se disminuyen en gran medida las capacidades parásitas entre contactos respecto a un dispositivo convencional del mismo tamaño con topología vertical. Además, el mecanismo de funcionamiento no está basado ni en la difusión de portadores ni en el uso de uniones con diferentes impurificaciones o con barrera, y se fabrica mediante

un solo proceso litográfico, reduciendo así costes y dificultades tecnológicas, lo que le dota de un especial atractivo. El dispositivo está fabricado mediante el grabado de dos zanjas aislantes en forma de L entre las cuales se forma un canal semiconductor asimétrico, como se muestra en la Figura I.13. Su principio de funcionamiento está basado en conceptos puramente electrostáticos y se explica en términos de la apertura o cierre del canal semiconductor debido a la carga superficial en las fronteras que lo rodean. Cuando se polariza negativamente el contacto derecho y se une a tierra el izquierdo la carga superficial vacía y corta el canal de manera que no se tiene corriente a través del dispositivo. Por el contrario si se aplica un potencial positivo, el canal se abre y permite el paso de corriente, como se observa en la Figura I.13. La modulación del potencial umbral se consigue mediante la modificación de la anchura del canal W , de manera que se puede mantener cerrado el canal incluso hasta potenciales de 10 V.⁴⁸

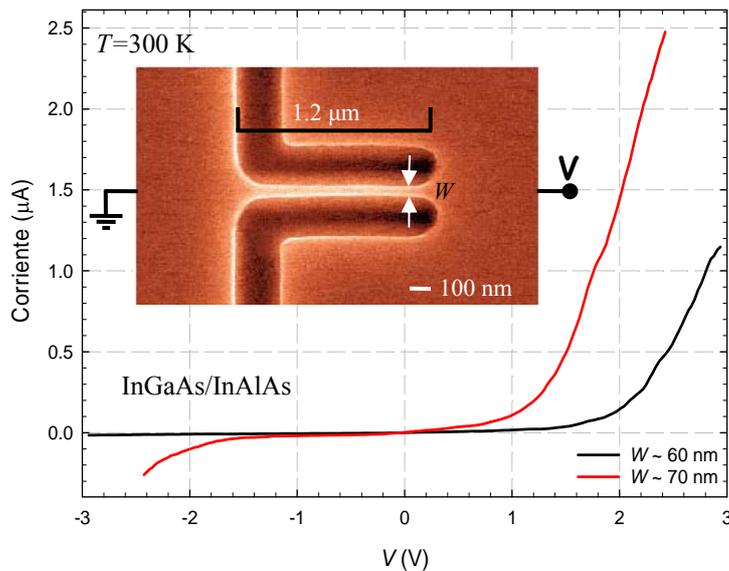


Figura I.13. Características a temperatura ambiente de dos SSDs (como el de la imagen SEM del *inset*) basados en la heteroestructura InGaAs/InAlAs con diferente anchura del canal.

Por no basarse específicamente en la naturaleza balística del transporte, este dispositivo se puede fabricar también en Si,⁵² con la evidente ventaja de aprovechar las avanzadas tecnologías CMOS. Sin embargo, el uso de materiales de alta movilidad como el InGaAs hace que el tiempo de tránsito sea mucho menor debido al aumento de velocidad asociado al transporte balístico. Por ello, pensando en las aplicaciones a muy alta frecuencia, estamos más interesados en este último material.

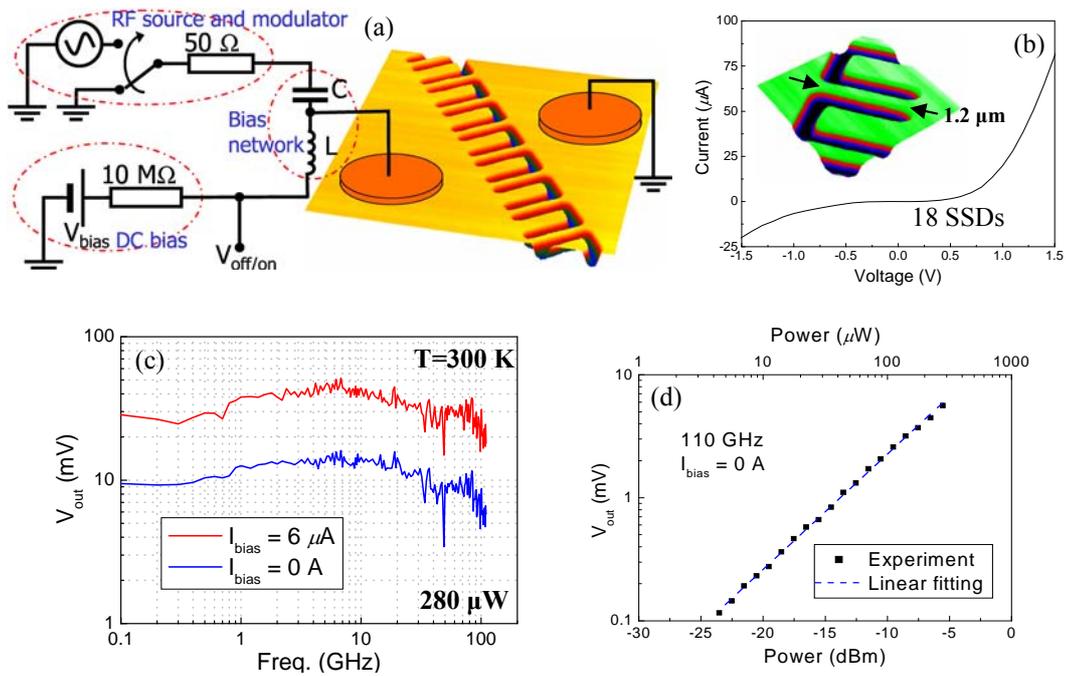


Figura I.14. (a) Montaje experimental de medidas de microondas. El voltaje dc se mide mediante un voltímetro digital HP4678B. (b) Características corriente voltaje de 18 nanodiodos de 1.2 μm de longitud y 100 nm de anchura aproximadamente conectados en paralelo a temperatura ambiente. (c) Respuesta en frecuencia desde 100 MHz hasta 110 GHz para una corriente de 0 y 6 μA , también realizadas a 300 K. (d) Detección del potencial de salida frente a la potencia en dBm de una señal de entrada de 110 GHz. Ajuste lineal que muestra un buen acuerdo con una dependencia cuadrática. Figuras tomadas de la Ref. 50.

En lo que se refiere al comportamiento dinámico, Balocco *et al.*⁵⁰ ha medido experimentalmente la posibilidad de detección de microondas hasta 110 GHz a temperatura ambiente en un *array* de 18 SSDs en paralelo de 1.2 μm de longitud de canal y 60–100 nm de ancho. La Figura I.14(b) presenta la característica estática del *array*. El montaje experimental para las medidas de microondas se muestra en la Figura I.14(a). Éste consiste en polarizar el dispositivo mediante una red dc (tipo LC) acoplada a un generador de señal de microondas (Agilent 8510XF) y una fuente conectada en serie con una resistencia de 10 M Ω .

La dependencia del potencial de salida V_{out} con la frecuencia está representada en la Figura I.14(c) (potencia incidente constante de 280 μW) para dos corrientes de polarización de 0 y 6 μA . Se observa una respuesta estable en frecuencia a lo largo de tres órdenes de magnitud, desde 100 MHz hasta 110 GHz, siendo éste el nanodispositivo más rápido caracterizado hasta el momento. Pese a tratarse de una configuración poco optimizada, donde sólo el 0.4 % de la potencial nominal es

absorbida eficazmente por la estructura (la impedancia de entrada es de $50\text{ K}\Omega$ para $I=10\text{ }\mu\text{A}$), se tiene una sensibilidad de 75 mV/mW para 110 GHz . Las optimizaciones de diseño y mejoras en el crecimiento, unidas al uso de un mayor número de diodos, han permitido llegar a una sensibilidad de 1300 mV/mW para una estructura con 45 SSDs ($500\text{--}1000\text{ mV/mW}$ hasta 50 GHz en diodos Schottky comerciales) (Figura I.15). La salida obedece una ley cuadrática, donde V_{out} tiene una dependencia lineal con la potencia incidente, como aparece en la Figura I.14(d). Esta respuesta lo hace apropiado para interesantes aplicaciones de microondas como por ejemplo la de demodulación. La posibilidad de fabricar un *array* de N SSDs en paralelo hace que no sólo consigamos reducir la impedancia total, sino que también se incremente en un factor N el nivel de corriente. Además, como el aumento del ruido en la corriente únicamente se incrementa en un factor de \sqrt{N} , se tiene una mejora de la relación señal/ruido en un factor \sqrt{N} .

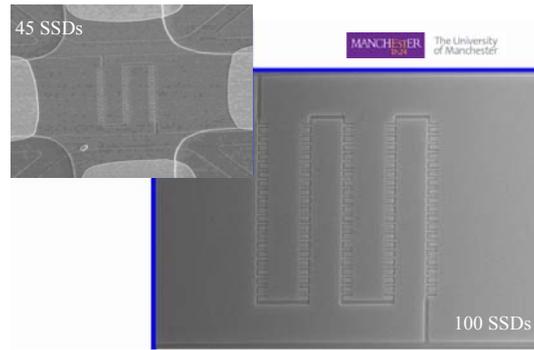


Figura I.15. Array de 45 y 100 SSDs.

Figura tomada de la Ref. 51.

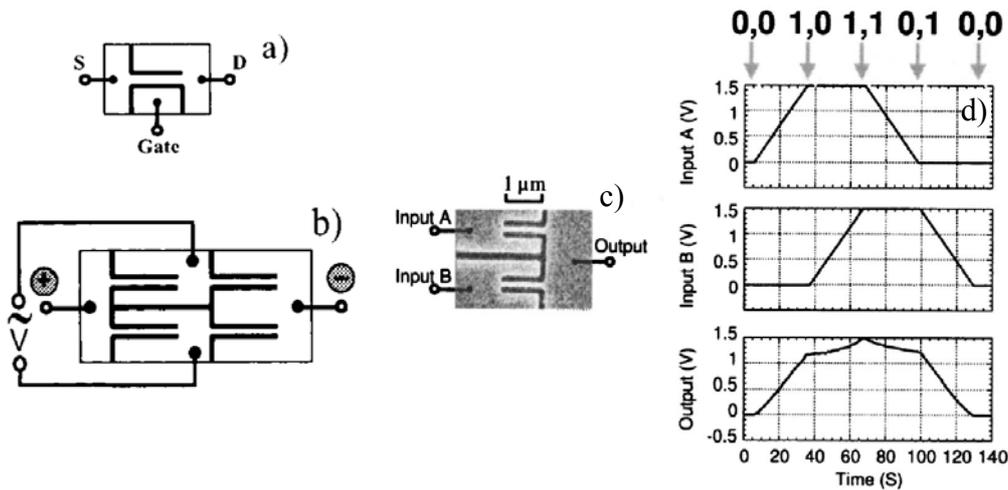


Figura I.16. (a) Diseño de una estructura con posibilidad de funcionar tanto como SSD (diodo) como transistor con puerta lateral. (b) Puente rectificador basado en un circuito de SSDs. (d) Resultados medidos a temperatura ambiente de una puerta lógica tipo OR realizada mediante el circuito de SSDs cuya imagen SEM aparece en (c). Figuras tomadas de la Ref. 48.

La sencillez de fabricación de estos dispositivos hace que, simplemente alargando una de las zanjias, se pueda crear una puerta lateral adicional, convirtiendo

el SSD en un SST (*Self-Switching Transistor*)⁴⁸, Figura I.16(a), y así poder controlar el potencial umbral mediante el potencial aplicado a la puerta. Por otra parte, mediante combinaciones de varios SSDs se pueden fabricar estructuras que funcionen como puentes rectificadores, Figura I.16(b). También se pueden diseñar dispositivos con aplicaciones lógicas, como por ejemplo el de una puerta tipo OR, Figura I.16(d), mediante un circuito muy simple de dos SSDs, Figura I.16(c).⁴⁸

I.2.1.d. Diodos de memoria

Basándose en la geometría del dispositivo anterior A. M. Song *et al.*^{55,56} han fabricado un dispositivo de memoria de dos terminales denominado SSM (*Self-Switching Memory*). Su base de funcionamiento reside en la variación de la ocupación de los estados superficiales presentes en las discontinuidades creadas por las zanjas según las condiciones de polarización. Mientras el potencial aplicado se encuentre dentro de un rango (-0.8 V, $+0.8$ V) la curva $I-V$ permanece invariable (se comportaría como un SSD). Sin embargo, cuando se aplica un potencial negativo del orden de -1.0 V aparece un efecto de histéresis muy pronunciado, Figura I.17(a).

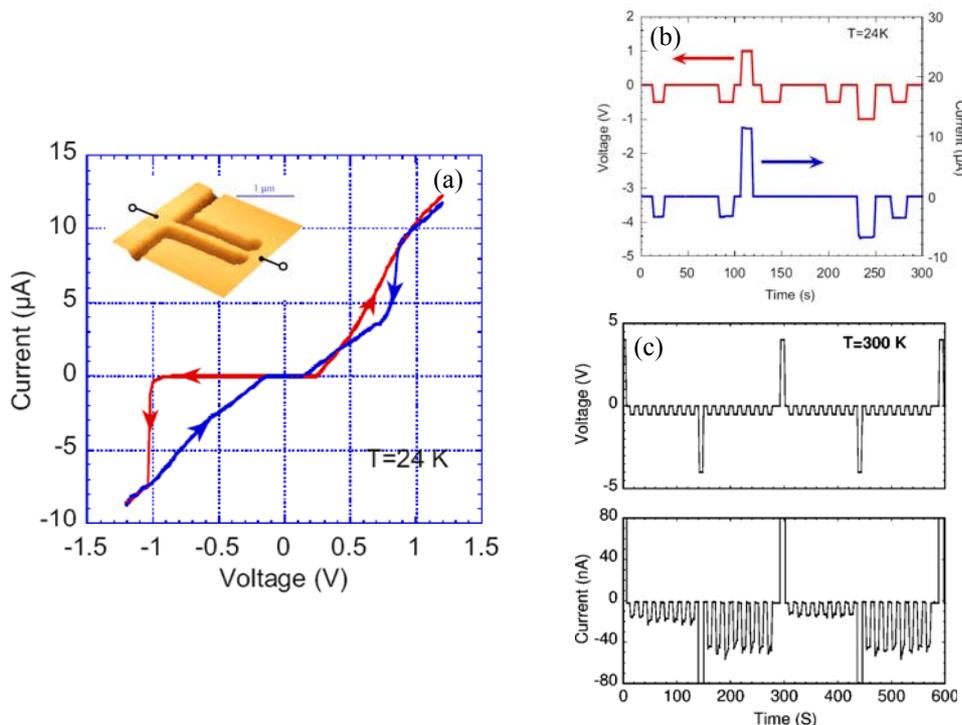


Figura I.17. (a) Fenómeno de histéresis en las características $I-V$ en un SSM medido a $T=24$ K. (b) Medidas del efecto memoria efectuadas usando pulsos *test* de detección de -0.5 V y voltajes de ± 1.0 V para cambiar de estado de memoria. (c) Mismo tipo de resultados que en (b) pero para temperatura ambiente y usando pulsos de ± 4.0 V para la conmutación. Figuras tomadas de las Ref. 55 y 56.

El acusado aumento de la corriente surge como consecuencia de una liberación de carga superficial (por efecto túnel) que aumenta la conductividad del canal, de manera que tenemos valores no nulos de corriente para polarización en inversa. Si ahora aumentamos el potencial aplicado en dirección ascendente hasta +1.0 V los estados superficiales se vuelven a llenar por emisión termoiónica de los electrones del canal, de manera que, al volver a la región inversa de polarización el diodo aparece de nuevo cortado. Este efecto de histéresis se puede utilizar para aplicaciones de memoria. Por ejemplo, usando pulsos de valor -0.5 V tendremos corriente aproximadamente nula (correspondiente a un estado de memoria lógica “0”) o de -2.5 μA (definido como un “1” lógico). La conmutación entre estos estados se efectúa mediante la aplicación de potenciales de valor ± 1.0 V. Como demostración, en la Figura I.17(b) se representan las medidas experimentales a 24 K de la corriente a través del diodo para las diferentes condiciones de polarización que acabamos de explicar. Este comportamiento se ha verificado hasta señales de frecuencia de 10 kHz (el límite de conmutación está acotado por el tiempo de captura y emisión de las trampas, que es del orden del μs). El efecto memoria también se ha comprobado a temperatura ambiente, Figura I.17(c). La retención de carga es de casi 10 h a temperaturas criogénicas y del orden de unos pocos minutos para temperatura ambiente (varios órdenes de magnitud mayor que la de las memorias semiconductoras DRAM).

Este tipo de estructura demuestra la posibilidad de sacar provecho de los efectos de superficie, que normalmente suelen ser perjudiciales y causantes del deterioro en el funcionamiento de muchos dispositivos, por lo que deliberadamente se intentan evitar.

I.2.2. Simulaciones Monte Carlo de nanodispositivos

Antes de presentar algunos de los resultados de simulaciones Monte Carlo relativos a los dispositivos que acabamos de analizar, explicaremos en este apartado cuál es el papel que juega la carga superficial y cómo incorporarla en nuestro simulador.

I.2.2.a. Implementación en un simulador

Recordemos que los estados permitidos dentro del gap, que modifican la densidad de carga libre en las cercanías de las fronteras, aparecen como consecuencia de la ruptura del potencial periódico en la superficie de los semiconductores. La complicación de los modelos analíticos, y especialmente el hecho de que los estados superficiales dependan tanto de la tecnología de fabricación como de los materiales involucrados en las discontinuidades, hacen que los fenómenos de superficie supongan un problema muy delicado y difícil a la hora de analizar sus efectos tanto en el transporte electrónico como en las características de salida de dispositivos semiconductores. Para calcular la concentración de electrones en dichos estados superficiales hace falta conocer no sólo su espectro de energías sino también su estadística de ocupación, es decir, tener información de las probabilidades o tiempos característicos de captura y emisión. Con el valor de estas magnitudes se podría realizar un análisis correcto de la dinámica de electrones en los estados superficiales, usándolas en un estudio microscópico que hiciera un tratamiento estocástico de los procesos de captura/emisión. Sin embargo, el desconocimiento específico de propiedades como densidad, sección eficaz o distribución en energía hacen también poco viable este método en nuestro modelo de trabajo.

El método de estudio y simulación de dispositivos utilizado en esta Memoria es la técnica Monte Carlo. Esto supone un problema añadido. Al tratarse de una simulación que necesita reproducir la dinámica de los portadores en iteraciones con pasos temporales muy pequeños (menores que el tiempo asociado al recorrido libre medio entre procesos de scattering ~ 0.1 ps), como las constantes de tiempo asociadas a los estados superficiales son grandes, del orden de los μ s, la simulación Monte Carlo es inabordable. Es decir, tan elevada constante de tiempo significa que si usamos un paso de 0.01 ps en cada iteración tendríamos que simular cien millones de iteraciones para conseguir un tiempo total de 1 μ s. Esto no tendría mucho sentido, ya que en promedio dichos estados sólo habrían cambiado su ocupación una vez, por lo que habría que simular varios μ s para poder reflejar de manera correcta la dinámica de estos estados. Un inconveniente adicional al correcto modelado de la dinámica de los estados superficiales es que su ocupación vendrá marcada no sólo por su nivel de energía sino también por el perfil de potencial y posición del nivel de Fermi en la región colindante. Este último aspecto es la base de funcionamiento de

los SSMS⁵⁵ comentados anteriormente y que se simularán en el Capítulo V de esta Tesis.

Por todas estas razones necesitamos una manera más simple de incluir en nuestras simulaciones los estados permitidos que aparecen en la banda prohibida de energía de la estructura de bandas de un semiconductor. Estos estados de superficie, que al capturar electrones originan una carga superficial negativa, modifican el comportamiento de los portadores cerca de la frontera, curvando las bandas de conducción y de valencia (Figura I.18).

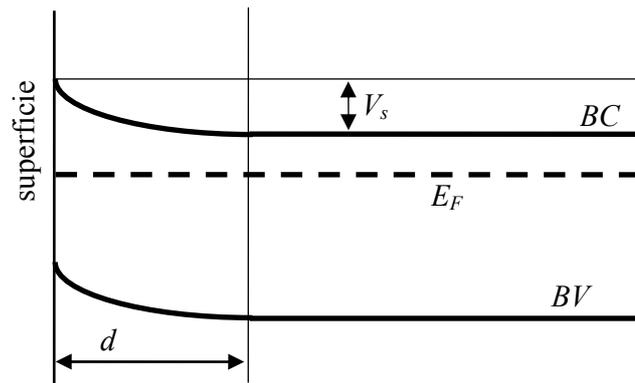


Figura I.18. Diagrama de bandas cerca de una superficie.

I.2.2.b. Significado y efecto de la carga superficial

En un planteamiento macroscópico, la curvatura de las bandas haría que el nivel de Fermi en la frontera quedara situado aproximadamente en el centro del gap. El valor del potencial de superficie es entonces el correspondiente a la curvatura de las bandas de energía como se muestra en la Figura I.18. Como consecuencia de esta curvatura de las bandas tendremos una zona de vaciamiento cerca de la superficie que se extiende una distancia d . Sólo los portadores con energía suficiente para superar la barrera creada por el potencial de superficie llegarán a la misma. Precisamente serán éstos los susceptibles de ser atrapados por los estados superficiales de energía. Por tanto se podría pensar en caracterizar los estados superficiales a través de un potencial de superficie V_s .^{69,96} Este potencial sería el responsable de la capa de vaciamiento producida en el semiconductor (siempre pensando que en estos casos estamos hablando de un potencial negativo, para materiales tipo n). Por otra parte es conveniente señalar que dicho potencial no está referido a la tierra del dispositivo, sino que es un potencial interno. Por esta razón no es posible incluirlo como un potencial aplicado en una simulación microscópica

como es el método de Monte Carlo, sino que es necesario hacerlo mediante una densidad de carga superficial, la cual se relaciona con el valor del potencial de superficie mediante⁶⁹

$$\sigma = \sqrt{2qN_D V_s \varepsilon}, \quad (\text{I.4})$$

donde N_D es la concentración de impurezas ionizadas y ε la permitividad del material semiconductor. El problema es que el valor del potencial superficial (o la carga superficial) no es fácil de medir experimentalmente.

Para el estudio de dispositivos electrónicos se ha propuesto un modelo sencillo que intente reflejar el efecto que los estados superficiales puedan tener en su comportamiento. El modelo consiste en asignar unas densidades superficiales de carga fija a las discontinuidades del semiconductor. Para dispositivos en los que la distancia de vaciamiento sea pequeña en comparación con sus dimensiones, este modelo de carga superficial constante ha funcionado correctamente para explicar cualitativamente⁷¹⁻⁷⁸ e incluso cuantitativamente⁴⁰ el funcionamiento de muchas estructuras. Por el contrario, cuando las dimensiones sean comparables con ese vaciamiento o menores que él, no es un buen modelo y de hecho no ha sido capaz de reproducir determinados resultados experimentales⁷⁹ obtenidos en uniones en T con ramas muy estrechas. No detallamos en este momento las particularidades de las medidas ya que constituyen el bloque fundamental del Capítulo II. Simplemente diremos que se trata de estructuras en las que el vaciamiento teórico producido por la carga superficial es mayor que la anchura de uno de los canales semiconductores de la estructura, lo que causa efectos no deseados en la simulación. Esto ocurre porque si mantenemos el mismo valor de la carga fija que para canales anchos estamos violando la neutralidad de carga (las cargas superficiales negativas superan a las cargas positivas provenientes de las impurezas donadoras ionizadas que se asignan al canal), dando como consecuencia resultados erróneos en las simulaciones. Para detallar este aspecto consideremos un canal semiconductor con una anchura W menor que el doble de la distancia de vaciamiento (Figura I.19). Como consecuencia de la curvatura de las bandas la concentración ya no es la del material (considerado infinito), sino que nos encontramos en una situación en la que el canal está casi vaciado. Asimismo, si aplicamos un potencial, las bandas de energía subirán o bajarán en el diagrama de energía, modificando la ocupación de los estados

superficiales. Vemos entonces que la geometría del dispositivo, los potenciales aplicados al canal, la posición del nivel de Fermi y los tiempos de captura y emisión marcarán de manera determinante la física de los fenómenos de superficie.

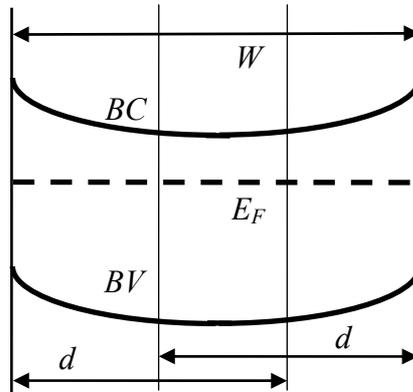


Figura I.19. Canal de anchura $W \leq 2d$.

Por todo ello y como uno de los objetivos principales de este trabajo, con el fin de reproducir la ocupación media de los estados superficiales, propondremos en esta Memoria un modelo de carga superficial auto-consistente⁸⁷⁻⁸⁹ con la concentración de portadores y el campo eléctrico, ya que un modelo de carga fija no es válido en el caso de canales muy estrechos. En este modelo la carga superficial no es fija en el tiempo ni constante en todos los puntos de la superficie de discontinuidad, sino que tiene la posibilidad de evolucionar (dependerá de la polarización). Para ello se usan una serie de parámetros que permiten controlar tanto el incremento (captura) como la disminución (emisión) de la carga superficial en función de la densidad de portadores y el campo eléctrico en las proximidades de las fronteras. Si esa carga de superficie aumenta, el vaciamiento será más pronunciado, y si la carga se reduce, la disminución de la concentración de portadores cerca de las fronteras no será tan acusada. En la sección II.3 del Capítulo II se darán todos los detalles del algoritmo de cálculo usado para incluir la carga superficial en nuestro simulador.

De manera paralela a los estudios y publicaciones de carácter experimental que se acaban de presentar en la sección anterior nuestro grupo de investigación ha realizado numerosos estudios mediante simulaciones Monte Carlo en el mismo tipo de dispositivos. Las particularidades del método se explicarán pormenorizadamente en el siguiente capítulo. A continuación presentaremos algunos resultados con la única pretensión de mostrar en líneas generales las ventajas y posibilidades de la herramienta para modelizar dichos nanodispositivos. Se ha usado el modelo de

densidad de carga fija y constante para incluir los efectos de superficie. Los valores usados son del orden de $\sigma/q=0.1\text{--}0.3\times 10^{12}\text{ cm}^{-2}$, que corresponden a 10–30 nm de vaciamiento. Conviene señalar que aun tratándose de una simulación semiclásica (multimodo), el buen acuerdo con los resultados experimentales hace posible estudiar estructuras donde el transporte es predominantemente balístico, demostrando así que a temperatura ambiente los efectos de coherencia de fase tienen una influencia muy reducida.

I.2.2.c. Transporte en canales balísticos

Empezamos con el análisis de canales realizados sobre una estructura de capas de $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$.⁸⁶ Haciendo un estudio de los valores medios de magnitudes microscópicas proporcionadas por las simulaciones Monte Carlo (Figura I.20), se concluye que el transporte puede considerarse de carácter balístico o cuasibalístico a temperatura ambiente cuando la longitud del canal es igual o menor que 200 nm.

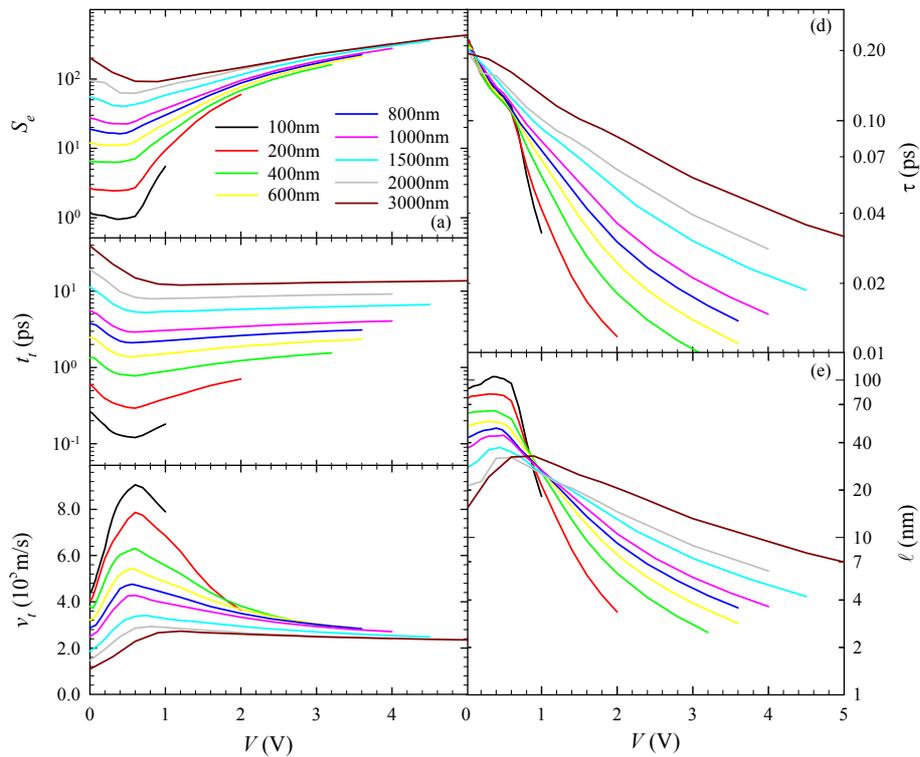


Figura I.20. Valores medios de (a) número de mecanismos de scattering S_e que sufren los electrones que cruzan el canal de cátodo a ánodo, (b) tiempo de tránsito t_i , (c) velocidad de tránsito longitudinal $v_t=L/t_i$, (d) tiempo de recorrido libre τ y (e) recorrido libre longitudinal ℓ , en función del potencial V aplicado entre los electrodos de canales de distinta longitud L y anchura $W=200$ nm.

El tiempo libre medio τ (calculado como el cociente entre el tiempo de tránsito t_t y el número de mecanismos de scattering S_e que sufren los electrones que cruzan el canal de cátodo a ánodo) en un canal de $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ es del orden de 0.2 ps para potenciales aplicados entre electrodos de $V < 0.5$ V. Para V mayores, la aparición de mecanismos de scattering intervale conlleva una reducción importante de τ . Además, otras características de transporte como son los perfiles de energía y velocidad,⁷¹ así como el comportamiento del ruido en corriente, corroboran la naturaleza balística en el transporte electrónico en estos canales.^{86,97}

I.2.2.d. Rectificador con obstáculo triangular

El rectificador balístico presentado en el apartado I.2.1.a también se ha analizado mediante nuestro simulador.^{72,78} Para mostrar la capacidad intrínseca del mismo para trabajar a muy alta frecuencia, en la Figura I.21 se presenta la respuesta (a) en valor medio y (b) instantánea del potencial V_{LU} frente a señales periódicas de diferente frecuencia y de amplitud 0.2 V (límite para la aparición de mecanismos intervale) aplicadas en modo *push-pull*. La eficiencia rectificadora es mayor para baja temperatura (carácter balístico más acentuado) y se mantiene hasta frecuencias del orden de THz, incluso a temperatura ambiente.

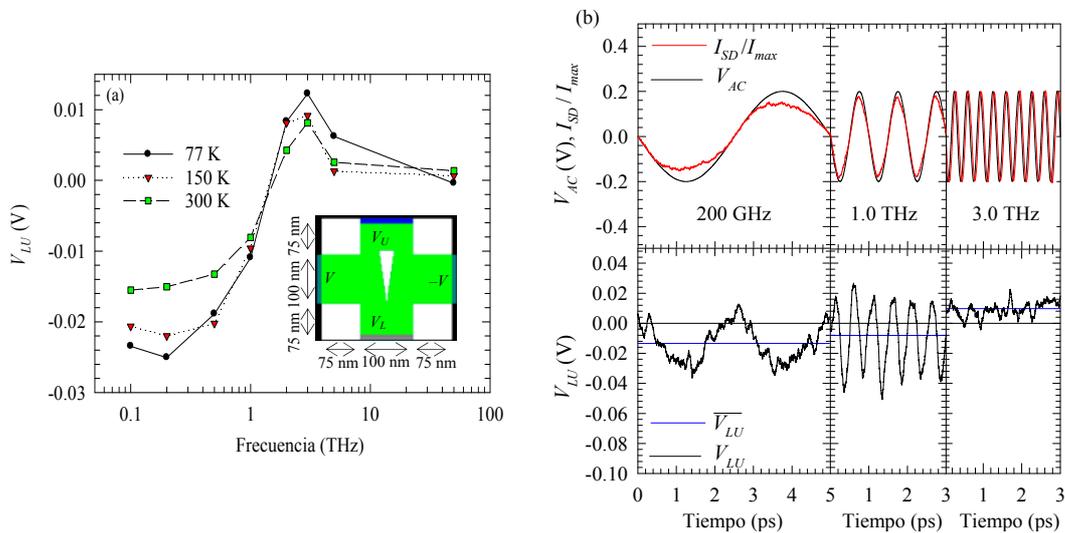


Figura I.21. (a) Valor medio de la respuesta V_{LU} en función de la frecuencia de la entrada de amplitud $V_{AC}=0.2$ V aplicada en modo *push-pull* en la estructura del *inset*. (b) Análisis temporal de la respuesta de la estructura frente a señales periódicas de frecuencia 0.2, 1 y 3 THz a temperatura ambiente. $\sigma/q=0.25 \times 10^{12}$ cm^{-2} . Este resultado fue la base para la fabricación del rectificador presentado en la Figura I.5.

Nuestras simulaciones indican que para aumentar la eficiencia rectificadora se puede disminuir el ángulo α entre la rama vertical superior y las ramas laterales.⁷⁷ En la Figura I.22 se presentan los resultados para un rectificador con y sin obstáculo triangular, donde el ángulo α varía desde 45° a 90° . Se puede apreciar un aumento de la sensibilidad rectificadora a medida que disminuye α , incluso sin obstáculo central, debido a la asimetría de la inyección de portadores en las ramas superior e inferior. Por ejemplo para $\alpha=45^\circ$ se obtiene una eficiencia de un 20% para $V=0.2$ V.

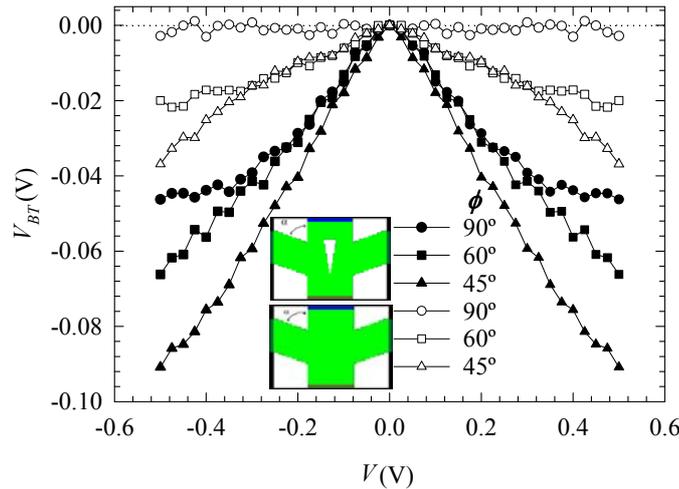


Figura I.22. Potencial entre las ramas superior e inferior V_{BT} cuando se polariza en modo *push-pull* la rama izquierda y derecha de un rectificador balístico como el del *inset* para diferentes ángulos α entre las ramas laterales. Los símbolos negros (blancos) corresponden a la estructura con (sin) obstáculo triangular en su interior. $T=300$ K. $\sigma/q=0.25 \times 10^{12}$ cm⁻².

De esta manera nuestra herramienta de simulación Monte Carlo puede usarse para dar las directrices de diseño, realimentando así los procesos tecnológicos.[†] La principal ventaja de este rectificador frente a las uniones de tres terminales es que la salida posee su propia referencia (la rama inferior) y por tanto no es necesaria la polarización *push-pull*, que añade una mayor dificultad tecnológica.

I.2.2.e. Multiplexor/Demultiplexor

Una de las posibles aplicaciones de las TBJs consiste en la fabricación de un multiplexor/demultiplexor (MUX/DEMUX) mediante la colocación de una puerta lateral.⁷¹ En función del potencial aplicado a la puerta V_G , el flujo de electrones proveniente de la fuente (contacto izquierdo) será dirigido hacia el contacto derecho ($V_G > 0$) o a la rama central ($V_G < 0$), Figura I.23(a). Para demostrar la operatividad

[†] Estos resultados fueron aprovechados por Knop *et al.* para fabricar los rectificadores de la Ref. 18

intrínseca a alta frecuencia de este dispositivo, se ha representado la respuesta dinámica de la corriente en las ramas derecha y central para una señal cuadrada periódica de 1 THz y amplitud 0.75 V, observándose su buena respuesta dentro de unos límites aceptables.

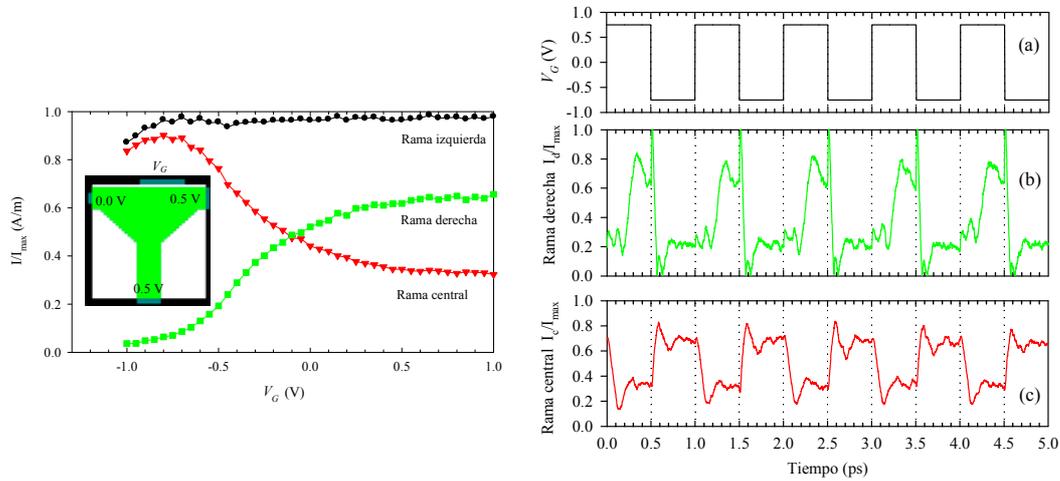


Figura I.23. Densidad de corriente normalizada en cada una de las ramas de un MUX/DEMUX (inset) en función del potencial de puerta para $V_R=V_C=0.5$ V. Respuesta dinámica de la corriente en la (b) rama derecha y (c) central para (a) una señal de 1 THz aplicada a la puerta del MUX/DEMUX. $\sigma/q=0.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

1.2.2.f. Uniones de tres terminales en forma de T e Y

En lo referente a uniones en de tres terminales en forma de T e Y, en la Figura I.24 se muestra la influencia del ángulo de apertura α de las ramas horizontales en los valores del potencial de fondo de la rama central V_C .⁷²

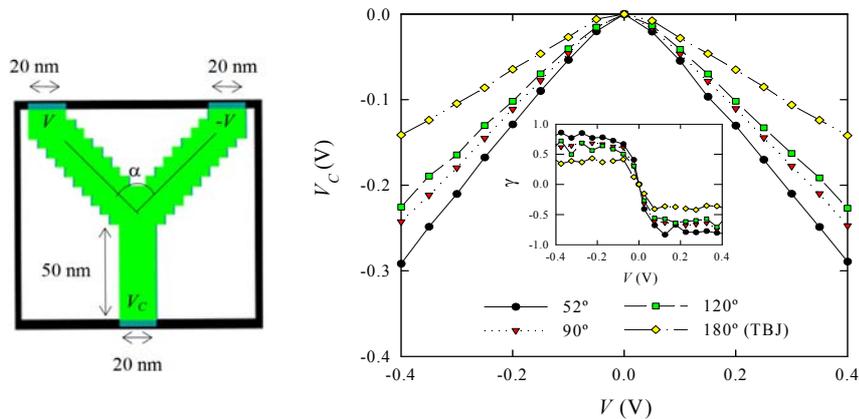


Figura I.24. Resultados Monte Carlo del potencial fondo de la rama vertical V_C y del parámetro de conmutación $\gamma=dV_C/dV$ de uniones en Y con diferentes ángulos de apertura α . A la izquierda se muestra la topología y dimensiones de la estructura cuando $\alpha=90^\circ$. $\sigma/q=0.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. $T=300$ K.

Los valores de V_C son más negativos para las uniones con menor α debido a que la penetración en la rama central, como consecuencia de la geometría y de un mayor campo eléctrico, es más pronunciada (y no sólo causada por la componente vertical de velocidad térmica como en una TBJ, $\alpha=180^\circ$). Por esta razón, la concentración de electrones en la rama central crece de manera muy significativa con la polarización aplicada V , aumentando así la curvatura de V_C-V .

I.2.2.g. Diodos autoconmutantes

Mediante el uso de nuestro simulador Monte Carlo, Mateos *et al.*⁷⁴⁻⁷⁶ han analizado diferentes SSDs (geometría mostrada en el *inset* de la Figura I.25) modificando la anchura W del canal. Los resultados muestran un buen acuerdo con respecto a las medidas experimentales que aparecían en la Figura I.13(b) (sección I.2.1.c) pese a que se ha usado una menor anchura (60 nm) de las zanjas laterales para tener un mejor control del canal. Ello evita la presencia de corriente inversa para canales anchos. Los aspectos más representativos de las curvas $I-V$ se reproducen correctamente, es decir, aparece rectificación en la corriente y el potencial umbral aumenta para canales estrechos.

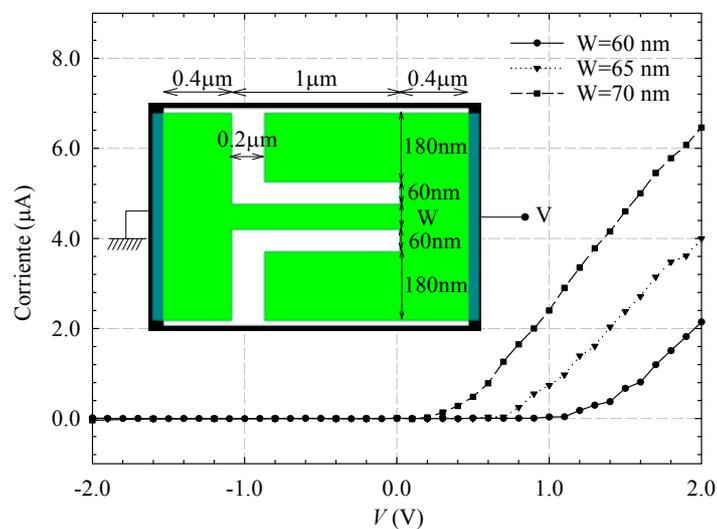


Figura I.25. Características $I-V$ del dispositivo con la geometría y dimensiones mostradas en el *inset* para diferentes valores de la anchura del canal W . Valor de la carga superficial $\sigma/q=0.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

I.3. HETEROESTRUCTURAS III–V DE ALTA MOVILIDAD

Después de presentar los principales nanodispositivos que aparecen en la literatura, es necesario en esta sección describir la estructura de capas usada en su fabricación. Conviene recordar que los detalles del proceso tecnológico que aquí presentamos son los usados en el desarrollo de los dispositivos fabricados en IEMN. Explicaremos el papel que juega cada una de las capas y las propiedades de los materiales que las componen. Resumiremos cuáles son las diferentes etapas necesarias (epitaxia, obtención de la mesa y contactos óhmicos) para la fabricación de los dispositivos. Por último, describiremos cuáles son actualmente los principales escollos que limitan la frecuencia máxima de funcionamiento de nuestras estructuras.

I.3.1. Capas y estructura de bandas

La heteroestructura de capas usada para la fabricación de dispositivos balísticos es básicamente la misma que la desarrollada para la fabricación de los transistores de efecto de campo de electrones de alta movilidad (HEMTs).^{9,10} La diferencia fundamental es que, dado que intentaremos que en los nanodispositivos el transporte sea de naturaleza lo más balística posible, la optimización de la geometría para evitar que haya conducción fuera del canal juega un papel esencial. En la realización de este tipo de dispositivos, y con la finalidad de disminuir lo máximo posible la resistencia del canal, existe un compromiso entre la densidad de carga en el canal (dada por el dopaje de la capa δ) y la movilidad electrónica. Esto requiere un proceso de optimización del espesor, dopaje y tecnologías de fabricación de la heteroestructura. La estructura epitaxial está compuesta por capas de tipo $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ (Figura 1.26) crecidas sobre un sustrato de InP que pasamos a detallar

- El búfer de $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ que limita la aparición de defectos en el canal.
- El canal constituido por un material semiconductor de pequeño gap y alta movilidad ($\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ en nuestro caso), donde los electrones se mueven en el pozo de potencial formado por la estructura de bandas de energía.
- Una capa separadora (*spacer*), fabricada con el mismo material que la capa *Schottky*, que tiene como misión alejar a los electrones libres del canal de las impurezas ionizadas y evitar el scattering con impurezas remotas.

- La capa δ (δ -doped layer) de espesor muy pequeño, formada por átomos de un elemento donador, en este caso Si, cuya función es proveer electrones al canal.
- Una capa o barrera Schottky no dopada y de material de gap grande (InAlAs en nuestro caso).
- La capa superior (cap layer) dopada con impurezas donadoras para obtener un contacto óhmico fiable y compensar el vaciamiento producido por la carga de superficie.

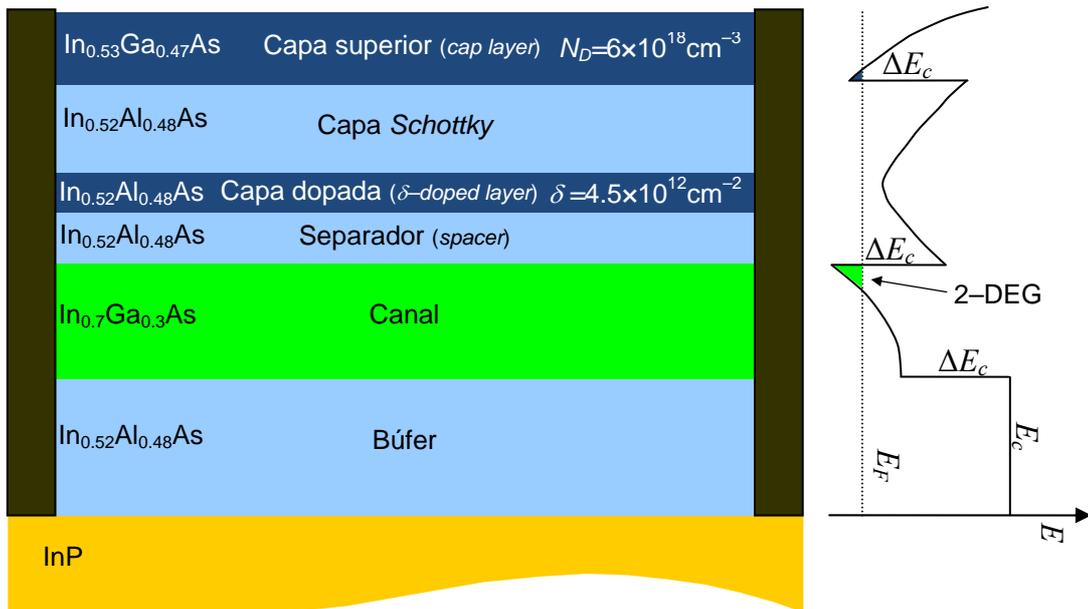


Figura 1.26. Estructura de capas de InAlAs/InGaAs usada para la fabricación de nanodispositivos balísticos. A la derecha se ha dibujado de manera esquemática el diagrama de bandas de energía asociado.

La elección del material que forma el canal es clave para asegurar que el transporte sea balístico. Para ello, es necesario conseguir una masa efectiva lo menor posible. Ésta se obtiene usando la proporción adecuada de In en el material $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ del canal, teniendo en cuenta que sea posible tecnológicamente crecerlo sobre InAlAs, ya que el *strain* compresivo (provocado por el diferente parámetro de red) que aparece cuando $x > 0.53$, hace que se generen dislocaciones. El valor usado en este trabajo será de $x = 0.7$ ya que es el máximo que hace posible obtener un canal con una anchura suficientemente grande sin que los efectos de las dislocaciones sean apreciables.⁸⁶ A la derecha de la Figura 1.26 hemos representado el diagrama de la banda de conducción asociado a la heteroestructura. En cada una de las heterouniones aparece una barrera de energía (ΔE_c) que impide el paso de los

electrones (a menos que tengan una energía cinética en la dirección perpendicular superior a la altura de la barrera), originando una zona de acumulación en el canal muy estrecha denominada gas bidimensional (2-DEG, *two-dimensional electron gas*).⁸

I.3.2. Gas bidimensional

Se entiende por gas bidimensional la capa de electrones, de espesor muy reducido, que se forma en la frontera de la unión de un material de gap ancho (InAlAs o AlGaAs) con otro de gap estrecho (InGaAs o GaAs). En ella, la energía está cuantizada en la dirección transversal del movimiento. En la Figura I.27 se ha representado la estructura de bandas de la heterounión $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ antes de su unión. Puesto que en equilibrio el nivel de Fermi tiene que ser constante, al ponerse en contacto ambos materiales se producirá una zona de acumulación muy estrecha y próxima a la unión. Es decir, se forma un pozo de potencial de manera que la conducción se canaliza paralela a la heterounión. Cuanto mayor sea la diferencia de energías entre las bandas de conducción se tendrá mejor confinamiento y una mayor densidad superficial de electrones n_s . El problema crítico del diseño de heteroestructuras es obtener altas movilidades, un recorrido libre medio lo mayor posible y disminuir al máximo la resistencia cuadrada R_{\square} de la estructura, todo ello a temperatura ambiente. Para este tipo de materiales se pueden alcanzar movilidades de $14000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, que significa un recorrido libre medio de unos 180 nm (estimado mediante la velocidad térmica y la ecuación I.2), que son más de un orden de magnitud mayores que los obtenidos para una capa de inversión de silicio.

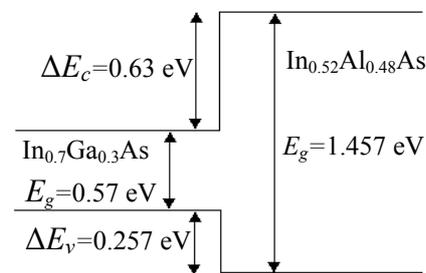


Figura I.27. Esquema de la estructura de bandas de $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$

I.3.3. Optimización de los parámetros de la heteroestructura

El proceso de optimización de la fabricación se efectúa mediante el ajuste tanto del grosor del separador (*spacer*), d_s , como del dopaje, δ , de la capa dopada. La idea es encontrar una situación de compromiso con el fin de, por una parte, conseguir una adecuada separación de las impurezas remotas para tener suficiente transferencia de

carga al canal sin aumentar en exceso la interacción coulombiana y, por otra parte, ajustar el valor de δ para tener una cantidad lo suficientemente grande de portadores en el canal, pero evitando la presencia de corrientes parásitas difusivas en las capas dopadas. Para analizar la influencia tanto de d_s como de δ , se han fabricado y caracterizado diferentes heteroestructuras, obteniendo su n_s y μ_H por medio de medidas experimentales de efecto Hall apoyadas por simulaciones Monte Carlo.^{71,86} Los valores óptimos de estas magnitudes son $d_s=10$ nm y $\delta=4.5\times 10^{12}$ cm⁻², que proporcionan una movilidad Hall $\mu_H=14000$ cm²/Vs y $n_s=3\times 10^{12}$ cm⁻². La otra capa donde hay impurezas (dopada intencionadamente) es la capa superior. Ésta debe ser del espesor adecuado para compensar el vaciamiento producido por la carga superficial, pero intentando reducir al mínimo la presencia de portadores libres, ya que la corriente debería producirse en su mayoría por los portadores del canal que son los de alta movilidad. Mediante medidas Hall del material volúmico, se estima que la carga superficial tiene un valor de 6×10^{12} cm⁻², por lo que con un dopaje de $N_D=6\times 10^{18}$ cm⁻³ la anchura apropiada de la capa superior es 10 nm.

I.4. PROCESOS TECNOLÓGICOS Y CARACTERIZACIÓN DE NANODISPOSITIVOS

Una vez repasada la bibliografía actual sobre los nanodispositivos y explicadas sus bases de funcionamiento y los materiales semiconductores que los componen, en esta sección mostraremos cuáles son los principales procesos tecnológicos necesarios para su fabricación. Detallaremos asimismo los métodos experimentales de caracterización y puntualizaremos los principales problemas a resolver, que limitan tanto las medidas como la operación en frecuencia de las estructuras de tamaño nanométrico. Las técnicas aquí descritas son las usadas en la fabricación y caracterización de uniones de tres terminales realizadas en el IEMN.⁷⁹⁻⁸¹

I.4.1. Epitaxia

La epitaxia de materiales se realiza mediante MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) sobre un sustrato semiaislante de InP. El crecimiento epitaxial se efectúa en dos etapas, la primera para la deposición gaseosa de los elementos V y la segunda de efusión de materiales puros III y V. Para garantizar la homogeneidad de crecimiento se hace rotar el porta-sustrato (de 2 pulgadas de diámetro) de manera que se crezca una monocapa por segundo. Este crecimiento es controlado in-situ por la observación de los “motivos” depositados por difracción RHEED (*Reflexion High Energy Electron Diffraction*), controlando así perfectamente los espesores de las diferentes capas. También se usa una técnica de difracción doble de rayos X (XPS, *X-ray photoemission spectroscopy*) para verificar la composición atómica de la epitaxia y la calidad de las interfases. La temperatura normal de crecimiento (medida con un pirómetro óptico) es de 520 °C. Para el caso del búfer se opera a 420 °C para aumentar su resistividad y evitar la segregación de impurezas desde la superficie de esta capa hacia la capa activa del canal. También hay que tener cuidado en el crecimiento de la capa δ , que tiene lugar a 520 °C, para que no haya segregación de Si hacia la capa Schottky o el *spacer*. Así, durante el crecimiento de los dos primeros nanómetros de la capa δ se debe bajar la temperatura del sustrato a 450 °C, y aumentarla para crecer el resto de capas.

I.4.2. Descripción del proceso tecnológico

Para la fabricación de estructuras de tamaños del orden de centenares de nanómetros es necesario usar técnicas de litografía electrónica, ya que la litografía óptica está limitada por la longitud de onda del ultravioleta. La máquina de litografía electrónica usada en la fabricación de los dispositivos balísticos en forma de T que dispone el IEMN (LEICA EBPG5000+) tiene una resolución de 7 nm, una de las mejores de Europa.

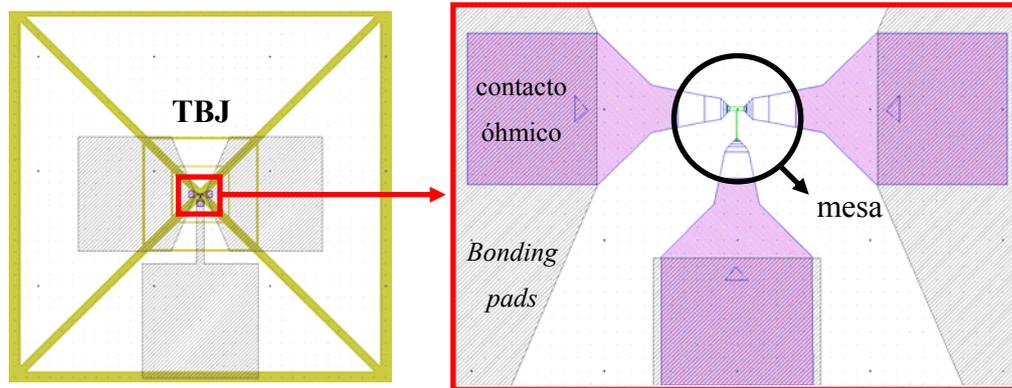


Figura I.28. Esquemas de las marcas de alineamiento y máscaras usadas para la fabricación de nanodispositivos. Ejemplo para una TBJ. Extraído de la Ref. 81.

La técnica usada para la definición de la geometría de los nanodispositivos en materiales III–V es el grabado (*etching*), ya sea húmedo (*wet*) o seco (*dry*). Para el grabado húmedo se emplean soluciones químicas altamente diluidas de ($\text{H}_3\text{PO}_4/\text{H}_2\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$), obteniéndose una velocidad de grabado de 25 nm/min. Se trata de una técnica isótropa, lo que implica poco control lateral del grabado de las capas y por tanto una pérdida de control en la anchura. Por el contrario, el grabado seco, en este caso por reactivo iónico (RIE, *Reactive Ion Etching*), es anisótropo, de manera que se puede reducir el grabado lateral. Se usa una mezcla de $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{Ar}$ con una velocidad de 10 nm/min que posibilita un mejor control de las dimensiones del dispositivo. En Tabla I.1 se resumen los valores obtenidos experimentalmente para los parámetros rugosidad, vaciamiento y penetración lateral del grabado o *etching undercut* para ambos métodos.⁹⁸ Estos parámetros nos dan indicaciones que permiten optar por un tipo de grabado u otro y proporcionan las reglas de diseño apropiadas para la fabricación de estos dispositivos.

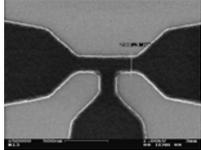
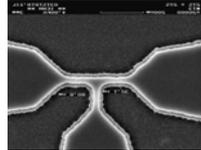
$T=300\text{ K}$	Grabado seco RIE	Grabado húmedo
Rugosidad	Baja	Alta
Resistencia cuadrada R_{\square}	$190\ \Omega$	$190\ \Omega$
Penetración lateral	Dimensiones similares a las de las máscaras	$> 60\text{ nm}$
Anchura de vaciamiento W_d	$(40 \pm 10)\text{ nm}$	$(40 \pm 10)\text{ nm}$
Tamaño mínimo	$(80 \pm 10)\text{ nm}$	$(200 \pm 10)\text{ nm}$
Imagen SEM		

Tabla I.1. Comparación de parámetros para grabado seco (RIE) y húmedo.

Las etapas para la fabricación de componentes balísticos son las siguientes

- Definición de las marcas de alineamiento, que se usan para el alineamiento de la litografía en los diferentes niveles de máscaras (Figura I.28).
- Fabricación de la mesa. Las etapas están esquematizadas en la Figura I.29. Consiste en aislar eléctricamente unos componentes de otros así como de los electrodos mediante un grabado de las capas superiores, penetrando hasta el búfer. Se pueden usar dos tipos de resinas, positiva (las zonas irradiadas desaparecen con el revelado) o negativa (la zonas irradiadas se mantienen durante el revelado). La resina negativa utilizada es de alta resolución HSQ (*Hydrogen SilsesQuioxane*), que se diluye con MBK (*Methyl IsoButyl Ketone*) para obtener el espesor deseado (del orden 15–20 nm). Para eliminar la resina HSQ se usa un ácido fluorhídrico ($\text{NH}_4\text{F}:\text{HF}$). La dosis del grabado (RIE, en nuestro caso) es clave en la obtención de las dimensiones deseadas (determinadas por la máscara). En función del espesor de resina y la dosis se produce un aumento de las dimensiones de la mesa definidas en la máscara. Para controlar estos aspectos se realizan dos etapas litográficas denominadas mesa pequeña (para la zona activa del componente) y mesa grande (para los accesos a la zona activa). En la Figura I.30 se presentan imágenes SEM que muestran la influencia de la dosis en las diferentes mesas. También es posible construir la mesa en una sola etapa, modificando y ajustando en el programa de la definición de las máscaras la dosis aplicada por el haz electrónico, lo que supone un ahorro de tiempo importante.

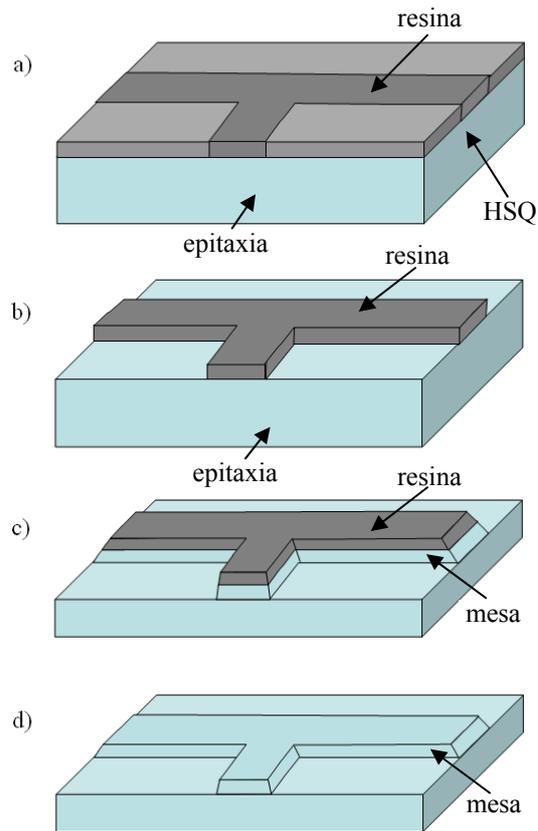


Figura I.29. Etapas para la fabricación de la mesa mediante resina negativa de alta resolución HSQ. (a) Litografía electrónica, (b) revelado, (c) grabado RIE y (d) retirada de la resina. Extraído de la Ref. 81.

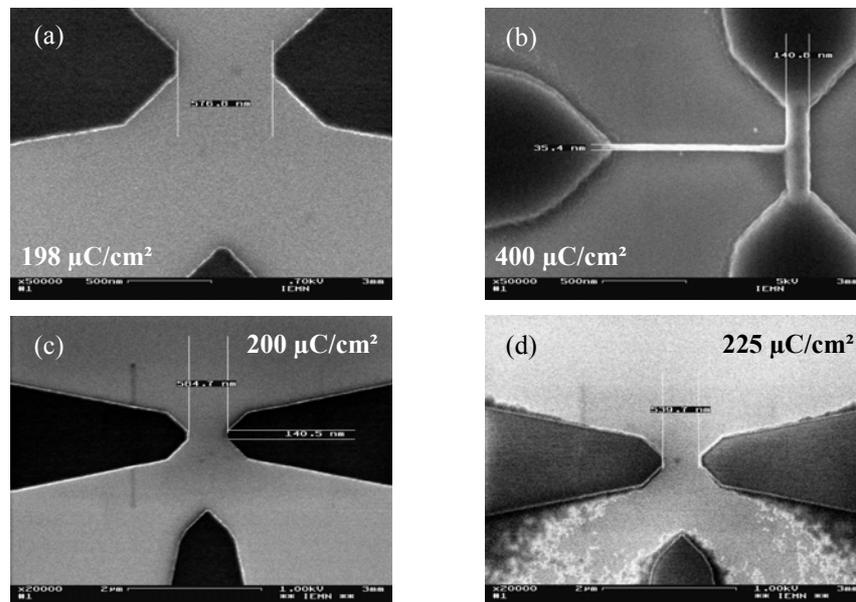


Figura I.30. Imágenes MBE de la mesa grande (a) y la pequeña (b) de uniones balísticas en T. En (c) y (d) se muestra la influencia de la dosis en un mismo motivo de mesa grande. Extraído de la Ref. 81.

Uno de los problemas tecnológicos derivados de la utilización de la HSQ es la retirada de la misma. Aparecen residuos de resina que no se pueden eliminar, quedando restos entre la heteroestructura y la metalización de los contactos óhmicos que se depositan sobre la mesa. Esto puede producir una notable disminución en la corriente en algunos dispositivos. Este problema se resuelve mediante el siguiente el siguiente proceso, en el que se utiliza la opción de resina positiva. Se inicia con la deposición de una capa de nitruro de silicio Si_3N_4 (excelente pasivador de estos componentes basados en InGaAs/InAlAs) que recubra toda la superficie de la mesa, y que solamente es retirada (mediante una disolución de fluoruro de amonio) en la zona de la metalización para realizar la litografía de los contactos. El proceso, esquematizado en la Figura I.31, lo describimos a continuación. Primero mediante PECVD (*Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition*) se deposita una capa de Si_3N_4 sobre la epitaxia. A continuación, usando una litografía de dos capas de alta resolución tipo P(MMA–MAA)/PMMA, se define la geometría y dimensiones de las mesas. Se realiza una metalización con Ge/Au (muy fina, 40 nm, pero muy estable) que sirve de máscara para el grabado RIE (plasma CHF_3/CF_4) del Si_3N_4 . Con otro grabado RIE del mismo tipo se define finalmente la mesa sobre la heteroestructura. La retirada del metal se hace por grabado húmedo.

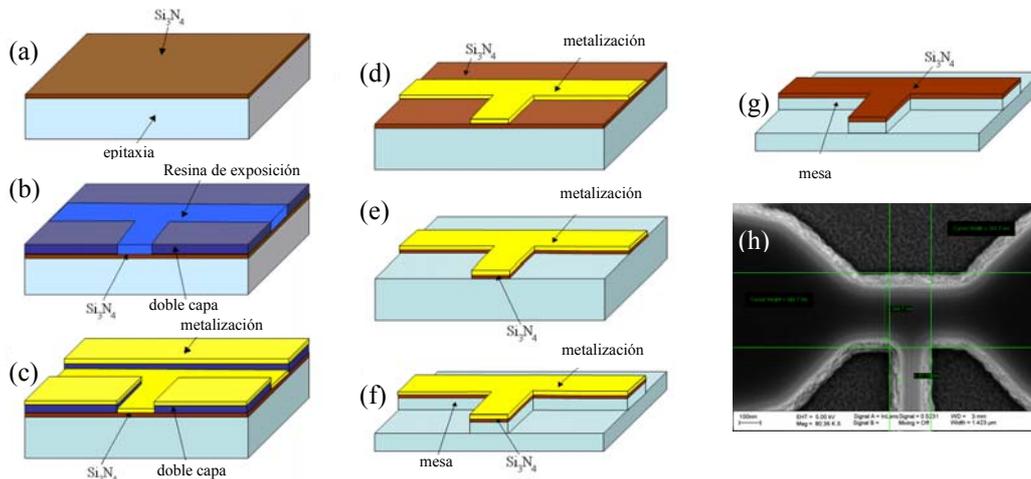


Figura I.31. Fabricación de la mesa mediante una máscara de nitruro de silicio. (a) Deposición de Si_3N_4 por PECVD. (b) Litografía de doble capa de resina positiva. (c) Metalización Ge/Au. (d) Lift-off. (e) Grabado RIE de Si_3N_4 . (f) Grabado RIE de la heteroestructura. (g) Retirada del metal. (h) Imagen SEM final de la mesa. Extraído de la Ref. 81.

- Deposición de contactos óhmicos. Se trata de metalizaciones Ni/Ge/Au/Ni/Au que se difunden en la heteroestructura gracias a un recocido de difusión tipo flash para obtener resistencias de contacto lo menores posibles (los valores típicos son del orden de 0.1–0.25 Ω .mm).
- Deposición de *Bonding pads*. Son la zonas que se usan para posar las puntas de caracterización en régimen estático y para fabricar las guías coplanares en los componentes medidos a alta frecuencia.

I.4.3. Caracterización estática y dinámica

En lo que respecta a la caracterización de este tipo de dispositivos, las medidas eléctricas en régimen estático se hacen de manera estándar. Describimos brevemente el procedimiento utilizado en el IEMN para la toma de medidas de uniones en T en oblea (*on-wafer*). Se utiliza una fuente de alimentación con tres canales como la mostrada en la Figura I.32 para polarizar las dos ramas horizontales y medir el potencial de la rama central. El software utilizado para el manejo de la fuente y el análisis de datos es el programa *IC-CAP* de la firma *Agilent*. Su versatilidad permite seleccionar el tipo polarización que se aplica o mide (corriente o potencial), su valor e incrementos temporales. Cada una de las sondas se conecta mediante cables coaxiales a las puntas (*Picoprobe* en este caso) de caracterización estática que se posan sobre la oblea con la ayuda de un microscopio, como se observa en la Figura I.32.



Figura I.32. Imágenes del banco de medida con puntas *Picoprobe* y de la fuente de alimentación de HP Agilent 4142B usadas en la caracterización estática de nanodispositivos.

En lo que respecta a la caracterización dinámica y de alta frecuencia, dado que en esta Memoria no se presentarán apenas resultados de este tipo, simplemente

mostramos un resumen. Mediante el uso de un analizador vectorial (VNA, *Vectorial Network Analyzer*) se extraen los parámetros S del dispositivo junto con los elementos parásitos y el cableado de acceso. Es necesario, por tanto, extraer de las medidas la parte correspondiente a los elementos anteriores al plano de referencia (marcado por las puntas de radiofrecuencia posadas sobre la oblea), pérdidas y posibles errores de medida. Por ello es necesario todo un proceso de estándares de calibrado (las técnicas dependen de la banda de frecuencias y del tipo de dispositivos). Éstas consisten en combinaciones de cortocircuitos (*short*), circuitos abiertos (*open*), líneas de transmisión (*line*), reflexiones (*reflect*), etc.

I.4.4. Problemas y dificultades tecnológicas

Es evidente que, dado que nos encontramos con unas dimensiones muy reducidas, aparecen problemas y dificultades tecnológicas que limitan las prestaciones esperadas de estas estructuras. La frecuencia máxima de funcionamiento es uno de los parámetros más importantes a optimizar en el diseño. Como hemos mencionado anteriormente, la característica fundamental de los materiales para fabricar dispositivos balísticos reside en la alta movilidad de los electrones. Para el $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$, la movilidad puede llegar a valores de $15000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ para temperatura ambiente. Utilizando resultados proporcionados por simulaciones Monte Carlo⁸⁶ o mediante una estimación de transporte puramente balístico, se obtienen velocidades del orden de 10^8 cm/s para un potencial aplicado de 0.5 V (antes de que aparezcan fenómenos intervale) entre terminales de un canal de 100 nm . Así, un dispositivo de este tamaño (al alcance de las técnicas de litografía actuales) tendría un tiempo de tránsito de 0.1 ps , lo que implicaría una frecuencia máxima intrínseca de funcionamiento de unos 10 THz . Nótese que se trata de una estimación en la que no se tienen en cuenta las capacidades parásitas que empeoran las prestaciones finales de la estructura. Aunque las simulaciones han mostrado que las frecuencias de corte intrínsecas pueden alcanzar el rango de THz, las partes extrínsecas son las más críticas a la hora de limitar la frecuencia máxima de funcionamiento. A continuación explicamos algunos de los problemas que es necesario investigar para mejorar el funcionamiento final de los nanodispositivos.

I.4.4.a. Capacidades parásitas y alta impedancia

Debido a las capacidades entre los contactos la frecuencia de corte se ve reducida ya que introducen un retraso temporal. Podemos estimarlas suponiendo que dichas capacidades están en paralelo con las resistencias de la unión, dando como resultado una frecuencia $f_c = 1/2\pi\tau$ donde $\tau = RC$ representa el tiempo de relajación de la red RC. El circuito equivalente completo³⁸ de una unión en Y sería el representado en la Figura I.33, donde aparecen las resistencias intrínsecas (no lineales), capacidades extrínsecas e intrínsecas (desde el punto de vista de las simulaciones Monte Carlo también son extrínsecas) y resistencias de accesos.

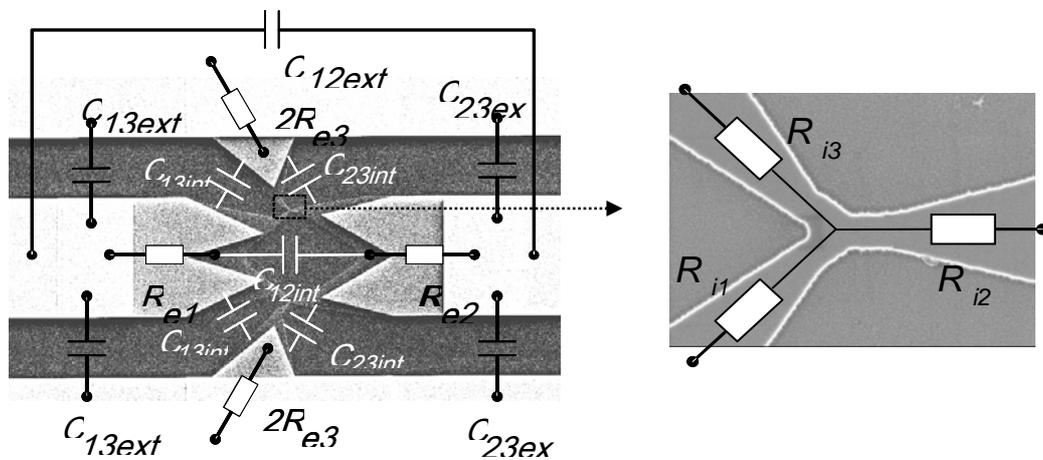


Figura I.33. Circuito equivalente de una unión en Y con todos sus elementos: resistencias intrínsecas (no lineales), capacidades extrínsecas e intrínsecas y resistencias de accesos. Dibujo extraído de la Ref. 38.

Parece claro entonces que el objetivo es reducir estas capacidades al mínimo valor posible. Mediante la optimización del diseño coplanar se pueden obtener capacidades del orden de 1 fF. Esto significa que, sabiendo que las resistencias de los dispositivos son del orden de $k\Omega$, tendríamos 1 THz de frecuencia máxima. Otra opción para aumentar la frecuencia de corte es la fabricación de una estructura de capas con múltiples canales de InGaAs en paralelo, Figura I.34(b), para reducir la resistencia (suponiendo que la capacidad es la misma ya que la geometría de los accesos no cambia). L. Bednarz³⁹ utiliza un modelo de resistencias no lineales para reproducir el comportamiento dc de las medidas experimentales de uniones en Y. El estudio de la influencia de los diferentes elementos de las estructuras se realiza mediante la implementación de éstos, Figura I.33(a), en el software ADS, siendo las capacidades intrínsecas " C_{xxint} " entre los contactos metálicos las de mayor valor y por ello las que limitan la frecuencia máxima de operación.

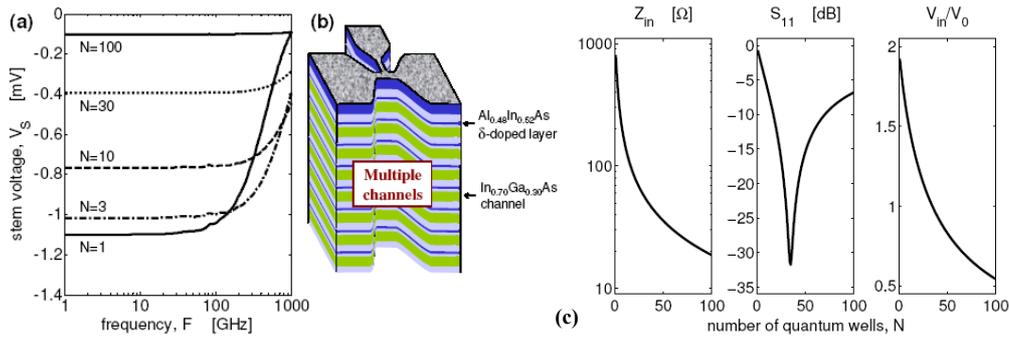


Figura I.34. (a) Simulación del potencial de fondo V_S , (c) impedancia de entrada Z_{in} , coeficiente de reflexión Γ y V_{in}/V_0 (V_0 es la amplitud de la señal incidente y V_{in} es el voltaje a la entrada de la YBJ) en función de la frecuencia para 1, 3, 10, 30 y 100 canales en paralelo esquematizados en (b). $P_{in}=0.1$ mW. Extraído de la Ref. 39.

Usando esta técnica de simulación se ha encontrado que los valores del potencial V_S de uniones en Y en función de la frecuencia, Figura I.34(a), muestran una disminución de la sensibilidad y un aumento de la frecuencia de corte a medida que se incrementa el número de canales en paralelo.³⁹ La mínima reflexión se encuentra cuando Z_{in} es igual a los 50 Ω de la fuente (adaptación de impedancias), corresponde a aproximadamente 30 canales en paralelo. En este caso la sensibilidad con respecto a un solo canal se ve reducida a la tercera parte pero la frecuencia de corte aumenta notablemente, Figura I.34(a). Por otra parte, en términos del ruido electrónico, dicha paralelización mejora la relación señal/ruido de estas estructuras. Esto las convierte en estructuras muy adecuadas, por ejemplo, como detectores de señales de muy alta frecuencia. Experimentalmente, la paralelización supone una enorme dificultad tecnológica, pero se han conseguido fabricar estructuras con 3 canales, obteniéndose dispositivos con resistencias de 200 Ω, con lo que la frecuencia máxima teórica aumentaría hasta los 5 THz. Las complicaciones radican en el hecho de que los contactos óhmicos han de penetrar lo suficiente para llegar a todos los canales. Por el contrario, en los SSDs, por tratarse de una estructura planar, es mucho más sencillo realizar geometrías con diodos en paralelo.

I.4.4.b. Adaptación de impedancias

Es bien conocido en teoría de circuitos que para conseguir transferir la máxima potencia (minimizar las reflexiones) de la fuente a la carga es necesario que la impedancia de salida de la fuente sea igual a la impedancia de entrada de la carga $\bar{Z}_{in} = \bar{Z}_{out}^*$. Esto es conocido como problema de adaptación de impedancias. Ésta es

una de las dificultades técnicas que se presenta a la hora de hacer medidas en nanouniones, ya que su impedancia es muy grande (del orden de $k\Omega$) comparada con la impedancia estándar de $50\ \Omega$ de los equipos de medida. Una solución es fabricar en la misma oblea semiconductor donde se crecen las uniones guías de microondas coplanares (CPW, *Coplanar waveguide*) cuya impedancia varía de la forma

$$Z_{in} = Z_C \frac{Z_L + Z_C \tanh(\gamma L)}{Z_C + Z_L \tanh(\gamma L)}, \quad (I.5)$$

donde Z_C es la impedancia característica de la línea (depende de la geometría y permitividad), Z_L es la impedancia de carga, γ es la constante de propagación de la línea y L su longitud. En la Ref. 39 se muestra cómo, usando una línea de $100\ \Omega$ ($500\ \mu\text{m}$ de longitud, que significa cuarto de onda para $50\ \text{GHz}$), se obtiene un incremento notable de la sensibilidad de hasta $55\ \text{mV/mW}$ a $50\ \text{GHz}$ (frecuencia para la cual la línea está adaptada), Figura I.35(b); mientras que para unos accesos simples, Figura I.35(a), se tiene una respuesta plana en frecuencia igual a la de la rectificación dc. Se podrían conseguir también mejores resultados realizando la adaptación mediante líneas con diferente permitividad y cuya anchura varía con la posición (*tapered transformers*), pero esta solución no se ha implementado por el momento.

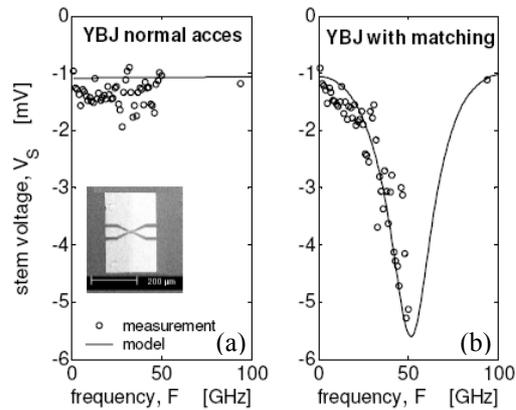


Figura I.35. Medidas dc del potencial de fondo de dos uniones YBJ en paralelo con (a) accesos normales y (b) con una línea de $100\ \Omega$. $P_{in}=0.1\ \text{mW}$. Extraído de la Ref. 39.

CAPÍTULO II

MÉTODO DE MONTE CARLO

MODELO DE CARGA SUPERFICIAL

El objetivo de este capítulo es explicar el método de Monte Carlo de dispositivos,^{65-70,82-86} usado para calcular los resultados que presentaremos en este trabajo. Consiste en un tratamiento puramente microscópico del transporte electrónico. Se estudia la dinámica de los portadores en el espacio real y de momentos, en el seno de un dispositivo semiconductor sometido a la acción de un campo eléctrico autoconsistente y de la red cristalina en la que se encuentran inmersos. Cuando se estudia un sistema físico de estas características aparecen parámetros gobernados por distribuciones de probabilidad que son muy complicadas de manipular. La solución a este problema consiste en manejar tales funciones por medio de distribuciones matemáticas pseudo-aleatorias sencillas, mediante el método de Monte Carlo;⁹⁹ en particular la que se ha usado es una distribución uniforme entre 0 y 1 (disponible en cualquier compilador). Dado que en los dispositivos que se van a analizar los efectos de superficie son claves, necesitamos añadirlos al simulador, por ello en este capítulo se explican detalladamente las particularidades del modelo utilizado para la inclusión de la carga superficial en el simulador. Además de obtener la respuesta estática y dinámica de los dispositivos, una de las magnitudes básicas a tener en cuenta en su diseño es el ruido. Explicaremos cuáles son los fenómenos físicos que dan lugar a la aparición del ruido y cómo se calcula éste en nuestras simulaciones.

II.1. ¿POR QUÉ? ¿EN QUÉ CONSISTE?

El método de Monte Carlo es un procedimiento numérico estadístico (es decir, no determinista) usado para aproximar expresiones matemáticas complejas o no evaluables analíticamente. Se denominó así en referencia al Casino de Montecarlo por ser ésta “la capital del juego de azar” y en donde el uso de la ruleta como un generador simple de números aleatorios motiva el nombre del método, ya que éste se basa en el uso de números aleatorios para dar solución a gran variedad de problemas matemáticos. La determinación del número π (aguja de Bufón),¹⁰⁰ el cálculo de trayectorias de neutrones (proyecto Manhattan, Enrico Fermi en 1930)¹⁰⁰ o el cómputo de integrales definidas multi-variables son algunas de las primeras y más conocidas aplicaciones del método.¹⁰⁰ El nombre y el desarrollo sistemático como herramienta de investigación de los métodos de Monte Carlo datan aproximadamente de 1950 con el desarrollo de la bomba de hidrógeno durante la Segunda Guerra Mundial en el laboratorio de los Álamos. Gracias al avance en el diseño de los ordenadores, cálculos Monte Carlo que en otro tiempo hubieran sido inconcebibles, hoy día son asequibles para la resolución de muchos problemas. Actualmente se trata de un método usado en gran parte de los campos de la Ciencia, entre ellos podríamos mencionar: física computacional, química, cromodinámica cuántica, finanzas y economía, diseño de formas aerodinámicas e incluso en videojuegos y en arquitectura.

Dentro de la electrónica el método de Monte Carlo se ha consagrado como una de las mejores opciones frente a otros modelos como el de deriva-difusión¹⁰¹ o el hidrodinámico¹⁰² para resolver la ecuación de transporte de Boltzmann,¹⁰¹ que es la que describe la dinámica electrónica, y así analizar de un modo semiclásico el funcionamiento de los dispositivos semiconductores. Se trata de un modelo completamente microscópico, por lo que precisa de una enorme potencia de cálculo frente a los otros métodos, pero con grandes ventajas respecto a ellos: incluye el detalle de los mecanismos de scattering, efectos de portadores calientes, transporte no estacionario y balístico (fundamental en dispositivos nanométricos) de modo intrínseco y es apropiado para análisis del ruido y fluctuaciones. La esencia del método es la manipulación de distribuciones de probabilidad complejas mediante números aleatorios¹⁰³ uniformemente distribuidos entre 0 y 1.

II.2. GENERALIDADES DEL SIMULADOR MONTE CARLO DE DISPOSITIVOS

El método de Monte Carlo se basa en una descripción microscópica del movimiento de portadores en el interior de un dispositivo, de forma que es posible resolver la ecuación de Boltzmann. En líneas generales podemos describir el modelo de la siguiente forma. Se trata del análisis de un grupo de portadores de carga que se mueven en el seno de un material semiconductor sometidos a la acción de un campo eléctrico. La red cristalina dota al portador de una masa efectiva de acuerdo con la estructura de bandas y su energía, y además es la causante de las interacciones o mecanismos de scattering que interrumpen el movimiento de los portadores. El campo eléctrico es actualizado en cada paso temporal a partir de la distribución instantánea de carga y del dopaje, y seguidamente se realiza el movimiento de las partículas en secuencias de recorridos libres interrumpidos por las interacciones con impurezas o fonones. Para efectuar un correcto tratamiento del problema se ha de resolver la ecuación de Poisson de modo autoconsistente con la distribución de partículas, incluyendo además las condiciones de contorno adecuadas tanto para la ecuación de Poisson como para la dinámica de los portadores. Las distribuciones matemáticas pseudo-aleatorias se usarán en diferentes fases de la simulación: en el cálculo del recorrido libre, en la elección de los mecanismos de scattering, en el estado final después del scattering, en la aceptación o rechazo de dichas interacciones (para tener en cuenta el principio de exclusión de Pauli) y en la inyección de portadores a través de los contactos. Esto es, en resumen, en lo que consiste el método de Monte Carlo de dispositivos (*ensemble* Monte Carlo o Monte Carlo multipartícula).

II.2.1. Sistema físico, parámetros y condiciones iniciales

Un ejemplo de la topología de los nanodispositivos objeto del estudio de este trabajo se muestra en la Figura II.1 (uniones en T). Éstos están fabricados con capas de InAlAs/InGaAs sobre un sustrato de InP, y el canal es de $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$, en donde la mayor proporción de In sirve para aumentar la movilidad de los electrones y por tanto su recorrido libre. Esta estructura de capas es la misma que la de los dispositivos HEMT de InAlAs/InGaAs fabricados con las modernas tecnologías que operan en los rangos de longitudes de onda submilimétricas,¹⁰⁴ haciéndolos así

compatibles en una integración conjunta para beneficiarse de sus ventajas complementarias y alcanzar el rango de los terahertzios. La estructura de capas es la misma que se presentó en la sección I.3, es decir: (i) capa superior, capa dopada de manera que se puedan establecer contactos óhmicos en los terminales, (ii) capa Schottky, (iii) capa dopada δ , capa dopada muy fina que proporciona los electrones al canal, (iv) separador, aleja físicamente el canal de las impurezas ionizadas de la capa δ para reducir la interacción coulombiana de largo alcance, (v) canal, capa no dopada donde tiene lugar el transporte, (vi) búfer, no dopado.

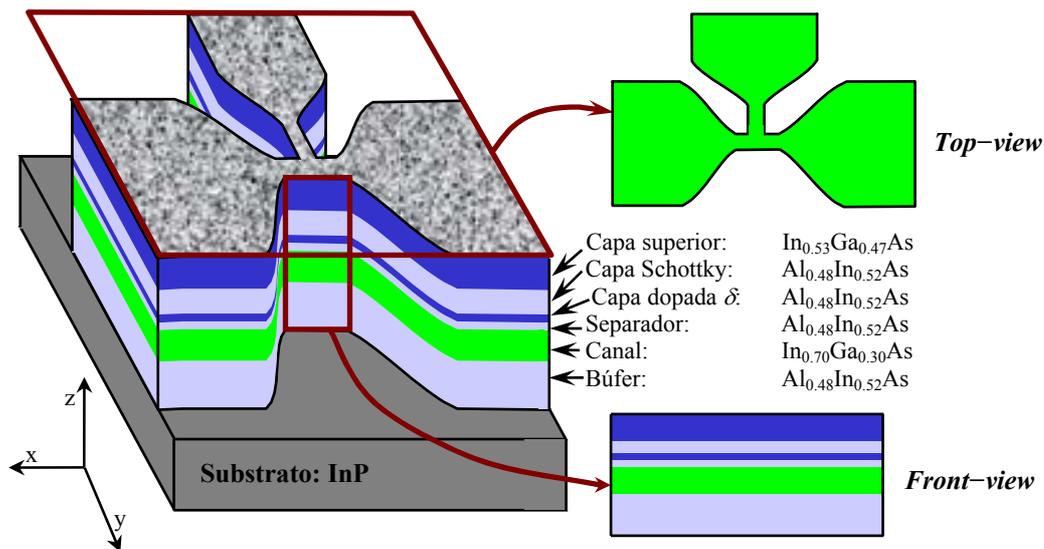


Figura II.1. Esquema tridimensional de la geometría y estructura de un nanodispositivo balístico con forma de T. Esquemas bidimensionales de las simulaciones Monte Carlo *front-view* (FV) y *top-view* (TV).

Un correcto estudio de los nanodispositivos precisaría una simulación 3D para tener en cuenta las cargas superficiales laterales y la geometría de las estructuras, pero ésta aún no se ha desarrollado. En su lugar se realizan simulaciones 2D, denominadas *front-view* (FV) y *top-view* (TV), esquematizadas en la Figura II.1. La primera (FV, plano xz) tiene en cuenta todos los detalles de la estructura de capas, mientras que la geometría en la dirección y se analiza mediante la simulación TV (plano xy) que será la usada en este trabajo. Esta simulación TV no incluye los detalles de la heteroestructura en la dirección z , pero sí la geometría en el plano xy , que juega un papel determinante en el estudio de nanodispositivos balísticos o cuasibalísticos. Por lo tanto, sólo simulamos el canal de $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ que es no dopado. La incorporación de las cargas fijas presentes en la estructura de capas se tiene en cuenta mediante la asignación de un dopaje “virtual” N_{db} al canal. Este

dopaje sólo interviene en la resolución de la ecuación de Poisson, ya que no se consideran las interacciones de los electrones con las impurezas ionizadas asociadas al mismo, al no encontrarse físicamente en el canal. Además, se asigna una densidad de carga superficial negativa a las interfases semiconductor–dieléctrico para incluir la influencia de los estados superficiales originados en el proceso tecnológico del grabado de capas. La modelización e influencia de esta carga superficial será el núcleo fundamental de este trabajo. Los resultados que se presentarán en los sucesivos capítulos corresponden todos a simulaciones tipo TV. La validez de este modelo está confirmada por diversos estudios previos.^{71,72,77,78}

Para comprender mejor cuáles son los pasos que sigue una simulación Monte Carlo, a continuación explicamos de manera resumida los principales bloques del diagrama de flujo (Figura II.2) que componen el programa, haciendo especial hincapié en aquellos aspectos novedosos que se han incorporado respecto a trabajos anteriores desarrollados en el Área de Electrónica de la Universidad de Salamanca. En concreto se detallará el tratamiento de las cargas superficiales, objetivo principal de esta Memoria, y la inclusión de los accesos en el dominio de la simulación con el fin de caracterizar correctamente los dispositivos estudiados.

En primer lugar se debe adoptar un modelo físico para el semiconductor o los semiconductores de que está formado el dispositivo. Para este estudio se ha considerado una estructura de bandas esféricas no parabólicas⁶⁶ cuya expresión es

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

o lo que es lo mismo

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha\gamma(\mathbf{k})}}{2\alpha}, \quad (\text{II.1b})$$

siendo \hbar la constante de Planck, ε la energía, \mathbf{k} el momento, m^* la masa efectiva y α el factor de no parabolicidad. En nuestro modelo consideramos la primera subbanda de conducción formada por el valle Γ , cuatro valles L equivalentes y tres valles X equivalentes. En las estructuras que se estudiarán sólo tendremos electrones contribuyendo a la corriente (materiales tipo n).

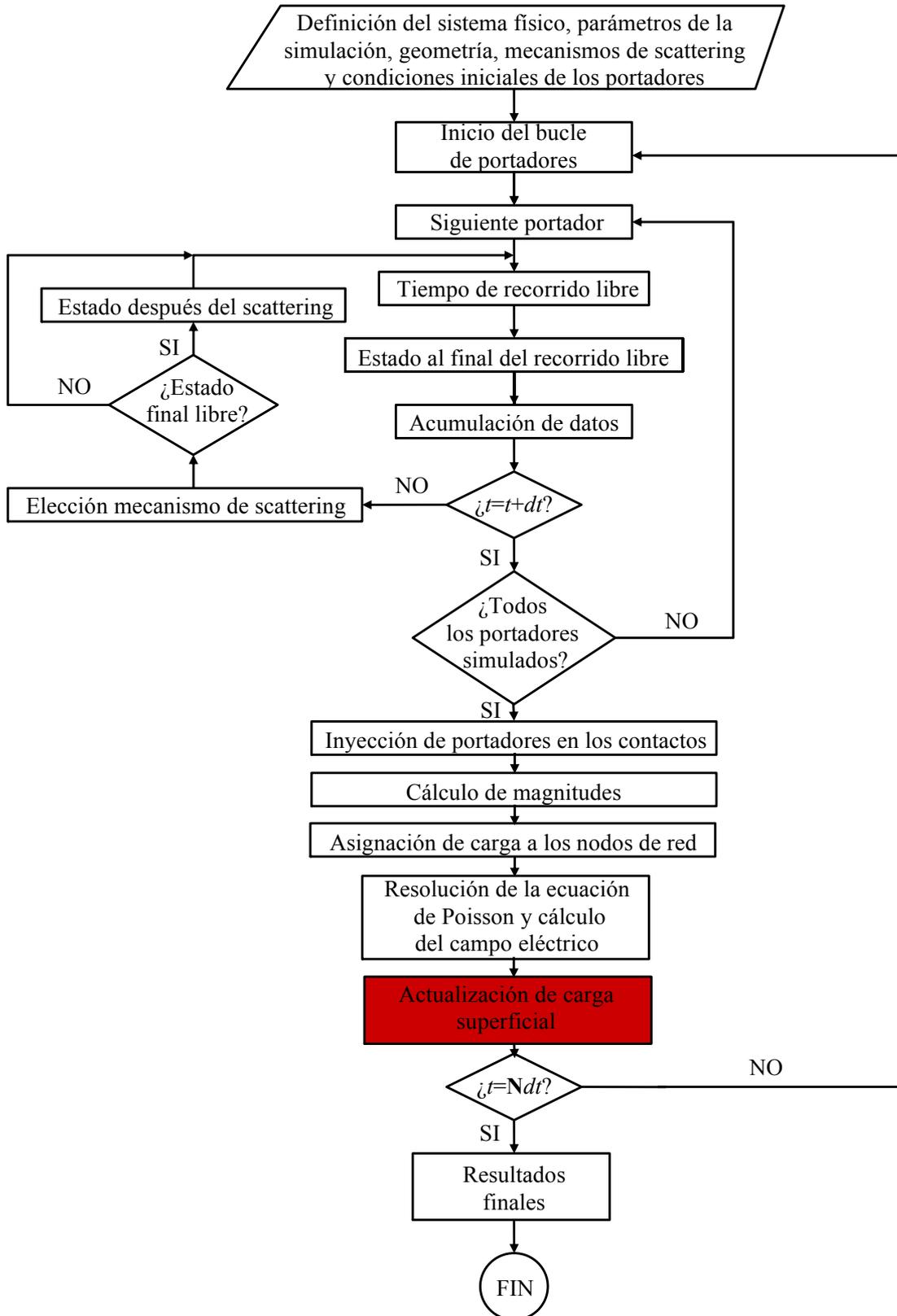


Figura II.2. Diagrama de bloques del método de Monte Carlo de dispositivos.

La simulación comienza con la definición del dispositivo. Se establece la estructura del mallado espacial que se usa para la resolución de la ecuación de Poisson. Además se especifican las dimensiones geométricas tanto del dispositivo como de las celdas de la discretización. Con el fin de hacer una correcta simulación del campo eléctrico, el tamaño de las celdas debe ser menor que la longitud de Debye del material.⁶⁶ Evidentemente se introducen el dopaje, permitividades, potenciales aplicados, número de iteraciones, paso temporal, temperatura, etc. También se deben localizar la posición de contactos y fronteras de discontinuidad.

La ubicación inicial de los electrones se hace de manera aleatoria, intentando que se asemeje a la que existiría en equilibrio. Así se genera una concentración igual al dopaje con una distribución de Fermi–Dirac en energía.

El paso temporal dt en el que se actualiza el campo eléctrico debe estar limitado superiormente por el inverso de la frecuencia de plasma,¹⁰⁵ f_p , y por el tiempo de relajación dieléctrica,¹⁰⁶ τ_d , de manera que dt debe cumplir que $f_p dt < 2$ y $dt < \tau_d$.

Los parámetros del material $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ usados en las simulaciones se proporcionan en la Tabla II.1, donde el efecto de *strain* se ha introducido disminuyendo ligeramente la masa efectiva para dar cuenta del aumento asociado de la movilidad ($m^*=0.037 m_0$, masa efectiva en el valle Γ). El resto de parámetros son los mismos que los que se utilizan para el $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$.¹¹⁵

El estudio exacto de un dispositivo exigiría simular el movimiento de todos los portadores, lo cual es inviable desde el punto de vista de tiempo de cálculo. Para resolver este problema se simula un número menor de partículas N_s , denominadas *superpartículas*, cada una de las cuales representará una carga de eN/N_s , definiéndose el parámetro *EPE* (equivalente partícula electrón) como $EPE=N/N_s$.

Parámetro	In _{0.7} Ga _{0.3} As		
	Γ	L	X
Densidad (Kg/m^3)	5.545		
Velocidad del sonido (m/s)	4.756		
Permitividad relativa estática	11.35		
Permitividad relativa óptica	13.88		
Energía del fonón LO (eV)	0.0328		
Energía del GAP (eV)	0.57		
Pot. scattering aleación (eV)	1.50		
	Γ	L	X
Masa efectiva (m^*/m_0)	0.037	0.258	0.538
Factor de no-parabolicidad α (eV^{-1})	1.255	0.461	0.204
Nivel de energía desde Γ (eV)	0.0	0.61	1.11
Núm. de valles equivalentes	1	4	3
Pot. def. acústico (eV)	5.887	10.84	9.657
Pot. def. óptico ($10^{10} eV/m$)	0.0	3.0	0.0
Energía fonón óptico no-polar (eV)	0.0	0.0369	0.0
Pot. def. intervale ($10^{10} eV/m$)			
desde Γ	0.0	7.83	11.32
desde L	7.83	6.40	6.80
desde X	11.32	6.80	8.54
Energía fonón intervale (eV)			
desde Γ	0.0	0.0254	0.0257
desde L	0.0254	0.0248	0.0302
desde X	0.0257	0.0302	0.0284

Tabla II.1. Parámetros físicos del In_{0.7}Ga_{0.3}As.

II.2.2. Mecanismos de scattering

En un cristal ideal en el que no hubiera interacciones de los electrones con la red, el campo eléctrico los aceleraría indefinidamente. Pero en realidad el cristal presenta imperfecciones y vibraciones de los átomos que lo componen, provocando que los electrones en su movimiento sufran una serie de colisiones, llamadas mecanismos de scattering, que ralentizan su marcha y tienden a mantenerlos cerca del mínimo de banda.

Hay diferentes tipos de mecanismos de scattering, que pueden clasificarse utilizando los siguientes criterios

- Dependiendo de su energía después de la interacción

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

Inelásticos: Hay un intercambio de energía con la partícula con la que colisiona.

- Dependiendo del ángulo entre el momento antes y después de la interacción

Isótropos: La dirección del momento del electrón después del scattering no depende de la dirección de su momento inicial.

Anisótropos: La probabilidad del estado final es mayor cuando no hay un cambio importante de dirección del momento del electrón.

- Dependiendo del origen físico de los mecanismos de scattering

Scattering con defectos: El scattering debido a la interacción con **impurezas ionizadas** (elástica y anisótropa), que en nuestro simulador se evalúa a partir del modelo de Brooks–Herring.^{70,107} El scattering de **aleación**, que aparece sólo en materiales compuestos.⁶⁹

Scattering portador–portador: No serán consideradas las interacciones entre electrones ya que incorporarlas es muy costoso a nivel de cálculo, y su influencia en los resultados es mínima dado que sólo son importantes para concentraciones altas que no alcanzaremos en este trabajo.^{108,109}

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).⁹⁴

La interacción puede producirse vía un potencial de deformación (también llamado scattering *no polar*) o ser causada por las 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 este grupo de mecanismos de scattering con la red (con fonones) consideraremos los siguientes tipos en el caso de $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$

✓ **Intervalle** (equivalente y no equivalente). Inelástico e isótropo.

Considerado independiente del tipo de fonón que lo provoca.

✓ **Acústico**. Elástico e isótropo.

✓ **Óptico polar**. Inelástico y anisótropo.

✓ **Óptico no polar**. Inelástico e isótropo. Sólo tiene lugar en los valles L.

El scattering piezoeléctrico es muy poco probable por lo que no lo incluiremos en nuestras simulaciones.

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.^{66,70,82,83,110,111} El cálculo de estas probabilidades, exceptuando el scattering con impurezas, se realiza al empezar la simulación. Los valores 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. Como hemos mencionado anteriormente, el scattering con impurezas no basta con calcularlo al principio sino que debe calcularse autoconsistentemente

con la actualización del nivel de Fermi y la temperatura electrónica,¹¹⁵ ya que éstos influyen en el factor de apantallamiento a la hora de calcular su probabilidad.

II.2.3. Dinámica de portadores

La dinámica de los electrones dentro del sólido debe estudiarse en el marco de la mecánica cuántica resolviendo la ecuación de Schrödinger con el potencial periódico de la red. Las soluciones de esta ecuación son funciones de Bloch que caracterizan el estado por medio de unos números cuánticos n , \mathbf{k} , s que son el índice de banda, vector de onda e índice de spin, respectivamente. Los autovalores son las bandas de energía $\varepsilon_n(\mathbf{k})$. Cuando aplicamos una fuerza externa \mathbf{F} , además del potencial periódico de la red, los estados evolucionan de acuerdo con la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. No es difícil demostrar⁹⁴ que para débiles perturbaciones el estado evoluciona como un estado de Bloch con su vector de onda $\mathbf{k}(t)$ satisfaciendo

$$\hbar \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} = \mathbf{F}. \quad (\text{II.2})$$

En un tratamiento cuántico del problema, todas las magnitudes relativas a los estados de Bloch se han de calcular como valores esperados. Pero la mecánica cuántica nos permite determinar algunas magnitudes tratando las soluciones como paquetes de onda, permitiendo así realizar un estudio semiclásico del problema. En concreto, la velocidad de un portador se obtendrá como la velocidad de grupo asociada al paquete de ondas que representa el movimiento de dicha partícula con una energía determinada. Para un material de bandas parabólicas (ecuación II.1b), la velocidad viene dada por

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^* (1 + 2\alpha\varepsilon)}. \quad (\text{II.3})$$

Así, el tratamiento semiclásico del problema se reduce a estudiar la evolución del vector de onda según la ecuación II.2, dotando a cada partícula de una masa efectiva m^* asociada a la estructura de bandas de la red cristalina en la que se mueve.

Como consecuencia de la presencia de mecanismos de scattering, el movimiento de los portadores se ha de separar en dos partes. La primera, el recorrido libre, en la que el movimiento de los electrones es gobernado por la acción del

campo eléctrico. Y la segunda, la actuación de los mecanismos de scattering (considerados instantáneos), que interrumpen el recorrido libre y cambian la trayectoria y energía del electrón. Como se aprecia en el diagrama de bloques de la Figura II.2, el tiempo de simulación T se divide en N intervalos dt ($T=Ndt$) en los que se simula la dinámica de todos los portadores. Para cada portador es necesario calcular cuánto dura su recorrido libre, cuál es el mecanismo de scattering que va a sufrir al terminar el “vuelo libre” y su estado final después de la colisión. Para obtener estos resultados nos apoyamos en el método de Monte Carlo. El problema es que la distribución de probabilidad que determina el tiempo del recorrido libre no es integrable analíticamente. Para resolver esta complicación usamos la técnica del autoscattering,¹¹² la cual añade un mecanismo de scattering ficticio de manera que la suma de todas las probabilidades Γ sea constante (no dependa de la energía). Con esta técnica el tiempo de recorrido libre es

$$t = -\frac{1}{\Gamma} \ln(r), \quad (\text{II.4})$$

donde r es un número aleatorio uniformemente distribuido entre 0 y 1, y Γ es la suma de las probabilidades de todos los mecanismos de scattering incluyendo el autoscattering. Para evitar la presencia de muchos mecanismos ficticios, que aumentan considerablemente el tiempo de cálculo, se efectúa una adaptación de Γ a lo largo de la simulación según la energía del electrón.⁶⁹

Durante el recorrido libre el portador evoluciona bajo la acción del campo eléctrico \mathbf{E} . Usando el modelo semiclásico expuesto anteriormente ($\mathbf{F}=-q\mathbf{E}$) las ecuaciones que rigen el movimiento del electrón son para el vector posición

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 - \frac{q\mathbf{E}t^2}{2m^*(1+2\alpha\varepsilon)} + \frac{\hbar\mathbf{k}_0t}{m^*(1+2\alpha\varepsilon)}, \quad (\text{II.5a})$$

y para el vector de onda

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 - \frac{q\mathbf{E}t}{\hbar}, \quad (\text{II.5b})$$

donde \mathbf{r}_0 y \mathbf{k}_0 son la posición y el momento del electrón al comienzo del recorrido libre.

Una vez determinado el tiempo de recorrido libre se escoge mediante la técnica Monte Carlo el mecanismo de scattering que va a sufrir el electrón. En el caso de que sea un autoscattering el estado no cambia y continúa el recorrido libre.

Por otra parte, cuando la concentración de electrones en el semiconductor es muy elevada (superior a 10^{17} cm^{-3} en InGaAs), la probabilidad de que el estado energético que va a ocupar el electrón después del scattering esté lleno no es despreciable. El principio de exclusión de Pauli impide que los electrones pasen a ocupar estados previamente poblados. Para tener en cuenta este fenómeno en la simulación de semiconductores degenerados, utilizaremos de nuevo un método aleatorio^{67,113,114} denominado técnica de rechazo (*rejection*), que se explica en la sección II.2.4.a.

Así, una vez determinado el mecanismo de scattering que tiene lugar al final del recorrido libre y consecuentemente la energía que debería tener el electrón, podremos aplicar el principio de exclusión. El problema para saber si el estado al que pasa el electrón está ocupado o no, es que no conocemos a priori la función de distribución de los electrones, $f(\varepsilon)$, que es precisamente un resultado de la simulación. Para dicha probabilidad de ocupación de un estado con energía ε se asume la estadística de Fermi–Dirac

$$f_{FD}(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{\varepsilon - \varepsilon_F(\mathbf{r})}{K_B T_{el}(\mathbf{r})}\right]}, \quad (\text{II.6})$$

donde $\varepsilon_F(\mathbf{r})$ y $T_{el}(\mathbf{r})$ son, respectivamente, la energía de Fermi y la temperatura media de los electrones en la posición \mathbf{r} , calculadas autoconsistentemente a lo largo de la simulación a partir de la concentración y la energía media local de los electrones en esa posición.¹¹⁵

Un número aleatorio r uniformemente distribuido entre 0 y 1 será nuestra vía para rechazar o no un mecanismo. La probabilidad de que r se encuentre entre 0 y $f_{FD}(\varepsilon)$ es la misma que la de que el estado final al que llega el electrón esté ocupado, por lo que el proceso es rechazado cuando r cumpla esa condición. A lo largo de la simulación este procedimiento se repite con cada mecanismo de scattering, de manera que al final de ésta el número de procesos rechazados será proporcional al de estados finales ocupados, que es lo que se pretende.

Nótese que atendiendo al resultado final, un mecanismo de scattering real rechazado es análogo a un proceso de autoscattering, ya que en ambos casos el estado del electrón no cambia al final del recorrido libre.

II.2.4. Inyección. Modelo físico de los contactos

La modelización de los contactos es una de las partes más importantes en el análisis de dispositivos que trabajan en régimen balístico debido a que apenas existen mecanismos de scattering que controlen el transporte de electrones. Por ello la estadística de inyección juega un papel esencial en el comportamiento de dichos dispositivos. A la hora de simular los contactos debemos tener en cuenta tanto la estadística de inyección como la distribución de velocidades de los portadores inyectados.

II.2.4.a. Distribución de velocidades

La distribución de velocidades de los portadores inyectados $f_{iny}(\mathbf{v})$ se calculará como la distribución térmica a la temperatura de la red $f_{th}(\mathbf{v})$ ponderada por la componente de la velocidad normal al contacto.¹¹⁶ Esto es así porque hay que tener en cuenta la mayor probabilidad de entrar que tienen los portadores rápidos y excluir a los portadores con velocidad perpendicular al contacto nula, $v_{\perp} = 0$, que no llegarán a entrar nunca en el dispositivo. Por tanto esta distribución tiene la forma (en el caso de inyección en el contacto de la izquierda y en dirección x)

$$\begin{aligned} f_{iny}(v_x) &= v_x f_{th}(v), \quad v_x > 0, \\ f_{iny}(v_y) &= f_{th}(v), \\ f_{iny}(v_z) &= f_{th}(v). \end{aligned} \tag{II.7}$$

En general la distribución térmica es la distribución de Fermi–Dirac, pero en el caso de contactos no degenerados ésta puede sustituirse por la de Maxwell–Boltzmann. Por otra parte es importante señalar que hay que tener en cuenta el signo de la componente de la velocidad normal al contacto, siendo ésta positiva para el contacto de la izquierda y negativa para el de la derecha debido al sentido de movimiento de los portadores.

Cuando sea aplicable la estadística de Maxwell–Boltzmann normalizando para $v \in (-\infty, \infty)$, la función de distribución para cada una de las componentes de la velocidad será

$$f_{iny}(v) = f_{MB}(v) = \sqrt{\frac{m^*}{2\pi k_B T}} \exp\left[-\frac{m^* v^2}{2k_B T}\right]. \quad (\text{II.8})$$

Entonces, utilizando el método de Monte Carlo, y trabajando en coordenadas polares, se calcula la expresión de las componentes de la velocidad de acuerdo con las siguientes fórmulas

$$\begin{aligned} v_x &= v_{th} \sqrt{-\pi \ln r_1}, \\ v_y &= v_{th} \sqrt{-\pi \ln r_2} \cos(2\pi r_3), \\ v_z &= v_{th} \sqrt{-\pi \ln r_2} \text{sen}(2\pi r_3), \end{aligned} \quad (\text{II.9})$$

donde r_1 , r_2 y r_3 son números aleatorios uniformemente distribuidos entre 0 y 1 y

$$v_{th} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m^* \pi}} \text{ la velocidad térmica.}$$

En el caso más general, que es el que usaremos en todas las simulaciones de este trabajo, la distribución térmica será la de Fermi–Dirac. Debido a que la distribución de probabilidad acumulada de dicha estadística no es integrable analíticamente, no podemos utilizar el método directo Monte Carlo y debemos recurrir a una técnica de rechazo.⁶⁶

Ahora tenemos que la distribución de velocidades de inyección será de la siguiente forma

$$f_{iny}(\mathbf{v}) = v_i \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{\varepsilon(\mathbf{v}) - \varepsilon_F}{k_B T}\right]}, \quad (\text{II.10})$$

donde ε es la energía y v_i la componente de la velocidad normal al contacto.

En primer lugar calculamos el valor máximo de la distribución F_{\max} mediante un barrido en velocidades entre 0 y un valor para el cual se considere que la cola de la distribución ya es prácticamente nula. Y en segundo lugar se lanzan tres números aleatorios r_1 , r_1' , r_1'' uniformemente distribuidos entre 0 y 1 para determinar aleatoriamente el valor de las componentes de velocidad $v_x, v_y, v_z \equiv \mathbf{v}_1$ y calcular

entonces cuanto vale $f_{iny}(\mathbf{v}_1)$. Ahora usamos el método de *rejection* sin más que lanzar un número aleatorio R_1 de manera que si se cumple

$$f_1 \equiv F_{\max} R_1 \leq f_{iny}(\mathbf{v}_1), \quad (\text{II.11})$$

los valores de v_x , v_y , y v_z se mantienen como valores de velocidad satisfaciéndose la distribución de Fermi–Dirac pesada por la velocidad; en otro caso se rechazan y se genera una nueva cadena r_2, r_2', r_2'' y R_2 de números hasta que la desigualdad anterior se satisfaga, tal como se muestra en la Figura II.3.

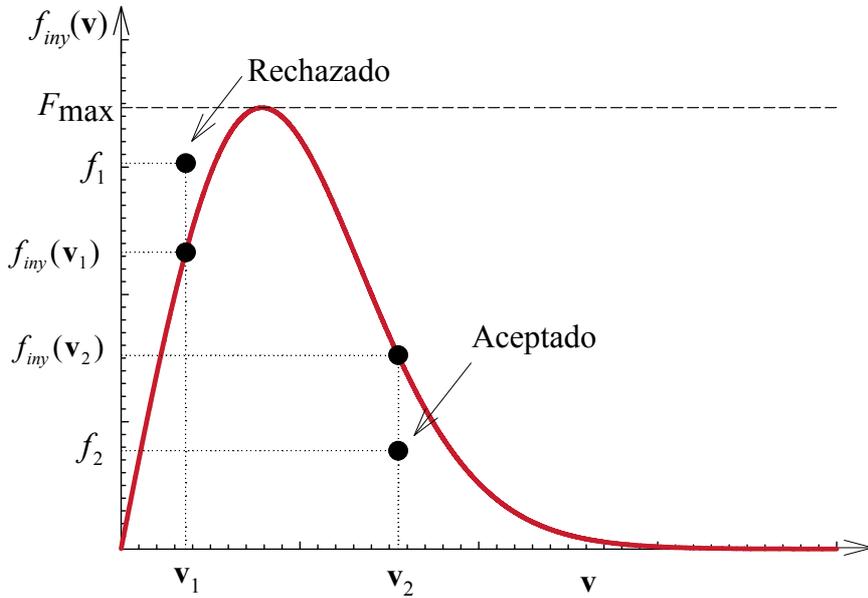


Figura II.3. Esquema de la técnica de rechazo (*rejection*).

II.2.4.b. Estadística de inyección

En primer lugar, para caracterizar la inyección debemos determinar el número de portadores por unidad de tiempo que entran en el dispositivo; esto es, calcular la frecuencia de inyección Γ que viene dada por¹¹⁷

$$\Gamma = N_c \bar{v}_i S, \quad (\text{II.12})$$

donde N_c es la densidad de portadores en el contacto, S es la sección transversal de la celda del contacto normal a la dirección de inyección, y \bar{v}_i es la velocidad media de los portadores que entran en el dispositivo, calculada mediante la expresión

$$\bar{v}_i = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} v_i f_{th}(\mathbf{v}) dv_x dv_y}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{th}(\mathbf{v}) dv_x dv_y}. \quad (\text{II.13})$$

En el caso de contactos no degenerados y en equilibrio térmico dicha integral se calcula fácilmente, ya que la distribución térmica es la de Maxwell–Boltzmann, dando como resultado la v_{th} definida anteriormente.

Cuando se trate de un contacto genérico usamos la estadística de Fermi–Dirac y la evaluación de dicha integral ya no será factible analíticamente. Por ello se debe recurrir a una integración numérica para resolverla.

Una vez calculada la tasa de inyección usamos una estadística poissoniana para introducir los portadores. Considerando la frecuencia de inyección independiente del potencial aplicado, el tiempo entre dos entradas consecutivas de electrones t_{iny} será generado con una probabilidad

$$P(t_{iny}) = -\Gamma \exp[-\Gamma t_{iny}]. \quad (\text{II.14})$$

Este esquema de inyección es aplicado a cada una de las celdas del contacto de acuerdo con la concentración local de portadores N_c .

Como estudiamos el nanodispositivo mediante una simulación *top–view* (TV), los detalles de la heteroestructura no están incluidos. Por ello, los contactos son modelizados como uniformes, con el valor de concentración de portadores en las mallas de los contactos elegido de forma adecuada para que las características $I–V$ se asemejen lo más posible a los resultados de las características obtenidas mediante la simulación *front–view* (FV).

En este modelo consideramos la estadística de Poisson. Sin embargo, en el caso en el que los contactos fueran degenerados, la estadística de inyección debería ser binomial y dependiente de la energía de los portadores. Existen algoritmos para generar dicha estadística¹¹⁸ que, aunque requieren recursos computacionales aceptables en el caso 1D, en el caso 2D son mucho mayores y el tiempo de simulación se hace inabordable.

II.2.5. Ecuación de Poisson. Condiciones de contorno

Cuando se estudia la dinámica de los portadores que se mueven en un material semiconductor dentro de un dispositivo, se ha de tener en cuenta tanto el efecto del campo eléctrico sobre el movimiento como las interacciones de los portadores con la red cristalina en la que se encuentran.¹¹⁹

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

$$\nabla[\epsilon_0\epsilon_s(\mathbf{r})\nabla\varphi(\mathbf{r},t)] = -\rho(\mathbf{r},t), \quad (\text{II.15})$$

donde φ es el potencial eléctrico en cada punto, ρ la densidad de carga, ϵ_0 la permitividad del vacío y ϵ_s la permitividad relativa estática de cada material que constituye el dispositivo. Supondremos que ϵ_s es independiente del tiempo (medio no dispersivo) y del campo aplicado (comportamiento lineal), y constante escalar para cada material (medio isótropo y homogéneo). $\epsilon_0\epsilon_s = \epsilon$ es la permitividad absoluta del material. En todo el trabajo que vamos a realizar se supondrá que esta permitividad no resulta afectada por la dinámica electrónica objeto de nuestro estudio.

Puesto que el gradiente de la permitividad en cada zona es nulo, la ecuación de Poisson en el caso bidimensional puede expresarse como

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0\epsilon_s}. \quad (\text{II.16})$$

II.2.5.a. Método de diferencias finitas

La técnica numérica usada para resolver esta ecuación es el método de diferencias finitas (caso particular del método de elementos finitos). Este método se basa en la discretización de las ecuaciones en cada nodo de un mallado rectangular en que se divide previamente la geometría del dispositivo. El modelo usado se esquematiza en la Figura II.4. Con el fin de alcanzar una resolución óptima, debido a que los valores del gradiente de potencial en las diversas zonas de material son muy diferentes, usaremos un mallado no uniforme. De este modo el dispositivo se discretiza en un conjunto de $N \times M$ celdas de distintos tamaños.

El proceso de resolución de la ecuación de Poisson tiene dos fases. Durante la primera, llamada de asignación de carga,⁸²⁻⁸⁵ se calculan las densidades de carga eléctrica que se atribuyen a los nodos del dispositivo (es en realidad el cálculo del segundo miembro de la ecuación II.17, en donde por comodidad de manejo se incorpora la información del mallado), las cuales se utilizarán en la segunda fase, que consiste en la resolución del sistema de ecuaciones resultantes de la discretización de la ecuación II.16. La carga asignada a cada nodo para la resolución de la ecuación de Poisson es la media de las densidades de carga (ponderadas por la superficie de cada celda) durante el paso temporal anterior en las cuatro celdas que rodean al nodo.

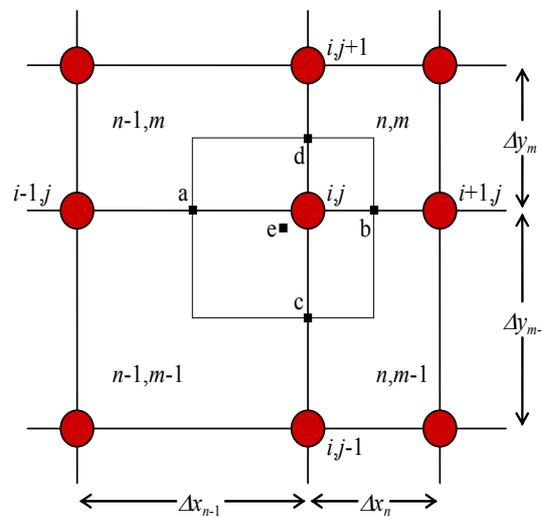


Figura II.4. Esquema para resolución de la ecuación de Poisson.

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

$$\begin{aligned}
 & \varphi_{i,j-1} \frac{2(\Delta x_n + \Delta x_{n-1})}{\Delta y_{m-1}} + \varphi_{i-1,j} \frac{2(\Delta y_m + \Delta y_{m-1})}{\Delta x_{n-1}} \\
 & - \varphi_{i,j} 2 \left[(\Delta x_n + \Delta x_{n-1}) \left(\frac{1}{\Delta y_m} + \frac{1}{\Delta y_{m-1}} \right) + (\Delta y_m + \Delta y_{m-1}) \left(\frac{1}{\Delta x_n} + \frac{1}{\Delta x_{n-1}} \right) \right] \\
 & + \varphi_{i+1,j} \frac{2(\Delta y_m + \Delta y_{m-1})}{\Delta x_n} + \varphi_{i,j+1} \frac{2(\Delta x_n + \Delta x_{n-1})}{\Delta y_m} = \\
 & - \left(\bar{\rho}_{n-1,m-1} \Delta x_{n-1} \Delta y_{m-1} / \epsilon_{n-1,m-1} + \bar{\rho}_{n,m-1} \Delta x_n \Delta y_{m-1} / \epsilon_{n,m-1} + \right. \\
 & \left. - \left(\bar{\rho}_{n-1,m} \Delta x_{n-1} \Delta y_m / \epsilon_{n-1,m} + \bar{\rho}_{n,m} \Delta x_n \Delta y_m / \epsilon_{n,m} \right) \right).
 \end{aligned} \tag{II.17}$$

Aplicando la ecuación de Poisson (ecuación II.17) a todos los nodos de la red (incluyendo las condiciones de contorno que veremos más adelante) tendremos un conjunto de $(N+1) \times (M+1)$ ecuaciones lineales. Este sistema es penta diagonal, y para

su resolución utilizaremos el método LU,¹²⁰ en el que es necesario calcular la matriz inversa de los coeficientes del sistema. La inversión de la matriz (que es el cálculo más costoso) 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 II.17 (que sí se calculan cada Δt).

Una vez determinado el potencial en cada nodo, las componentes del campo eléctrico en cada celda serán las siguientes

$$\begin{aligned} E_x^{n,m} &= -\nabla_x \varphi = -\frac{1}{2} \left(\frac{\varphi_{i+1,j+1} - \varphi_{i,j+1}}{\Delta x_n} + \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{\Delta x_n} \right), \\ E_y^{n,m} &= -\nabla_y \varphi = -\frac{1}{2} \left(\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{\Delta y_m} + \frac{\varphi_{i+1,j+1} - \varphi_{i+1,j}}{\Delta y_m} \right), \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

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

II.2.5.b. Condiciones de contorno

Vamos a estudiar ahora el problema de las condiciones de contorno. La geometría de un dispositivo presenta discontinuidades en las que las propiedades eléctricas cambian abruptamente y además aparecen fronteras asociadas a la finitud del recinto de simulación, por lo que nuestro estudio corresponde al caso de un problema “homogéneo a trozos”. La continuidad de los campos físicos y de sus derivadas se garantiza porque en el caso real las magnitudes no pueden presentar discontinuidades, sino variaciones muy rápidas en regiones de transición. Cuando consideramos la situación idealizada de transición abrupta, se producen discontinuidades en las magnitudes del problema que es lo que se pretende determinar en este estudio. Es bien sabido que una vez conocida la divergencia de un campo vectorial, \mathbf{F} , la discontinuidad en sus componentes normales a la frontera se escribe

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{F}_2 - \mathbf{F}_1) = \lim_{h \rightarrow 0} (h \nabla \cdot \mathbf{F}), \quad (\text{II.19a})$$

donde h representa la anchura de la región de transición.

En nuestras interfaces semiconductor–dieléctrico o semiconductor–aire, \mathbf{F} es el vector desplazamiento \mathbf{D} , que verifica $\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$, por lo que la condición de contorno será

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) = \sigma, \quad (\text{II.19b})$$

donde σ representa la densidad de carga superficial, los subíndices 1 y 2 hacen referencia a cada uno de los materiales y \mathbf{n} corresponde a la dirección normal a la superficie de discontinuidad siempre orientada de 1 a 2 (Figura II.5).

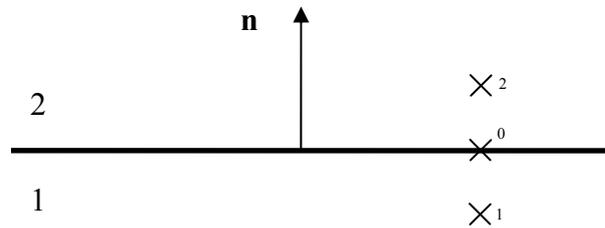


Figura II.5. Superficie de discontinuidad. Condiciones de contorno.

El potencial eléctrico φ , que es continuo al atravesar la superficie frontera¹²¹

$$\varphi_0 = \lim \varphi_0^2 = \lim \varphi_0^1, \quad (\text{II.20a})$$

satisface

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} = -\varepsilon \overline{\nabla \varphi} \Rightarrow -\varepsilon_2 \frac{\varphi_2 - \varphi_0}{\Delta y_{20}} - \left(-\varepsilon_1 \frac{\varphi_0 - \varphi_1}{\Delta y_{01}} \right) = \sigma. \quad (\text{II.20b})$$

Las condiciones de contorno para la ecuación de Poisson son de dos tipos. Tipo Dirichlet, que corresponde a conocer el valor del potencial en el contorno (en nuestro problema serán los contactos del dispositivo) o tipo Neumann en las que debemos tener información de la derivada normal del potencial (densidad de carga superficial). Por tanto el problema estará bien planteado, tiene solución única, si conocemos el valor del potencial o su gradiente normal en todos los puntos del contorno (representación integral del potencial).

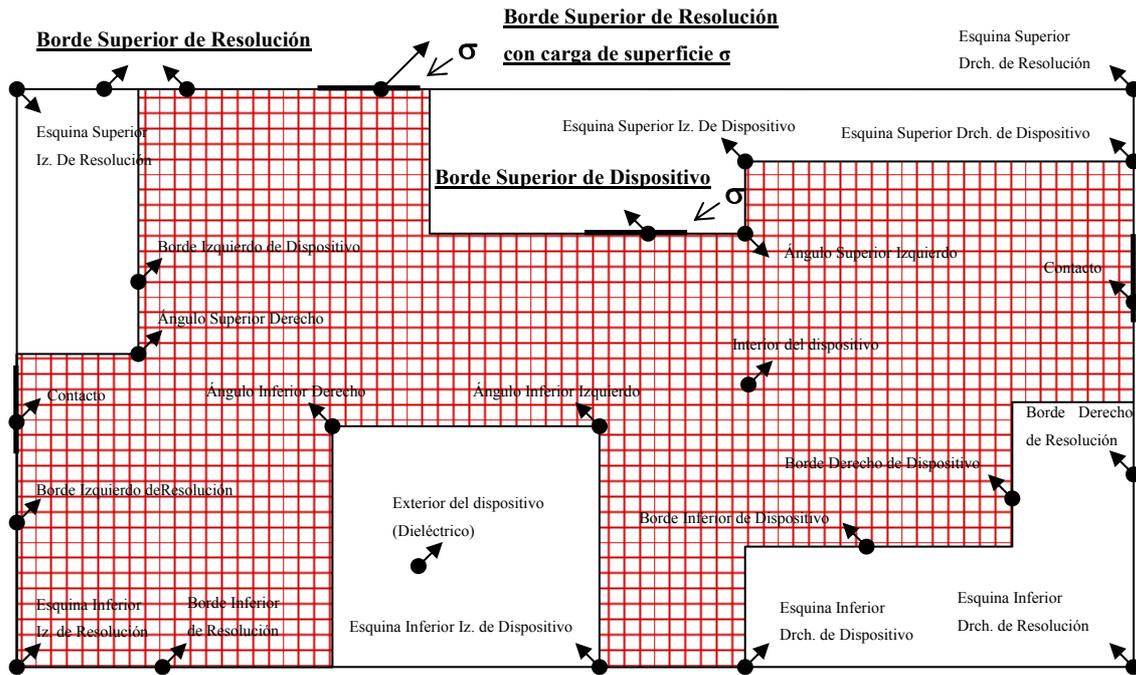


Figura II.6. Tipos de fronteras en un dispositivo.

Se presenta entonces una casuística (Figura II.6) complicada en la que se tendrán que asignar los coeficientes de la matriz de Poisson en función de las condiciones de contorno necesarias en cada caso. Para mostrar cómo se asignan valores a los coeficientes de la matriz de Poisson estudiaremos detenidamente uno de los casos que se presenta a la hora de incluir las condiciones de contorno. El ejemplo que vamos a utilizar será una frontera con una discontinuidad en la dirección “y” a la que llamaremos frontera tipo *Borde Superior*. Se pueden presentar diferentes posibilidades dentro de este tipo

Borde Superior de Resolución: El dispositivo y/o el recinto de simulación terminan sin tener ninguna particularidad la frontera de separación. Sería el caso en el que el semiconductor o el dieléctrico continúan pero ya no lo simulamos. Dado que el tamaño del mallado es finito el potencial puede variar ligeramente en la primera celda, por ello lo que hacemos es realizar la discretización de la ecuación II.16 considerando un nodo ficticio $\varphi_{i,j+1} = \varphi_{i,j-1}$ e imponiendo $\bar{\rho}_{n-1,m} = \bar{\rho}_{n,m}$ y $\Delta y_m = \Delta y_{m-1}$ para el cálculo de la carga asociada al nodo, teniendo como resultado

$$\begin{aligned}
& \varphi_{i,j-1} \frac{2(\Delta x_n + \Delta x_{n-1})}{\Delta y_{m-1}} + \varphi_{i-1,j} \frac{2(\Delta y_{m-1})}{\Delta x_{n-1}} \\
& - \varphi_{i,j} 2 \left[(\Delta x_n + \Delta x_{n-1}) \left(\frac{1}{\Delta y_{m-1}} \right) + (\Delta y_{m-1}) \left(\frac{1}{\Delta x_n} + \frac{1}{\Delta x_{n-1}} \right) \right] \\
& + \varphi_{i+1,j} \frac{2(\Delta y_{m-1})}{\Delta x_n}.
\end{aligned} \tag{II.21a}$$

Si la frontera está en un semiconductor, el segundo miembro de II.16 será

$$- \left(\bar{\rho}_{n-1,m-1} \Delta x_{n-1} \Delta y_{m-1} / \varepsilon_{n-1,m-1} + \bar{\rho}_{n,m-1} \Delta x_n \Delta y_{m-1} / \varepsilon_{n,m-1} \right), \tag{II.21b}$$

pero si la frontera está en un dieléctrico/aire entonces el segundo miembro evidentemente es cero.

Borde Superior de Resolución con carga de superficie σ . Tanto el recinto de simulación como el dispositivo terminan en una discontinuidad semiconductor–dieléctrico con una carga superficial asociada a la misma. En este caso, dado que $\varepsilon_{n,m} \ll \varepsilon_{n,m-1}$ ($\varepsilon_o \ll \varepsilon_{sc}$), el medio “2” no aparece y entonces la presencia de una densidad superficial de carga impone la siguiente condición para los potenciales

$$\varepsilon_{n,m-1} \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}}{\Delta y_{m-1}} = \sigma. \tag{II.22}$$

Borde Superior de Dispositivo: El dispositivo termina pero el recinto de simulación no. Así, aplicando la ecuación II.20b se obtiene

$$- \varepsilon_{n,m} \frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{\Delta y_m} + \varepsilon_{n,m-1} \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}}{\Delta y_{m-1}} = \sigma, \tag{II.23}$$

donde $\sigma = 0$ en el caso de que no asignemos carga superficial a la frontera.

Así, en la simulación Monte Carlo de dispositivos lo primero es calcular los coeficientes de la matriz de Poisson para cada nodo dependiendo de que sea interior del dispositivo, exterior del dispositivo (dieléctrico), de un contacto o de una superficie de discontinuidad. La resolución de la ecuación de Poisson se lleva a cabo en dos puntos del código del programa. El primero tiene lugar antes de empezar la simulación y se utiliza para determinar los parámetros necesarios en el cálculo de la corriente de acuerdo con el teorema de Ramo–Schockley^{122,123} que detallaremos en la siguiente sección (conviene señalar que lo que se resuelve es la ecuación de Laplace). Y en segundo lugar, en cada paso temporal dt se evalúan los segundos

miembros (II.17, II.21b, II.22, II.23) y mediante la resolución de la ecuación de Poisson se obtienen los potenciales asociados a cada nodo de acuerdo con la discretización del problema.

Se ha mostrado cómo la carga superficial juega un papel esencial, ya que aparece vía condición de contorno en la resolución del problema. Lo que resta a partir de ahora es explicar qué valores le asignamos o cómo calculamos esa densidad de carga superficial σ para introducirla en las condiciones de contorno (véase la sección II.3).

II.2.6. Cálculo de magnitudes

Al utilizar el método de Monte Carlo podemos hallar el valor de las magnitudes derivadas de la dinámica de portadores como son velocidades, energía y concentración, así como otras necesarias para el estudio de los dispositivos tales como potenciales, campo eléctrico, ocupación de los diferentes valles y fenómenos de scattering. En todos los cálculos y para todas las polarizaciones se simula un cierto número de iteraciones suficiente para alcanzar el régimen estacionario. Posteriormente se acumulan los resultados para calcular los valores medios de las diferentes magnitudes.

De esta manera el valor medio de una magnitud A en la posición \mathbf{r} , correspondiente a la celda p , $A_p(\mathbf{r})$, en la que hay N_p portadores, será⁶⁶

$$A_p(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} A_i, \quad (\text{II.24})$$

donde A_i es el valor de A para la partícula i . Para determinar la evolución temporal de la magnitud $A_p(\mathbf{r})$, se considera la dependencia temporal en la ecuación anterior calculando el valor medio de las magnitudes de las partículas cada dt

$$A_p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N_p(t)} \sum_{i=1}^{N_p} A_i(t). \quad (\text{II.25})$$

El cálculo de la corriente es uno de los puntos clave en el análisis de características estáticas, dinámicas y del ruido de un dispositivo electrónico. La manera más intuitiva de calcularla, a la vez que sencilla, sería contar las partículas que salen/entran del dispositivo a través de un contacto en la unidad de tiempo.

El principal problema de este método es que requiere de muchas iteraciones para ser fiable y además no permite calcular de forma precisa la corriente en cada instante de tiempo. Aunque no sea estrictamente necesario para nuestras simulaciones, la utilización de un método más correcto permitirá un mejor análisis, no sólo de las características dinámicas y del ruido, sino también de las estáticas.

El método del que hablamos se fundamenta en el teorema de Ramo–Shockley,^{122,123} desarrollado para el cálculo de corrientes en tubos de vacío, y que fue extendido al caso más general (incluyendo la presencia de mecanismos con dependencia temporal extrema, como procesos Auger, fotoexcitación, recombinación Shockley–Read–Hall, etc., incluso en el límite cuántico) a partir de la ecuación de continuidad de la corriente en conjunción con las ecuaciones de Maxwell.^{124,125} Nosotros emplearemos en este trabajo el modelo propuesto por H. Kim.¹²⁶

Se trata de una forma muy potente de calcular la contribución a la corriente en un electrodo procedente de un electrón que se mueve dentro del dispositivo. La generalización para un medio dieléctrico inhomogéneo, $\epsilon(\mathbf{r})$ lineal e independiente del tiempo y del campo eléctrico, con una distribución arbitraria de carga fija y con potenciales variables en los electrodos está demostrada en la Ref. 126 y se ha aplicado al tipo de dispositivos estudiados en este trabajo.⁸⁶ En esta generalización se calcula la carga inducida en el electrodo j , Q_j , por todas las partículas libres cargadas a partir de la suma del producto de la carga de cada partícula por el potencial eléctrico, V' , en la posición de esa carga cuando el electrodo j , en el que queremos calcular la corriente, se mantiene a un potencial unidad, mientras los demás están unidos a tierra y se suprimen todas las carga (fijas y libres) del sistema. Este potencial eléctrico es la solución de la ecuación de Laplace en las condiciones que acabamos de mencionar, siendo por tanto un factor geométrico independiente del tiempo y de la densidad de carga. El cálculo de la corriente es tan sencillo como hacer la derivada temporal de la carga

$$i_j(t) = dQ_j/dt = -q dV'/dt = -q \frac{dV'}{dx} \frac{dx}{dt} = -qv(t) dV'/dx, \quad (\text{II.26})$$

donde $v(t)$ es la velocidad de cada electrón, q su carga y V' el potencial eléctrico calculado en las condiciones anteriormente señaladas.

La principal consecuencia de este teorema es que el movimiento de un portador de carga contribuye a la corriente en terminales aunque no alcance físicamente dichos contactos. Cuando los potenciales de los electrodos son fijos, el cambio de posición del electrón produce una variación en la carga de los contactos (la líneas de fuerza del campo cambian y por ello la carga en los terminales se debe adaptar) que se debe ver reflejada en una corriente a través del dispositivo. Es como si la contribución a la corriente fuese gradual, pero cuando el electrón salga del dispositivo la contribución total será la misma que si lo hubiésemos contado sólo en el momento de la salida (la corriente sería la carga asignada a esa partícula dividida por el paso temporal dt).

Por otra parte, si los potenciales de los contactos varían en el tiempo, se inducirán cargas en los contactos y tendremos una corriente de desplazamiento que vendrá determinada por las capacidades C_{ji} entre electrodos¹²⁷

$$i''_j(t) = \sum_i C_{ji} \frac{\Delta V_i(t)}{\Delta t}, \quad (\text{II.27})$$

dónde ΔV_i es el incremento de potencial en el electrodo i -ésimo.

II.3. CARGA SUPERFICIAL. MODELOS

Como se ha expuesto en el Capítulo I, en dispositivos de dimensiones grandes con respecto al recorrido libre medio de los electrones, los fenómenos de superficie no juegan un papel determinante en su funcionamiento. Por el contrario, si las dimensiones alcanzan el rango nanométrico la carga superficial puede llegar a tener una importancia notable en el transporte electrónico, llegando incluso a ser determinante en el comportamiento del dispositivo. El objeto de esta sección es describir los posibles modelos para el cálculo de dicha densidad superficial de carga.

II.3.1. Modelo de carga superficial constante

Una opción es usar un modelo donde la carga superficial sea constante, es decir, con un valor impuesto en el fichero de entrada de la simulación y que no depende ni de la posición ni de la polarización. La presencia de la carga superficial en las fronteras produce un vaciamiento debido a la repulsión coulombiana y en consecuencia la densidad de electrones disminuirá en sus proximidades.

II.3.1.a. Estimación del vaciamiento lateral

Con el fin de obtener valores numéricos de la carga superficial e introducirla como parámetro en la simulación Monte Carlo usamos estimaciones experimentales. En éstas se realiza una caracterización eléctrica de canales de diferente geometría (Figura II.7) con el objetivo de determinar la anchura de vaciamiento lateral W_d .^{79,98} Realizando medidas de $I-V$ en canales de diferente longitud y anchura se obtiene el valor de su resistencia R . Esta resistencia será la suma de la resistencia del canal más la resistencia de los accesos R_C de acuerdo con la expresión

$$R = 2R_C + R_{\square} \frac{L}{W}, \quad (\text{II.28})$$

donde R_{\square} es la resistencia cuadrada de la estructura de capas, L es la longitud del canal y W la anchura física del mismo.

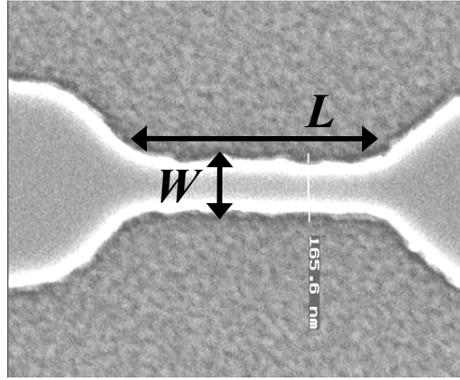


Figura II.7. Imagen SEM de un canal semiconductor de longitud L y anchura W .

En la Figura II.8 se esquematiza el método de cálculo de la resistencia de los accesos y de la anchura de vaciamiento lateral. Representando la resistencia total R en función de la longitud L del canal para una anchura dada, se determina el valor de la resistencia de los accesos R_C . De la misma manera, la gráfica de la conductancia $G=1/(R-2R_C)$ en función de la anchura W para una longitud L dada permite calcular el vaciamiento lateral del canal W_d .

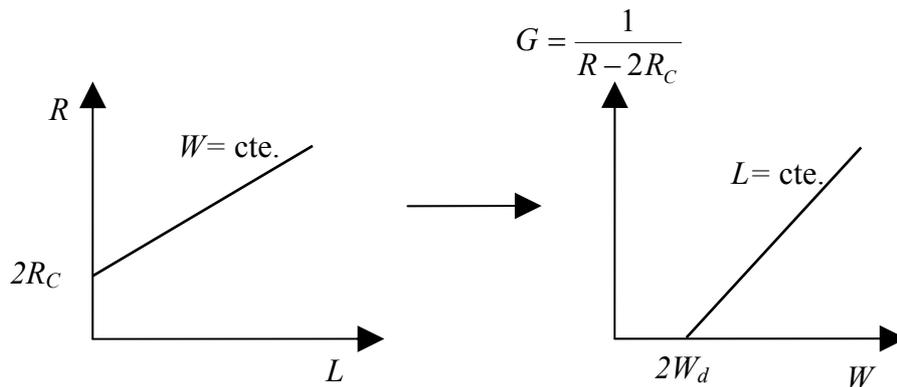


Figura II.8. Método para el cálculo de la resistencia de accesos R_C y del vaciamiento lateral W_d .

A partir del valor de la anchura de vaciamiento lateral evaluamos la carga superficial como $\sigma/q = W_d N_{db}$, donde N_{db} representa el dopaje virtual que utilizamos en nuestras simulaciones. Los valores del vaciamiento lateral estimados experimentalmente^{79,98} son del orden de 40 nm (± 10 nm) para el $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$, que corresponde a un valor de carga superficial de $\sigma/q = (0.4 \pm 0.1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para $N_{db} = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, que será el usado en nuestras simulaciones.

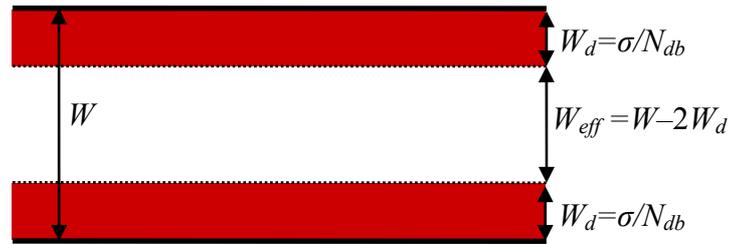


Figura II.9. Anchura efectiva de un canal debido al vaciamiento lateral.

En la simulación Monte Carlo podemos variar los valores de la carga superficial asignada a las interfases, lo cual significa considerar diferentes anchuras de vaciamiento. El papel de la carga superficial es reducir la anchura del canal (Figura II.9) en cada lado en un valor $W_d = \sigma/N_{db}$ debido al vaciamiento lateral. Diremos entonces que la anchura efectiva es $W_{eff} = W - 2W_d$. Este modelo es muy útil para realizar un primer estudio y explicar el funcionamiento de los dispositivos.

II.3.1.b. Problemas del modelo de carga constante

Valores excesivamente altos de la carga superficial pueden hacer que la anchura efectiva sea *negativa*. Esto significaría que el canal está vacío de electrones libres que puedan atravesarlo. Pero esto no tiene mucho sentido, ya que si no hay portadores libres en esa zona del canal difícilmente pueden estar ocupados los estados de energía asociados a las cargas de superficie. Es decir, como se indicaba antes, este modelo de carga fija no tiene en cuenta la forma en la que se ocupan (estadística, vida media, espectro de energía) los estados superficiales. En este caso el dopaje de fondo positivo (N_{db}) no compensaría la carga superficial negativa de forma que no aseguraríamos la neutralidad de carga. Este efecto aparecerá en las simulaciones de uniones en T que tengan la rama vertical muy estrecha o cuando la carga fija impuesta a la superficie sea excesivamente grande. Como consecuencia de esta “violación de la cuasineutralidad” el potencial en el centro de la rama horizontal tiene un mínimo muy acusado que impide el transporte de electrones en la rama vertical, dejando sin corriente al dispositivo.

Aunque este modelo de carga constante es útil para dispositivos relativamente grandes y permite una buena comprensión de los fenómenos asociados a la carga superficial, es sólo una primera aproximación al fenómeno físico. Por ello, en un intento de reflejar más fielmente los procesos microscópicos que tienen lugar, se propone un modelo auto-consistente de carga superficial.⁸⁷

II.3.2. Modelo auto-consistente de carga superficial

II.3.2.a. Filosofía y necesidad del modelo

Con el fin de intentar reproducir de manera correcta el comportamiento de los estados superficiales en canales de anchura menor al doble del vaciamiento lateral teórico, se elabora un modelo que tiene en cuenta de forma auto-consistente la presencia o ausencia de portadores en el interior del canal. Es decir, actualizamos 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 dejar evolucionar esa carga superficial de manera que se adapte a las condiciones de cada estructura. La modificación de la carga superficial afecta a la simulación Monte Carlo del problema, ya que la carga superficial aparece en la resolución de la ecuación de Poisson en las ecuaciones [II.22](#), [II.23](#), aspecto éste que debe tratarse con cuidado.

Con la simulación auto-consistente de la carga superficial se intenta reproducir el efecto de cambio de ocupación de los estados superficiales. Evidentemente un conocimiento teórico de dichos estados permitiría un tratamiento mucho más riguroso, incluyendo probabilidades de fenómenos de scattering superficiales, estadísticas de ocupación, espectros de energía, etc. Pero, como expusimos en el [Capítulo I](#), la complicación de los cálculos y los elevados tiempos de vida media hacen inviable una simulación de este tipo. Por ello se propone un modelo “ad-hoc” que intenta, mediante el ajuste de una serie de parámetros introducidos en el modelo, un tratamiento sencillo del problema.

II.3.2.b. Implementación y diagrama de flujo

A continuación detallamos el procedimiento de implementación del modelo. Éste consiste en efectuar la adaptación local de la carga superficial cada cierto número de iteraciones que llamaremos *NIQSE*. Este parámetro determina la rapidez de la evolución temporal de los valores de carga superficial. Una actualización muy rápida puede producir un ruido no deseado que se transmitiría artificialmente a las características de salida. Por el contrario, una modificación de la carga superficial cada muchas iteraciones no reflejará fielmente el efecto dinámico de la adaptación de la carga superficial y no representaría una mejora importante con respecto al modelo de carga constante.

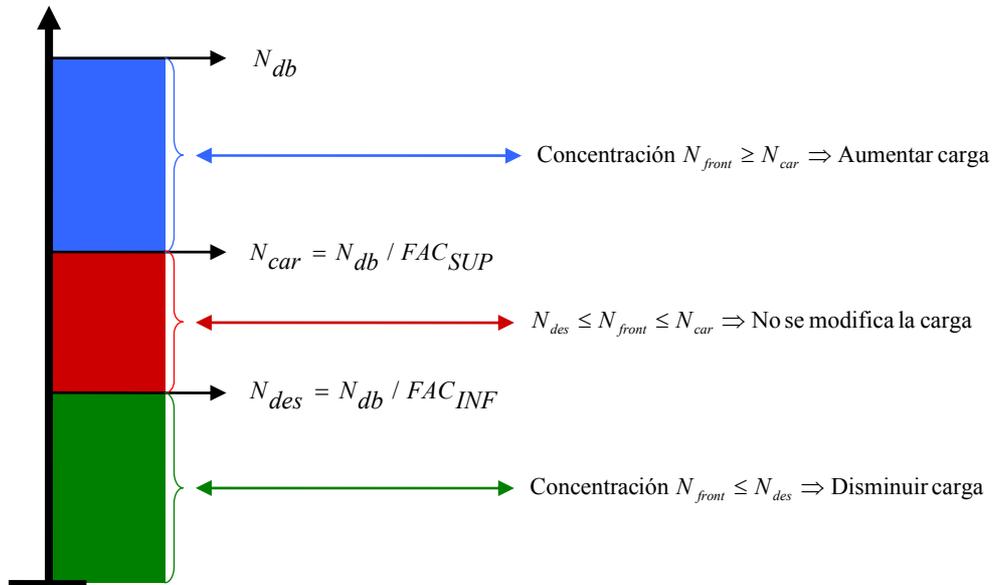


Figura II.10. Esquema para la comparación de la concentración de portadores en el modelo dinámico de carga superficial.

Nuestro modelo permitirá la adaptación de la carga superficial en función de dos cotas sobre la densidad N_{db} . Se definen los valores de los factores o cotas relativas sobre N_{db} denominadas FAC_{SUP} y FAC_{INF} . Estos valores relativos a la densidad N_{db} indican aproximadamente el rango al que intentaremos adaptar la concentración de electrones en las celdas próximas a la frontera. Para determinar la evolución de la carga superficial, comparamos la densidad de electrones en la celda frontera que llamaremos N_{front} (Figura II.10), calculada como la media sobre las $NIQSE$ iteraciones anteriores, con las dos cotas anteriormente definidas. Si la concentración es mayor que el límite superior ($N_{car} = N_{db} / FAC_{SUP}$), debemos aumentar la carga superficial para que el efecto repulsivo de la carga de superficie vacíe más el canal y así la concentración disminuya. Denominamos N_{car} a este valor, ya que si la concentración es mayor que él, se cargan los estados superficiales. Si, por el contrario, es menor que el límite inferior ($N_{des} = N_{db} / FAC_{INF}$), lo que hacemos es disminuir la carga superficial, ya que el potencial de superficie ha dejado la celda adyacente con muy pocos portadores. Igualmente, se denomina N_{des} en referencia a la descarga de los estados superficiales. De esta manera intentamos mantener la densidad de electrones en el rango marcado por estos dos valores de concentración (N_{des}, N_{car}).

En el algoritmo de modificación de carga superficial se han introducido unos contadores ($Reps$, $Repb$) para favorecer o dificultar la evolución de la carga tanto en

el aumento como en la disminución de la misma. Así, si la comparación de la concentración con respecto a los límites sobre N_{db} no se verifica un número de veces fijado en el programa ($Reps$ para las subidas y $Repb$ para las bajadas de nivel de carga superficial), la modificación de carga superficial no se producirá. Se podría entender que los tiempos de captura y emisión de electrones de los estados superficiales son del orden de $NIQSE \times Reps$ y $NIQSE \times Repb$, respectivamente.

Cabe señalar que en determinados casos (que podríamos asociar a una densidad de estados superficiales no muy elevada) se ha establecido que la carga superficial no pueda superar un cierto nivel máximo σ_{max} . En lo que respecta a la cantidad en que se aumenta o disminuye la carga superficial, se podrían asignar valores diferentes para los dos procesos, pero en nuestro caso empleamos la misma cantidad $\Delta\sigma$. Por último indicamos que las cotas N_{car} y N_{des} sobre el valor de N_{db} pueden asociarse al número de estados superficiales y su distribución en energía. El significado de cada parámetro y su valor se detallarán en el Capítulo III dedicado a resultados.

En la Figura II.11 se muestra el diagrama de bloques correspondiente a la actualización auto-consistente de la carga superficial introducido en el simulador Monte Carlo. En ella se muestra cómo se produce una actualización de carga cuando el número de iteraciones sea un múltiplo del valor de $NIQSE$. Cuando la concentración de electrones se encuentra entre los dos límites fijados sobre la densidad de fondo, no se modifica la carga superficial (línea roja). El aumento (línea azul) o la disminución (línea verde) de la carga superficial se producirá cuando se cumpla la condición de que la concentración N_{front} se encuentre por encima de N_{car} o por debajo de N_{des} y se verifique dicha condición el número de veces marcado por $Reps$ o $Repb$, respectivamente.

Es importante recalcar que, evidentemente por tratarse de un modelo “ad-hoc”, no es posible reproducir la estadística de ocupación de los estados superficiales, pero sí describimos correctamente de manera “global” el efecto de la carga superficial.

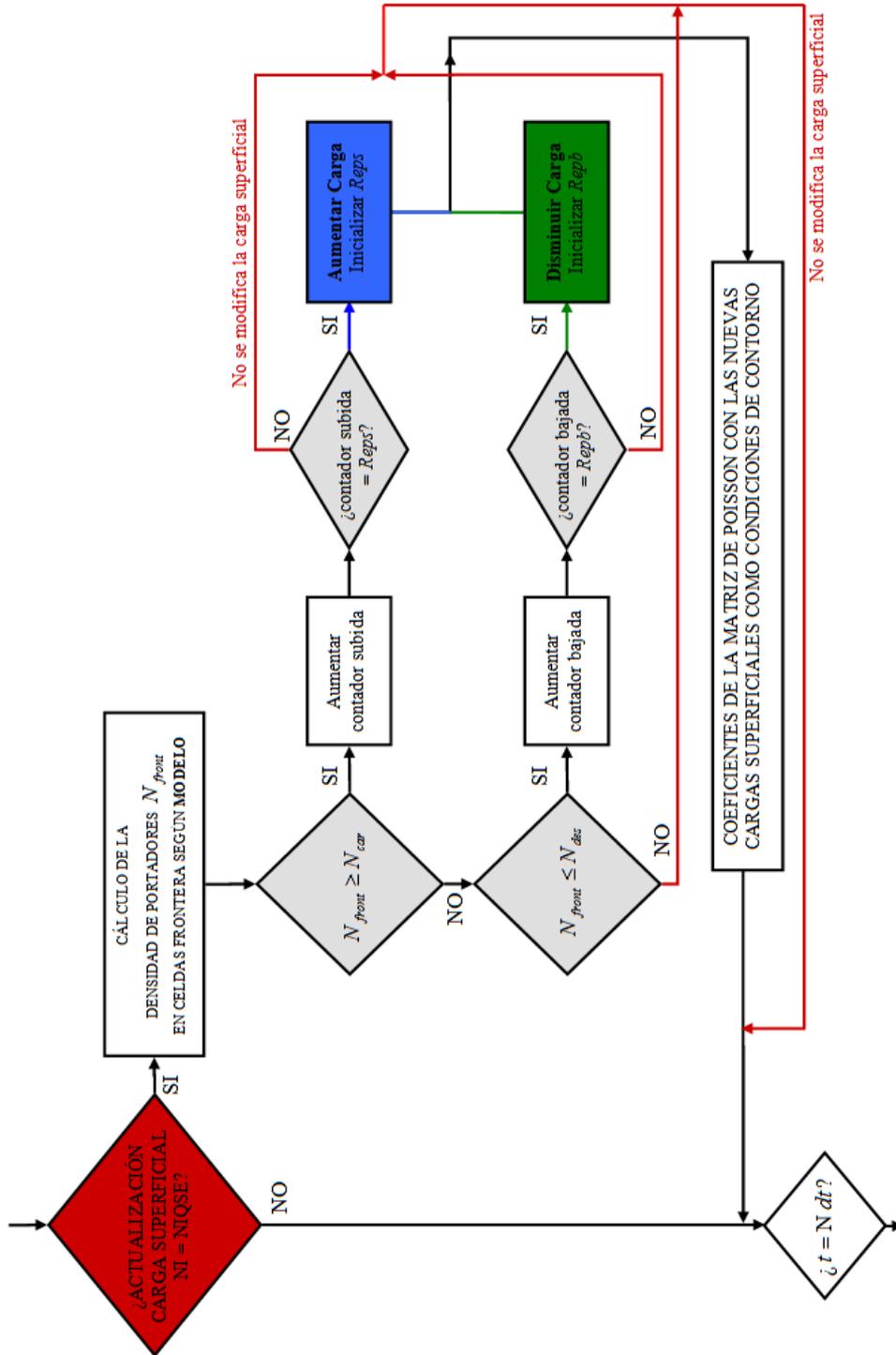


Figura II.11. Diagrama de bloques del modelo Monte Carlo para la actualización auto-consistente de la carga superficial.

Para determinar la evolución de la carga superficial, el punto clave es la comparación de la densidad de electrones de la celda frontera N_{front} con respecto al dopaje de fondo. Para dicha comparación podemos usar la celda frontera únicamente o realizar un promedio con más celdas. Esto último repercutirá en una mayor precisión y menores fluctuaciones en la adaptación de la carga superficial. Teniendo

en cuenta esta posibilidad, para efectuar la comparación se proponen diferentes modelos (Figura II.12)

- **Modelo a una celda:** Sólo se tiene en cuenta la celda en la que vamos a modificar la carga superficial.
- **Modelo a seis celdas:** Se realiza un promedio de la densidad de carga superficial de la celda en que se actualiza la carga junto a las celdas inmediatamente adyacentes a ella.
- **Modelo a quince celdas:** El promedio se extiende a celdas segundas vecinas.

A medida que se incorporan más celdas para evaluar la concentración N_{front} que comparamos con los límites fijados sobre la densidad de fondo N_{db} , se consiguen unas variaciones más suaves de los valores de la carga superficial asignados a la frontera y una mayor precisión en su cálculo, ya que se está considerando un mayor número de partículas. Esto reducirá el ruido matemático asociado a las fluctuaciones de carga superficial.

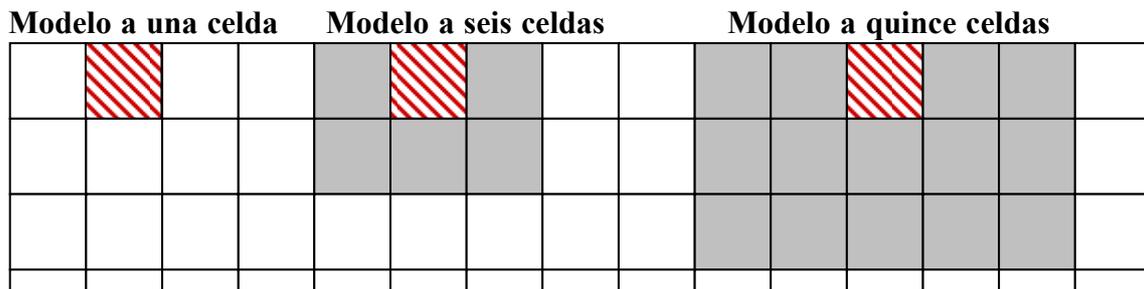


Figura II.12. Modelos de comparación de densidad de portadores.

Es importante que señalemos en este momento que la utilización de un modelo que use más de una celda para evaluar la concentración N_{front} es clave en el estudio de uniones de tres terminales en forma de T, mientras que para el análisis de diodos SSD hemos verificado que es suficiente con usar el modelo a una celda. La razón fundamental es que en las uniones en T el transporte se realiza en la dirección horizontal, mientras que el potencial de la rama vertical, que es el que estudiamos, es debido a la penetración de portadores en la rama central como consecuencia de la componente térmica vertical de la velocidad de los portadores que fluyen por las ramas horizontales. Además en esta rama se va a encontrar una situación de vaciamiento prácticamente total, por lo que el número de partículas no será muy

elevado, de modo que la estimación de la concentración tendrá bastante incertidumbre a menos que usemos mayor número de celdas en su cálculo. Por el contrario, en los SSDs y SSMs el transporte electrónico se produce en un canal de dimensiones similares al vaciamiento, de manera que el cálculo de la concentración ya no es tan crítico, y es prácticamente independiente del número de celdas que se tengan en cuenta. En el Capítulo III, dedicado a las uniones en T, mostraremos la influencia de cada uno de los parámetros del modelo tanto en las características de salida ($I-V$ y V_C-V) como en los valores de carga superficial.

II.3.2.c. Refinado del modelo. Procesos túnel y efectos de memoria

La aparición de efectos de memoria en la corriente de los diodos SSM (ver apartado I.2.1.d) al sobrepasar determinados valores en el potencial aplicado nos indica que existe algún proceso (diferente a la carga/descarga provocada por la proximidad de portadores en la frontera) por el cual la carga superficial puede verse modificada y que no estamos incluyendo en nuestro modelo. Hasta el momento, el modelo para el tratamiento de la carga superficial sólo tiene en cuenta la concentración en las proximidades de la frontera, donde el mecanismo físico causante de las migraciones de carga es la emisión termoiónica. Los procesos de efecto túnel también pueden cambiar la ocupación de los estados superficiales, siendo éstos dependientes del perfil del potencial y no de la carga cerca de la superficie. Éste será el mecanismo físico nuevo que incluiremos para reproducir los resultados experimentales. Ya que en nuestro modelo no estamos incluyendo la dinámica de la carga superficial mediante expresiones analíticas, sino que se trata de una técnica “ad-hoc” para reproducir globalmente su efecto, debemos encontrar una magnitud física calculada microscópicamente en nuestras simulaciones que nos pueda dar cuenta de la presencia o ausencia de estos fenómenos. Ese parámetro es el campo eléctrico normal a la discontinuidad, que denotamos por E^\perp . Éste representa la pendiente del potencial eléctrico (banda de conducción) en las proximidades de la discontinuidad, dándonos así información acerca de la barrera de potencial que tendrían que atravesar los electrones hacia/desde los estados superficiales. Así, de manera semejante al algoritmo formulado con la concentración N_{front} , para la evolución de la carga superficial con E^\perp proponemos el algoritmo esquematizado en la Figura II.13.⁹² Nótese que también se usan los parámetros relativos a la evaluación de concentración N_{car} y N_{des} que acabamos de definir en el apartado anterior.

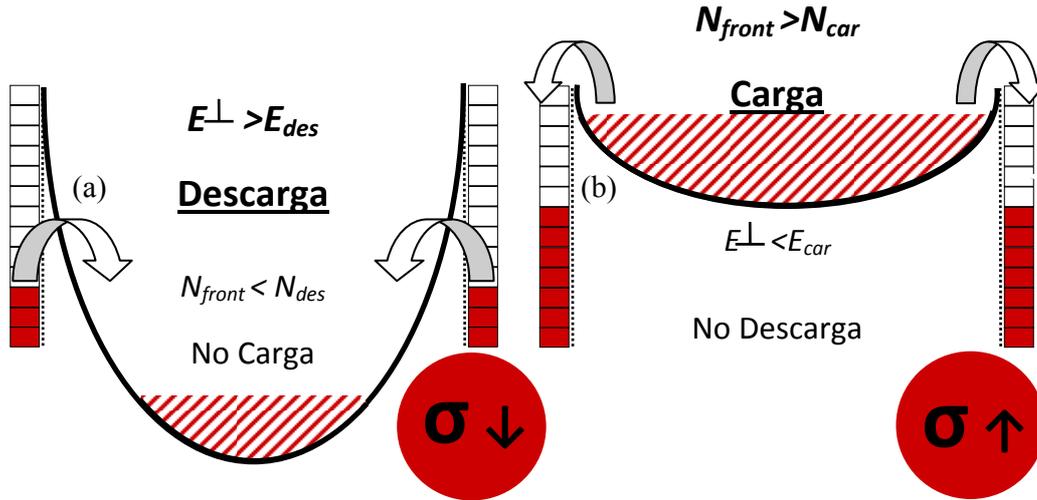


Figura II.13. Esquema de las bandas de conducción en la dirección perpendicular a una discontinuidad semiconductor–dieléctrico para diferentes situaciones. (a) Descarga de estados superficiales hacia el canal por efecto túnel. $N_{front} < N_{des}$ y $E^{\perp} > E_{des}$. (b) Carga de los estados superficiales desde el canal por emisión termoiónica. $N_{front} > N_{car}$ y $E^{\perp} < E_{car}$.

En primer lugar se calcula el valor del campo eléctrico perpendicular E^{\perp} y la concentración cercana a la frontera N_{front} como valor medio sobre un determinado número de iteraciones $NIQSE$. Si el campo eléctrico E^{\perp} es mayor que un campo “umbral de descarga” E_{des} y la concentración N_{front} es menor que el nivel de descarga $N_{des} = N_{db}/FAC_{INF}$, se reduce el valor local de la carga superficial en una cantidad $\Delta\sigma$. Esta condición significa que la pendiente de la banda de conducción en el canal perpendicular a la frontera es lo suficientemente alta (la anchura de la barrera es pequeña) como para tener una probabilidad significativa de procesos de efecto túnel que descarguen los estados superficiales, Figura II.13(a). Además, como N_{front} es pequeño, los procesos de carga son despreciables comparados con la disminución de la ocupación por efecto túnel. Por otra parte, si el campo eléctrico E^{\perp} es menor que un campo “umbral de carga” E_{car} y la concentración de portadores libres N_{front} es mayor que el nivel de carga $N_{car} = N_{db}/FAC_{SUP}$, el mecanismo dominante es la carga de estados superficiales por emisión termoiónica por lo que la carga superficial se incrementa en la misma cantidad $\Delta\sigma$, Figura II.13(b). En los casos en los que el campo eléctrico y la concentración no verifiquen estas condiciones que acabamos de describir, la carga no se modifica ya que se considera que los procesos de captura y emisión por parte de estados superficiales son despreciables o se compensan entre ellos. En la Figura II.14 mostramos un esquema donde se representan todas las situaciones posibles.

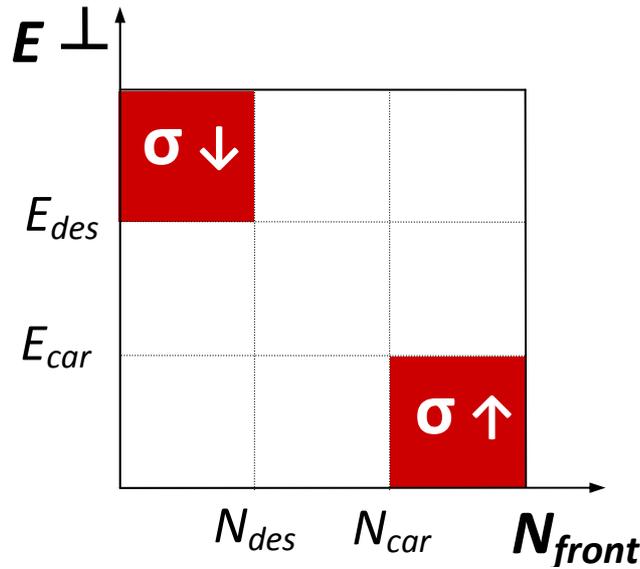


Figura II.14. Representación esquemática de las situaciones que se pueden presentar en términos del campo eléctrico normal E_{\perp} y de la concentración N_{front} con respecto a los diferentes parámetros: campo umbral de descarga E_{des} , y de carga E_{car} , niveles inferior o de descarga N_{des} y superior o de carga N_{car} de la densidad. En rojo los casos en que se modifica la carga superficial.

Para dar una interpretación física de los umbrales de campo eléctrico, hay que relacionarlos con la energía de activación de los estados superficiales y la anchura de la barrera de potencial como se ve en la Figura II.15. Cuando mayor sea la energía de activación, para tener una anchura de la barrera lo suficientemente pequeña como para considerar significativa la probabilidad túnel se necesita una mayor pendiente de la banda de conducción, lo que en nuestro modelo vendría representado por valores más altos del campo umbral de descarga. El modelo que acabamos de describir será el usado en las simulaciones de SSMs del Capítulo V.

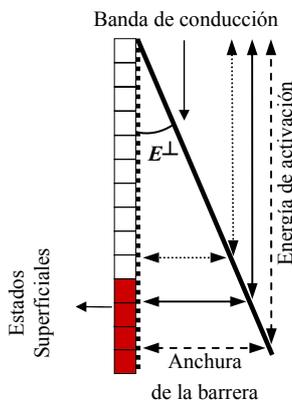


Figura II.15. Dibujo ilustrativo de la relación entre la energía de activación de los estados superficiales, el campo eléctrico normal E_{\perp} y la anchura de la barrera.

II.4. ANÁLISIS DEL RUIDO

En Ciencia, y especialmente en Física y Telecomunicaciones, cuando se habla del ruido no se hace referencia necesariamente a fenómenos audibles, sino a las fluctuaciones aleatorias de una magnitud en torno a un valor estacionario. En el campo de la Electrónica entendemos por ruido a las oscilaciones espontáneas que se producen en la corriente o el voltaje del sistema. Su origen está asociado a sucesos aleatorios que modifican la velocidad y/o el número de los portadores del dispositivo.^{128,129} Si estas fluctuaciones se amplifican e introducen en un altavoz dan lugar a un sonido incoherente y “silbante” al que coloquialmente denominamos ruido.

El método de Monte Carlo es una de las técnicas más adecuadas para el estudio del ruido en dispositivos electrónicos, ya que incluye de forma natural, sin necesidad de suposiciones adicionales, los procesos microscópicos aleatorios que lo producen.¹³⁰⁻¹³³ De hecho, no se realiza ninguna hipótesis previa sobre el valor de las fuentes del ruido o su posible correlación, sino que éstas pueden calcularse directamente a través del método.

II.4.1. Magnitudes básicas

Las fluctuaciones δA de una magnitud A que, en el caso del ruido electrónico, y particularmente en esta Tesis, será la corriente a través de un dispositivo, están definidas por la diferencia en cada instante de tiempo de dicha magnitud $A(t)$ con respecto a su valor medio \bar{A} , $\delta A(t) = A(t) - \bar{A}$.

El método más usado para examinar la dependencia en frecuencia de una magnitud que fluctúa es el análisis de Fourier, que realiza una descripción en términos de la densidad espectral denotada por $S_A(f)$, donde f es la frecuencia. Esta magnitud es muy útil ya que puede compararse directamente con medidas de laboratorio.

II.4.1.a. Función de autocorrelación

La densidad espectral puede calcularse mediante la transformada de Fourier de su representación teórica en el dominio temporal, la función de autocorrelación

$$C_A(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \delta A(t') \delta A(t'+t) dt'. \quad (\text{II.29})$$

Esta función describe el comportamiento dinámico de las fluctuaciones espontáneas de la magnitud A en torno a su valor de equilibrio. Como indica su nombre, representa la coherencia temporal entre los valores de las fluctuaciones de la magnitud en diferentes tiempos.

II.4.1.b. Densidad espectral

Para un proceso estacionario, usando el teorema de Wiener–Kintchine,¹³⁴ se calcula la densidad espectral como

$$S_A(f) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} C_A(t) e^{j2\pi ft} dt, \quad (\text{II.30})$$

donde el factor 2 proviene de que únicamente se consideran frecuencias positivas.

En esta Tesis únicamente se analizarán las fluctuaciones de corriente en condiciones de potencial aplicado constante (ruido en corriente). Existe otro modo de funcionamiento, denominado ruido en voltaje, donde se examinan las fluctuaciones del potencial cuando la corriente es constante. Como realizaremos simulaciones bidimensionales las unidades serán $\text{A}^2\text{m}^{-1}\text{s}$.

A continuación detallamos cómo se calculan estas magnitudes dentro de un simulador Monte Carlo. La magnitud de la que queremos estudiar las fluctuaciones aleatorias será la corriente I de portadores a través de los electrodos. En la simulación, la corriente I se evalúa únicamente en instantes discretos $j\Delta t$ (desde 0 hasta $n\Delta t$), por lo que la función de autocorrelación sólo se puede calcular para dichos instantes, de la forma

$$C_I(j\Delta t) = \frac{1}{n-j+1} \sum_{i=j}^n \delta I(i\Delta t) \delta I[(i-j)\Delta t] \quad (\text{II.31})$$

El tiempo de muestreo Δt ha de ser lo suficientemente pequeño como para detectar las fluctuaciones de mayor frecuencia, de manera que en virtud del teorema de muestreo de Shannon¹³⁵ $\Delta t < 1/(2f_{\max})$, donde f_{\max} es la frecuencia máxima a detectar.

La densidad espectral se calcula, por tanto, a partir de una función de autocorrelación muestreada para $k+1$ valores discretos del tiempo (suponiendo que es nula fuera de ese intervalo, $t \geq k\Delta t$)

$$S_I(f) = 4\Delta t \sum_{m=0}^k C_I(m\Delta t) \cos(2\pi f m \Delta t). \quad (\text{II.32})$$

Para evitar los armónicos asociados a la duración finita de las funciones de autocorrelación, aplicaremos “ventanas”,^{111,120} reduciendo así las contribuciones “de fugas” a las frecuencias múltiplos del inverso del tiempo total calculado, $f_k = 1/k\Delta t$. Con el método de las “ventanas” los valores de las funciones de autocorrelación tienden a cero de una forma más suave, lo que se consigue por medio de la multiplicación por ciertas funciones decrecientes (que son precisamente a las que se denomina ventanas). En nuestro caso usamos una ventana de tipo Hanning.¹²⁰ Por otra parte, la minimización del efecto de la aparición de armónicos se consigue cuanto menor sea Δt y mayor k .

II.4.2. Mecanismos causantes del ruido

En el análisis de la densidad espectral de las fluctuaciones de corriente aparecen diferentes máximos asociados a determinados fenómenos físicos. Conviene indicar que nosotros siempre vamos a analizar el rango de frecuencias más allá del ruido Flicker^{136,137} o $1/f$. A continuación comentaremos los mecanismos más importantes que pueden originar ruido electrónico y el rango de frecuencias característico.⁸²

- (i) Ruido térmico (de difusión): También denominado Johnson–Nyquist. Es atribuido a las fluctuaciones de la velocidad de los portadores. Este tipo del ruido está incorporado a la simulación Monte Carlo de manera natural. En equilibrio, es el único que aparece y es independiente de la frecuencia hasta valores del orden del inverso del tiempo de relajación del momento. Fuera de equilibrio es el mecanismo dominante en la mayoría de semiconductores. La aplicabilidad del teorema de Nyquist permite calcular la densidad espectral asociada a este tipo de ruido en equilibrio como $S_I(\omega) = 4K_B T \text{Re}(Y(\omega))$, donde K_B es la constante de Boltzmann, T la temperatura e Y la admitancia.
- (ii) Ruido de inyección (*shot noise*): Es causado por el carácter discreto de la carga electrónica. Aparece cuando una serie de procesos independientes ocurren aleatoriamente,¹³⁸ como por ejemplo el paso

de portadores a través de una barrera.¹³⁹ Su densidad espectral viene dada en un amplio rango de frecuencias por $S_I(\omega)=2qI$, con q la carga elemental e I el valor medio de la corriente.

- (iii) Ruido asociado a las oscilaciones de plasma: El acoplamiento entre las fluctuaciones de la velocidad de portadores y las del campo eléctrico autoconsistente¹⁴⁰ da lugar a un máximo en la densidad espectral del ruido en la denominada frecuencia del plasma

$$f_P = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{N_D q^2}{\epsilon m^*}}, \quad (\text{II.33})$$

donde q es la carga del electrón, N_D el dopaje, ϵ la permitividad dieléctrica del material y m^* la masa efectiva. Este fenómeno se manifiesta de modo natural en la densidad espectral del ruido en voltaje. En el caso del ruido en corriente es necesaria la presencia de inhomogeneidades en la concentración de portadores para observarlo.¹⁴¹

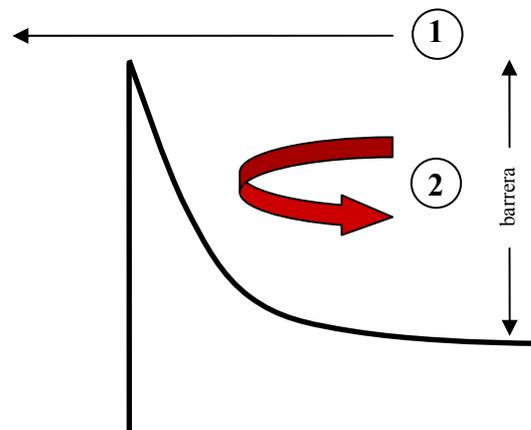


Figura II.16. Esquema representativo de los dos grupos de electrones que se aproximan a una barrera.

- (iv) *Returning carriers*: En diodos de barrera Schottky aparece otro fenómeno interesante que da lugar a un máximo en el ruido a frecuencias menores que las de plasma. El origen de este nuevo máximo está asociado a los portadores que se aproximan a la barrera pero no tienen suficiente energía cinética para superarla y se dan la vuelta, por lo que se les denomina *returning carriers*.^{139,140} En los diodos SSD aparece un máximo en el espectro de origen no idéntico pero sí similar al de los diodos Schottky, por lo que es conveniente

explicar el mecanismo de los *returning carriers* en este momento. En la Figura II.16 se han representado de forma esquemática los dos casos que se pueden producir cuando un electrón llega a una barrera. En función de su energía cinética en la dirección perpendicular a la barrera se distinguen: grupo 1 con energía mayor que la barrera y grupo 2 con energía menor que la barrera y por ello incapaces de superarla. Los primeros son los responsables del valor de baja frecuencia de la densidad espectral y su contribución es constante con la frecuencia (ruido *shot*). Los segundos dan una contribución del tipo f^2 hasta alcanzar un máximo cuya amplitud está relacionada con la altura de la barrera que han de superar los portadores.^{139,142} Cabe mencionar que la frecuencia de plasma está involucrada en la dinámica de este tipo de portadores.

II.4.3. Circuito equivalente

En Shur⁹⁶ se demuestra que un semiconductor homogéneo de tamaño característico mayor que el recorrido libre medio puede representarse mediante un circuito tipo R–L–C como el mostrado en la Figura II.17. Se le denomina circuito equivalente de pequeña señal. Mediante combinaciones de elementos R–L–C se puede representar la impedancia de pequeña señal de un dispositivo, siendo de gran utilidad a la hora de analizar de manera analítica el ruido. La resistencia, que refleja el carácter óhmico del semiconductor, es función de la movilidad y la concentración de portadores. De igual forma es necesario incluir un condensador que refleje los efectos capacitivos entre los contactos. Esta capacidad es simplemente la capacidad geométrica. La autoinducción da cuenta del efecto inercial asociado al retardo de los portadores cuando son acelerados por el campo eléctrico. En un tratamiento circuital diríamos que corresponde al retraso de la corriente respecto del voltaje aplicado en un circuito inductivo. Estas magnitudes propias del circuito equivalente están asociadas a los diferentes tiempos característicos del sistema $CR=\tau_d$, $L/R=\tau_m$ y $CL=\tau_p^2$ donde $\tau_d=\varepsilon/(qN_D\mu)$ es el tiempo de relajación dieléctrico, $\tau_m=m^*\mu/q$ es el tiempo de relajación del momento, y τ_p el tiempo asociado a la frecuencia de plasma, definido en la ecuación II.33.

Mediante el teorema de Nyquist¹⁴³ se puede calcular la densidad espectral de la corriente a partir de la parte real de admitancia $Y(\omega)=1/Z(\omega)$ de acuerdo con la expresión $S_I(\omega)=4K_B T \text{Re}(Y(\omega))$.

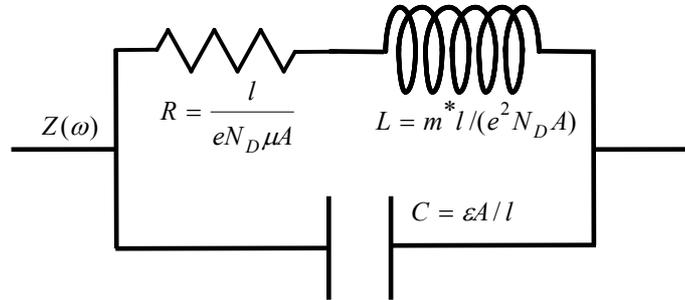


Figura II.17. Circuito equivalente RLC de pequeña señal para un semiconductor homogéneo de longitud l y anchura A en condiciones óhmicas. $Z(\omega)$ es la impedancia del circuito.

Para representar las zonas donde el transporte sea balístico y las zonas de carga espacial (en las proximidades de las discontinuidades semiconductor–dieléctrico) se usarán circuitos formados por una resistencia y una capacidad en paralelo calculados a partir de los resultados de las simulaciones Monte Carlo. Así podremos estudiar de una manera analítica la dependencia de la densidad espectral de las fluctuaciones de la corriente con respecto a determinadas modificaciones de la geometría de los SSDs y corroborar los resultados de nuestras simulaciones. Puesto que obviamente la determinación de los parámetros circuitales R–L–C de cualquier dispositivo corresponde a un típico problema inverso (conocida la respuesta del mismo), optaremos por un circuito equivalente simple, con un número mínimo de elementos, que lo pueda representar de forma aproximada en un cierto intervalo de frecuencia y que tenga significado físico.

CAPÍTULO III

UNIONES DE TRES TERMINALES EN FORMA DE T

Dentro de los nanodispositivos de los que hablamos en el Capítulo I, el objetivo de esta Memoria es estudiar los efectos de carga superficial en dos de ellos, las uniones de tres terminales en forma de T o *T-Branch Junctions* (TBJs), que se estudiarán en este capítulo, y los diodos autoconmutantes o *Self-Switching Diodes* (SSDs), cuyo análisis se hará en los Capítulos IV y V. El funcionamiento de las uniones en T se ha demostrado experimentalmente^{19,20,26,28,29,33,42} y se han propuesto varios modelos teóricos⁵⁹⁻⁶¹ que explican su funcionamiento basándose en una descripción coherente del transporte a partir del formalismo de Landauer-Büttiker.^{62,63} Como alternativa, el método de simulación microscópica Monte Carlo, basado en efectos puramente semiclásicos, ha sido capaz de reproducir con gran éxito las medidas experimentales realizadas a temperatura ambiente.^{71,72,73,86}

En este capítulo utilizaremos el simulador Monte Carlo descrito en la sección II.2 y compararemos sus resultados con las medidas experimentales de uniones balísticas en T con diferentes anchuras de su rama vertical efectuadas en el IEMN (*Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie du Nord*, Villeneuve d'Ascq en Lille, Francia). Gracias a la fluida colaboración que mantenemos con dicho laboratorio, podemos disponer de datos detallados, tanto de topología de los dispositivos como de su caracterización experimental. En particular, estos dispositivos se fabricaron en el marco del proyecto europeo NANO-TERA,¹⁴⁴ orientado al desarrollo de aplicaciones a THz usando diversos tipos de nanodispositivos balísticos. Se encuentra que, la forma de campana del potencial del fondo de la rama vertical al polarizar en modo *push-pull* se acentúa cuando la

anchura de la rama vertical es menor.⁹⁸ Veremos que mediante el uso de un modelo de carga superficial constante (explicado en la sección II.3.1) no es posible reproducir dichas medidas experimentales. Sin embargo, si utilizamos un modelo más sofisticado, el modelo auto-consistente para el tratamiento de la carga superficial,⁸⁷⁻⁸⁹ cuyos detalles fueron expuestos en la sección II.3.2, se reproducen correctamente los resultados.

La gran cantidad de magnitudes que proporciona el simulador Monte Carlo permite llevar a cabo un análisis preciso de los fenómenos que ocurren a escala microscópica en el interior del dispositivo, y así poder explicar los resultados de una manera detallada y clara. El esquema seguido en la elaboración de este capítulo es el siguiente. En lo que respecta al comportamiento estático, daremos los detalles de la topología, polarización y simulación de las estructuras de tres terminales en forma de T. Con el modelo de carga constante se estudiarán unas estructuras en T específicas para las que se dispone de medidas experimentales, poniendo de manifiesto las discrepancias que aparecen y explicando su origen. Después de presentar una serie de simulaciones que analizan la influencia de los diferentes parámetros del modelo auto-consistente de carga superficial, se expondrán los resultados finales para las uniones en T, que muestran un buen acuerdo con los experimentales. Por último analizamos la respuesta en frecuencia de uniones con diferentes tamaños. Mostramos resultados tanto experimentales como Monte Carlo de su operación como dobladores y mezcladores de frecuencia. Finalmente se estudiarán TBJs en la que para disminuir su resistencia y mejorar su respuesta dinámica se ha aumentado la anchura de su rama horizontal.

III.1. GEOMETRÍA DEL DISPOSITIVO. MOTIVACIÓN

Antes de centrarnos en el estudio minucioso de las magnitudes obtenidas en las simulaciones, presentaremos la topología de la estructura simulada y la forma en que se realizan en ella las medidas experimentales.

III.1.1. Topología

Este tipo de dispositivos está formado por dos ramas o canales semiconductores unidos en forma de T, como se muestra en la imagen AFM de la Figura III.1. Ya que uno de los objetivos de este trabajo es contrastar los resultados experimentales con los obtenidos mediante las simulaciones Monte Carlo, debemos explicar el procedimiento de toma de medidas y las condiciones de la simulación para poder hacer una comparación correcta de los resultados.

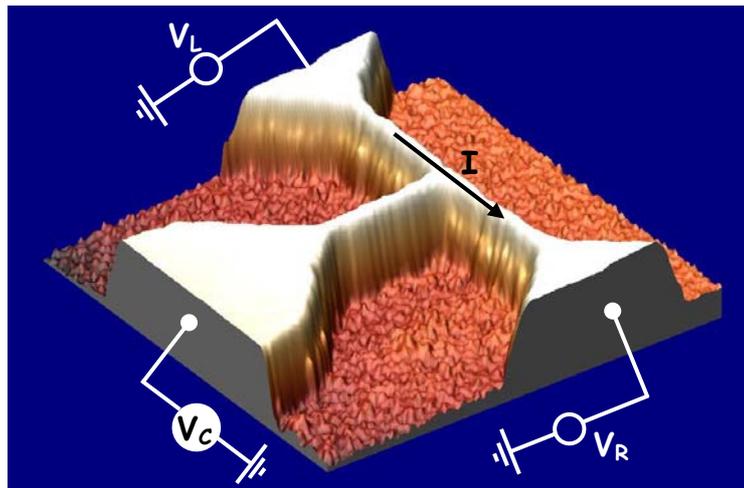


Figura III.1. Imagen AFM de una unión en T y su configuración de polarización y medida

III.1.2. Configuración de polarización

Existen dos formas diferentes de polarizar un dispositivo de este tipo. La primera de ellas es la denominada *push-fix*, en la que un contacto es mantenido a potencial nulo mientras que en el otro se aplica el potencial deseado, es decir, $V_L=0$ y $V_R=V$ (ver Figura III.1). La otra configuración es la tipo *push-pull*. En ésta se aplican potenciales iguales pero de distinto signo a los dos contactos de la estructura, $V_R=-V_L=V$. En la simulación por ordenador cualquiera de los dos métodos es perfectamente viable. En el laboratorio sin embargo dependerá del montaje experimental disponible. En las uniones que se han estudiado en este trabajo, el

objetivo es medir el potencial en el fondo de la rama central vertical, representado por V_C , cuando esta rama está en circuito abierto ($I_C=0$). El rango de valores usado para polarizar la estructura en el modo *push-fix* ha sido (-0.5 V, 0.5 V), lo que equivale a polarizaciones en modo *push-pull* de (-0.25 V, 0.25 V). Aunque la mayoría de los resultados para V_C se presentarán para la configuración *push-pull* (V_C^{PP}), se pueden expresar para *push-fix* (V_C^{PF}) sin más que realizar la transformación siguiente

$$V_C^{PP} = V_C^{PF} - \frac{V^{PF}}{2}, \quad (\text{III.1})$$

donde V^{PF} es el potencial aplicado al contacto derecho en la configuración *push-fix*.

Suponiendo un comportamiento óhmico, se esperaría que el potencial medido en el fondo de la rama vertical fuera cero en una configuración *push-pull* (la semisuma de los potenciales aplicados en los contactos $(V_L+V_R)/2$). Pero como se demuestra experimentalmente en la Ref. 19 y teóricamente en la Ref. 59, la curva V_C-V presenta valores negativos para $V \neq 0$, con una dependencia parabólica para potenciales aplicados pequeños (ecuación I.3). En su modelo, H. Q. Xu⁵⁹ aplica la teoría de scattering junto con el formalismo de las probabilidades de transmisión y reflexión de los electrones con la energía del nivel de Fermi para describir las propiedades no lineales de los conductores.

III.1.3. Accesos a los dispositivos y condiciones de simulación

Como recordatorio, es importante señalar que nuestras simulaciones son del tipo *top-view* (TV) (ver II.2.1), en donde solamente se simula el canal de $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$. Para tener en cuenta las cargas fijas presentes en la estructura de capas se asigna al canal un dopaje “virtual” $N_{db} = 10^{17} \text{cm}^{-3}$ al resolver la ecuación de Poisson, pero sin considerar el scattering con impurezas, de manera que el transporte en el canal no dopado es correctamente reproducido.

Es evidente que el funcionamiento del dispositivo dependerá no sólo de su zona activa, sino también de los elementos extrínsecos. Estamos hablando de los contactos y accesos, regiones que se fabrican con el fin de poder aplicar y medir potenciales en el dispositivo y de inyectar/extraer portadores en su zona activa. Se trata pues de regiones de dimensiones grandes con resistencia baja donde el campo eléctrico es prácticamente nulo; se dice que los electrones en ellos están termalizados

(energía correspondiente a la temperatura de la red). Pero si se aplican potenciales elevados o la longitud de los canales es excesivamente pequeña, puede ocurrir que el campo eléctrico en las zonas de los accesos cercanas al canal ya no sea cero. El campo penetra en los accesos, lo cual no es deseable ya que perturba la llegada de portadores al canal. Esto ocurre cuando la resistencia de los accesos es apreciable con respecto a la de la zona activa. La situación ideal sería que la resistencia de los accesos fuera nula, pero eso es imposible ya que su anchura debe disminuir a medida que nos acerquemos a la zona activa de la estructura, Figura III.2(a). El problema es que los tamaños reales de los accesos completos son excesivamente grandes para poder simularse con un mallado fino. Asimismo, la simulación de los accesos conlleva una enorme cantidad de tiempo de cálculo debido a la gran cantidad de portadores que se encuentran en ellos. Por otra parte, si los accesos no son simulados, las condiciones de contorno y la modelización de los contactos condicionarán el comportamiento del dispositivo, tanto en sus características estáticas como en las del ruido, de manera especial en estructuras muy cortas.^{116,145} Se ha de tener pues especial cuidado en la simulación de los accesos.

Un primer modelo que podemos utilizar en la simulación Monte Carlo es aquel que no incluye los accesos en la simulación. En este caso se considera un valor de la densidad de portadores en los contactos, N_C (ecuación II.12), que proporcione los mismos valores y comportamiento de la corriente que en una simulación con toda la estructura de capas (*front-view*, FV). Este método puede fallar en dispositivos muy pequeños, ya que podemos estar obligando, de manera no intencionada, a introducir portadores con una velocidad y una cadencia que no se correspondan al campo eléctrico de la zona próxima al terminal. Tampoco sería posible modelar el efecto de la penetración del campo en los accesos. Por ello se opta por la inclusión total o parcial de los accesos en el dominio de simulación. Su misión es hacer una correcta inyección de portadores (descrita en la sección II.2.4), es decir, se trata de una reserva de electrones (*reservoirs*) que van entrando o saliendo de la zona activa. Así, los portadores inyectados tendrán tiempo para estabilizarse a la velocidad adecuada antes de llegar a la región activa de la estructura. Por otra parte, la inclusión de los accesos hace que el tratamiento del problema se realice de una forma más natural. En las simulaciones sin accesos la frecuencia de inyección está determinada por una densidad de portadores en el contacto $N_C > N_{db}$ que puede producir una inyección

errónea, como hemos señalado anteriormente, y que además depende de cada tipo de dispositivo. Por el contrario, si se incluyen los accesos y se fija $N_C=N_{db}$ en la parte del dispositivo alejada de la región activa, se tendrá una distribución de portadores que en los extremos de la región de interés no se verá afectada por las condiciones de inyección en los contactos.

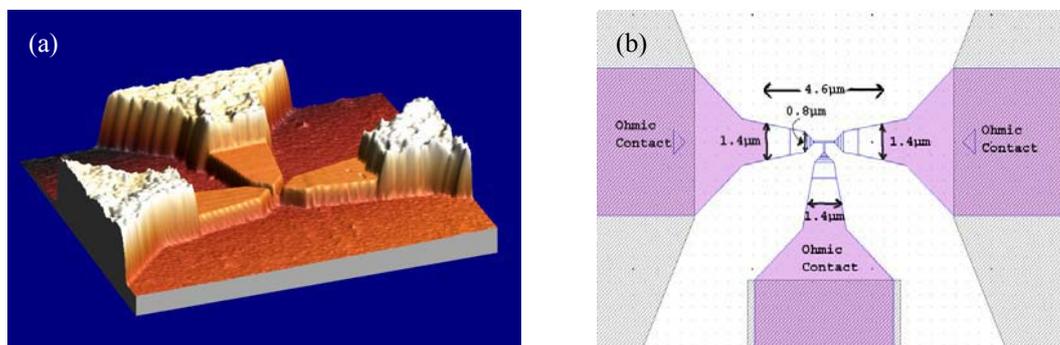


Figura III.2. (a) Imagen *AFM* de la unión en T. (b) Máscara para la fabricación de los accesos y contactos en los nanodispositivos balísticos con forma de T.

En la Figura III.2 se muestra la geometría real de los accesos a los nanodispositivos simulados y la máscara para la fabricación de una unión en T realizada en el IEMN de Lille. En ellas se distinguen dos zonas: los accesos semiconductores y la parte correspondiente al contacto óhmico. Con objeto de reducir el tiempo de cálculo sin que ello suponga una pérdida de precisión, se han simulado diferentes canales y tipos de accesos,⁸⁶ concluyéndose que resulta suficiente incluir 350 nm de los accesos en el dominio de simulación y luego añadir una pequeña resistencia en serie para simular correctamente los contactos.

Además, mediante la simulación de los accesos podemos determinar la dimensión Z no simulada con el criterio siguiente. Puesto que en las simulaciones TV la concentración de electrones es 10^{17}cm^{-3} , se toma como valor de Z aquel que proporciona un valor de la concentración superficial de electrones en el canal, n_s , igual al medido experimentalmente en las obleas en el IEMN. Se obtiene entonces que $Z=n_s/N_{db} \approx (1-3) \times 10^{12} \text{cm}^{-2} / 10^{17} \text{cm}^{-3} = (1-3) \times 10^{-5} \text{cm}$. Mediante el cálculo Monte Carlo de la resistencia para canales de diferentes anchuras y longitudes, se ha comprobado⁸⁶ que el valor de la resistencia de los accesos (ver Figura II.8), usando el valor de Z calculado anteriormente, coincide con las medidas experimentales. Este valor de la dimensión no simulada hace posible la comparación directa de los resultados Monte Carlo con las medidas experimentales, ya que los valores obtenidos

en la simulación son resultados 2D. Por ejemplo, para el cálculo de corriente bastará con multiplicar la densidad de corriente obtenida en la simulación $J(\text{A/m})$ por el valor de $Z(\text{m})$. En el caso de las simulaciones sin accesos, este cálculo es más delicado, ya que el valor de la densidad de portadores de inyección no es igual al dopaje de fondo, $N_C \neq N_{db}$.

Por otra parte, como consecuencia de que no hemos simulado los accesos en su totalidad (hemos incluido sólo 350 nm), debemos añadir una resistencia en serie para comparar con los resultados experimentales. Su valor es $R_C = 1.3 \times 10^{-4} \Omega \text{m}^{86}$ que, teniendo en cuenta el valor de la dimensión

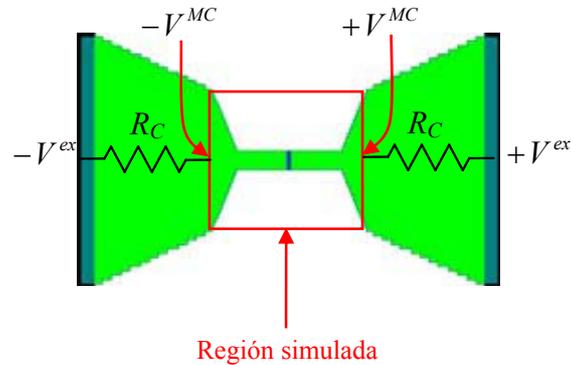


Figura III.3. Esquema de región simulada. Inclusión de resistencias de acceso.

no simulada de $Z = 2 \times 10^{-7} \text{ m}$, significa una resistencia en serie de valor $R_C = 650 \Omega$. Esto supone que, a la hora de comparar los valores de V_C , cuando en las simulaciones Monte Carlo se aplica un potencial V^{MC} , los resultados obtenidos corresponderán a un valor de potencial aplicado en las medidas experimentales de $V^{ex} = V^{MC} + R_C \times I^{MC}$ debido a la caída de potencial en la zona del contacto no simulada (Figura III.3). Al presentar alguna comparación con medias experimentales hemos elegido representar las curvas en función del potencial aplicado en las medidas experimentales V^{ex} , pero también lo podríamos haber hecho en función del simulado V^{MC} , restándole al potencial aplicado el producto $R_C \times I^{ex}$.

III.1.4. Resultados previos

A continuación expondremos algunos resultados obtenidos con el modelo simple de carga superficial constante⁷¹ usando diferentes valores de carga superficial $\sigma/q = 0.1 - 0.35 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ($N_{db} = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) para la estructura en T que aparece en el *inset* de la Figura III.4 (ramas de anchura 50 nm y longitud 75 nm).

Los valores negativos del potencial V_C dependen del nivel de carga superficial, ya que ésta controla la intensidad de los efectos de carga espacial (amplitud del mínimo de potencial de la Figura III.5). Este control es similar al ejercido por el potencial de puerta superior de los experimentos de Shorubalko.¹⁹ Tanto la magnitud

de la carga superficial σ como el perfil asimétrico de la concentración de carga libre asociado al movimiento balístico de los portadores inyectados en los contactos afectan de manera determinante a los valores de V_C .

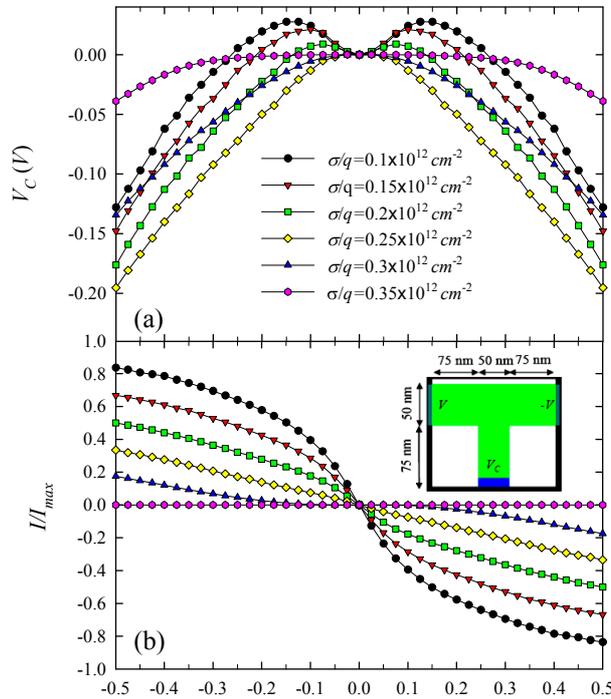


Figura III.4. (a) Potencial V_C y (b) corriente horizontal normalizada a la corriente máxima inyectada por los contactos (I/I_{max}) (Ref. 71) para diferentes valores de la densidad de carga superficial σ . $T=300$ K. *Inset:* geometría de la TBJ.

En la Figura III.5 se observa cómo, debido a los efectos de carga superficial, el valor del potencial eléctrico disminuye al alejarse de los contactos, vaciando progresivamente el canal, y dando lugar así a un mínimo de potencial y de concentración de electrones. Este mínimo está situado en el centro de la estructura en condiciones de equilibrio, pero al polarizar la unión se desplaza hacia el electrodo positivo como consecuencia del perfil asimétrico de la concentración de electrones, que es mayor cerca del electrodo negativo debido al movimiento balístico (en el lado izquierdo $V_L=V$, menor concentración de electrones, con velocidad alta; y en el lado derecho $V_R=-V$, más electrones pero más lentos).^{117,146} Como consecuencia de esto el potencial en el centro de esta rama, denotado por $V_H(x_C)=V_{HC}$ (siendo $x_C=100$ nm), es siempre menor que el de equilibrio y disminuye al aumentar V .

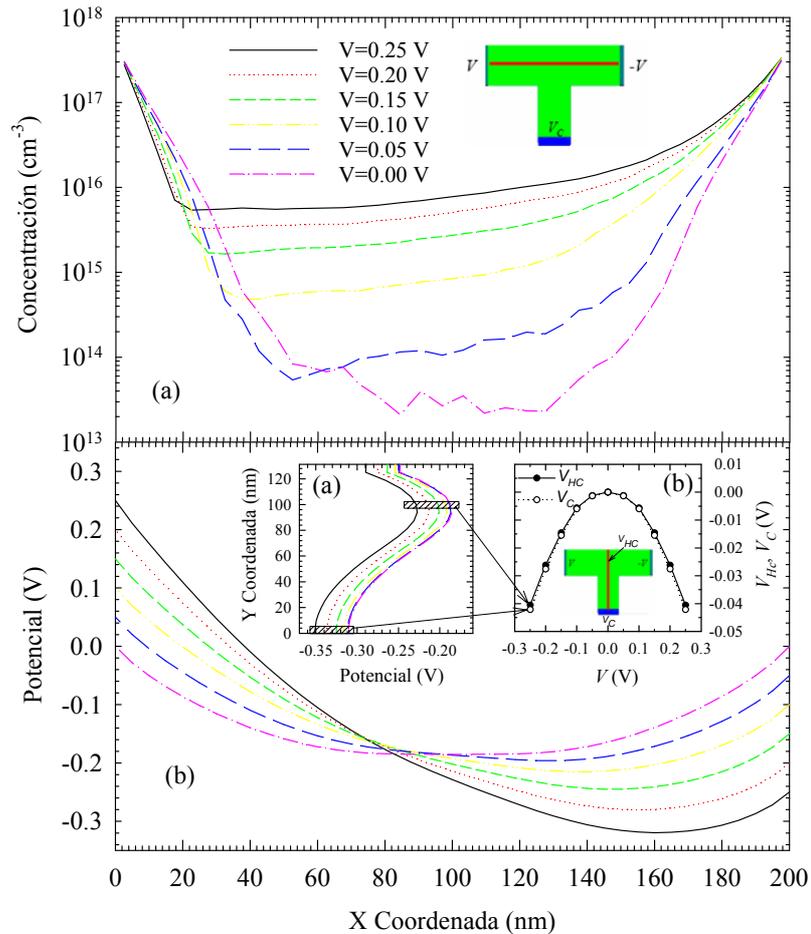


Figura III.5. Perfiles de (a) concentración de electrones y (b) potencial eléctrico a lo largo del centro de la rama horizontal (V_H) de la unión en T mostrada en la Figura III.4 con $\sigma/q=0.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para diferentes valores de $V=V_L=-V_R$. *Inset:* (a) Potencial en el centro de la rama central vertical (V_V) y (b) valores del potencial en el fondo de esta rama V_C y en centro de la unión V_{HC} .

En cuanto a los efectos verticales, en el *inset* (a) de la Figura III.5 se presenta el perfil de potencial en el centro de la rama vertical. Podemos observar que las variaciones de V_{HC} con V se “trasladan” hasta el fondo de la rama vertical, originando la forma de campana que muestran los valores de V_C en función de V , cómo se aprecia en el *inset* (b) de la Figura III.5. La rama vertical actúa como una sonda de potencial conectada a la rama horizontal y detecta las variaciones de potencial en el centro de la unión en T. Esto es debido a que la penetración de portadores en la rama central tiene lugar únicamente como consecuencia de la componente térmica vertical de la velocidad de los portadores que fluyen por la rama horizontal, que es prácticamente independiente de V . Además, como en este modelo la carga en las superficies es independiente de la polarización (y es la misma en toda la discontinuidad), el perfil del potencial V_{HC} se solapa con el de V_C . En el caso de

tener una unión en Y,⁷² la penetración de portadores hacia la rama vertical hará que los valores medidos en el fondo de esta rama V_C ya no sean los mismos que los que existen en el centro de la unión V_{HC} .

También se simularon estructuras con longitudes mayores de la rama horizontal $L=980, 450$ y 330 nm.^{73,86} Sorprendentemente se encontraron valores negativos de V_C incluso cuando el transporte en ellas era óhmico (o cuasi-difusivo) y se esperaba (al menos en la más larga) que el potencial en la rama central V_C fuera cero. Esto es debido a efectos de calentamiento de electrones, cuando aumenta el potencial aplicado por encima de un cierto valor, aparecen mecanismos de scattering intervale, produciendo un aumento de la masa efectiva media y la consecuente disminución de la velocidad, por lo que tiene lugar una acumulación de portadores lentos cerca del contacto con potencial positivo (ánodo). Así, el perfil del potencial eléctrico cambia, produciéndose casi toda la caída de potencial cerca del ánodo, donde se acumulan los electrones lentos de los valles superiores, de manera que el potencial del punto central de la unión en T sigue las variaciones del potencial negativo del cátodo, dando como resultado una caída lineal de V_C con respecto al potencial aplicado en *push-pull*, Figura III.6 (b). Para evitar este fenómeno nos restringiremos a potenciales menores de 0.5 V (límite marcado por la diferencia de energías entre los valles Γ y L del semiconductor que forma el canal, Tabla II.1), de

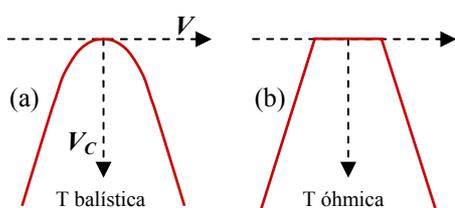


Figura III.6. $V_C - V$ de una unión en T de dimensiones características (a) inferiores o comparables y (b) mayores que el recorrido libre medio a temperatura ambiente.

forma que la respuesta de V_C resulte parabólica, Figura III.6 (a). Además, el comportamiento en frecuencia será notablemente mejor debido a que la velocidad de los electrones no se verá disminuida por la aparición de fenómenos de scattering, pudiendo ser ésta 4 ó 5 veces superior que en los dispositivos óhmicos.

Estos resultados obtenidos con el modelo de carga superficial estática permiten una primera introducción a la comprensión del papel que ésta juega en la respuesta de los nanodispositivos. Sin embargo, a continuación presentamos unos resultados experimentales que nos indican que dicho modelo no es válido en algunos casos, por lo que es necesario mejorarlo con el fin de modelizar de forma más precisa los fenómenos físicos asociados a la carga superficial.

III.2. MEDIDAS EXPERIMENTALES. PROBLEMAS DEL MODELO DE CARGA SUPERFICIAL CONSTANTE

III.2.1. Dispositivos fabricados

En la Figura III.7 se presentan las imágenes por microscopio SEM de uniones en T fabricadas en el IEMN. Las dimensiones de las uniones aparecen indicadas en la Figura III.7 (f).

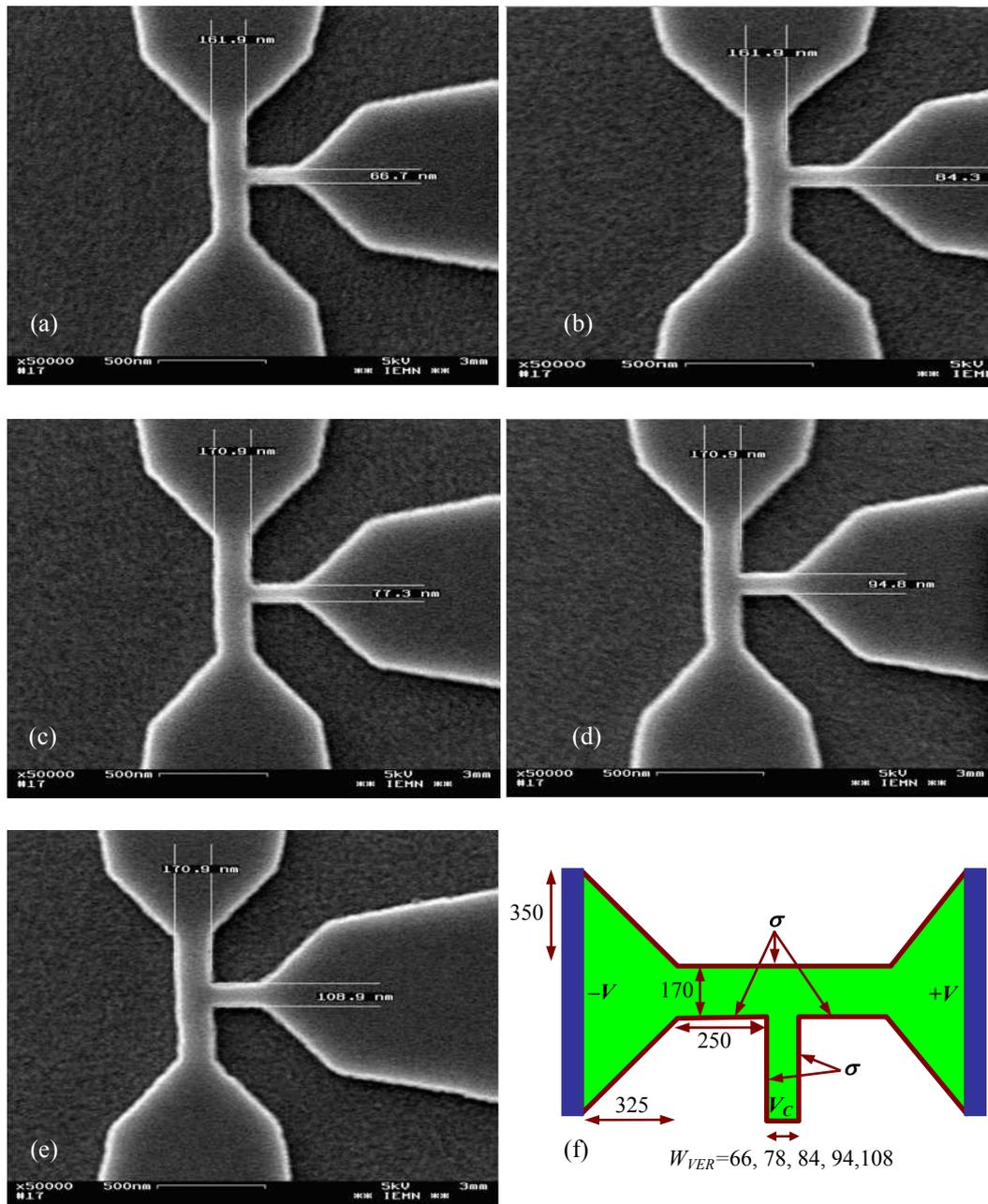


Figura III.7. Imágenes obtenidas mediante microscopio electrónico de las uniones en T con diferentes anchuras de la rama vertical (a)–(e). En (f) se indican las dimensiones en nm.

Para la discretización espacial utilizada en las simulaciones Monte Carlo se ha usado un mallado no uniforme de 86×46 celdas. La zona de los accesos tiene unas dimensiones de 325×870 nm. La anchura de la rama vertical, que denotaremos por W_{VER} , toma valores de 66, 78, 84, 94 y 108 nm, tamaño que usaremos para referirnos a ellas como T66, T78, T84, T94 y T108, respectivamente. La rama horizontal es de 170 nm de ancho y desde 566 hasta 608 nm de largo para las diferentes uniones.

III.2.2. Resultados experimentales

En la Figura III.8 presentamos las medidas experimentales de (a) potencial V_C en la rama central (medido con un voltímetro de alta impedancia) y (b) corriente I que fluye por la rama horizontal de las uniones en T cuando se polarizan en modo *push-pull* ($V_R = +V$ y $V_L = -V$ aplicados a la rama derecha e izquierda respectivamente). Las principales conclusiones a la vista de los resultados experimentales son las siguientes. En polarización *push-pull* el potencial V_C es mayor en módulo, es decir más negativo, a medida que la anchura de la rama vertical W_{VER} disminuye, y la corriente es prácticamente independiente de W_{VER} . En polarización *push-fix*, Figura III.8(c), el potencial V_C llega a presentar una pendiente negativa con V_{PF} para las polarizaciones más altas y las W_{VER} menores, aspecto éste que se refleja en una pendiente mayor que la unidad en el potencial V_C en *push-pull*. Éste es un resultado en principio inesperado, ya que hasta el momento creíamos que la rama vertical era simplemente un elemento pasivo de medida (sonda de potencial),⁷² de manera que el potencial V_C debería ser prácticamente independiente de la anchura W_{VER} .

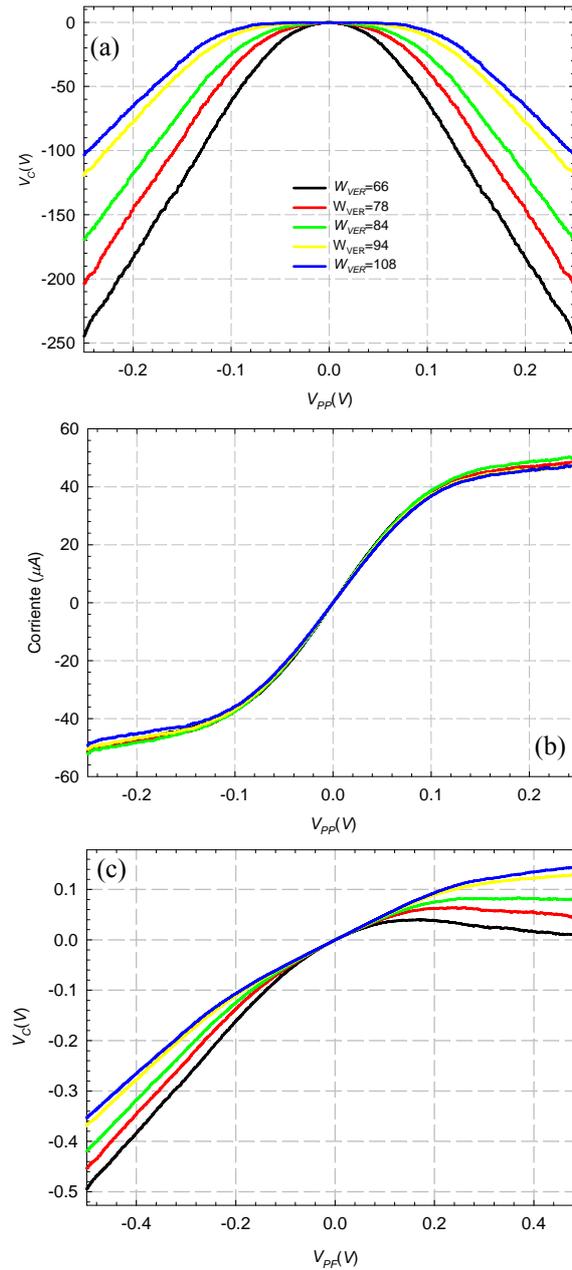


Figura III.8. (a) V_C y (b) corrientes medidas experimentalmente en función del potencial aplicado en modo *push-pull*, $V_{PP} = V_R = -V_L$, y (c) V_C medido en modo *push-fix*, $V_{PF} = V_R$ y $V_L = 0$, para las uniones en T con diferentes anchuras W_{VER} de la rama vertical mostradas en la Figura III.7.

III.2.3. Simulaciones con el modelo de carga superficial constante

Como ya se explicó en la sección II.3.1, la primera posibilidad para incluir los efectos superficiales es usar un modelo de carga superficial constante. Hemos tratado de reproducir las medidas experimentales que acabamos de presentar usando el modelo de carga constante con diferentes valores de σ . Los resultados obtenidos con

un valor de $\sigma/q=0.4\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ aparecen en la Figura III.9, siendo totalmente inconsistentes con los experimentales.

Por ejemplo, en la Figura III.9(a) se observa cómo la estructura que mayor valor de V_C presenta es la de anchura de 84 nm (línea verde), justo cuando la anchura es aproximadamente igual al vaciamiento lateral producido por la carga superficial impuesta $\sigma/q=0.4\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ($L_d=40 \text{ nm}$, de forma que la anchura efectiva teórica del canal $W_{eff}=W-2W_d\approx 0$). Para anchuras de la rama vertical mayores o menores que estos 84 nm, equivalente a poner menos/más carga superficial, como en la Figura III.4(a), ya sea por el débil efecto de la carga superficial o por tener un vaciamiento casi total, se obtienen menores valores de V_C . Este comportamiento es completamente diferente al observado experimentalmente. La corriente, Figura III.9(b), sí es independiente de la anchura de la rama vertical, pero sus valores son mayores que los experimentales. Por otra parte, si usáramos un valor diferente de σ se podría obtener un buen acuerdo para una o dos estructuras, pero nunca para todas ellas.

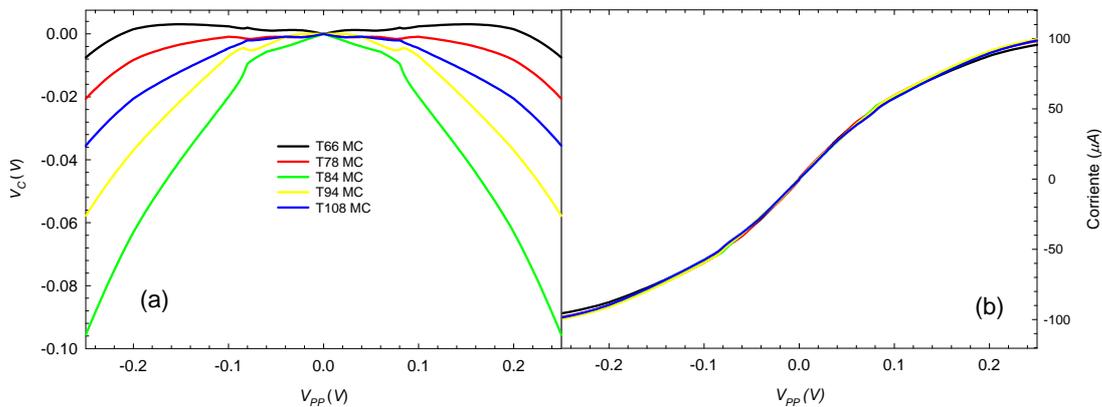


Figura III.9. (a) V_C y (b) corriente en función del potencial aplicado $V_{PP}=V_R=-V_L$ para las uniones en T presentadas en la Figura III.7. Modelo de carga superficial constante ($\sigma/q=0.4\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$).

En la sección III.1.4 hemos visto que la forma de V_C viene determinada por los desplazamientos del mínimo del perfil de potencial y de la concentración de electrones en el centro de la unión típicos del transporte balístico. La anchura de la rama vertical de las estructuras de las que disponemos de resultados experimentales es bastante similar en todas ellas. Por ello, se ha decidido simular nuevas estructuras con anchuras más pequeñas (tanto de la rama vertical como de la horizontal), de manera que se observen con mayor claridad los fenómenos que hacen que los resultados Monte Carlo no coincidan con los experimentales. En la Figura III.10 se

muestran los valores del potencial de fondo de la rama vertical y las corrientes obtenidas mediante la simulación Monte Carlo con carga constante ($\sigma/q=0.4\times 10^{12}$ cm^{-2}) de estas nuevas estructuras con diferentes anchuras de la rama vertical $W_{VER}=20, 50, 80$ y 100 nm y anchura de la rama horizontal fija (100 nm). El comportamiento cualitativo de V_C es similar al observado en los resultados anteriores, pero la corriente disminuye a medida que W_{VER} se hace más pequeña.

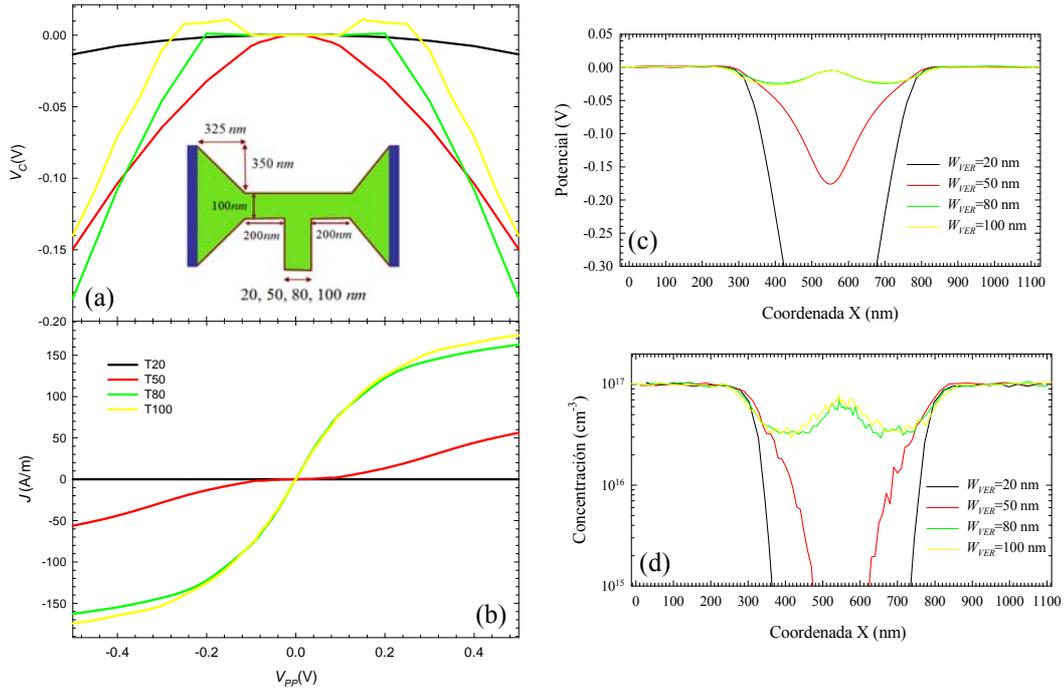


Figura III.10. (a) Curvas V_C y (b) densidades de corriente en función del potencial aplicado $V_{PP}=V_R=-V_L$ obtenidas con el simulador Monte Carlo para uniones en T con la geometría mostrada en el *inset*. Modelo de carga superficial constante ($\sigma/q=0.4\times 10^{12}$ cm^{-2}). (c) Perfil del potencial eléctrico y (d) concentración de electrones en equilibrio a lo largo de la parte central de la rama horizontal.

Para explicar este resultado, analicemos detenidamente las diferentes magnitudes internas obtenidas mediante la simulación Monte Carlo. En la Figura III.10(c) se observa cómo para las anchuras de la rama vertical menores que el doble de la longitud de vaciamiento ($W < 80$ nm = 2×40 nm) aparece un mínimo en el perfil del potencial eléctrico en el centro de la rama horizontal, que es más acusado a medida que disminuimos esta anchura. En consecuencia, tenemos también una disminución de la concentración de portadores en esa zona, Figura III.10(d). Este efecto es originado por los elevados valores de carga superficial fija impuestos en las fronteras de la rama vertical. La carga fija negativa situada en dichas superficies es

tan elevada que su influencia (el campo eléctrico generado) llega hasta la rama horizontal. Esto ocurre así porque las cargas positivas asociadas al dopaje no compensan la carga superficial dando origen a un exceso de carga negativa en la rama vertical. El efecto de las cargas superficiales situadas en las fronteras de la rama vertical hace que se produzca un vaciamiento lateral en esta rama, pero como estamos tratando con dispositivos nanométricos, la excesiva proximidad de esas cargas superficiales negativas influye también en otras zonas del dispositivo, como es la zona central de la rama horizontal de la unión, llegando incluso a vaciar toda la rama central en el caso de $W_{VER}=20$ nm y haciendo que $V_C=0$, Figura III.10(a). En el caso de que el mínimo de potencial que aparece en el centro de la rama horizontal no sea tan acusado como para no dejar pasar ningún portador a través de la misma, aparecerán valores negativos en V_C .

Por esta razón, aunque se consiga reproducir el comportamiento parabólico del valor del potencial V_C para uniones en T con ramas anchas, el modelo con carga superficial constante no funciona correctamente, ya que cuando la rama vertical es suficientemente estrecha la corriente a través de la estructura es nula debido al vaciamiento (barrera de potencial) generado en el centro de la rama horizontal, y sólo para potenciales muy altos es posible la conducción eléctrica, Figura III.10(b).

Por otra parte, valores tan altos de la carga superficial (en las uniones con $W_{VER}<2W_d$) no tienen un significado físico aceptable ya que no aseguran la cuasineutralidad de carga al mantener la ocupación de los estados superficiales, puesto que si la rama vertical está vaciada los estados de superficie no serán susceptibles de ocuparse. Así, podemos concluir que el origen principal de los problemas observados en la Figura III.9 es un exceso de carga superficial con respecto a la que se precisaría para vaciar por completo la rama vertical.

III.3. RESULTADOS CON EL MODELO AUTO-CONSISTENTE DE CARGA SUPERFICIAL

En esta sección mostraremos que usando el modelo auto-consistente de carga superficial^{87,89} descrito en el Capítulo II (sección II.3.2) sí que es posible reproducir los resultados experimentales, y además explicaremos la influencia de la rama central sobre los valores de V_C , relacionándolos con el comportamiento de la carga superficial.

III.3.1. Influencia de los parámetros del modelo

En esta sección se van a detallar cuáles han sido los pasos para elegir los valores finales de los parámetros del modelo auto-consistente presentado en la sección I.3.3. Recordemos que tenemos dos parámetros, FAC_{SUP} y FAC_{INF} , que nos delimitan el valor de la concentración próxima a la interfase N_{front} entre un límite superior o de carga $N_{car}=N_{db}/FAC_{SUP}$ por encima del cual se aumenta la carga superficial y otro límite inferior o de descarga $N_{des}=N_{db}/FAC_{INF}$ por debajo del que se disminuye la carga superficial. La concentración de portadores libres N_{front} se calcula como el valor medio sobre un número de celdas (una, seis o quince, Figura II.12) y durante un número de iteraciones que denominamos $NIQSE$. La elección de este valor es un compromiso para optimizar la precisión en el cálculo de la evolución de la concentración electrónica sin incrementar en exceso el tiempo total de la simulación. El valor que mejores resultados proporciona son 500 iteraciones. En lo que respecta a la cantidad en la que incrementamos la carga superficial, se ha elegido un valor de $\Delta\sigma=10^{-10}$ cm⁻² y se ha comprobado que los resultados finales no dependen de éste. También tenemos unos contadores ($Reps$ y $Repb$) introducidos para favorecer/desfavorecer el aumento/disminución de la carga superficial. El proceso de ajuste de los valores de estos contadores, el número de celdas para evaluar N_{front} y los parámetros FAC_{SUP} y FAC_{INF} es laborioso, de forma que aquí recogemos algunos de los resultados para mostrar su influencia en los valores tanto de corriente y potencial V_C , como de carga superficial. En la Tabla III.1 se indican los valores utilizados en cuatro casos denotados por las letras A, B, C y D, donde se han usado seis celdas para la estimación de N_{front} .

Veamos primero la influencia de los parámetros del modelo en los valores del potencial de fondo de la rama vertical. En la Figura III.11 se presentan las curvas V_C-V para la unión T108. En primer lugar mostramos el efecto de la modificación de las cotas FAC_{SUP} y FAC_{INF} , Figura III.11(a). Observamos que cuanto

Modelo	FAC_{SUP} / FAC_{INF}	$Reps/Repb$
A	100/1000	1/5
B	50/500	1/5
C	100/1000	1/1
D	250/2500	1/5

Tabla III.1. Parámetros del modelo.

menores son los límites fijados sobre la densidad de fondo (valores más altos de FAC_{SUP} y FAC_{INF} , con lo que vaciamos más el canal), mayor curvatura presentan las curvas V_C-V , siendo el modelo D el que mayor valor absoluto del potencial de fondo V_C proporciona. La Figura III.11(b) muestra el resultado de la variación de los valores de $Reps$ y $Repb$. En el modelo A imponemos que la condición de bajada ($Repb$) se tenga que repetir más veces (cinco en este caso) que la condición de subida ($Reps$); estamos favoreciendo el incremento de la carga superficial, por lo que los valores de V_C son más negativos (más curvatura en A que en C). El efecto es similar al de aumentar las cotas FAC_{SUP} y FAC_{INF} , ya que en ambos casos se vacía más el canal.

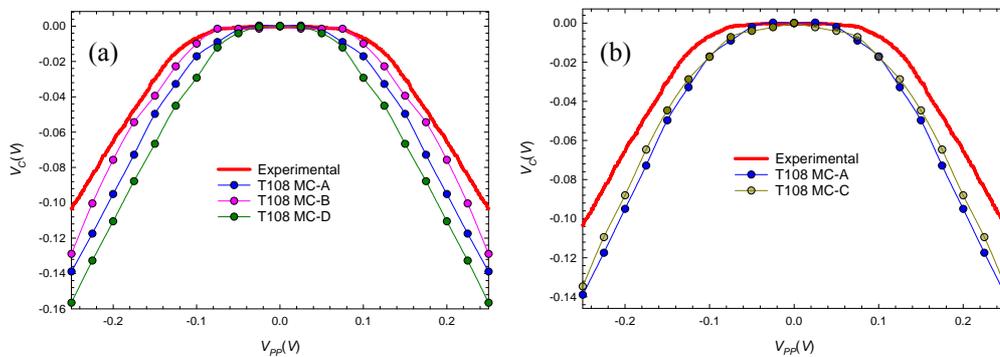


Figura III.11. Influencia de los parámetros del modelo auto-consistente de carga superficial en las curvas V_C-V . (a) Variando los límites sobre el dopaje de fondo y (b) cambiando los contadores de subida/bajada de carga superficial. Las líneas rojas corresponden a las medidas experimentales.

En la Figura III.12 se ilustran cuáles son las consecuencias de la variación de estos mismos parámetros sobre la corriente y sobre la carga superficial de la discontinuidad semiconductor-dieléctrico en el lado derecho de la rama vertical en equilibrio. En lo relativo a la carga superficial vemos cómo a medida que incrementamos las cotas FAC_{SUP} y FAC_{INF} , los valores de ésta son mayores y se genera además un mayor vaciamiento. Consecuentemente en media los valores más

altos, indicados por las líneas rectas verticales, son los correspondientes al modelo D, luego el A y finalmente el B, como se aprecia en la Figura III.12(a). Ocurre lo mismo con la influencia de los contadores de subida/bajada. La carga superficial es mayor en el modelo A que en el C, ya que, como hemos señalado anteriormente, al aumentar el número de veces que se tiene que repetir la condición para la disminución de la carga superficial se favorece el aumento de ésta, Figura III.12(b). En lo que respecta a los valores de las corrientes a través de la estructura el razonamiento es similar. En la Figura III.12(c) se observa cómo la corriente es menor para los modelos en los que la carga superficial es mayor.

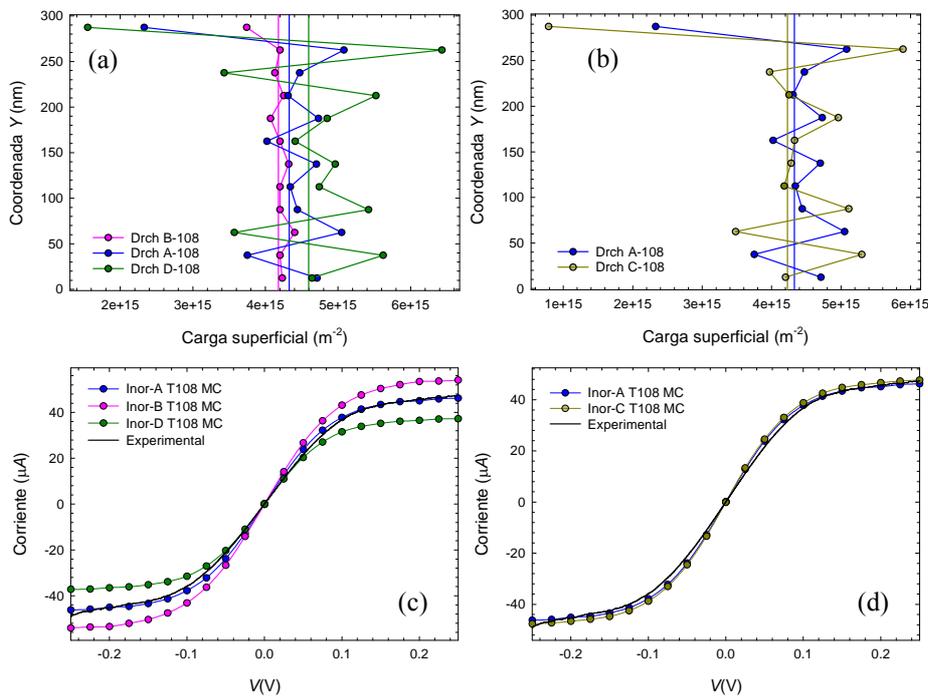


Figura III.12. Influencia de los parámetros del modelo en los valores de (a) y (b) cargas superficiales en equilibrio en la discontinuidad del lado derecho de la rama vertical, y (c) y (d) en las corrientes. (a) y (c) corresponden a variaciones en los límites sobre el dopaje de fondo, y (b) y (d) a los contadores de subida/bajada de carga superficial. Las líneas rectas verticales indican el valor medio de la carga superficial.

Por último, la influencia del número de celdas utilizado para calcular N_{front} se presenta en la Figura III.13. En ella se observa cómo los modelos de una y seis celdas presentan resultados similares, mientras que el modelo de quince se aparta un poco de ellos. Este resultado era previsible, ya que a medida que realizamos la comparación usando la concentración de un número mayor de celdas, provocamos el vaciamiento de una zona más amplia de la rama, haciendo que la carga superficial sea más elevada, Figura III.13(c). Esto también se percibe en los resultados de las

corrientes, Figura III.13(b). El modelo a una celda es el que presenta mayores valores de corriente, mientras que para el de quince se obtienen los más bajos, como corresponde a los valores de cargas superficiales y vaciamiento de cada uno de los modelos, Figura III.13(c).

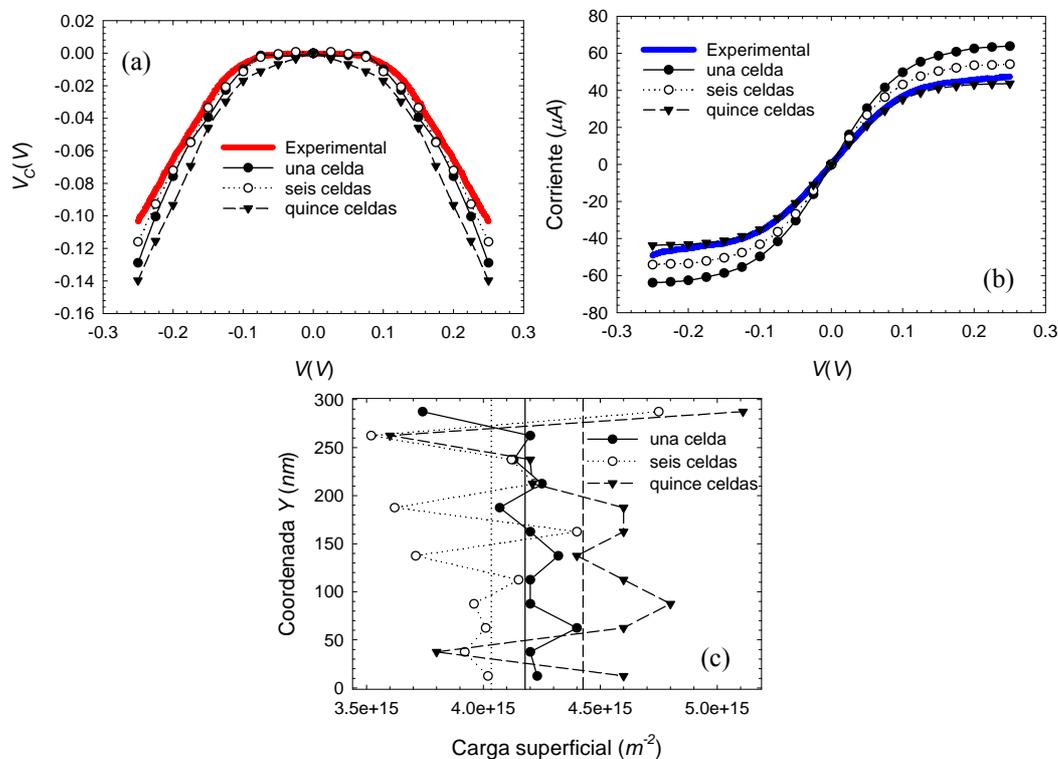


Figura III.13. Influencia de los modelos de comparación de concentración con una, seis y quince celdas (a) en las curvas V_C - V , (b) en las corrientes y (c) en la carga superficial en equilibrio de la discontinuidad derecha de la rama vertical de la unión T108.

III.3.2. Aspectos técnicos del modelo

En una simulación con carga de superficie constante, el hecho de alcanzar el régimen estacionario depende sólo del movimiento de los electrones en el interior del dispositivo, ya que las condiciones de contorno para la resolución de la ecuación de Poisson no cambian. Sin embargo, en una simulación auto-consistente sí que cambian, por lo que cada vez que se modifique la carga es como si planteásemos un problema “nuevo”. Esto hace más complicada la consecución del régimen estacionario, puesto que este cambio obligará a un reajuste de concentración en el canal. Estamos pues resolviendo un problema con condiciones de contorno sobre el gradiente normal del potencial (carga superficial) que se van autoadaptando con la distribución de portadores. Esto hace que no sea un simple problema de electrostática, no ya por tener una evolución temporal de la carga volúmica, sino por

la dinámica de las condiciones de contorno. Por esta razón hemos comprobado que la evolución de la carga superficial llega a alcanzar un valor constante que asegura la estabilidad de la solución en el régimen estacionario.

Por otra parte, en los resultados que hemos mostrado hasta ahora, los valores de carga superficial presentan grandes oscilaciones (forma de sierra, un valor por encima y otro por debajo del valor medio), como se aprecia en la Figura III.12(a) y (b) y Figura III.13(c). Este problema se ha resuelto mediante la realización de una media con las celdas contiguas. Una vez calculada la carga superficial de todas las celdas frontera (cada vez que se actualice, es decir cada N_{IQSE} iteraciones) se hace la media con las dos celdas vecinas. Como se muestra en la Figura III.14 la carga final será $\sigma^a = (\sigma^a + \sigma^b + \sigma^c) / 3$. De esta manera se suaviza el perfil de carga superficial.

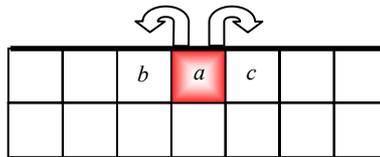


Figura III.14. Esquema de la asignación de carga mediante una media a las celdas vecinas.

Otra última dificultad técnica radica en que la presencia de esquinas y ángulos (Figura II.6) en la discretización del contorno, por ejemplo de los accesos, hace que no sea sencillo elegir las celdas que se usan para calcular la concentración N_{front} . Por ello se ha de incorporar en el código una amplia casuística, que no describiremos aquí, para atender este problema.

Tomando como referencia el modelo B, usando quince celdas en la determinación de N_{front} e incluyendo estos aspectos que acabamos de explicar, se han realizado una serie de simulaciones con el fin de mejorar el acuerdo cuantitativo con los resultados experimentales. Los valores finales adoptados para los parámetros son los siguientes $N_{IQSE}=500$, $Reps=1$, $Repb=5$, $FAC_{SUP}=50$, $FAC_{INF}=100$, $\Delta\sigma=10^{-10}$ cm⁻². El número de iteraciones simuladas ha sido de 10^6 para equilibrio y de 4×10^5 para el resto de polarizaciones. Para el cálculo de magnitudes medias (sección II.2.6) se deja pasar un cierto número de iteraciones antes de empezar a acumular valores. Así, en el caso de equilibrio se deja evolucionar la simulación durante 6×10^5 iteraciones y se calculan medias en las 4×10^5 iteraciones restantes. En el resto de polarizaciones la división es al 50%. Otras magnitudes de las

simulaciones son: paso temporal $dt=1$ fs, y densidad de fondo del material $N_{db}=10^{17}$ cm⁻³. El número de partículas simuladas es del orden de 50000 y la temperatura es de $T=300$ K.

Debemos especificar también que en todos los resultados presentados en este trabajo los valores de V_C se han obtenido restándoles el valor de equilibrio ($V_C^{equilibrio}$), ya que en una simulación Monte Carlo lo que se está calculando es el potencial asociado al fondo de las bandas de energía. Éste se ve modificado por la presencia de cargas superficiales (Figura 1.18), uniones de diferentes materiales (*heterouniones*), o uniones del mismo material con diferente dopaje (*homouniones*), y suele llamarse potencial interno o electroquímico. Como lo que se mide experimentalmente no es el potencial interno, sino el asociado a la polarización, a la hora de comparar los resultados simulados con los experimentales debemos siempre restar dicho potencial de equilibrio ($V_C \equiv V_C^{polarizado} - V_C^{equilibrio}$).

III.3.3. Resultados del modelo auto-consistente

Pasamos ahora a exponer los resultados Monte Carlo con los parámetros del modelo auto-consistente de carga superficial optimizado para la simulación de estructuras TBJ y su comparación con los experimentales. Explicaremos los resultados en términos de las magnitudes internas proporcionadas por el simulador.

III.3.3.a. Simulaciones Monte Carlo

En la Figura III.15 representamos los resultados Monte Carlo referentes a las uniones en T de las que tenemos resultados experimentales, las de la Figura III.7, y cuyas medidas de laboratorio aparecen en la Figura III.8.

En contraste con los cálculos de V_C realizados con el modelo de carga constante (Figura III.9), el modelo auto-consistente de carga superficial proporciona valores que siguen la misma dependencia con la anchura W_{VER} que las medidas experimentales y presentan un buen acuerdo cuantitativo. En la Figura III.15 se han representado las curvas (a) V_C-V y en su *inset* las corrientes I de las cinco uniones junto a (b) una representación esquemática indicando las dimensiones de la región simulada y las variables que usaremos para la explicación de su funcionamiento.

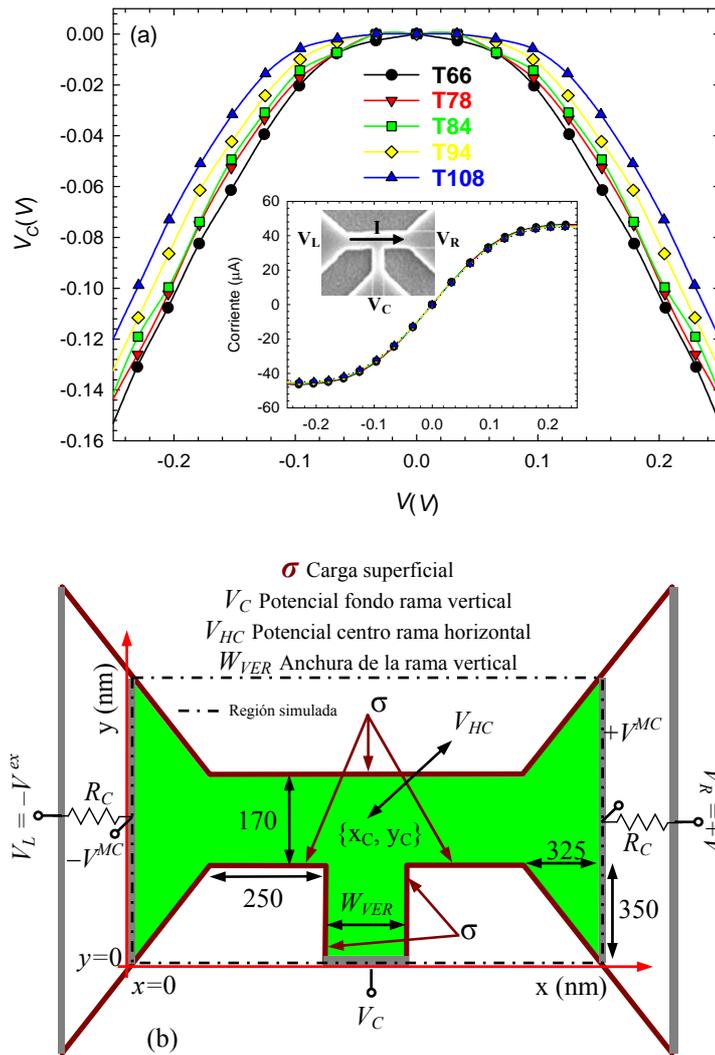


Figura III.15. (a) Potencial V_C en función del potencial aplicado V (en modo *push-pull*) calculado, para uniones TBJ con 66, 78, 84, 94 y 108 nm de anchura de la rama vertical, mediante simulaciones Monte Carlo donde se ha usado un modelo de carga auto-consistente. *Inset*: Corriente a través de la rama horizontal. (b) Representación esquemática de las uniones en T. Dimensiones de accesos, anchura y longitud de las ramas en nm.

III.3.3.b. Comparación con medidas experimentales

Si comparamos los resultados experimentales con las simulaciones de cada una de las TBJs podemos observar (Figura III.16) que el acuerdo de V_C en el caso de las uniones T108 y T94 es muy bueno (la T84 presenta una diferencia máxima de un 8%), y que en lo que respecta a las corrientes es excelente para todas ellas. Sin embargo para la T más estrecha el acuerdo no es del todo satisfactorio. Esto lo atribuimos a que al estar la rama vertical tan vaciada, nuestro modelo no aprecia con suficiente exactitud la variación en la concentración de electrones.

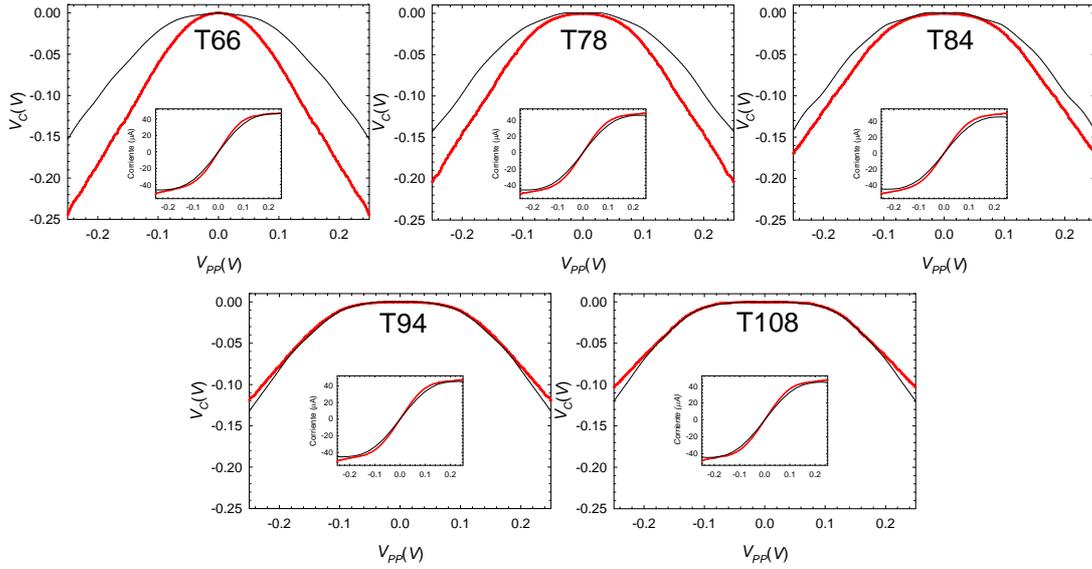


Figura III.16. Comparación de los resultados de las simulaciones (negro) con las medidas experimentales (rojo) para los valores de V_C e I obtenidos en las cinco uniones: T66, T78, T84, T94 y T108.

Para hacer esta comparación hemos tenido en cuenta una resistencia R_C asociada a la parte de los accesos que no incluimos en el dominio de la simulación. Por ejemplo, una polarización Monte Carlo V^{MC} , Figura III.15(b), de 0.25 V significa un valor $V^{ex}=0.25+650 \Omega \times 45 \times 10^{-6} \text{ A}=0.28 \text{ V}$ (un incremento de 0.03 V).

A partir de ahora usaremos los resultados microscópicos proporcionados por el simulador para entender el porqué de estos valores de V_C .

III.3.3.c. Influencia de la rama vertical

En primer lugar, veamos que el modelo auto-consistente permite la variación de la carga superficial con la posición de acuerdo con la concentración de carga libre próxima. La Figura III.17 muestra los perfiles de la carga superficial a lo largo de la frontera de la rama vertical en condiciones de equilibrio ($V=0$) para las cinco uniones. La posibilidad de auto-adaptación del modelo hace que la carga superficial alcance un valor que corresponde aproximadamente al que produce el vaciamiento total de la rama ($\sigma/q=0.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) en la unión más estrecha T66. Por el contrario, en la unión más ancha, T108, la carga superficial llega a un valor próximo al obtenido en las medidas experimentales ($\sigma/q=0.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$),⁹⁸ dando consistencia a los resultados de nuestro modelo. Además, la carga superficial toma valores prácticamente constantes cerca del fondo de la rama, lo que indica que éstos no cambiarían si la rama vertical fuese más larga, o que es suficiente con simular una

longitud de unos 350 nm para reproducir correctamente los resultados. Así, podemos concluir que nuestro nuevo modelo permite la adaptación de la carga superficial a la geometría de la estructura.

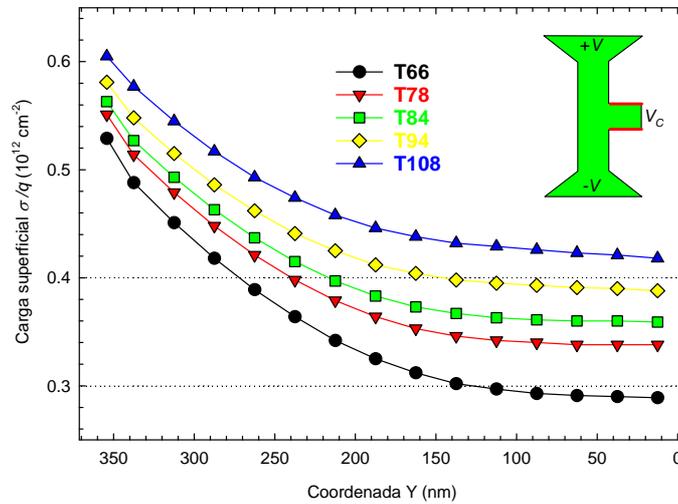


Figura III.17. Carga superficial en los laterales de la rama vertical en equilibrio ($V=0$).

A partir de ahora nos vamos a centrar en el estudio Monte Carlo de la unión más ancha T108 y de la más estrecha T66. Analizaremos no sólo las cargas superficiales sino también su influencia sobre la concentración de portadores y los perfiles de potencial eléctrico tanto en la dirección horizontal como la vertical, tratando de explicar el incremento de los valores negativos de V_C al reducir la anchura de la rama central.

En el estudio de las TBJs empezaremos analizando la diferencia entre V_{HC} y V_C . En la Figura III.18 hemos representado los valores obtenidos con las simulaciones Monte Carlo para V_{HC} de T66 y T108, junto a los calculados para un canal sin rama vertical. Se observa claramente que V_{HC} es prácticamente independiente de la anchura de la rama vertical e incluso de su presencia o ausencia. Teniendo presente que el transporte se realiza en la dirección horizontal, y que la anchura y longitud de la rama horizontal es prácticamente la misma en los tres casos, era de esperar que los valores de V_{HC} coincidieran para las tres estructuras, ya que la perturbación producida por la rama vertical en la unión con la horizontal es pequeña.

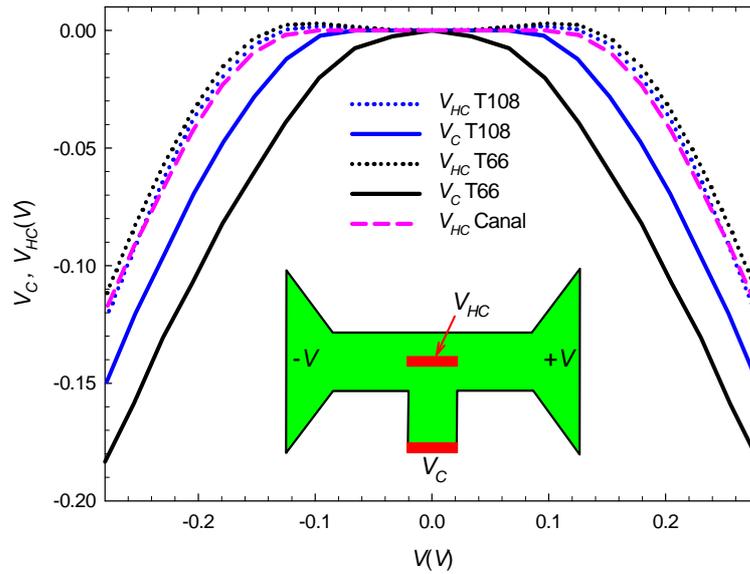


Figura III.18. V_{HC} y V_C en función del potencial aplicado para las TBJs con $W_{VER}=66$ y 108 nm. También aparece representado el valor V_{HC} para un canal sin rama vertical.

Como consecuencia de estudios previos (modelo de carga superficial constante) y de la propia intuición, podría pensarse que la presencia de la rama vertical debería tener la misión únicamente de “medir” las variaciones del potencial en el centro de la rama horizontal V_{HC} , funcionando como una sonda de potencial. Si esto fuera cierto, y como V_{HC} es independiente de W_{VER} (Figura III.18), V_C no debería depender de la anchura de la rama vertical, hecho que experimentalmente hemos visto que no ocurre. Como evidentemente no se mide el potencial V_{HC} ya que es un punto inaccesible, sino que lo que se mide es el potencial del fondo de la rama vertical, se tendrá que tener en cuenta la diferencia de potencial ΔV_V dada por la

circulación del campo eléctrico ($\Delta V_V = - \int_{y=0}^{y=y_C} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l}$) a lo largo de esta rama, que no

será la misma para todos los potenciales aplicados. Las perturbaciones, ya sean por fenómenos de carga superficial o de penetración de portadores, hacen que V_C ya no sea fiel reflejo de las variaciones de V_{HC} . Dicho ΔV_V proporciona la diferencia de potencial con respecto al centro de la unión V_{HC} , que se verá modificada en el caso de tener una carga superficial lateral en la rama vertical que varíe tanto con el potencial aplicado como con la posición, que es lo que hemos visto que ocurre con el modelo auto-consistente de carga superficial. Esto explica los valores diferentes de V_C para T66 y T108, ya que los valores de V_C se deben a dos efectos combinados: uno horizontal (dado por la variación de V_{HC} con la polarización) y otro vertical

(dado por la variación de ΔV_V con el potencial aplicado), que estudiaremos por separado.

III.3.3.d. Perfiles horizontales de potencial, concentración y cargas superficiales

La concentración y el potencial eléctrico a lo largo de la rama horizontal son muy similares en las dos uniones en T, como se observa en la Figura III.19 en la que se puede apreciar la perturbación que la rama vertical causa en los perfiles horizontales de estas magnitudes. La aparición de un abultamiento en la concentración es consecuencia de la ausencia de cargas superficiales en la interfase inferior debida a la presencia de la rama vertical, lo cual reduce el nivel de vaciamiento en el centro de la unión (mayor concentración).

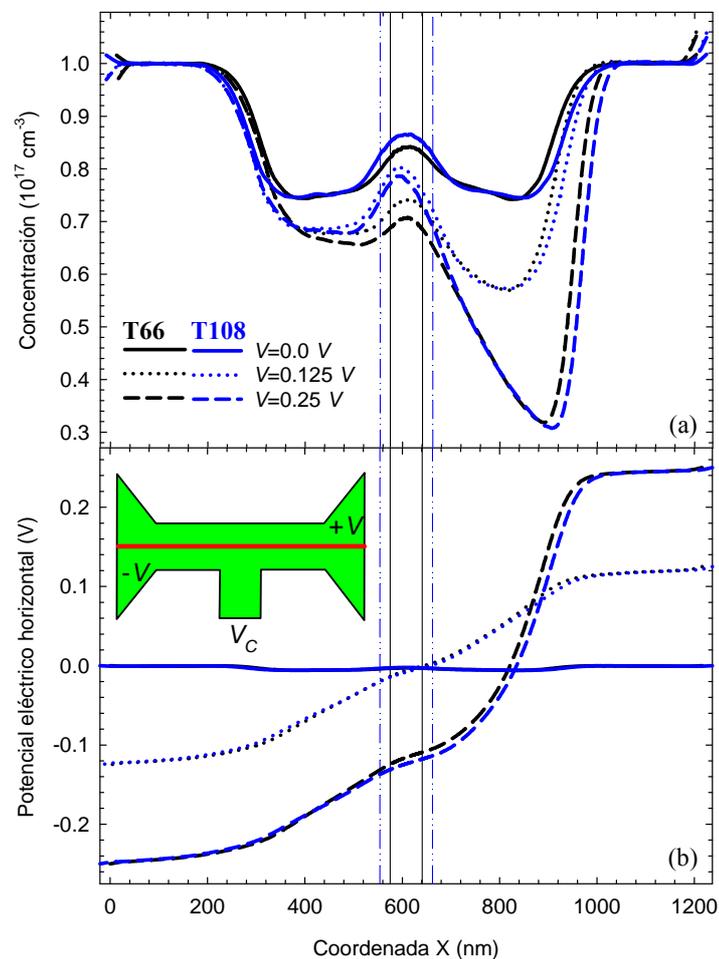


Figura III.19. Perfiles de (a) concentración de electrones y (b) potencial a lo largo del centro de la rama horizontal en las dos uniones T66 (negro) y T108 (azul) para $V=V_R=-V_L=0.0, 0.125$ y 0.25 V.

En la Figura III.19 también se observa que este efecto es más pronunciado en la unión ancha (T108) que en la estrecha (T66), y especialmente en la concentración; de hecho el potencial eléctrico casi no varía por la presencia de la rama vertical (o

por su anchura). Como consecuencia de esto, los valores de V_{HC} apenas dependen de la anchura de la rama central, o incluso de la presencia o ausencia de la misma, como hemos visto en la Figura III.18. Además conviene recalcar que aunque la perturbación que supone la rama vertical en el perfil horizontal de la concentración pueda parecer significativa, lo realmente importante no es el valor concreto para una determinada polarización, sino su diferencia respecto a la situación de equilibrio, que es lo que se mide para obtener V_C .

En la Figura III.20 se comparan los valores obtenidos para V_{HC} en un canal simple (sin rama vertical) con el modelo de carga constante y el modelo auto-consistente. El modelo auto-consistente proporciona un incremento considerable de los valores negativos de V_{HC} , consecuencia de una mayor asimetría de la carga en la dirección horizontal, en comparación con los obtenidos con el modelo de carga constante; véanse por ejemplo los perfiles de la Figura III.5(a). Esta asimetría (que aparece también en la energía y la velocidad en la dirección x) podemos observarla en la Figura III.19, en la que se detecta un fuerte vaciamiento en la zona derecha de la rama horizontal para valores altos del potencial aplicado V . Dicha región se vuelve más resistiva, de forma que la mayor parte del potencial aplicado cae en ella y se tienen valores más negativos de V_{HC} . El transporte balístico en la dirección horizontal provoca cualitativamente el mismo efecto,^{71,72,117} pero más débil que el que acabamos de ver aquí, de forma que los valores negativos de V_{HC} obtenidos con el modelo de carga constante son menores, Figura III.20.

Este fenómeno que acabamos de observar, en el que se tiene un fuerte vaciamiento cerca del ánodo para valores altos de V , es causado por la elevada carga superficial presente en esa zona del dispositivo. Este hecho se ilustra en la Figura III.21, donde se han representado los valores de σ en la parte superior e inferior de las discontinuidades de la rama horizontal. El origen del incremento de carga superficial cerca del ánodo se debe a que cuando los electrones son acelerados

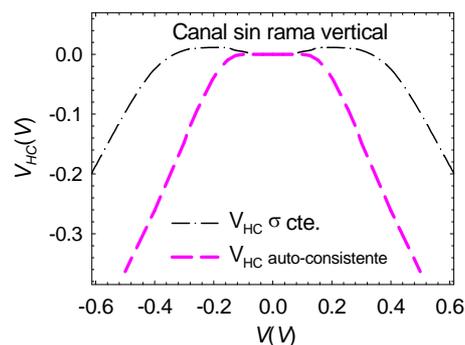


Figura III.20. Valores de V_{HC} calculados en el canal sin rama vertical mediante el modelo correspondiente a carga constante ($\sigma/q=0.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) y con el modelo auto-consistente de carga superficial.

balísticamente, su energía se incrementa de manera significativa al acercarse al contacto derecho. Los mecanismos de scattering, incluso siendo pocos, provocan una redistribución energética, haciendo que la componente transversal de la energía aumente. De este modo, los electrones son capaces de alcanzar las fronteras de la TBJ a pesar del efecto repulsivo de la carga superficial e incrementan su valor de acuerdo con el modelo propuesto. La situación estacionaria de concentración y potencial eléctrico vendrá determinada por la competencia entre tal efecto repulsivo y la componente transversal de la energía.

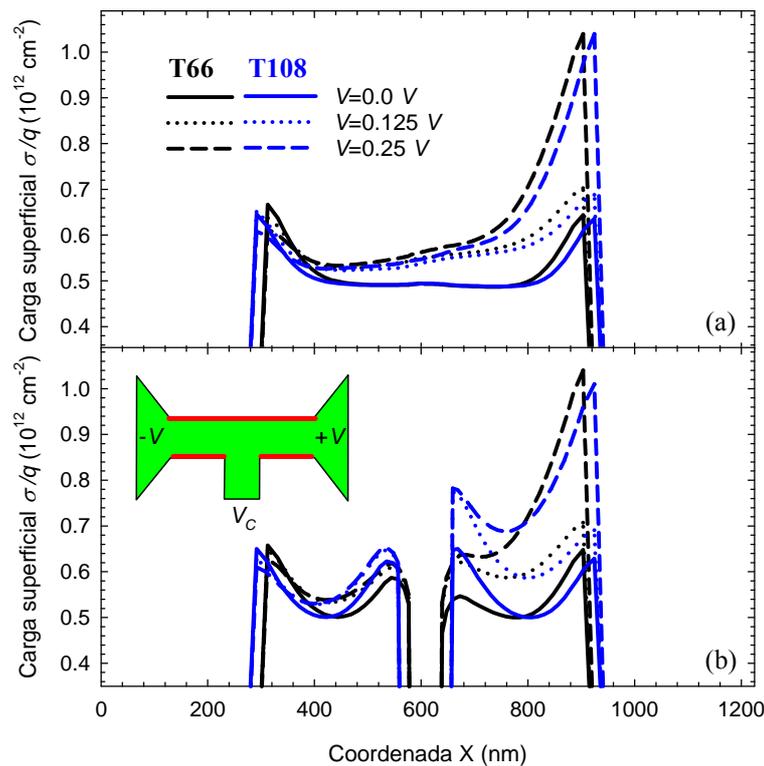


Figura III.21. Carga superficial en la discontinuidad semiconductor–dieléctrico (a) superior y (b) inferior de la rama horizontal en las dos uniones T66 (negro) y T108 (azul) para $V=V_R=-V_L=0.0$, 0.125 y 0.25 V.

Por último, además del fenómeno que acabamos de describir, hemos observado (Figura III.22) que la curva $V_{HC}-V$ de un canal simple (estructura sin rama vertical) tiene pendiente mayor que la unidad en configuración *push-pull* (o de forma equivalente, una pendiente negativa en modo *push-fix*) para los potenciales más altos. Cabe destacar que este efecto también aparece en las medidas experimentales, presentadas en la Figura III.8. Los detalles no los mostramos aquí, pero hemos comprobado mediante simulaciones en modo *push-fix*, que este comportamiento se debe a un aumento de la concentración (derivado evidentemente de una menor carga

superficial) en las proximidades de la zona central (y hacia la parte izquierda), que hace que el potencial eléctrico para las polarizaciones más altas disminuya respecto a su valor para potenciales aplicados más bajos, *inset* de la Figura III.22.

En vista de los resultados mostrados hasta ahora, podemos concluir que la dependencia de V_C con la anchura de la rama vertical W_{VER} está asociada al cambio del perfil vertical del potencial eléctrico (ΔV_V) entre las diferentes TBJ, ya que V_{HC} , que da cuenta de los efectos horizontales, prácticamente no depende de W_{VER} .

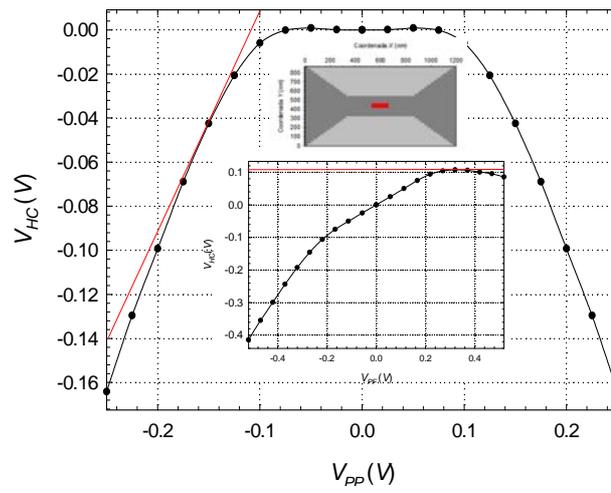


Figura III.22. Potencial V_{HC} , calculado como el promedio de los veinte nodos centrales (dibujados en rojo), en función del potencial aplicado en *push-pull* (la línea roja es una recta de pendiente unidad) y en *push-fix* (*inset*) (la línea roja es una recta de pendiente cero).

III.3.3.e. Perfiles verticales de potencial y concentración

Para estudiar el efecto de la rama vertical, en la Figura III.23 se han representado tanto la concentración como el potencial eléctrico a lo largo del centro de la rama vertical. En primer lugar, en la Figura III.23(b) podemos observar que el vaciamiento total en la parte superior de la rama horizontal da lugar a la forma parabólica del potencial, que se ve distorsionada en las proximidades de la unión de las dos ramas por el hecho de que la concentración de electrones no es nula en esa zona.

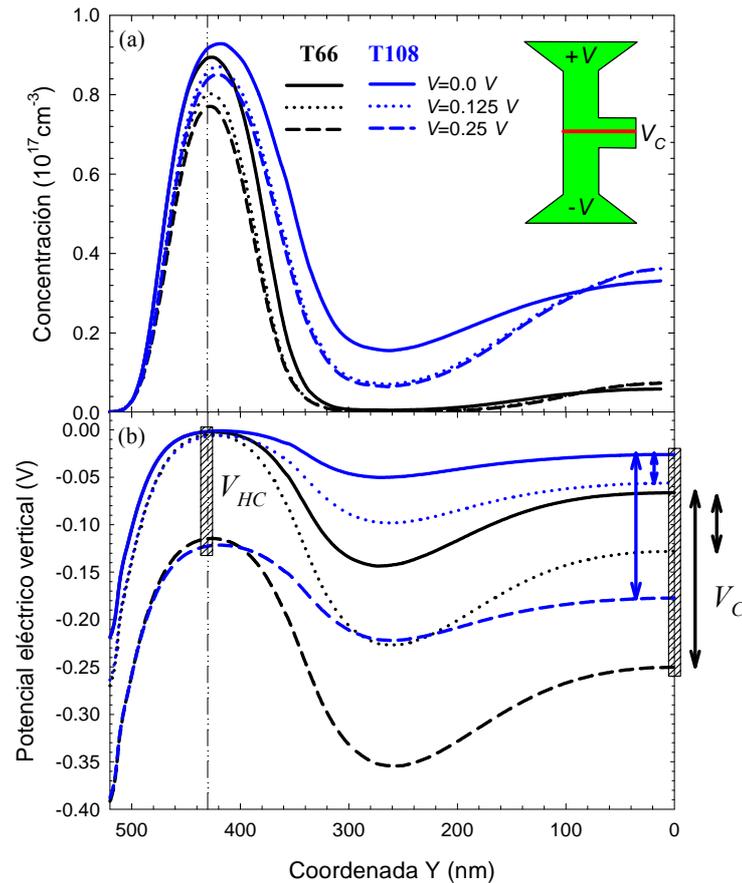


Figura III.23. Perfiles de (a) concentración de electrones y (b) potencial a lo largo del centro de la rama vertical en las dos uniones T66 (negro) y T108 (azul) para $V=V_R=-V_L=0.0, 0.125$ y 0.25 V .

En lo que respecta a equilibrio, la diferencia en la concentración en el fondo de la rama vertical ($y=0 \text{ nm}$), Figura III.23(a), es la causante de que la estructura con menor anchura de la rama vertical presente menores valores del potencial V_C que la ancha. Se debe a la diferencia entre los niveles de Fermi en ambas uniones. En la unión estrecha ($W_{VER}=66 \text{ nm}$) la densidad de electrones en el fondo de la rama vertical es de $0.6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, lo que significa un nivel de Fermi con respecto a la banda de conducción de $E_F - E_C = -0.09 \text{ eV}$. Por el contrario, para T108 la concentración es de $3.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, que corresponde a $E_F - E_C = -0.04 \text{ eV}$. Esta diferencia entre los niveles de Fermi, de valor $\Delta E_F = 0.05 \text{ eV}$ es justo la que aparece en los perfiles de potencial en equilibrio para $y=0 \text{ nm}$, Figura III.23(b). En la Figura III.24 hemos representado el mapa bidimensional del potencial electroquímico para las dos uniones (permite visualizar la forma del potencial en toda la estructura) y se han marcado los 0.05 V que hay de diferencia en el potencial en el fondo de la rama vertical.

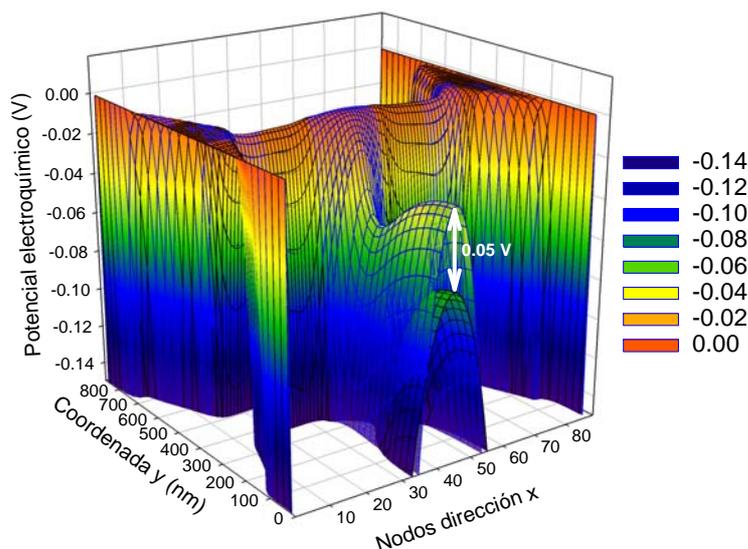


Figura III.24. Mapa 2D del potencial electroquímico ($V_L=V_R=0$) para T66 (negro) y T108 (azul).

Cuando polarizamos la estructura podemos observar que el perfil vertical del potencial apenas cambia en la parte correspondiente a la rama horizontal. Así, y como ya habíamos visto, los valores de V_{HC} son los mismos en T66 y T108 (aproximadamente cero para $V=0.125$ V y -0.12 V para $V=0.25$ V). Sin embargo, la evolución a medida que nos acercamos al fondo de la rama vertical ($y=0$ nm) sí que es sustancialmente diferente. La mayor diferencia del potencial eléctrico en el fondo de la rama vertical con respecto al de equilibrio que presenta la unión T66 respecto a la T108, ver flechas de la Figura III.23(b), proporciona una mayor curvatura (valores más negativos) de la característica V_C-V para las TBJs estrechas, como también se apreciaba en los resultados experimentales.

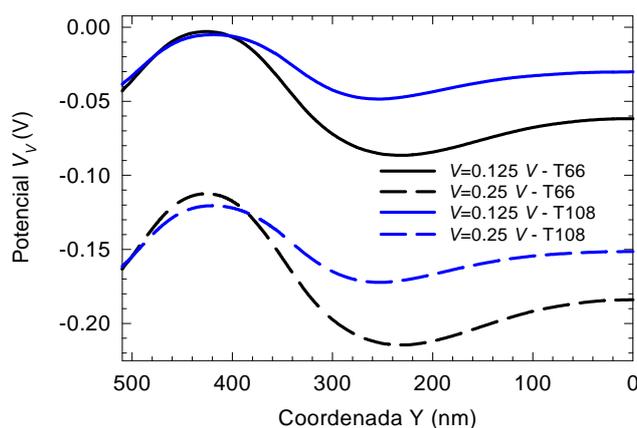


Figura III.25. Diferencia del potencial con respecto a equilibrio para $V=0.125$ y 0.25 V.

Podemos apreciar también cómo a consecuencia de usar un modelo auto-consistente la variación del potencial eléctrico respecto al equilibrio varía con la

posición a lo largo de la rama vertical (Figura III.25), en contraste con la separación constante entre curvas obtenida con el modelo de carga fija, *inset* (a) de la Figura III.5.

III.3.3.f. Explicación teórica de los resultados

Intentemos explicar de manera cualitativa, y con carácter más teórico, la forma del potencial usando alguno de los resultados que acabamos de mostrar. Cuando aumentamos W_{VER} “eliminamos” carga superficial de las zonas cercanas a la unión en las dos discontinuidades horizontales inferiores, por lo que la concentración en la zona central de la unión aumenta. Se podría decir que anchuras grandes de la rama vertical hacen que la anchura efectiva W_{eff} de la rama horizontal aumente. Esta disminución en el vaciamiento de la zona central provoca que en T108 tengamos una densidad de carga mayor y más uniforme en la dirección y , lo que produce que la caída de potencial eléctrico sea más “suave” en la dirección y . Así, el potencial eléctrico alcanza valores menos negativos para las uniones con anchuras grandes de la rama vertical, como podemos ver en la Figura III.23(b) y Figura III.24. Podemos dar una interpretación sencilla por medio del teorema de Poisson–Helmholtz,¹⁴⁷ que dice que un campo vectorial, regular en el infinito, puede expresarse en función de su divergencia y su rotacional como

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_{\infty} \frac{\nabla'(\nabla' \cdot \mathbf{E}) - \nabla' \times (\nabla' \times \mathbf{E})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv' = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\infty} \frac{\overline{\nabla' \rho}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv'. \quad (\text{III.2})$$

Vemos que mediante esta expresión el campo eléctrico está íntimamente ligado a las variaciones de la densidad de carga. Así, en la unión con rama vertical más ancha, como se tiene una variación más suave de la concentración, el campo eléctrico será menor, y se tendrá menor caída de potencial desde la parte central de la rama horizontal hacia la rama vertical (que es lo que hemos observado en las simulaciones). Nótese que el factor $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ dentro de la integral hace que tengan mayor influencia las fuentes cercanas, y que un gradiente suave de la densidad de carga no significa necesariamente un campo eléctrico pequeño, ya que el campo está determinado por la integral en todo el espacio.

III.3.3.g. Cargas superficiales

Para terminar la explicación es necesario conocer, además de la concentración de carga libre en la rama vertical, los valores de la carga superficial en sus fronteras, que representamos en la Figura III.26. Al igual que vimos en la Figura III.17, cuanto mayor es la anchura de la rama vertical mayor es la carga superficial en ésta, y por tanto el perfil del potencial eléctrico en la dirección transversal a esta rama tiene mayor pendiente, pues el campo eléctrico ligado a la condición de contorno tipo Neumann (ecuación II.23) es mayor. Esto se puede ver en los mapas 2D de la Figura III.24 y Figura III.26. Evidentemente, este efecto repercute en la rama horizontal, ya que obligará a una mayor curvatura (hacia valores más negativos) del potencial eléctrico en la dirección y para anchuras W_{VER} menores. Esto concuerda con lo que se ha explicado y visto anteriormente, pero en realidad se trata de un problema mucho más complicado de condiciones de contorno mixtas (Dirichlet y Neumann), donde los potenciales en la estructura estarán determinados por el potencial impuesto en los contactos y la derivada normal del mismo en las discontinuidades (determinada por las cargas superficiales). De esta forma los valores del potencial en el centro de la rama vertical dependerán del potencial aplicado a los contactos (que marcan el origen de potenciales), pero su derivada en la dirección transversal está afectada por el valor de la carga superficial lateral.

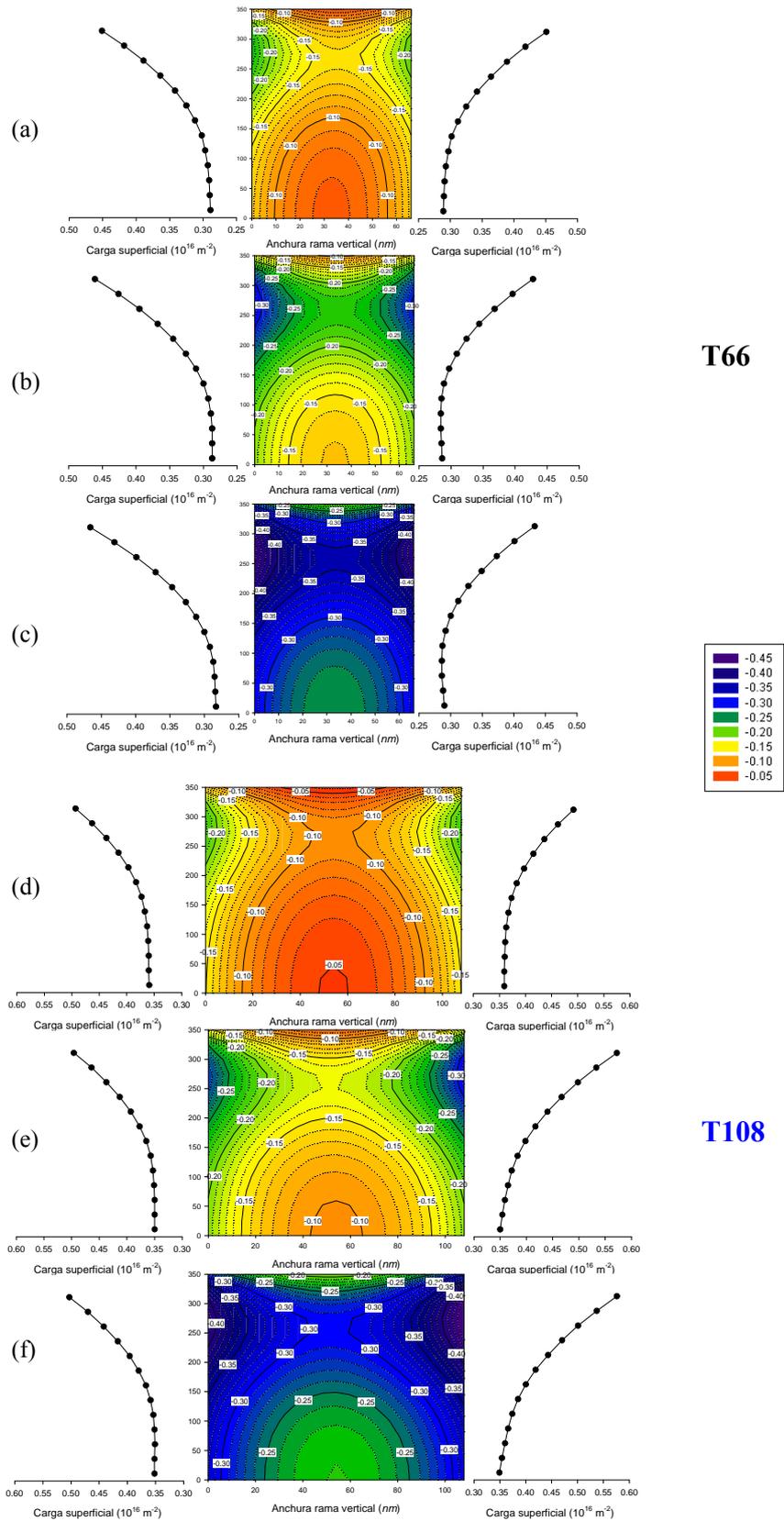


Figura III.26. Mapas 2D del potencial en la rama vertical y perfiles de carga superficial en las fronteras de dicha rama para tres polarizaciones (a) y (d) $V=0.0$, (b) y (e) 0.125 , (c) y (f) 0.25 V en las uniones de anchura $W_{VER}=66$ nm y $W_{VER}=108$ nm respectivamente.

Como era de esperar, los perfiles de σ para $V=0$ V son los mismos para las fronteras derecha e izquierda de la rama vertical. Además, para la unión T66 los perfiles de carga superficial son muy similares para todas las polarizaciones, ya que la rama vertical está prácticamente vaciada, ver Figura III.23(a). Por el contrario, para T108 el comportamiento de las cargas laterales es diferente; en el lado derecho σ crece con el potencial aplicado, mientras que en el izquierdo apenas cambia. Esto es consecuencia de la dirección del movimiento de los electrones que, acelerados por el campo eléctrico, viajan hacia la derecha. A la vista de los resultados uno podría esperar valores más negativos de V_C para la unión T108 por este exceso de carga superficial negativa, pero no es el caso, ya que la variación de σ con respecto al equilibrio y el tamaño de la rama vertical juegan un papel muy importante. De hecho, la proximidad de las cargas negativas de las fronteras verticales y la posibilidad de penetración de portadores libres en esta rama son también decisivas en el comportamiento de V_C . Por otra parte, el incremento de σ con la polarización en la parte derecha de la rama vertical de la unión T108 es más acusado en la parte superior, produciendo un mayor vaciamiento en esa región, mientras que, de forma contraria, la concentración de electrones al fondo de la rama crece con V , Figura III.23(a), provocando un aumento del valor del potencial eléctrico en ese punto. Concluimos que la mayor parabolicidad de las curvas V_C que aparece en la TBJ estrecha está relacionada con la concentración constante (casi totalmente vaciada) de la rama vertical, en contraposición con la variación de la concentración de electrones que tiene lugar en el fondo de la rama central de la unión ancha, que compensa el incremento de carga superficial en la parte superior.

Resumiendo, hemos visto que como las ramas verticales son de una anchura del orden o menor de la longitud de vaciamiento, necesitamos usar un modelo auto-consistente (la carga superficial se ajusta a cada situación) para reproducir correctamente los resultados experimentales, y que el transporte balístico en la dirección horizontal junto con los efectos de carga superficial son los causantes del comportamiento no lineal $V_C = -\alpha V^2$ y de la aparición de potenciales negativos, ya sea en el centro de la rama horizontal V_{HC} o en el fondo de la rama vertical V_C . Con este estudio concluimos que la zona central de unión de las dos ramas es la que marca la respuesta final del dispositivo y además parece evidente que los efectos de carga superficial son claves.

III.3.4. Influencia de las dimensiones de la rama horizontal

En este apartado se pretende estudiar mediante el modelo auto-consistente de carga superficial, cómo afectan las dimensiones de la rama horizontal a los valores del potencial del fondo de la rama vertical. Este análisis lo hacemos tomando como estructura de partida la unión en T con anchura de rama vertical de 108 nm. Se presentan resultados variando tanto la anchura como la longitud de la rama horizontal (Figura III.27).

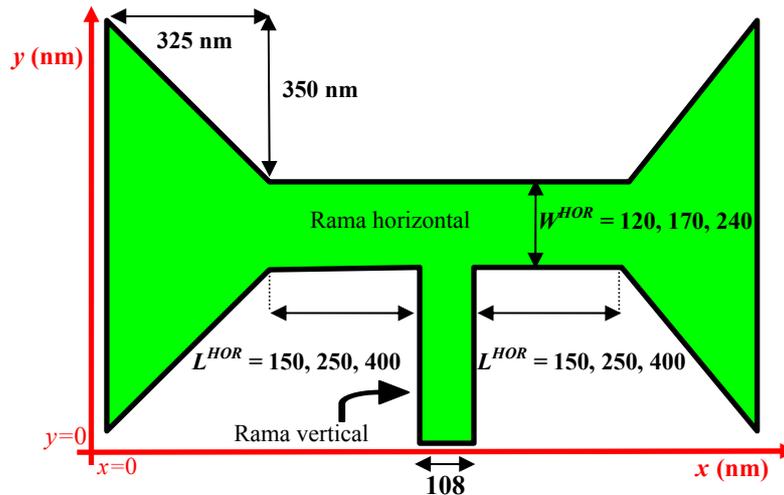


Figura III.27. Dibujo ilustrativo de las diferentes estructuras que se estudian en este apartado. Uniones con anchura de la rama horizontal $W^{HOR}=120, 170, 240$ nm y longitud de la rama horizontal $L^{HOR}=150, 250, 400$ nm para las TBJ de mayor anchura de la rama vertical $W_{VER}=108$ nm.

En la bibliografía se pueden encontrar medidas experimentales para estructuras similares,³⁶ aunque existe alguna contradicción en la explicación de sus resultados y ciertas discrepancias con nuestro formalismo. Aún así, estas medidas refrendan la potencia de nuestro modelo, ya que sin ser nuestro objetivo obtener un perfecto acuerdo, las medidas muestran las mismas tendencias (buen acuerdo cualitativo) que encontramos con nuestras simulaciones Monte Carlo.^{88,89}

En primer lugar hemos modificado la longitud de la rama horizontal $L^{HOR}=150, 250$ y 400 nm, Figura III.28(a). Los valores de V_{HC} son casi idénticos para todas las uniones. Esto es debido a que el perfil de la concentración a lo largo de la rama horizontal es análogo para las diferentes longitudes, de manera que la caída de potencial desde los contactos al centro de la unión es prácticamente la misma. Como ocurría en la sección anterior, es la presencia de la rama vertical y de las cargas superficiales asociadas lo que provoca que el valor de V_C sea diferente para cada

estructura. Al igual que en los resultados experimentales,³⁶ se observa que la forma parabólica de la salida V_C es más acusada para las uniones más cortas. Dado que los valores de V_{HC} son similares, estas diferencias están causadas por los cambios en los valores de la concentración de electrones y carga superficial en la rama vertical.

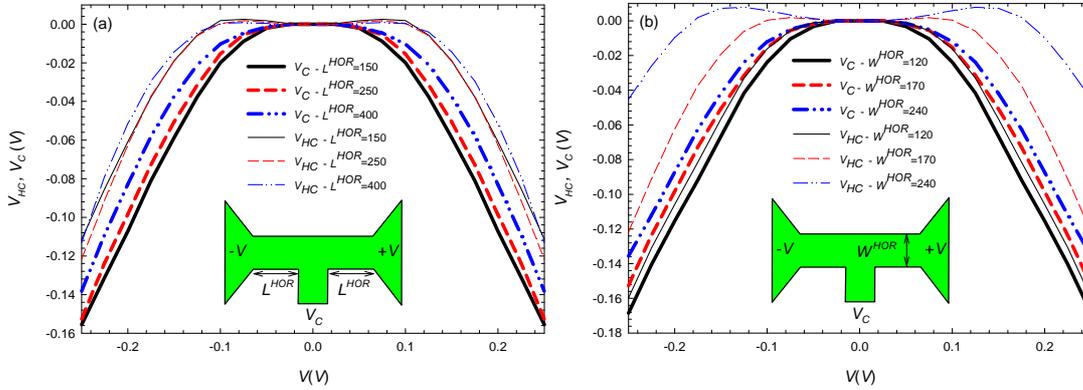


Figura III.28. V_{HC} y V_C en función del potencial aplicado para uniones en T con (a) diferente longitud de la rama horizontal $L^{HOR}=150, 250$ y 400 nm y (b) diferente anchura de la rama horizontal $W^{HOR}=120, 170$ y 240 nm.

En segundo lugar, en la Figura III.28(b) se representan los valores de V_{HC} y V_C en TBJs donde se ha variado la anchura de rama horizontal $W^{HOR}=120, 170$ y 240 nm. Podemos apreciar que los valores de V_C son mayores (más negativos) a medida que se disminuye la anchura, como se observa en resultados experimentales de la bibliografía.³⁶ De forma destacada, y en contraste con el comportamiento encontrado al modificar W_{VER} y L^{HOR} , los valores del potencial del centro de la unión V_{HC} presentan una fuerte dependencia con W^{HOR} . En estas estructuras, a pesar de tener la misma longitud, el perfil de concentración a lo largo de la rama horizontal depende de forma muy acusada del vaciamiento inducido por la carga superficial, como se puede apreciar en la Figura III.29. La concentración es más baja para la unión de menor anchura W^{HOR} debido a un vaciamiento mayor, como era de esperar. Por esta razón el perfil del potencial eléctrico cambia de forma significativa con W^{HOR} , y consecuentemente los valores de V_{HC} son diferentes para cada TBJ. La asimetría en los perfiles de concentración, originada por el efecto combinado del transporte cuasibalístico y de la carga superficial, hace que la mayor parte del potencial aplicado caiga en la región próxima al ánodo (derecha), haciendo que V_{HC} (y V_C) alcancen valores cada vez más negativos para menores W^{HOR} . La dependencia de V_{HC} con W^{HOR} resulta suavizada por las variaciones de la carga superficial de la rama vertical, de forma que no es tan acusada para los valores del potencial del fondo, V_C .

Hemos obtenido resultados similares para la unión denominada T66. La diferencia más importante es que al ser ésta tan estrecha, la proximidad de las cargas superficiales impide variaciones de concentración en ella, ya lo veíamos en la Figura III.23(a), de manera que se limitan los efectos derivados de la variación de las dimensiones de la rama horizontal. En buena medida, lo que ocurre en la rama vertical es independiente de lo que pase en la zona central de la unión.

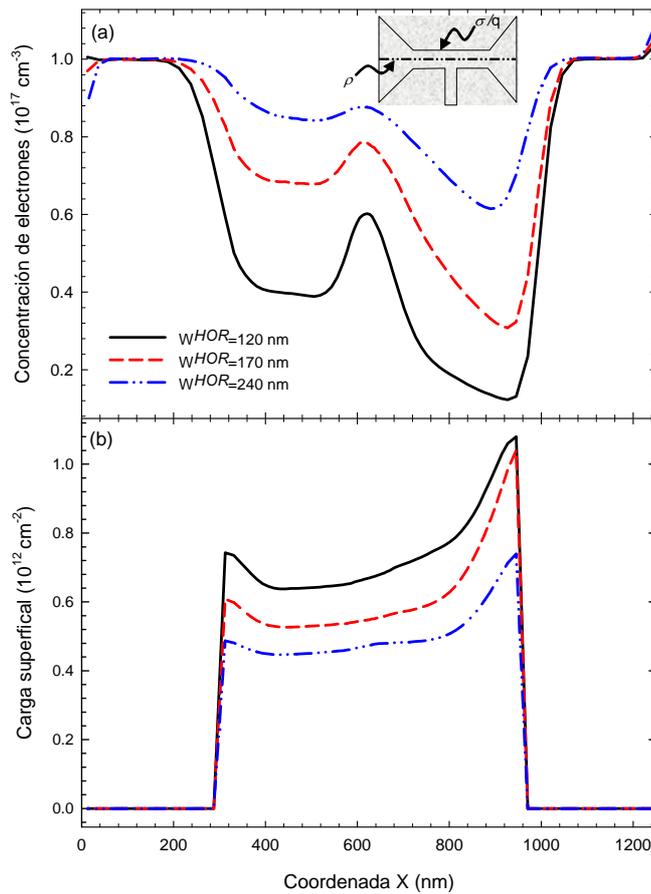


Figura III.29. (a) Concentración de portadores a lo largo del centro de la rama horizontal y (b) carga superficial en la interfase semiconductor–dieléctrico para diferentes valores de W^{HOR} y un potencial de $V=0.25 \text{ V}$.

III.4. RESPUESTA EN FRECUENCIA

Hasta el momento hemos hecho un estudio de las uniones balísticas de tres terminales en forma de T en régimen estático. Esta parte del trabajo motivó el llevar a cabo una estancia en el IEMN, centro de referencia en la fabricación y caracterización de este tipo de nanodispositivos, con la idea de efectuar de primera mano medidas de respuesta en frecuencia. Los resultados relativos al comportamiento dinámico de las uniones de tres terminales los explicamos en esta sección. En primer lugar estudiaremos uniones en las que las anchuras de todas sus ramas son de dimensiones del orden del recorrido libre medio (140 nm para este material, InGaAs).¹¹ Y en segundo lugar analizaremos la respuesta de uniones anchas, donde la rama horizontal es significativamente mayor que en las estructuras analizadas hasta el momento (la rama vertical se mantiene estrecha) para reducir su resistencia y así mejorar la respuesta dinámica.

III.4.1. Uniones con rama horizontal estrecha

En las uniones de rama horizontal estrecha hemos observado que, debido a la influencia de la carga superficial, los perfiles de magnitudes físicas como el potencial eléctrico o la concentración en la rama horizontal ven incrementada su asimetría, y por ello proporcionan un mayor valor de la salida V_C . En primer lugar hemos efectuado una serie de medidas a baja frecuencia para mostrar la posibilidad de mezclado (<1 MHz) con estas estructuras. En cuanto a alta frecuencia, existen medidas experimentales⁸¹ de hasta 4 GHz. Las simulaciones Monte Carlo, que para bajas frecuencias son totalmente inviables (debido al enorme tiempo de cálculo, ya que el paso temporal es de fs), sí que nos sirven sin embargo para confirmar las medidas experimentales a alta frecuencia. Éstas predicen que el doblado de frecuencia se mantendría hasta casi los THz; eso sí, de manera intrínseca, ya que en las simulaciones no se incluyen impedancias ni capacidades parásitas, ni del dispositivo ni de los elementos de acceso y medida externos.

III.4.1.a. Baja frecuencia. Mezclado de señales

La posibilidad de mezclado y detección de fase, asociada a la respuesta no lineal de las TBJs, ya se ha demostrado experimentalmente en la Ref. 43. Sin embargo, tales medidas presentan una disminución excesiva de la amplitud del espectro a medida que aumenta la frecuencia (la amplitud de las bandas laterales

suma y diferencia no es la misma), atribuida a una desadaptación de impedancias entre las decenas de $k\Omega$ típicas de las uniones en T y los 50Ω de los aparatos de medida. Veremos cómo han de resolverse estas dificultades.

Describamos brevemente las bases teóricas del mezclado (o multiplicación) de señales. Sean dos señales, $V_1 = A \cos(2\pi f_1 t)$ y $V_2 = A \cos(2\pi f_2 t)$, de diferente frecuencia e igual amplitud a aplicar a los terminales izquierdo y derecho de una estructura TBJ. La salida del dispositivo será de la forma

$$V_C = -\alpha \left(\frac{V_1 - V_2}{2} \right)^2 + \frac{V_1 + V_2}{2} + b \frac{V_1 - V_2}{2} + c, \quad (\text{III.3})$$

donde α es el coeficiente de parabolicidad, b representa la posible asimetría de la geometría de la unión y c es una constante para tener en cuenta el error de *offset* del aparato de medida. Teniendo en cuenta que el potencial aplicado no es *push-pull*, es necesario añadir (con respecto a la ecuación I.3) el término $(V_1 + V_2)/2$. Usando las propiedades de las funciones trigonométricas es fácil demostrar que la salida está formada por las componentes espectrales dadas en la Tabla III.2.

Armónicos	Amplitudes
dc	$\alpha A^2/4 + c$
f_1	$A(1+b)/2$
f_2	$A(1-b)/2$
$f_1 + f_2$	$\alpha A^2/4$
$f_1 - f_2$	$\alpha A^2/4$
$2f_1$	$\alpha A^2/8$
$2f_2$	$\alpha A^2/8$

Tabla III.2. Amplitudes de los armónicos resultantes de la multiplicación de dos señales periódicas de igual amplitud A , y diferentes frecuencias f_1 y f_2 , para una respuesta del tipo de la de la ecuación III.3.

Partiendo de estos resultados se ha realizado una serie de medidas para confirmar la teoría, de acuerdo con el montaje experimental que se muestra en la Figura III.30. Está formado simplemente por un par de generadores de señal para aplicar las entradas, un osciloscopio para registrar la salida y un banco de medida donde, sobre la unión en T, se colocan las puntas para aplicar y extraer las señales.

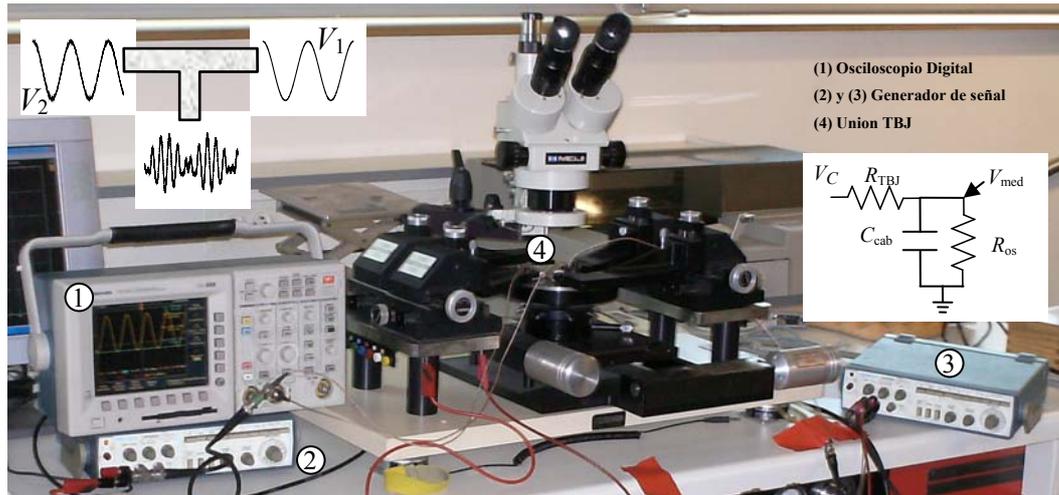


Figura III.30. Montaje experimental para el análisis del mezclado de frecuencias. A la unión en T, situada en el banco de pruebas, se le aplican las señales mediante dos generadores de funciones (Tektronix CFG 250). El potencial V_C se mide mediante un osciloscopio digital (Tektronix TDS3012). En la parte superior izquierda se ha esquematizado la forma de las dos señales de entrada (de diferente frecuencia y misma amplitud) y la forma de la onda a la salida. A la derecha se ha dibujado un circuito equivalente simple del montaje de medida. C_{cab} es la capacidad del cableado de medida, R_{os} es la resistencia de entrada del osciloscopio, R_{TBJ} sería la resistencia de salida de la unión a medir y V_{med} el potencial medido. Fotografía tomada en la sala de caracterización del IEMN.

En primer lugar se efectúa una caracterización estática de la unión. No disponemos de ninguna imagen SEM de dicha muestra para dar sus dimensiones, ya que para ello habría que eliminar la deposición de Si_3N_4 , lo que destruiría todos los componentes cercanos, además de dañar en gran medida los contactos óhmicos. Realizando medidas en campos cercanos que no han sido pasivados se ha estimado que las dimensiones son las establecidas por la máscara más 30 nm (con un error de ± 10 nm). Así, para unas dimensiones de máscara de $W_{VER}=60$ nm y $W^{HOR}=150$ nm, podemos estimar el tamaño real en $W_{VER}=(90\pm 10)$ nm y $W^{HOR}=(180\pm 10)$ nm. En la Figura III.31(a) aparecen los resultados medidos para el potencial de salida y la corriente a través de la rama horizontal. Se ha hecho un ajuste de los datos en el intervalo de ± 100 mV (que será la amplitud A, que usaremos para las señales periódicas de entrada). También se ha evaluado la frecuencia de corte asociada al cableado del montaje, Figura III.31(b). Para ello simplemente se necesita medir la amplitud de la salida dejando una de las entradas al aire, estimándose un valor para la frecuencia de corte f_C en torno a 6 kHz. Este valor coincide con el que podemos calcular pensando en que la red $R_{os}C_{cab}$ del aparato de medida es la que limita la respuesta en frecuencia (las capacidades del dispositivo son mucho menores, del

orden de fF). Para un valor de la resistencia de entrada del osciloscopio de $R_{os}=1\text{ M}\Omega$, utilizando la expresión $f_C=1/(2\pi R_{os}C_{cab})=6\text{ kHz}$, obtenemos un valor de unos 26 pF para la capacidad del cableado. Éste es un valor razonable teniendo en cuenta que la longitud del cableado es de fracción de metro y que un valor típico para los cables usados es 40–80 pF/m.

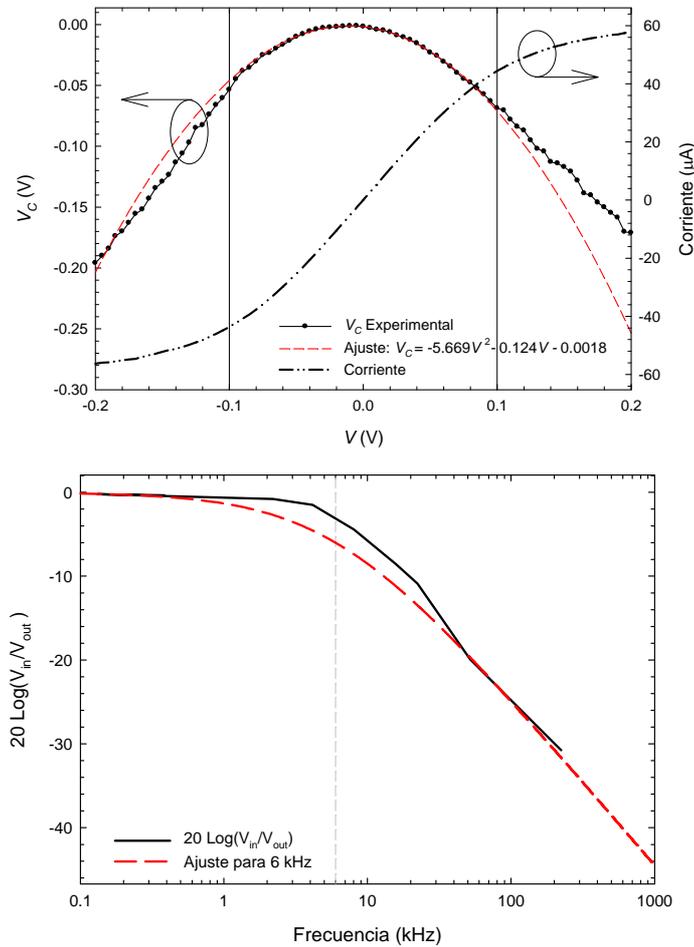


Figura III.31. (a) Medida experimental del potencial de fondo V_C y de la corriente I . Ajuste entre $\pm 100\text{ mV}$ (líneas verticales) a la forma de la ecuación III.3 con valores de las constantes $\alpha=-5.669\text{ V}^{-1}$, $b=0.124$ y $c=0.0018\text{ V}$. (b) Cálculo de la frecuencia de corte midiendo la caída de la señal de salida con un terminal de la rama horizontal al aire y el otro conectado al generador de señales. Amplitud de entrada pico–pico 200 mV.

Hemos planteado un circuito equivalente para caracterizar en términos de resistencias la unión (Figura III.32). Las resistencias medidas entre cada par de terminales (con el tercero al aire), correspondientes a la parte (a) de la figura, son de $R_1=3.7\text{ k}\Omega$ y $R_2=R_3=1\text{ M}\Omega$. Mediante estos valores se pueden calcular, pasando a la configuración (b), las resistencias físicas de cada rama, que toman los valores $R_C=1\text{ M}\Omega$ y $R_A=R_B=1.85\text{ k}\Omega$. La resistencia de salida, que llamaremos R_{TBJ} , es la dada

por la asociación $R_C+R_A//R_B$, que es de prácticamente $1\text{ M}\Omega$. De esta forma, y usando el circuito equivalente que aparece en la parte superior derecha de la Figura III.30, se obtiene que el potencial medido a frecuencia nula satisface $V_{\text{med}}=V_C\times R_{os}/(R_{os}+R_{TBJ})$. Esto significa que para nuestro caso la señal está multiplicada por $1/2$.

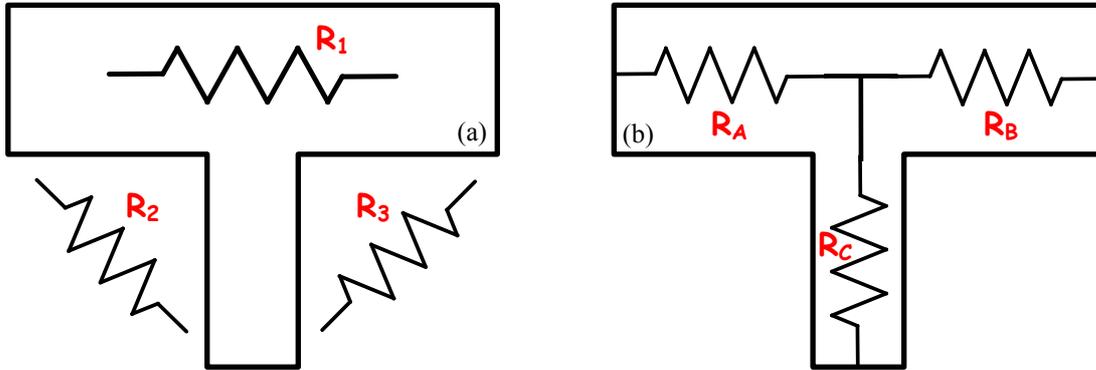


Figura III.32. Circuito equivalente en términos de (a) resistencias medidas y (b) resistencias físicas de cada rama. El paso de una configuración a otra se efectúa mediante las relaciones $R_A=(R_1+R_2-R_3)/2$, $R_B=(R_1-R_2+R_3)/2$ y $R_C=(-R_1+R_2+R_3)/2$.

Para las medidas hemos utilizado una amplitud de 100 mV y un osciloscopio que presenta la opción de obtener el espectro en frecuencia (cálculo de la transformada de Fourier). Además mediante la implementación de un código FFT (*Fast Fourier Transform*), basado en el algoritmo de Cooley–Tukey,¹⁴⁸ en la hoja de cálculo Sigma Plot hemos calculado la densidad espectral teórica de la salida que corresponde al mezclado de dos señales de amplitudes y frecuencias iguales a las elegidas en el experimento. Utilizando los valores del ajuste de la curva V_C-V ($\alpha=-5.669\text{ V}^{-1}$, $b=0.124$ y $c=1.8\text{ mV}$) podemos estimar teóricamente los valores de la amplitud de los diferentes armónicos. Para compararlos con los medidos experimentalmente debemos tener en cuenta un factor 2, dado que la transformada de Fourier sólo tiene sentido físico para frecuencias positivas. También tendremos en cuenta, tal y como dedujimos anteriormente, la influencia de R_{TBJ} , multiplicando la salida por $R_{os}/(R_{os}+R_{TBJ})$. Por fin, y para incluir la presencia de un polo asociado a la respuesta de la TBJ, debemos dividir la amplitud del espectro por el factor $(1+f/f_c)$.

En las gráficas de la Figura III.33 mostramos los espectros calculados teóricamente y los proporcionados por el osciloscopio para diferentes pares de valores de las frecuencias de entrada. En la Figura III.33 aparecen los resultados para dos señales de frecuencias (a) $f_1=500\text{ Hz}$ y $f_2=600\text{ Hz}$ y (b) $f_1=500\text{ Hz}$ y $f_2=50\text{ Hz}$.

Los valores de las amplitudes (de acuerdo con la expresiones de la Tabla III.2), teniendo en cuenta las consideraciones anteriores, son 6.18 mV para dc, 3.48 mV para f_1-f_2 , 12.97 mV para f_1 , 9.95 mV para f_2 , 1.52 mV para $2f_1$, 2.99 mV para f_1+f_2 y 1.47 mV para $2f_2$, Figura III.33(a). El acuerdo entre los dos tipos de resultados (medidos y calculados) es excelente. En el *inset* se ha representado la forma de la señal de salida.

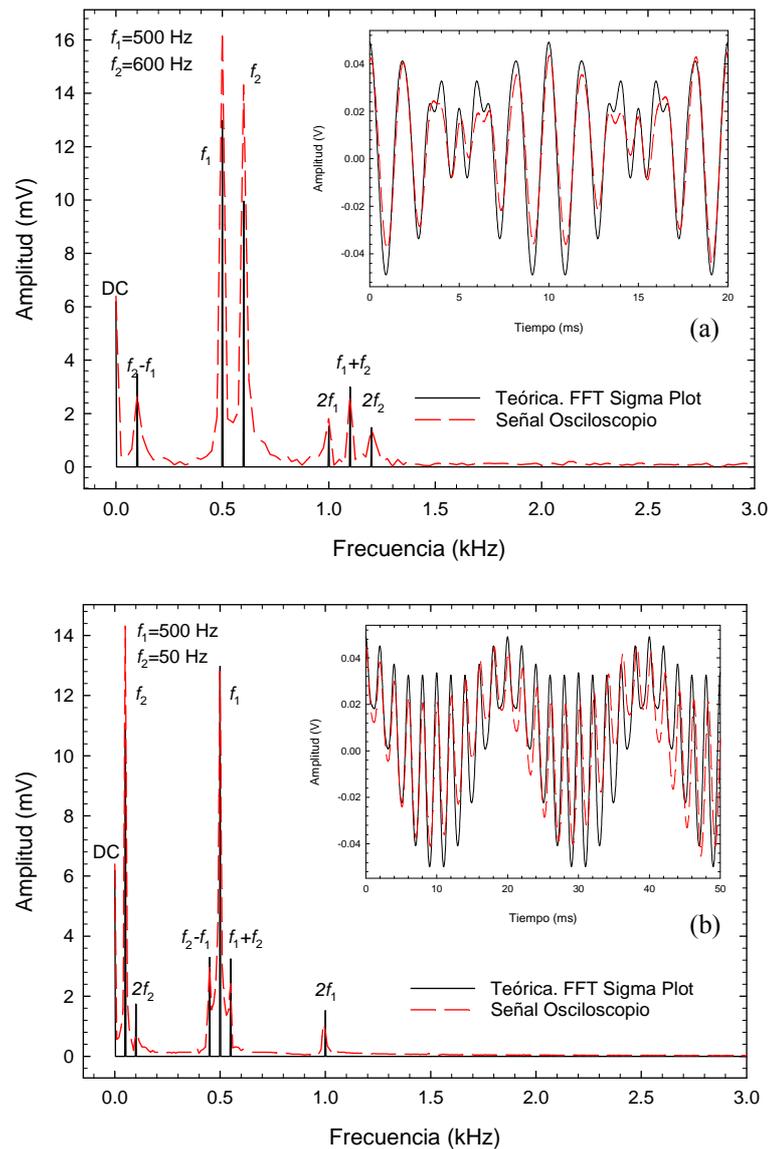


Figura III.33. Espectros calculados de forma analítica y medidos experimentalmente con el osciloscopio para (a) frecuencias de $f_1=500$ Hz y $f_2=600$ Hz y (b) $f_1=500$ Hz y $f_2=50$ Hz. *Inset*: Forma de la señal de salida. Impedancia del osciloscopio $1\text{ M}\Omega$. $f_c=6\text{ kHz}$ y $A=100\text{ mV}$.

Si subimos en frecuencia a decenas de kHz, debido a la atenuación introducida por la red $R_{os}C_{cab}$, la amplitud de la señal disminuirá notablemente. Para evitarlo reducimos la impedancia de entrada del osciloscopio a $R_{os}=100\text{ k}\Omega$. De esta forma el

polo lo multiplicamos por un factor 10, hasta 60 kHz. El problema derivado de este cambio es que la resistencia de la T ya no es del orden de la del aparato de medida, por lo que la señal está mucho más atenuada. En la Figura III.34 presentamos los resultados para $f_1=19.3$ kHz y $f_2=500$ Hz, donde se puede apreciar con claridad una mayor atenuación que para los casos anteriores. Podemos observar que aparecen los picos asociados a las diferentes componentes espectrales $2f_2=1$ kHz, $f_1-f_2=18.8$ kHz y $f_1+f_2=19.8$ kHz.

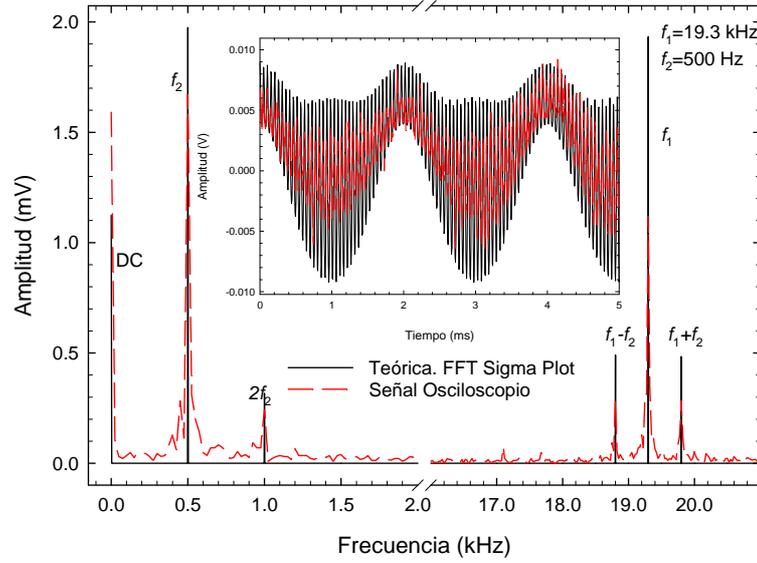


Figura III.34. Espectros calculados de forma analítica y medidos experimentalmente con el osciloscopio para frecuencias de $f_1=19.3$ kHz y $f_2=500$ Hz. *Inset:* Forma de la señal de salida. Impedancia del osciloscopio 100 k Ω . $f_c=60$ kHz y $A=100$ mV.

Por último hemos efectuado medidas aumentando la amplitud de la señal de entrada hasta 200 mV. Para ajustar la curva estática ya no es suficiente con utilizar la expresión cuadrática (del tipo de la ecuación I.3). Tomando como partida una expresión teórica general¹⁴⁹ para el potencial de salida V_C

$$V_C^2 - 2V_C / \alpha_F - V^2 = 0, \quad (\text{III.4})$$

donde $\alpha_F = \mu_F / q$ es un coeficiente que depende del potencial electroquímico (μ_F) y V es el potencial aplicado en modo *push-pull*, obtenemos que

$$V_C = \frac{1}{\alpha_F} - \sqrt{\frac{1}{\alpha_F^2} + a(V-c)^2 + bV + d}, \quad (\text{III.5})$$

donde hemos añadido dos términos, uno con amplitud b , que representa la posible asimetría de la geometría de la unión, y otro con amplitud d , para eliminar el error de

offset del aparato de medida. Las constantes a y c son necesarias para reproducir las medidas experimentales y se han ajustado para obtener el mejor acuerdo posible. Los valores usados son $a=2.6$, $b=0.28$, $c=0.03$ V, $d=0.005$ V y $\alpha=5.669$ V⁻¹, Figura III.35(a). El objetivo es verificar si aparecen nuevos armónicos, diferentes a los asociados a una respuesta cuadrática.

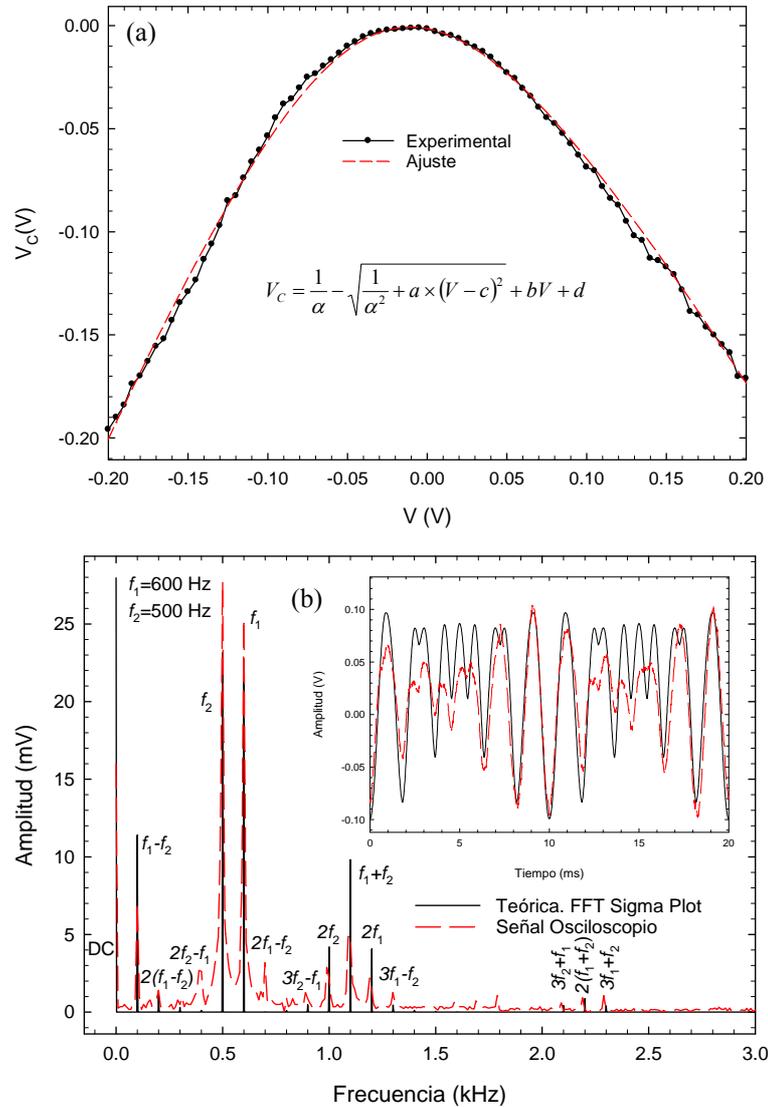


Figura III.35. (a) Medida experimental del potencial de fondo V_C y ajuste entre ± 200 mV de acuerdo con la expresión de la ecuación III.5 con valores de las constantes $a=2.6$, $b=0.28$, $c=0.03$ V, $d=0.005$ V y $\alpha=5.669$ V⁻¹. (b) Espectros calculados de forma analítica y experimentalmente por medio de la salida del osciloscopio para frecuencias de $f_1=600$ Hz y $f_2=500$ Hz. *Inset*: Forma de la señal de salida. Impedancia del osciloscopio 1 M Ω . $f_c=6$ kHz y $A=200$ mV.

En la Figura III.35(b), para $f_1=600$ kHz y $f_2=500$ Hz, podemos ver que efectivamente aparecen nuevas componentes en el espectro $2f_2-f_1=400$ Hz y $2f_1-f_2=700$ Hz (respuesta tipo V³) y $2(f_2-f_1)=200$ Hz, $3f_2-f_1=900$ Hz, $3f_1-f_2=1300$

Hz, $3f_2+f_1=2100$ Hz, $2(f_1+f_2)=2200$ Hz y $3f_1+f_2=2300$ Hz (respuesta tipo V^4). Analíticamente sólo aparecen términos de orden cuarto ya que la señal es del tipo raíz cuadrada.

III.4.1.b. Simulaciones a alta frecuencia. Doblador y detector de fase

En lo relativo a alta frecuencia, la simulación Monte Carlo es una excelente herramienta para estimar la frecuencia intrínseca máxima de funcionamiento de las TBJs.⁷² Para demostrar la capacidad de doblado de frecuencias, en la Figura III.36 representamos la respuesta del potencial de salida V_C a una excitación con señales periódicas de amplitud 0.1 V y frecuencias de 1 GHz, 10 GHz y 100 GHz aplicadas en modo *push-pull*. El dispositivo muestra una excelente capacidad de doblado de frecuencia y de rectificación al menos hasta 100 GHz.

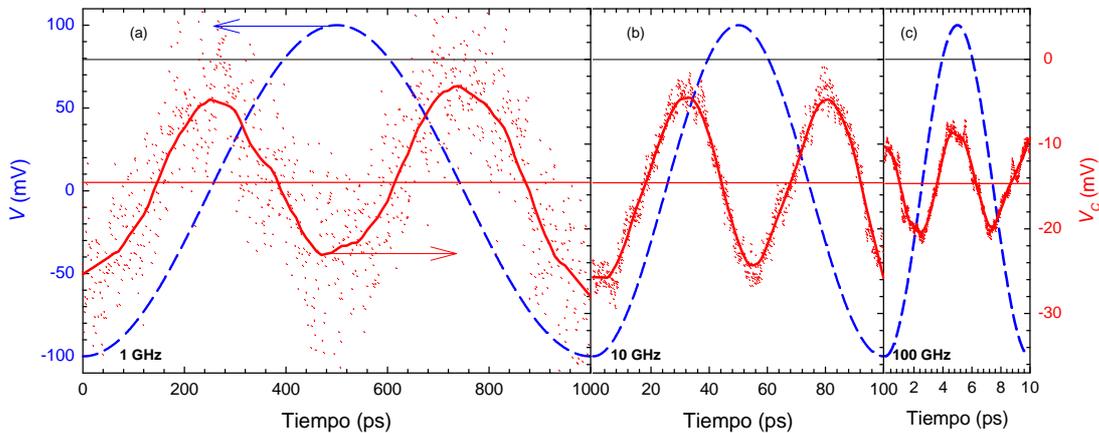


Figura III.36. Respuesta del potencial de fondo V_C , a una excitación mediante señales periódicas de amplitud 0.1 V y frecuencias de (a) 1 GHz, (b) 10 GHz y (c) 100 GHz aplicadas en modo *push-pull*. Las dimensiones de la unión en T son $W_{VER}=66$ nm, $L^{HOR}=250$ nm y $W^{HOR}=120$ nm. Las líneas rojas corresponden a un *smoothing* de los datos obtenidos con el simulador. Téngase en cuenta que para frecuencias tan “bajas” como 1 GHz, simulando con un $dt=1$ fs, el número de puntos de un periodo es 10^6 , de ahí el “ruido” de la nube de puntos. La línea roja horizontal corresponde al valor medio de la salida y la negra al valor $V_C=0.0$ V.

Estos resultados se han calculado utilizando el perfil de carga superficial obtenido en equilibrio ($V=0$ V), es decir, sin dejarlo evolucionar, por lo que a este tipo de cálculos los denominamos con carga superficial “congelada”. La justificación para realizarlos así es que los tiempos típicos de captura/emisión de los estados superficiales (μ s) son mucho mayores que el periodo de la señal más lenta que aplicamos (1 ns), de modo que consideramos que la ocupación de estos estados no varía. Las dimensiones de la unión en T empleada para realizar estos cálculos son

$W_{VER}=66$ nm, $L^{HOR}=250$ nm y $W^{HOR}=120$ nm. Se trata por ello de un dispositivo con una longitud de la zona activa de unos 500 nm (mucho mayor que el rectificador con obstáculo triangular de la Figura I.21), de manera que, pensando en un transporte puramente balístico donde las velocidades fueran del orden de 5×10^7 cm/s, nos daría una frecuencia de corte de 1 THz (asociada al transporte longitudinal). Para confirmar este aspecto, hemos examinado la corriente a través de la rama horizontal, observando que apenas presenta desfase con respecto al potencial aplicado hasta estas frecuencias, lo que significa que en dirección horizontal los portadores responden adecuadamente. Para frecuencias mayores, el desfase va aumentando como consecuencia de que el tiempo de tránsito es mayor que el periodo de la señal, y los electrones no tienen tiempo de completar el recorrido entre terminales, sino únicamente una parte de él. El problema es que en este tipo de unión no hay una discontinuidad (como el obstáculo de los rectificadores de cuatro terminales) o una geometría (en ángulo como la unión en Y) que guíe a los portadores hacia el terminal de salida o rama inferior (aquí lo hacen sólo por la componente térmica de la velocidad), lo que significa un deterioro en la respuesta dinámica que buscamos, como veremos a continuación.

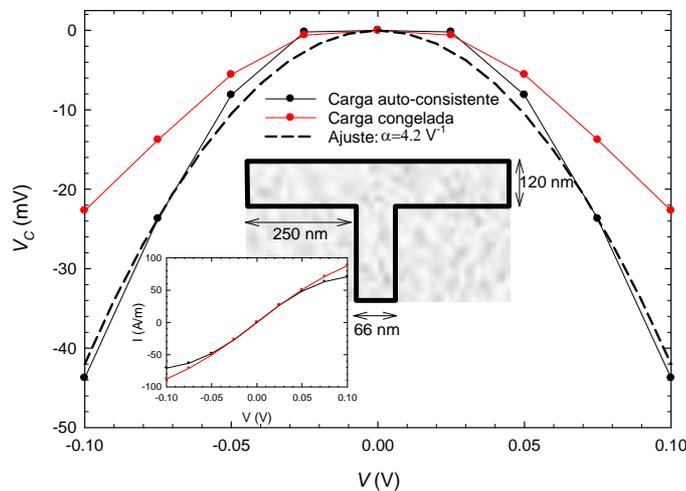


Figura III.37. Resultados Monte Carlo de la curva V_C - V para la TBJ mostrada. Ajuste cuadrático con coeficiente de parabolicidad $\alpha=4.2$ V^{-1} . También se incluye la forma de V_C en lo que denominamos cálculos con carga superficial “congelada” (al valor de equilibrio). *Inset*: Corriente a través de la rama horizontal y geometría de la TBJ.

En la Figura III.37 representamos la respuesta estática del potencial de salida, que se ajusta en el rango ± 0.1 V a una curva cuadrática con coeficiente $\alpha=4.2$ V^{-1} . Mostramos también la corriente I y el potencial V_C obtenidos con el modelo de carga

superficial “congelada”. El valor medio que debería tener la respuesta de V_C vendrá dado por

$$\overline{V_C} = f \int_0^{1/f} -\alpha(V \cos(2\pi ft))^2 dt = -\alpha V^2/2. \quad (\text{III.6})$$

En nuestro caso, como la amplitud es de 100 mV, se obtiene un valor de $\overline{V_C} = -21$ mV, que es algo más negativo a los valores que encontramos en la simulación. Sin embargo, si ajustamos a una parábola los valores estáticos calculados con la carga superficial “congelada” ($\alpha = 2.5 \text{ V}^{-1}$), se obtiene un valor de $\overline{V_C} = -12.5$ mV, muy próximo al valor medio de la simulación dinámica (Figura III.36). Este resultado era de esperar, ya que como acabamos de explicar ésta ha sido la manera de realizar dichas simulaciones Monte Carlo. El aumento del valor absoluto de V_C del modelo auto-consistente con respecto a los valores calculados con la carga superficial “congelada” corresponde a la contribución asociada a la adaptación de la carga superficial al potencial aplicado.

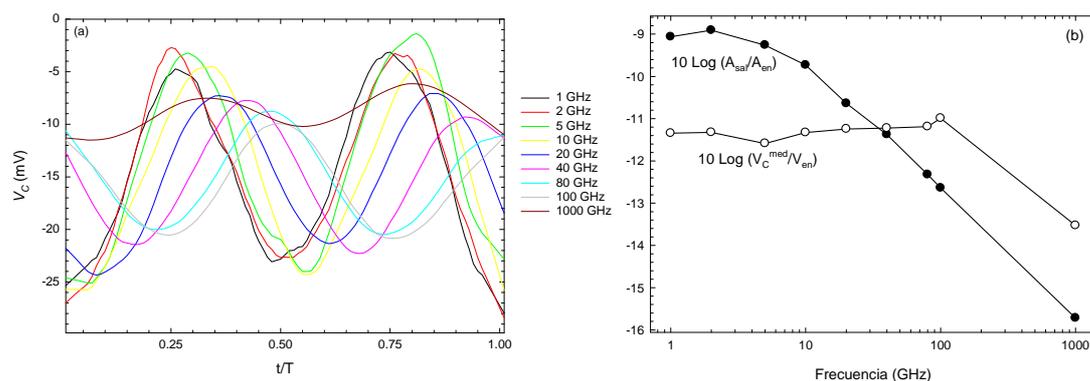


Figura III.38. (a) Representación de la forma de la salida de la unión para diferentes frecuencias y (b) valores de su amplitud A_{sal} y valores medios V_C^{med} normalizados a la amplitud de la entrada V_{en} expresados en dB en función de la frecuencia.

En la Figura III.36 podemos apreciar que la salida tiene un forma senoidal con frecuencia doble que la entrada, y que, a medida que aumentamos la frecuencia de las señales de entrada, la capacidad de doblado del dispositivo va disminuyendo, pero se puede considerar todavía efectiva a 100 GHz. Para analizar los resultados con más detalle, en la Figura III.38(a) se ha representado la forma de la salida para frecuencias desde 1 GHz a 1 THz. Observamos que la amplitud de la señal rectificadora va disminuyendo a medida que aumentamos la frecuencia. Sin embargo, el valor medio de la salida, $\overline{V_C}$, es aproximadamente el mismo para todas las

frecuencias hasta 100 GHz. Esta diferencia en las frecuencias de corte de estos dos efectos se debe a que el valor de la amplitud está asociado a un efecto vertical de respuesta lenta dado por la penetración de portadores en la rama central mientras que el de \overline{V}_C viene dado por el transporte horizontal cuya dinámica es muy rápida. Las dificultades que tienen los portadores para entrar/salir en/de la rama vertical respondiendo a la frecuencia de excitación provocan que la amplitud vaya disminuyendo a medida que la entrada es más rápida (con una frecuencia de corte del orden de las decenas de GHz), pero proporcionan el mismo valor de \overline{V}_C . En la Figura III.38(b) representamos en dB el valor de la amplitud de salida normalizado al de entrada. Con la forma de dicha curva podemos estimar la frecuencia de corte del dispositivo como el punto donde dicha amplitud cae -3 dB respecto al valor inicial (amplitud mitad), que en nuestro caso sería de unos 50 GHz para la amplitud y de más de 1 THz para el valor medio. Concluimos que aún tratándose de un buen elemento rectificador a altas frecuencias, no funciona correctamente como doblador por encima de 50 GHz. Esto es así porque la geometría de las TBJs no está tan optimizada como en las YBJs o rectificadores con obstáculo central en lo que a los efectos verticales se refiere.

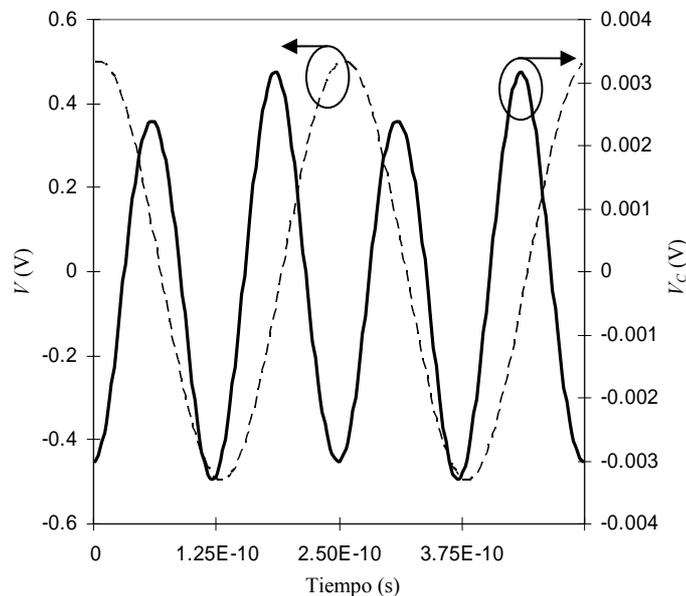


Figura III.39. Caracterización mediante un LSNA de una YBJ funcionando como doblador de frecuencia para una señal de entrada de 4 GHz. Figura extraída de la Ref. 81.

Para confirmar experimentalmente estos resultados, mostramos algunas medidas recientes que se han obtenido para este tipo de nanodispositivos.⁸¹ Las

mayores dificultades para realizar este tipo de medidas son, por una parte, el conseguir una verdadera polarización *push-pull*²⁶ y, por otra, la optimización de los accesos para las medidas de alta frecuencia. Gracias a la colaboración que mantenemos con el IEMN y la UCL disponemos de medidas de YBJs donde la geometría se ha mejorado para limitar las capacidades entre accesos y guías coplanares (capacidades *crosstalk*). La elección de esta geometría en Y en lugar de en T es debido a que, como acabamos de explicar, su respuesta en frecuencia es mejor. Los principales elementos del montaje de medida son un analizador de señal del tipo LSNA (*Large Signal Network Analyser*) junto con dos sondas de medida, una de estática (HIP FPM-100x, 5k Ω) para medir la componente de continua y otra de alta frecuencia (HIP Picoprobe 35) de alta impedancia, 1.25 M Ω , que permite medidas de hasta 26 GHz. También se usa un generador de señal para excitar las uniones (Agilent Technologies E8257D PSG *Analog Signal Generator*).

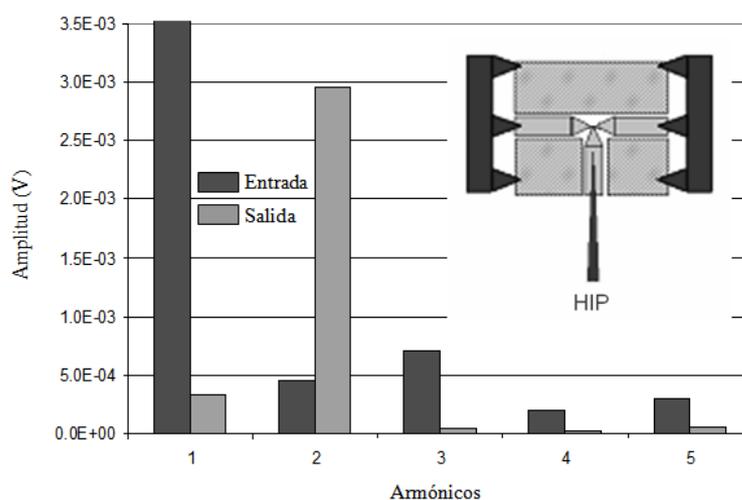


Figura III.40. Espectro en frecuencia de la entrada (negro) y la salida (gris) obtenidas con un LSNA en una YBJ optimizada. Representamos los armónicos correspondientes a 4 (fundamental), 8, 12, 16 y 20 GHz. Figura extraída de la Ref. 81.

Mediante este montaje se puede recalcular la forma de onda a partir de las medidas de amplitud y fase de los armónicos. En la Figura III.39 observamos el doblado de frecuencia para una señal de entrada de 4 GHz (aparece sin componente dc). A la salida se obtiene una señal temporal cuasi-sinusoidal de frecuencia 8 GHz. Esto lo podemos comprobar analizando las medidas mostradas en la Figura III.40, donde, en el dominio de la frecuencia, la amplitud espectral del segundo armónico de la señal de salida es una década mayor que para el resto de modos.

También disponemos de resultados experimentales de este dispositivo funcionando como detector de fase. En este caso se aplican a la rama derecha e izquierda dos señales de igual amplitud y frecuencia pero distinta fase, $V_1=A\cos(2\pi ft+\varphi)$ y $V_2=A\cos(2\pi ft+\varphi)$. A partir de la ecuación III.3, podemos obtener que, para este caso, el potencial de salida tiene un valor de

$$\begin{aligned}
 V_C &= \frac{\alpha A^2}{8}(1 - \cos\varphi) \\
 &+ \frac{\alpha A^2}{8}(\cos(2 \times 2\pi ft) + \cos(2 \times 2\pi ft + 2\varphi) - \cos(2 \times 2\pi ft + \varphi)) \\
 &+ \frac{A}{2}(\cos(2\pi ft) + \cos(2 \times 2\pi ft + \varphi))
 \end{aligned} \tag{III.7}$$

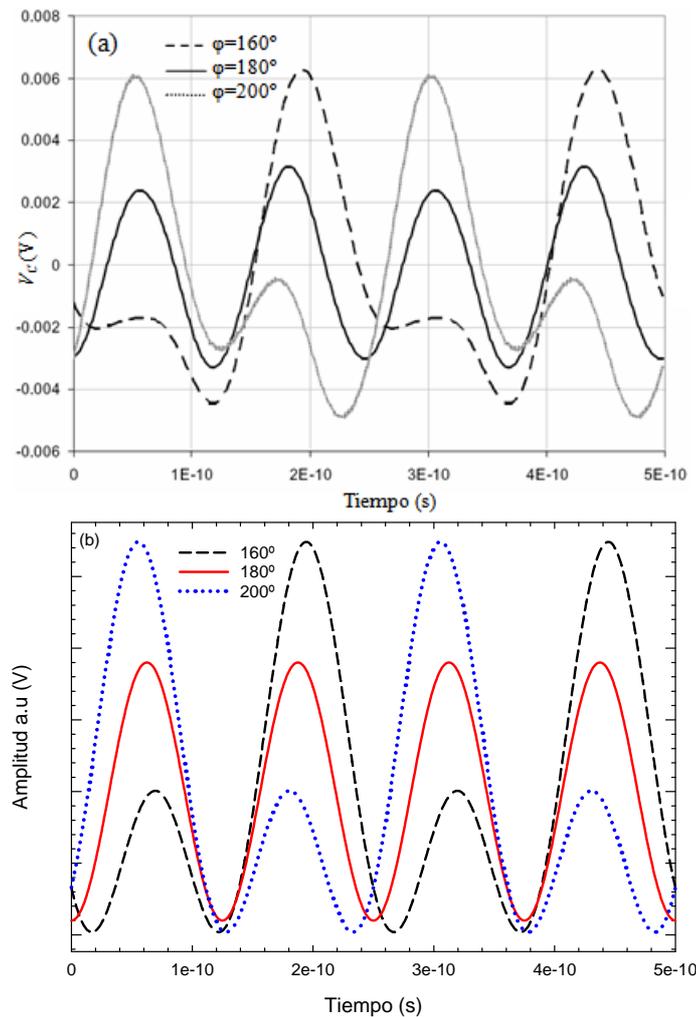


Figura III.41. (a) Señales medidas en el fondo de la rama central para dos señales de entrada de frecuencia 4 GHz desfasadas entre sí en un valor de $\varphi=160^\circ$, 180° , y 200° . (b) Representación analítica de la ecuación III.7 para dichos desfases. Figura (a) extraída de la Ref. 81.

En la Figura III.41 presentamos dichos resultados junto con la forma de las curvas que se obtienen a partir de la respuesta teórica de la ecuación III.7. Ambas presentan un acuerdo bastante satisfactorio.

III.4.2. Uniones con rama horizontal ancha

Hasta el momento se han estudiado uniones en T en las que la rama horizontal tenía una anchura que no era mucho mayor que la de vaciamiento y por ello los efectos asociados a las cargas superficiales eran importantes. En la sección III.3.4 se presentaron resultados de simulaciones Monte Carlo para uniones con diferente W^{HOR} y observamos que el valor absoluto del potencial de salida crecía para las anchuras menores. Recuérdese la gran diferencia que aparecía, al modificar W^{HOR} , en los valores del potencial central de la rama horizontal V_{HC} debido a que el vaciamiento (causado por la carga superficial) es más significativo en uniones estrechas. Con el fin de mejorar la respuesta dinámica de las TBJs se han fabricado TBJs con rama horizontal ancha para así disminuir su resistencia (pagando el precio de una menor sensibilidad dada por los menores valores de V_C). En estas TBJs se mantiene la dimensión longitudinal, que es la que determina el carácter más o menos balístico del transporte electrónico.

Aunque esta Memoria está dedicada fundamentalmente a simulaciones por ordenador, la posibilidad de realizar una estancia breve en el IEMN permitió conocer de primera mano las técnicas de fabricación y caracterizar algunas TBJs con ramas horizontales de anchura 500 nm. Los resultados de parte de este trabajo aparecen reflejados en la Figura III.42(a) donde, como es habitual, representamos los valores de corriente y potencial de fondo V_C . Se trata de cuatro uniones con diferente anchura de rama vertical $W_{VER}=69, 76, 86$ y 100 nm. La anchura de la rama horizontal es aproximadamente de unos 500 nm. Como ocurría en los resultados de la sección III.2.2, Figura III.8(a), los valores de V_C tienen mayor curvatura cuanto menor es la anchura de la rama vertical W_{VER} . Las corrientes difieren muy ligeramente, como era de esperar teniendo en cuenta que las anchuras horizontales de todas ellas no son exactamente las mismas. A la hora de realizar las medidas prestamos especial atención a los valores de las resistencias entre las diferentes parejas de terminales, ver Figura III.32(a), cuyos valores resumimos en la Tabla III.3.

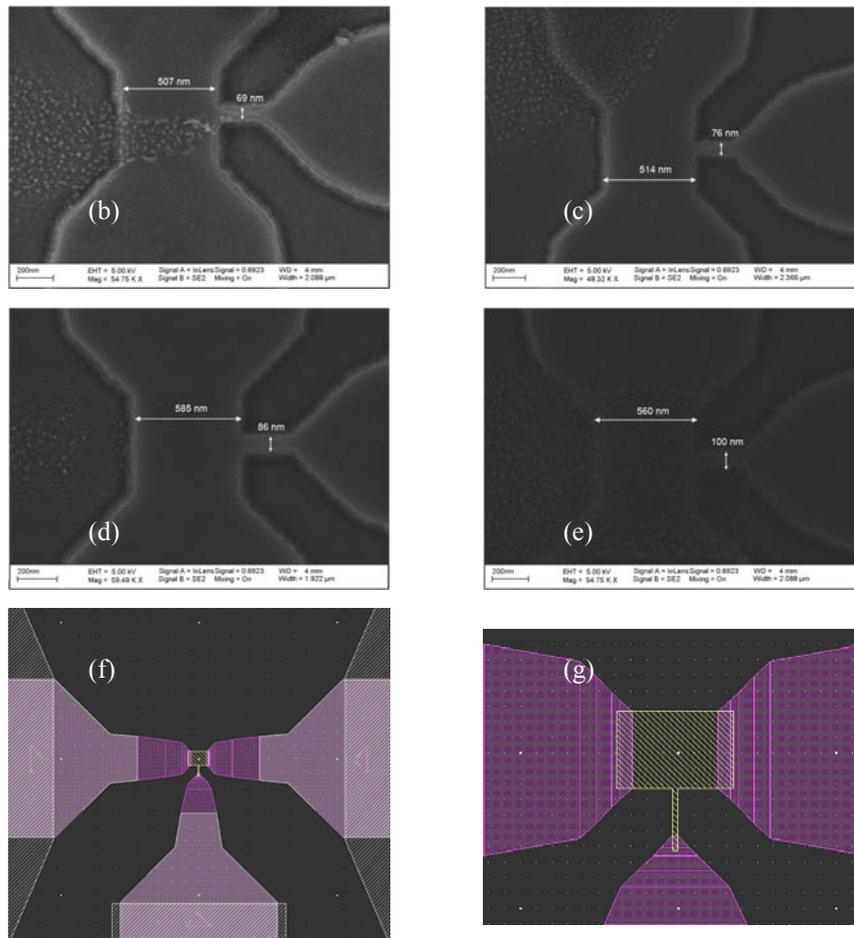
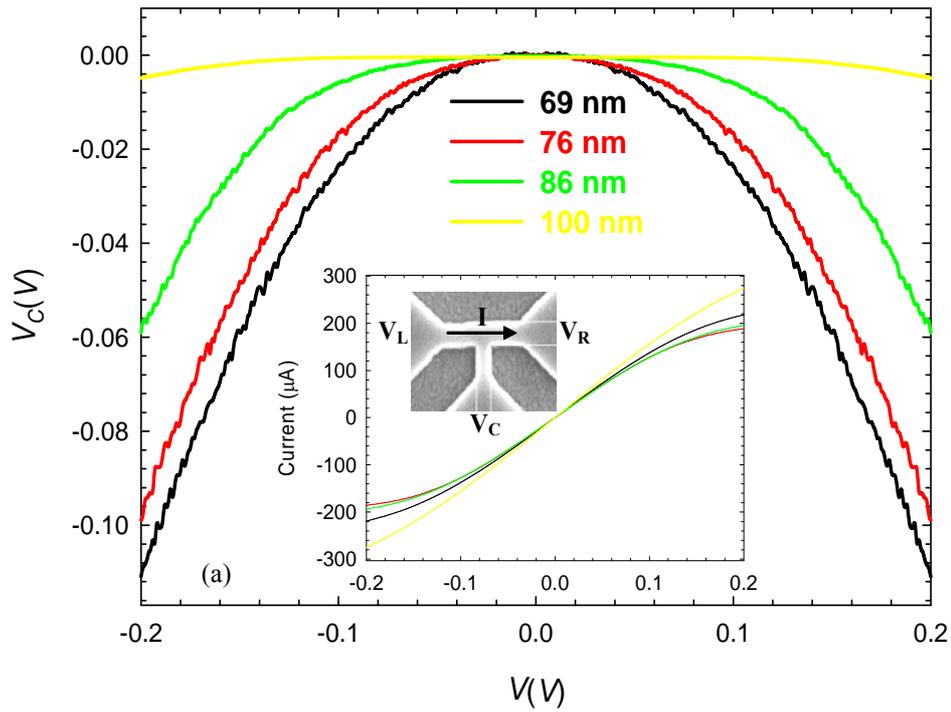


Figura III.42. (a) Potencial V_C y corrientes I medidas experimentalmente en modo *push-pull* para TBJs con diferentes anchuras $W_{VER}=69, 76, 86$ y 100 nm de la rama vertical mostradas en las imágenes SEM (b)–(e). $W^{HOR}=500$ nm y $L^{HOR}=250$ nm. Se muestran también en (f) y (g) las máscaras usadas para la litografía.

	R_1	$R_2 \approx R_3$
T69	1.3 k Ω	890 k Ω
T76	1.4 k Ω	120 k Ω
T86	1.4 k Ω	16 k Ω
T100	1.2 k Ω	4 k Ω

Tabla III.3. Valores de las resistencia indicadas en la Figura III.32 (a) para las cuatro uniones.

La resistencia asociada a la rama horizontal debe tomar valores cercanos a los k Ω para asegurarnos de que esta rama esté en condiciones aceptables (no haya habido fallos en el proceso tecnológico) en cuanto a concentración de portadores. Debido a la mayor anchura de la rama horizontal los valores son bastante inferiores a los encontrados en las TBJs estudiadas en la sección anterior. Los valores de las otras dos resistencias deben ser parecidos, aunque no necesariamente iguales ya que es imposible asegurar una total simetría en los dispositivos fabricados. Podemos apreciar que la mayor curvatura del potencial de salida para la unión con rama vertical más estrecha ($W_{VER}=69$ nm) está en relación con un valor mayor de las resistencias R_2 y R_3 .

Para estudiar estas uniones hemos utilizado la misma herramienta de simulación Monte Carlo que la de la sección III.3, con el modelo de carga superficial auto-consistente (con los mismos valores para los parámetros).

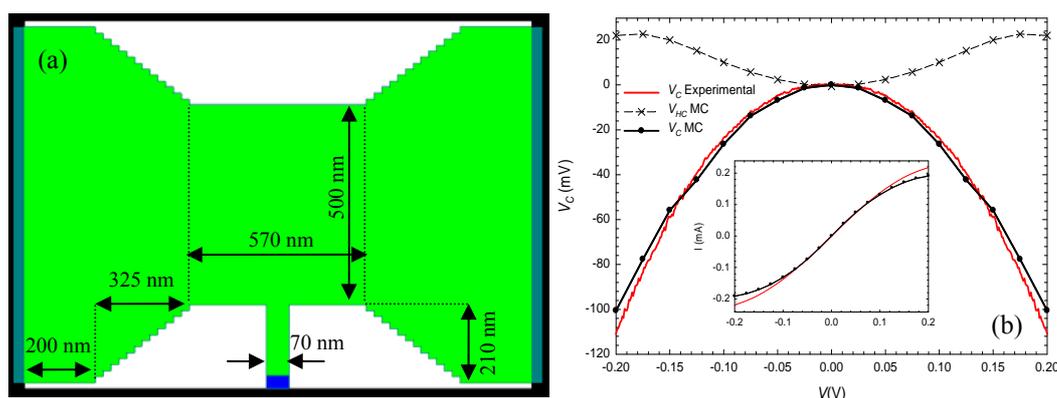


Figura III.43. (a) Dimensiones de los dispositivos simulados para obtener los resultados Monte Carlo mostrados en (b). Se representan los valores de V_C tanto simulados como medidos experimentalmente, así como los resultados obtenidos para el potencial central V_{HC} . Inset: Valores de corriente utilizando una longitud no simulada de $Z=10^{-7}$ m.

En la Figura III.43 hemos dibujado la topología y dimensiones de las uniones simuladas, que son las mismas que las de los dispositivos medidos experimentalmente. La anchura de la rama horizontal es, como indicábamos anteriormente, de 500 nm. Este aspecto incrementa enormemente el tiempo de cálculo de nuestras simulaciones, por ello hemos estudiado solamente la de rama vertical más estrecha ($W_{VER}=70$ nm).

A la hora de realizar estas simulaciones se nos presentaron algunos problemas que pasamos a comentar. Un problema importante es que la inyección utilizada hasta el momento (explicada en la sección II.2.4) se realiza con una tasa constante que es válida cuando el contacto está realmente en equilibrio, situación que no se da en este caso, en que la resistencia de los accesos es comparable a la de la zona activa (la más resistiva), por lo que el campo eléctrico llega a la región donde inyectamos los portadores. Nótese que la anchura de la rama horizontal (500 nm) no es despreciable frente a la de los accesos (920 nm). Hemos comprobado que para potenciales aplicados por encima de 0.1 V la tasa de inyección constante asociada al equilibrio de los contactos provoca una disminución notable en el número de portadores cerca del cátodo y que por tanto afecta de manera significativa a los perfiles de potencial horizontales.

Para intentar solucionar este problema en la medida de lo posible se ha sustituido la tasa de inyección constante (asociada a la velocidad media de los portadores calculada con la distribución térmica) por una inyección de portadores que mantenga la neutralidad de carga en la región del dispositivo adyacente al contacto.¹¹⁶ Para ello, una vez que se ha simulado el movimiento de los portadores durante el paso temporal, se inyectan en las celdas contiguas al contacto los portadores necesarios para compensar la carga positiva del dopaje de fondo. En simulaciones unidimensionales este modelo funciona perfectamente, mientras que en dos dimensiones aparece una pequeña acumulación de electrones junto a los contactos con la consiguiente caída de potencial.¹¹⁶ Esta pequeña alteración está asociada al hecho de que no se extraigan partículas cuando la concentración es superior a la de equilibrio.

Los resultados correspondientes al potencial de salida V_C y a la corriente aparecen en la Figura III.43(b). Se puede apreciar un acuerdo excelente entre medidas experimentales y las simulaciones Monte Carlo para ambas magnitudes, lo

que de nuevo confirma la validez de nuestro modelo. En el caso de TBJs con W_{VER} mayores hemos encontrado la misma dependencia que la observada experimentalmente, Figura III.42(a), asociada a los efectos verticales que ya se explicaron en la sección III.3.3.

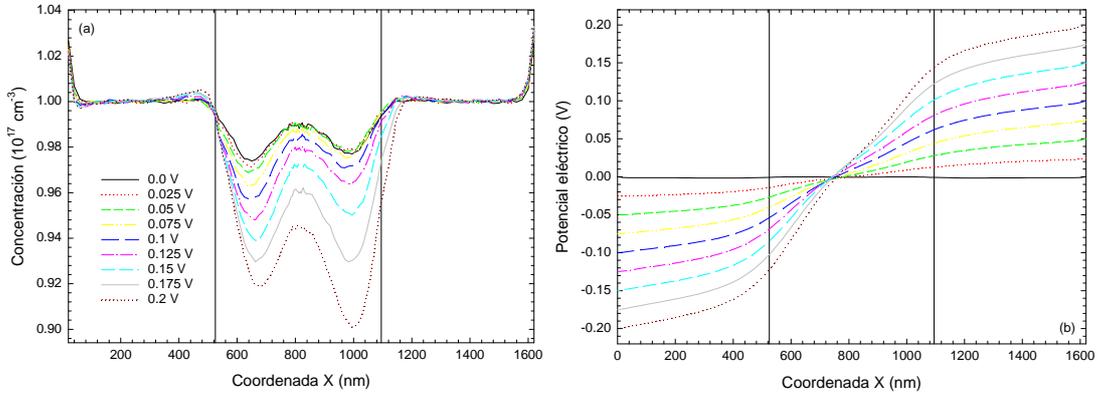


Figura III.44. Perfiles de (a) concentración de electrones y (b) potencial a lo largo del centro de la rama horizontal para $V=V_R=-V_L=0.0-0.2$ V. Las líneas verticales delimitan la zona activa de la TBJ.

En la Figura III.44 hemos representado los perfiles de concentración de electrones y potencial eléctrico a lo largo del centro de la rama horizontal de la unión. En primer lugar se aprecia que la concentración es mucho más homogénea que para valores de W^{HOR} menores (compárese por ejemplo con los de la Figura III.29). Nótese que aquí la concentración sólo varía en un 10% respecto al dopaje de fondo (10^{17} cm^{-3}). Aunque se observa la asimetría típica del carácter balístico, la influencia de la carga superficial de la rama horizontal es muchísimo menor que para anchuras pequeñas. El hecho de que las anchuras del canal horizontal y los accesos sean del mismo orden hace que, como se puede ver en la Figura III.44(b), parte del potencial aplicado caiga en los accesos. Podemos apreciar en la Figura III.44(b), que para un potencial aplicado de 0.2 V, casi 1/3 de éste cae en los accesos.

Para completar el estudio de estas uniones, en la Figura III.45 comparamos los perfiles de velocidad y campo eléctrico a lo largo del centro de la rama horizontal para una unión ancha ($W^{HOR}=500$ nm) y otra estrecha ($W^{HOR}=120$ nm, como la estudiada en las secciones III.3.4 y III.4.1). La mayor diferencia que se observa es que mientras en la unión estrecha los valores altos de campo eléctrico se concentran en la región cercana al ánodo (derecha), en la ancha el perfil de campo eléctrico es mucho más simétrico. Además, en la unión con $W^{HOR}=500$ nm podemos apreciar que el campo eléctrico no es nulo en la región cercana a los contactos, lo que provoca una reducción significativa del potencial aplicado. En cuanto a las velocidades, de forma

similar, el efecto de sobrevelocidad que aparece en la zona derecha es muchísimo más acusado para la unión estrecha. No obstante, aunque los valores obtenidos son mayores para la unión con $W^{HOR}=120$ nm, si tenemos en cuenta la pérdida de potencial en los accesos la magnitud de la velocidad es muy similar en ambas uniones ya que son igual de largas. Compárese, por ejemplo, la curva de 0.2 V para la de 500 nm con la de 0.125 V $\approx (2/3) \times 0.2$ V en la de 120 nm, ambas con valores en torno a $3.5\text{--}4 \times 10^7$ cm/s.

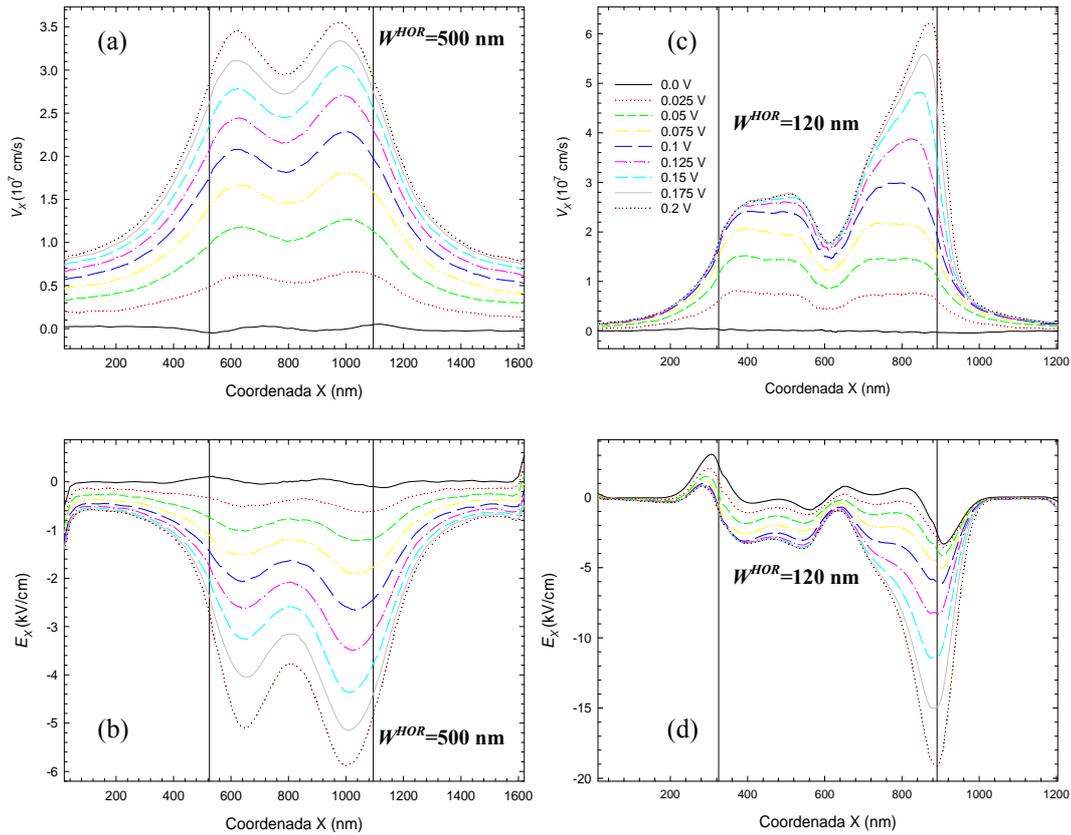


Figura III.45. Perfiles de velocidad de los electrones y campo eléctrico en la dirección “ x ” a lo largo del centro de la rama horizontal para potenciales aplicados $V=V_R=-V_L$ entre 0.0 y 0.2 V. Anchura de la rama horizontal de (a) y (b) $W^{HOR}=500$ nm y (c) y (d) $W^{HOR}=120$ nm. Las líneas verticales delimitan la zona de los accesos en cada TBJ.

Todos estos aspectos repercuten en una menor eficiencia de la rectificación del potencial de salida en la unión más ancha. En la Figura III.46 comparamos los resultados para el potencial V_C , V_{HC} y la corriente a través de la rama horizontal en la unión ancha ($W^{HOR}=500$ nm) y en la estrecha ($W^{HOR}=120$ nm). Es conveniente señalar que la anchura de la rama vertical para las dos uniones es muy similar, de 69 y 66 nm respectivamente. Mientras que para la estrecha con $V=0.1$ V se encuentra $V_C=-44$ mV, en el caso de la unión ancha tenemos que $V_C=-26$ mV, por lo que la

eficiencia se ve reducida prácticamente a la mitad. Si comparamos los cálculos realizados con el modelo de carga superficial auto-consistente y con el de carga “congelada”, en el caso $W^{HOR}=500$ nm se observa que tanto la corriente horizontal como el potencial V_{HC} son prácticamente iguales, lo que significa que la adaptación de la carga superficial con la polarización en las fronteras de la rama horizontal apenas influye en los resultados. Por lo tanto, el aumento que observamos en los valores de V_C del modelo auto-consistente respecto al de carga “congelada” es debido a un efecto vertical, originado por la variación de carga superficial de la rama vertical con la polarización. En el caso de que la rama horizontal sea estrecha, Figura III.46(b), la separación entre las curvas de V_C para ambos modelos es mayor. Se debe a un efecto horizontal, ya que se puede apreciar que los valores de las magnitudes horizontales obtenidas con el modelo auto-consistente, como corriente o V_{HC} , son substancialmente diferentes de las calculadas con carga “congelada”. Concluimos entonces que la variación de la carga superficial de la rama horizontal con la polarización y su efecto sobre V_{HC} sí es importante, al contrario de lo que ocurre en el caso de la TBJ con rama horizontal ancha.

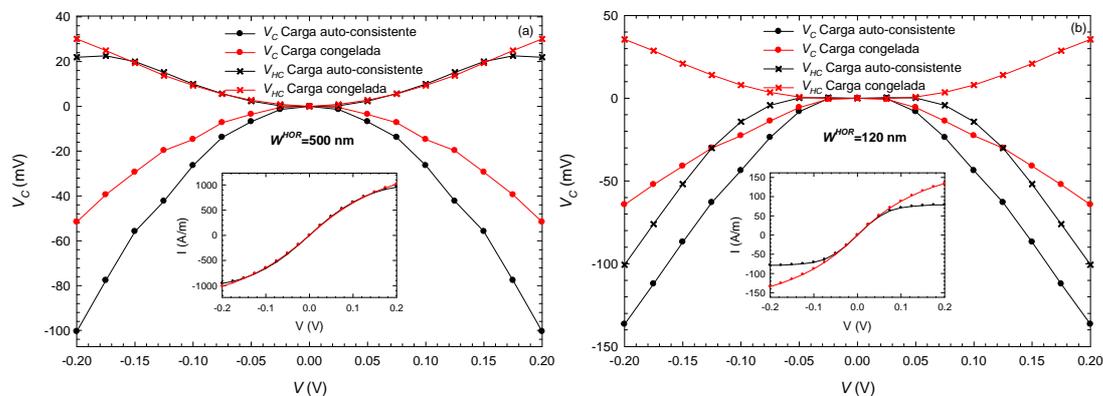


Figura III.46. Resultados Monte Carlo para las curvas V_C-V y $V_{HC}-V$ en TBJs con rama horizontal de anchura (a) 500 nm y (b) 120 nm calculados tanto con el modelo auto-consistente de carga superficial como con el de carga superficial “congelada” al valor de equilibrio. *Inset*: Corriente a través de la rama horizontal.

CAPÍTULO IV

DIODOS AUTOCONMUTANTES

Hemos anunciado en la introducción, que el otro bloque principal de este trabajo estaría dedicado al estudio del comportamiento estático, dinámico y del ruido de los diodos autoconmutantes o *Self-Switching Diodes* (SSDs),^{48,49} que analizaremos en este capítulo. Los fenómenos de memoria^{55,56} que aparecen en determinadas medidas experimentales de los SSDs, consecuencia de la ocupación de los estados de superficie, se explicarán en el Capítulo V ya que sus aplicaciones son diferentes.

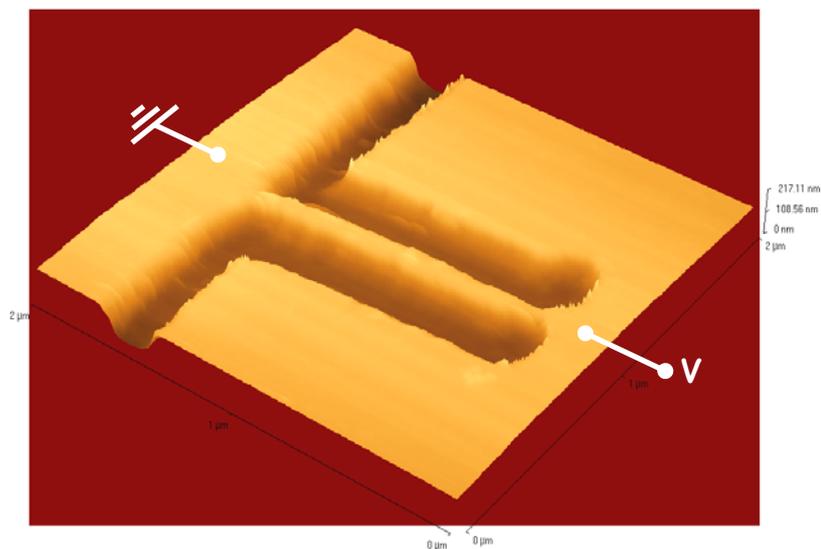


Figura IV.1. Imagen AFM de un *Self-Switching Diode* (SSD).

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 que generan unas zanjas

aislantes en forma de L (Figura IV.1). La gran ventaja que poseen los SSDs frente a dispositivos rectificadores tradicionales como uniones $p-n$ o diodos Schottky es 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. Además, el uso de canales de materiales de alta movilidad como el InGaAs permite que las frecuencias de funcionamiento puedan incluso llegar a los THz.^{50,51} Las expectativas de funcionamiento a alta frecuencia se ven adicionalmente favorecidas por la arquitectura planar, en la que los contactos eléctricos están separados lateralmente en lugar de estar colocados paralelamente a ambos lados de la oblea. Esto hace que las capacidades parásitas entre contactos sean menores que las de los dispositivos convencionales del mismo tamaño. Por todas estas razones nos encontramos ante un diodo con aplicaciones potenciales como detector de señales, mezclador de frecuencias o generador de armónicos (debido a su respuesta no lineal) en el rango de los THz.

La estructura de este capítulo es la siguiente. Inicialmente, utilizando las simulaciones Monte Carlo 2D de tipo *top-view* (TV), explicaremos su principio de funcionamiento en términos de la apertura del canal regulada por la carga superficial en las interfases laterales.⁷⁴⁻⁷⁶ Estudiaremos el comportamiento estático del dispositivo en función de la geometría del mismo, dando indicaciones para su escalado óptimo. A continuación se analizará la respuesta en frecuencia, calculando el límite intrínseco de funcionamiento. El comportamiento dinámico presenta un máximo resonante claramente definido a frecuencias del orden de los THz, por lo que optimizando la geometría es posible no sólo mejorar la sensibilidad de detección, sino también lograr un cierto grado de selectividad en frecuencia. Por último, investigaremos de forma detallada la densidad espectral del ruido en corriente tanto en baja (por encima del rango $1/f$) como en alta frecuencia (THz). Discutiremos el origen de los diferentes máximos del espectro del ruido, así como la dependencia de su amplitud y frecuencia con diversos parámetros de la topología relacionándolos con la respuesta dinámica analizada previamente, para así poder optimizar el funcionamiento de los SSDs a alta frecuencia.^{90,91}

IV.1. COMPORTAMIENTO ESTÁTICO

El diodo autoconmutante posee una atractiva característica $I-V$ 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. Al igual que en el capítulo anterior, vamos a usar nuestro simulador semiclásico Monte Carlo 2D para explicar la física del funcionamiento de los diodos autoconmutantes basados en heteroestructuras InAlAs/InGaAs.

IV.1.1. Principio de funcionamiento

De la misma forma que con las TBJs, necesitamos incluir una densidad de carga negativa en las discontinuidades semiconductor–aire para incorporar la influencia de estados superficiales. Ya mostramos, en la sección 1.2.2.g, que mediante el uso de un modelo de carga constante podíamos reproducir los resultados de las medidas experimentales. Sin embargo, por consistencia con el resto del trabajo de esta Tesis, los cálculos de este capítulo se realizan con el modelo auto–consistente de carga superficial. Los resultados estáticos son bastante similares a los que se obtendrían con un modelo de carga fija, pero con la gran ventaja de que el simulador adapta la carga a la geometría y no tenemos que imponerla como parámetro de entrada. Además, como veremos en el capítulo siguiente, para reproducir ciertos fenómenos sí necesitaremos del modelo auto–consistente.

La Figura IV.2 muestra un esquema tridimensional del SSD. Las simulaciones se efectúan en el plano xy , donde la geometría es determinante en el comportamiento final. La dimensión no simulada (que permitirá la comparación de los valores de las simulaciones con los medidos en dispositivos reales) se puede estimar como $Z=n_s/N_{db}=10^{-5}$ cm, con $n_s=10^{12}$ cm⁻² valor típico para la densidad Hall de electrones en canales InGaAs.^{*,48,76} El valor de la carga superficial se calcula mediante nuestro modelo auto–consistente. Su valor lo hemos limitado a $\sigma_{\max}/q=0.5\times 10^{12}$ cm⁻², y el resto de los parámetros del modelo son los mismos que los utilizados para las simulaciones de las TBJs del capítulo anterior.

* Los SSDs se han simulado con un 53% de In ($m^*=0.042$)¹¹⁵ para el InGaAs del canal ya que es ésta la proporción usada en los dispositivos fabricados experimentalmente.

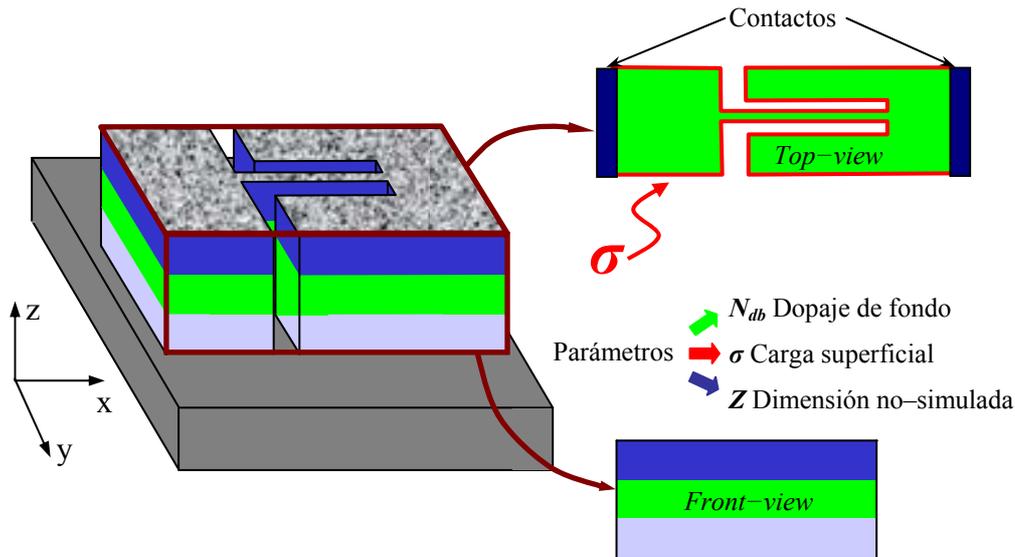


Figura IV.2. Esquema tridimensional de la geometría de un SSD y parámetros usados en las simulaciones 2D de tipo *top-view*.

IV.1.1.a. Características $I-V$

Hemos simulado diferentes SSDs con la geometría del *inset* de la Figura IV.3, donde se ha modificado la anchura W_C del canal. La corriente muestra una característica rectificadora, en donde el potencial umbral depende del valor de W_C . Cuanto más estrecho sea el canal más difícil es abrir el mismo, y por tanto mayor es el potencial necesario para vencer el vaciamiento lateral y que el canal conduzca.

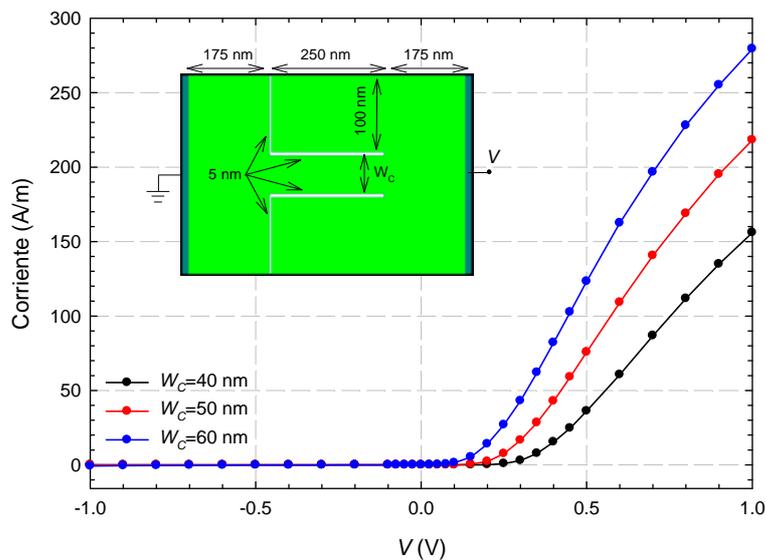


Figura IV.3. Características $I-V$ del dispositivo con la geometría y dimensiones mostradas en el *inset* para diferentes valores de la anchura del canal $W_C=40$, 50 y 60 nm.

La explicación de este comportamiento se basa en la apertura o cierre del canal como consecuencia de la carga superficial presente en las discontinuidades laterales.

Utilizaremos la Figura IV.4 para describirlo de manera más visual. En equilibrio, el canal se puede encontrar casi completamente cerrado debido al vaciamiento forzado por la carga negativa de los estados de superficie, Figura IV.4(a). El nivel de vaciamiento estará marcado por la relación entre la anchura del canal y la cantidad de carga superficial de las interfases. Ahora, al aplicar un potencial V entre los extremos del diodo, debido a la asimetría del canal, no solamente cambiará el perfil a lo largo del mismo sino que la anchura efectiva se verá modulada, aumentando o disminuyendo según el signo de V . Cuando éste sea positivo (siempre desde el lado derecho respecto al izquierdo), el potencial aplicado se propaga a ambos lados del canal nanométrico haciendo que el canal aumente su anchura efectiva de conducción, Figura IV.4(b). El potencial para el que el canal conduce, es decir, el potencial umbral, depende de lo vaciado que éste se encuentre en equilibrio y de la anchura de las zanjas horizontales. Por el contrario, cuando V es negativo, éste reduce de manera significativa la anchura efectiva del canal, haciendo que el vaciamiento aumente aún más, Figura IV.4(c).

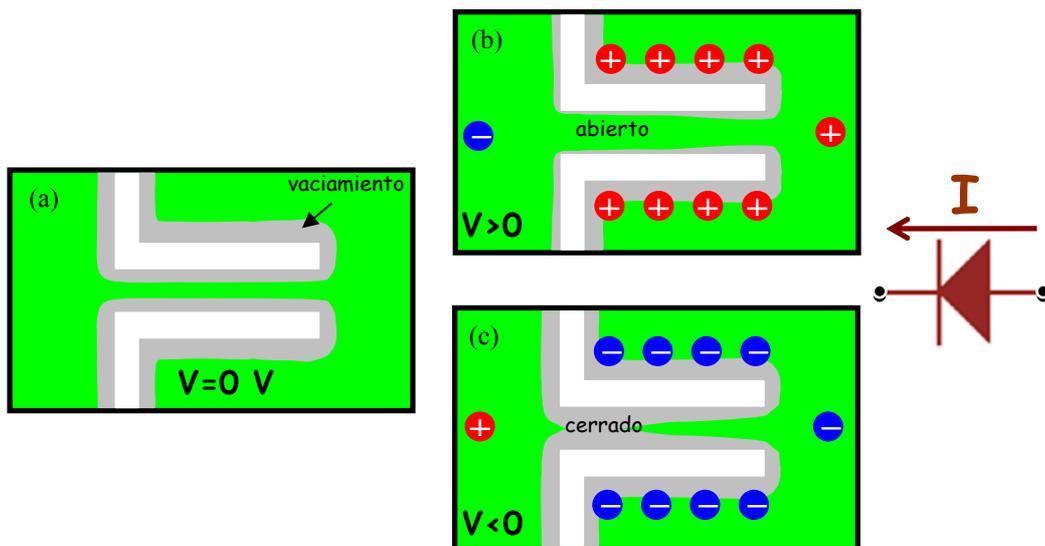


Figura IV.4. Representación del papel de la carga superficial en el funcionamiento de un SSD cuya corriente es debida a electrones. (a) Equilibrio, (b) $V>0$ canal abierto y (c) $V<0$, canal cerrado.

Vemos pues que este sencillo dispositivo se comporta como un diodo rectificador tradicional, permitiendo el paso de corriente sólo para $V>0$. Resulta interesante recalcar en estos momentos la importancia de estar trabajando con un dispositivo de dimensiones submilimétricas, ya que si no lo fuesen su funcionamiento sería totalmente diferente. En efecto, si la anchura del canal fuera de tamaño mayor (μm), los efectos superficiales serían irrelevantes (la relación

superficie/volumen es muy pequeña), de manera que el dispositivo perdería el poder rectificador, comportándose como una simple resistencia.

IV.1.1.b. Mapas de potencial. Barreras

Por medio de las magnitudes microscópicas proporcionadas por la simulación Monte Carlo podemos dar una explicación más detallada de este comportamiento. La Figura IV.5(a) muestra un mapa 2D del potencial eléctrico dentro de un SSD con $W_C=50$ nm para potenciales aplicados de $V=-0.5$, 0.0 y +0.5 V.

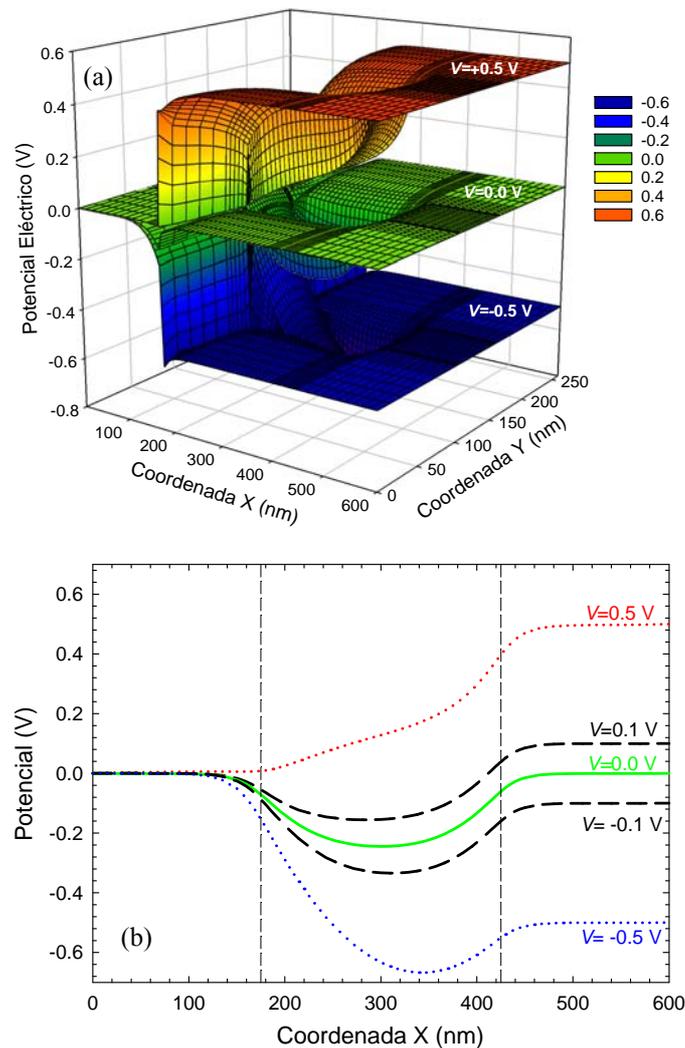


Figura IV.5. (a) Mapa 2D del potencial eléctrico de un SSD como el mostrado en el *inset* de la Figura IV.3 con $W_C=50$ nm para $V=-0.5$, 0.0 y +0.5 V. (b) Perfiles unidimensionales del potencial eléctrico a lo largo del centro del canal semiconductor para diferentes potenciales aplicados.

Podemos observar que el potencial aplicado en el ánodo (contacto derecho) se propaga a las proximidades del canal, mientras que en la región del cátodo (a la izquierda de las zanjas) el potencial es siempre cero. El canal se encuentra cerrado

para $V=0.0$ V debido al vaciamiento inducido por las cargas superficiales de las paredes laterales, que dan lugar a una barrera de potencial en la dirección longitudinal. Dicha barrera corresponde al valor mínimo del perfil unidimensional del potencial eléctrico a lo largo del centro del canal semiconductor representado para diferentes potenciales aplicados en la Figura IV.5(b).

Para $V>0$, el potencial positivo alcanza las regiones laterales del canal del SSD, de manera que la barrera de potencial que ven los electrones que fluyen de izquierda a derecha disminuye (cátodo a ánodo) o incluso desaparece, como se observa para $V=+0.5$ V. Los electrones que superan la barrera contribuyen a la corriente, de manera que a medida que la barrera disminuye el canal se abre, dando lugar a una dependencia exponencial de la corriente con el potencial aplicado (mientras exista la barrera). Por el contrario, cuando $V<0$, la forma del potencial en la parte derecha del dispositivo apenas cambia con respecto a la situación de equilibrio (simplemente se desplaza hacia valores menores), de modo que el canal se mantiene cerrado.

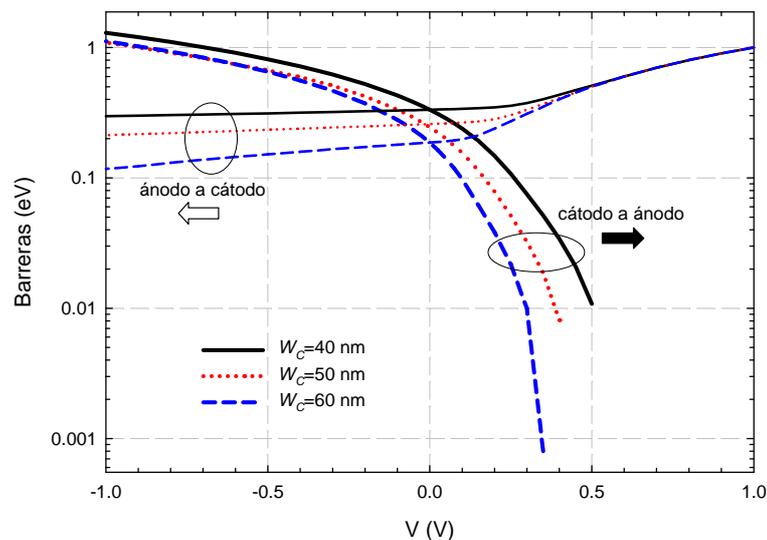


Figura IV.6. Barreras de potencial que “ven” los electrones en su movimiento de ánodo a cátodo y viceversa para las diferentes anchuras $W_C=40$, 50 y 60 nm.

Para visualizar esta evolución de manera más clara, en la Figura IV.6 se han representado en escala logarítmica las barreras de potencial en las dos direcciones de movimiento para diferentes anchuras del canal $W_C=40$, 50 y 60 nm. En inversa (potenciales aplicados negativos), la barrera en el potencial eléctrico es suficiente para no permitir el paso de los electrones en ninguna de las dos direcciones, mientras que en directa (potenciales aplicados positivos) llega un momento en que la barrera

desaparece para los electrones que van de cátodo a ánodo (izquierda a derecha), de manera que la corriente empieza a ser significativa. Esto sucede (Figura IV.3) cuando la barrera de potencial de cátodo a ánodo es menor que aproximadamente $4K_B T = 0.1$ V. En el caso de $W_C = 50$ nm ocurre para un valor de 0.2 V del potencial aplicado, mientras que para 40 y 60 nm ocurre para 0.1 y 0.3 V respectivamente. Por otra parte, también podemos observar que la altura de la barrera en el caso de equilibrio es mayor cuando se hace el canal más estrecho (Figura IV.7), de manera que el potencial umbral necesario para abrir el canal y que éste empiece a conducir es mayor. Esto justifica el comportamiento que vimos en las características $I-V$ de la Figura IV.3.

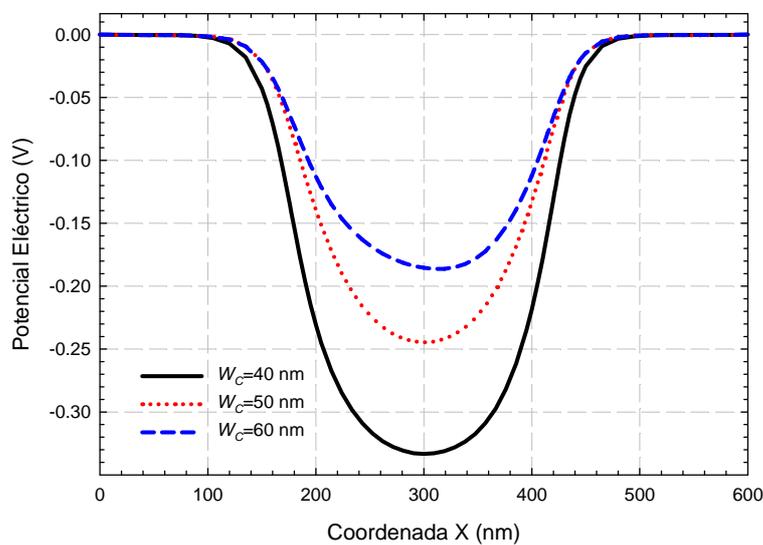


Figura IV.7. Perfil del potencial eléctrico a lo largo del canal en condiciones de equilibrio para diferentes anchuras del canal $W_C = 40, 50$ y 60 nm.

Consecuentemente, el principio de operación de este dispositivo es similar al de un transistor de efecto de campo de realce (cerrado en equilibrio), en el cual las puertas laterales (en este caso cortocircuitadas con el drenador) controlan el flujo de corriente a través del canal.^{150–151}

IV.1.2. Indicaciones de diseño

En esta sección vamos a mostrar cómo mediante las simulaciones se pueden optimizar las características $I-V$ de los diodos SSD. Para ello modificaremos diferentes parámetros de la geometría de los diodos: anchura del canal W_C , longitud del canal L_C , anchura de las zanjas vertical y horizontal W_v y W_h , y permitividades dieléctricas del material de las zanjas aislantes verticales y horizontales ϵ_v y ϵ_h

(Figura IV.8). El SSD que tomaremos como referencia y sobre el que iremos haciendo modificaciones, aumentando o disminuyendo cada uno de los parámetros de su geometría (manteniendo el resto constantes), será el que tiene las características siguientes $W_C=50$ nm, $L_C=250$ nm, $W_v=W_h=5$ nm; y $\varepsilon_v=\varepsilon_h=1$. La longitud de los accesos es de $L_{acc}=175$ nm.

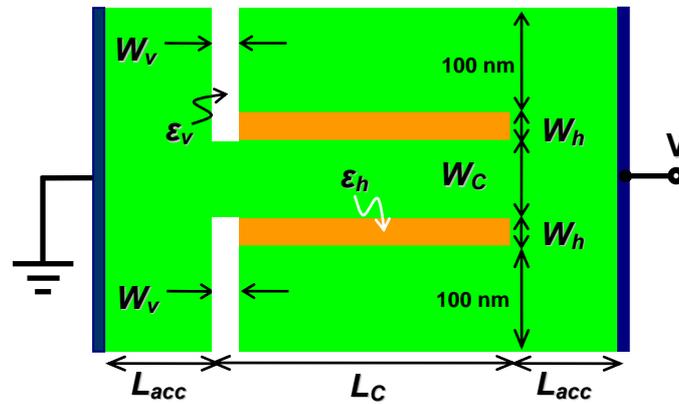


Figura IV.8. Geometría del SSD analizado. W_C anchura del canal, L_C longitud del canal, W_v y W_h anchura de las zanjais vertical y horizontal, respectivamente, y L_{acc} longitud de los accesos al canal. ε_v y ε_h son las permitividades dieléctricas relativas del material de las zanjais aislantes verticales y horizontales, respectivamente. $W_C=50$ nm y $L_{acc}=175$ nm para el estudio realizado en esta sección.

Comenzamos estudiando la influencia de la longitud del canal L_C en las características $I-V$. Así, en la Figura IV.9 hemos representado los resultados para L_C desde 100 nm a 1 μm en un SSD de $W_C=50$ nm. La anchura de las zanjais es de 5 nm, cercana al límite de la tecnología actual, pero que proporciona un mejor control de la corriente, ya que el potencial aplicado en el contacto derecho influye con más intensidad sobre la ocupación del canal (veremos esto con más detalle a continuación). Podemos observar que aparecen efectos de canal corto (comparables a los que aparecen en transistores de efecto de campo tradicionales) cuando la relación L_C/W_C disminuye. En este caso, bajo condiciones de polarización inversa, el potencial de las regiones laterales no es capaz de vaciar el canal, de forma que la barrera que impide el paso de portadores desaparece, permitiendo el flujo de una corriente de pérdidas significativa, pero sólo para canales muy cortos ($L_C=100$ nm). Esta situación sería más pronunciada en el caso de canales anchos o con zanjais más gruesas. La tendencia a la saturación en la corriente para potenciales aplicados altos está asociada a efectos de portadores calientes.

La reducción del tiempo de tránsito debida no sólo a la reducción de la longitud del canal, sino también a las grandes velocidades alcanzadas gracias a que el transporte empieza a ser claramente balístico (el mayor cambio se observa al pasar de 200 a 100 nm), permitirá una gran mejora en las prestaciones de estos SSDs para aplicaciones en alta frecuencia.

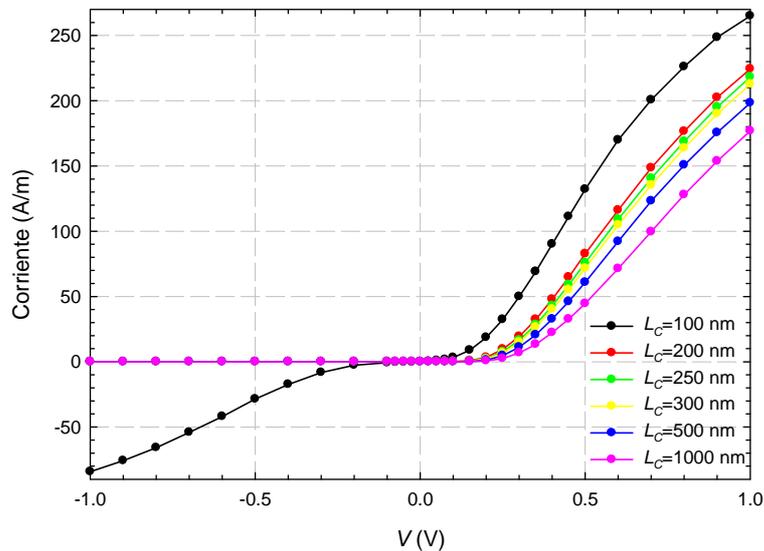


Figura IV.9. Curvas $I-V$ para el SSD de la Figura IV.8 ($W_c=50$ nm, 5 nm de anchura de zanjas, $\epsilon_v=\epsilon_h=1$) con diferentes longitudes del canal $L_c=100, 200, 250, 300, 500$ y 1000 nm.

La influencia de la anchura de las zanjas, tanto horizontales como verticales, se ilustra en la Figura IV.10. Las simulaciones de las características estáticas $I-V$ muestran cómo el potencial umbral de conducción del dispositivo está claramente influenciado por la zanja horizontal, mientras que el efecto de la vertical es insignificante. Es debido a que el funcionamiento del diodo autoconmutante está basado en el acoplamiento transversal del campo eléctrico a través de las zanjas horizontales, es decir, a la mayor o menor influencia del potencial aplicado sobre el nanocanal semiconductor. El potencial umbral de conducción sufre un desplazamiento hacia valores mayores cuando las zanjas horizontales son anchas, ya que el control que ejercemos sobre el canal es menor por lo que será necesario aplicar un valor de potencial más alto para conseguir abrirlo. La modificación de la anchura de las zanjas verticales apenas influye en el valor de la corriente salvo cuando éstas son muy grandes. Como estamos manteniendo fija la longitud del canal en 250 nm, en el caso de $W_v=50$ nm la actuación del potencial aplicado se ve reducida a una longitud considerablemente menor, por lo que el control sobre los portadores del canal disminuye significativamente.

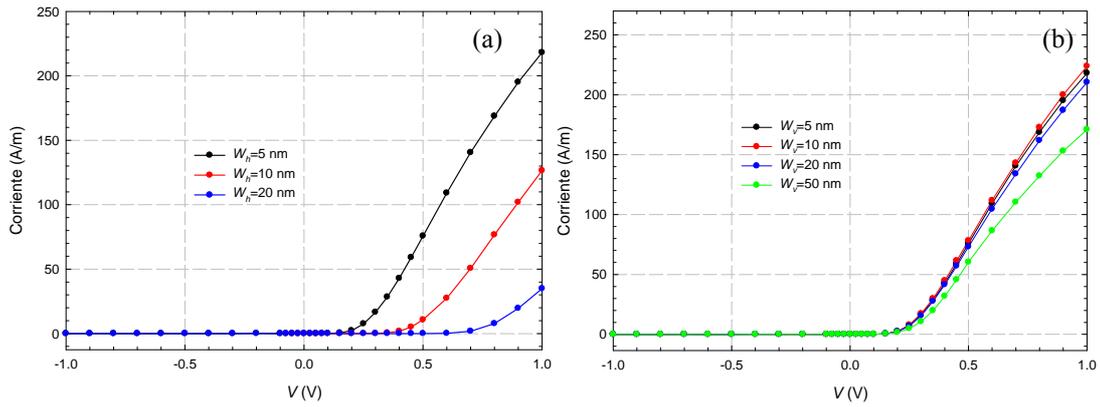


Figura IV.10. Curvas $I-V$ para el SSD de la Figura IV.8 ($W_C=50$ nm, $L_C=250$ nm, $\varepsilon_v=\varepsilon_h=1$) con diferentes anchura de las zanjas (a) horizontales $W_h=5$, 10, 20 nm y (b) verticales $W_v=5$, 10, 20 y 50 nm.

Por último podemos estudiar la influencia de la permitividad, es decir, del material dieléctrico con el que se podrían rellenar las zanjas aislantes, tanto horizontales como verticales (Figura IV.11). De nuevo observamos que son las propiedades de la zanja horizontal, la permitividad en este caso, las que más influyen en los valores y el umbral de la característica $I-V$.

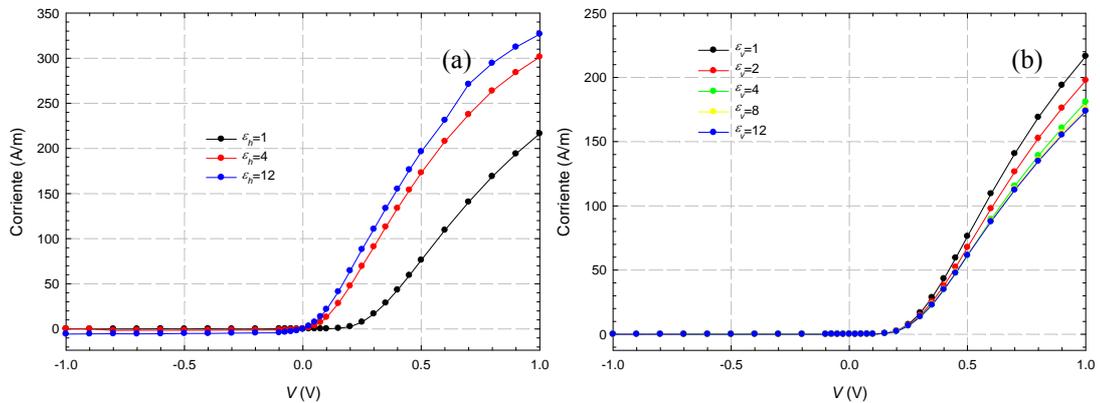


Figura IV.11. Curvas $I-V$ para el SSD de la Figura IV.8 ($W_C=50$ nm, $L_C=250$ nm, 5 nm de anchura de zanjas) con diferentes permitividades relativas de (a) la zanja horizontal $\varepsilon_h=1$, 4 y 12 y (b) la zanja vertical $\varepsilon_v=1$, 2, 4, 8 y 12.

Al aumentar la permitividad relativa de la zanja horizontal hasta un valor de 12 observamos un incremento apreciable de los valores de corriente, así como un menor potencial umbral. Nótese que en este caso se tiene una pequeña corriente de pérdidas para la región de polarización inversa al ser difícil mantener el nivel de vaciamiento, ya que la capacidad de la zanja horizontal es muy elevada. Como ocurría anteriormente, el cambio en la permitividad de la zanja vertical no modifica en gran medida los valores de la corriente, aunque sí algo más que en la situación precedente.

El umbral de conducción es el mismo para todos los casos, Figura IV.11(b), y se observa un efecto de saturación en la influencia de ϵ_r sobre la curva $I-V$ a partir de un valor de 4 para la permitividad relativa.

Desde el punto de vista de las aplicaciones hay que señalar que el uso de materiales de alta permitividad para rellenar la zanja horizontal o el hacer ésta lo más estrecha posible proporciona un aumento significativo de la corriente. Este efecto puede utilizarse para obtener valores mayores en la corriente rectificadora generada al aplicar un potencial de alterna al diodo. Por otra parte, es interesante que las características $I-V$ presenten la mayor no linealidad posible (y en el máximo rango de potenciales aplicados), aspecto que unido al transporte balístico proporciona la posibilidad de generación de armónicos a muy alta frecuencia.

IV.2. COMPORTAMIENTO DINÁMICO

La propiedad más atractiva que posee este dispositivo es su capacidad de operar a frecuencias del orden de THz. A pesar de ser un área de gran interés científico, el rango de frecuencias de los terahertzios del espectro electromagnético (entre las microondas tradicionales y las radiaciones ópticas) continúa siendo una de las regiones menos desarrolladas. Dado que sus posibilidades son enormes, desde espectroscopía, radioastronomía hasta multitud de aplicaciones médicas y biológicas, en esta sección analizamos la respuesta dinámica de los SSDs como candidato a operar en este rango de frecuencia. Una de las grandes ventajas de nuestro simulador Monte Carlo es que permite hacer un análisis preciso del comportamiento dinámico de los dispositivos.

IV.2.1. Respuesta en frecuencia del SSD. Máximo en la rectificación

El SSD que tomaremos como referencia para todos los cálculos es el mismo que en el apartado anterior, que tiene los tamaños siguientes $W_C=50$ nm, $L_C=250$ nm, $W_v=W_h=5$ nm, y $\epsilon_v=\epsilon_h=1$. Comenzaremos presentando los resultados de la respuesta en frecuencia modificando la longitud del canal.⁷⁴⁻⁷⁶ En la Figura IV.12 se muestra la dependencia temporal de la corriente en SSDs de $L_C=100$, 250 nm y 1 μ m cuando se aplica un potencial armónico al terminal derecho (el izquierdo se conecta a tierra) $V(t)=V_0\text{sen}(2\pi ft)$ de amplitud $V_0=0.5$ V y frecuencias 0.1, 0.5 y 1 THz. Se observa que para 100 GHz tenemos una excelente rectificación (cercana a la del régimen estático). La estructura más corta proporciona un nivel mayor de corriente en polarización directa y una pequeña conducción en inversa, como era de esperar a la vista de sus características estáticas. Se puede afirmar que los valores de corriente están en fase con el potencial aplicado, entendiendo por ello que el máximo de corriente coincide en el tiempo con el máximo de la polarización. Conviene señalar aquí que para realizar este tipo de cálculos hemos utilizado el perfil de carga superficial obtenido en condiciones de equilibrio, ya que ésta es la situación sobre la que aplicamos la señal variable en el tiempo. Consideramos pues que las cargas superficiales no son capaces de responder a frecuencias tan elevadas como algunos GHz y por ello utilizamos de nuevo un perfil de cargas superficiales “congelado”. A medida que se incrementa la frecuencia de la señal, se va modificando la forma de

onda de la corriente, apareciendo un desfase respecto al potencial aplicado, pero manteniendo un valor medio positivo (excepto para la longitud de $1 \mu\text{m}$).

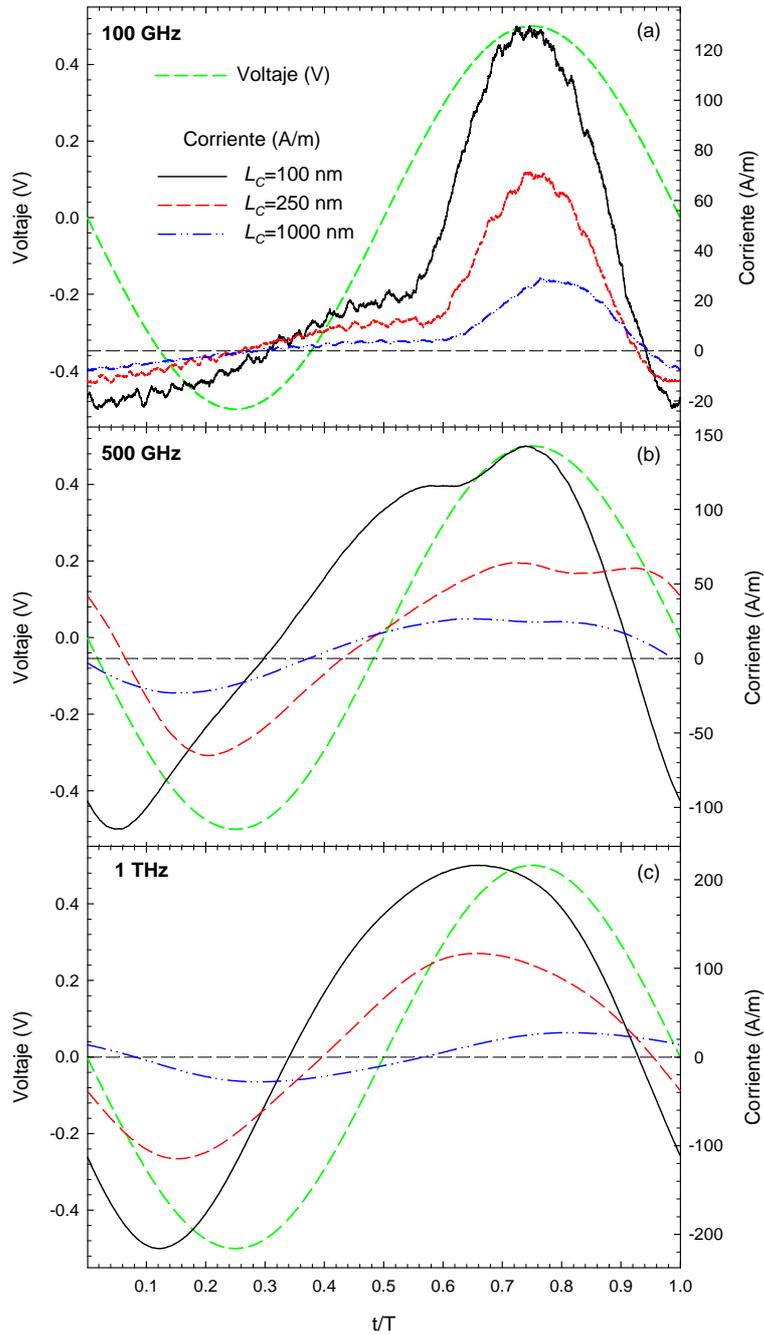


Figura IV.12. Respuesta en corriente de un SSD con longitudes de canal $L_C=100$, 250 y 1000 nm frente a una señal sinusoidal de amplitud $V_0=0.5$ V aplicada al terminal derecho (izquierdo a tierra) y frecuencias (a) 100 GHz, (b) 0.5 THz y (c) 1 THz. $W_C=50$ nm, $W_v=W_h=5$ nm, y $\epsilon_v=\epsilon_h=1$.

Partiendo de estos resultados, y para analizar el comportamiento rectificador de los SSDs, se han realizado una serie de simulaciones en las que prestamos atención al valor medio de la corriente en función de la frecuencia del potencial periódico aplicado (Figura IV.13). La corriente media presenta un ligero aumento que aparece

justo antes de las frecuencia para la que decrece y se hace cero (no hay rectificación). Tanto la frecuencia a la que se produce ese aumento de la corriente como la del paso por cero dependen de la longitud del canal y son menores para los más largos. Para $L_C=100$ nm, en la respuesta temporal, Figura IV.12(b), se puede apreciar un segundo máximo en la corriente cuando el potencial aplicado pasa de valor negativo a positivo debido a que los efectos no estacionarios son más importantes. Esto produce un incremento en la respuesta dc para señales de entrada de frecuencias cercanas a los THz. El fenómeno físico que lo explica está relacionado con la dependencia temporal de la concentración de electrones en las zonas adyacentes al canal. Más adelante iremos describiendo con detalle este fenómeno.

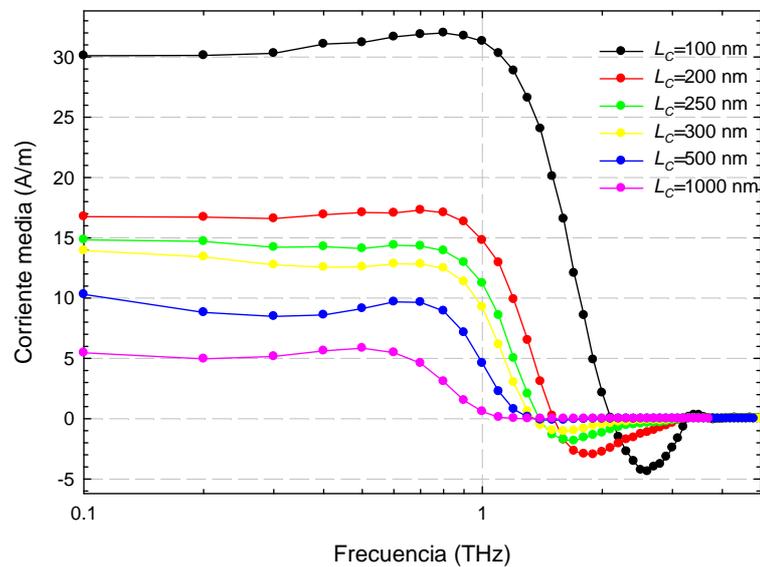


Figura IV.13. Valor medio de la corriente frente a la frecuencia de una señal periódica de amplitud $V_0=0.5$ V aplicada a SSDs como los de la Figura IV.8 modificando la longitud del canal semiconductor $L_C=100, 200, 250, 300, 500$ y 1000 nm. $W_C=50$ nm, $W_v=W_h=5$ nm; y $\epsilon_v=\epsilon_h=1$.

Para los diodos más cortos, la amplitud de la corriente dc a baja frecuencia es significativamente mayor, en claro acuerdo con la respuesta estática de la Figura IV.9. La estructura con $L_C=100$ nm responde correctamente hasta frecuencias superiores a 1 THz, de manera que se puede concluir que, al menos intrínsecamente, estos dispositivos son potenciales candidatos para el diseño de detectores de potencia a frecuencias de THz. La mejora de la respuesta en frecuencia para L_C pequeñas tiene sin embargo el problema asociado a las resistencias y capacidades extrínsecas, que pueden condicionar considerablemente dichas aplicaciones a muy alta frecuencia. Se deben realizar esfuerzos a nivel tecnológico y de diseño para minimizar estos efectos. Por último, subrayamos la aparición de valores negativos⁷⁴⁻⁷⁶ (signo contrario a lo

que se esperaría de la respuesta estática) para frecuencias mayores que la de corte. Cabe destacar que este fenómeno no aparece para canales mayores de 300 nm, en los cuales el transporte comienza a perder su carácter balístico.

Hemos comprobado también la posibilidad de generación de armónicos con los SSDs aprovechando su respuesta no lineal. Para ello simplemente se ha de calcular la transformada de Fourier de la respuesta temporal de la corriente al excitar el diodo con una señal sinusoidal.⁵⁴ Se ha encontrado que los primeros cuatro armónicos ($m=1-4$) tienen una amplitud de corriente $|I_m|$ apreciable para frecuencias desde 100 GHz hasta 1 THz.

IV.2.2. Anchura de la zanja vertical

Como vamos a explicar a continuación, la aparición del máximo en el valor la corriente rectificadora media, así como la dependencia de su frecuencia y amplitud con la geometría, no puede entenderse a partir de las características estáticas $I-V$. La comprensión de los mecanismos físicos que la originan, junto a la posibilidad de modificar las propiedades que dan lugar a esta respuesta en frecuencia, serán puntos clave en el diseño del dispositivo, ya que éste es sumamente interesante desde el punto de vista de las aplicaciones. Como adelantábamos en la introducción, el objetivo final es disponer de un detector de estado sólido que pueda funcionar a frecuencias de THz proporcionando una señal de salida elevada e incluso un alto grado de selectividad en frecuencia.

Para comprender el origen del comportamiento observado, recientemente el grupo de A. M. Song ha propuesto un modelo basado en la carga y descarga de la región cercana a las zanjas verticales.¹⁵² Hemos realizado un análisis similar en los diodos con la geometría estudiada hasta ahora. En la Figura IV.14 representamos los perfiles del potencial eléctrico a lo largo del centro del canal para dos diodos, uno el de referencia con $W_v=5$ nm, y otro con $W_v=50$ nm. Las polarizaciones elegidas corresponden a la situación en la que la barrera que impide el flujo de electrones está a punto de desaparecer (amplitud de la barrera $< 4K_B T=0.1$ V). Recuérdese que el potencial umbral para estos SSDs es aproximadamente de 0.2 V como vimos en la Figura IV.10(b). Se puede apreciar cómo el mínimo del potencial, que es el que da lugar a la barrera, se sitúa cada vez más próximo al punto del canal donde finaliza la zanja vertical (ver *inset*). Esto se aprecia de forma más clara para la anchura de la

zanja vertical mayor y cuando el potencial aplicado es próximo al umbral de conducción.

Así, las zonas claves en la rectificación de los diodos serán las regiones adyacentes al canal próximas a la zanja vertical. Al excitar el SSD, las fronteras de las zanjas tendrán potenciales positivos o negativos, provocando por efecto electrostático la apertura o cierre del nanocanal.

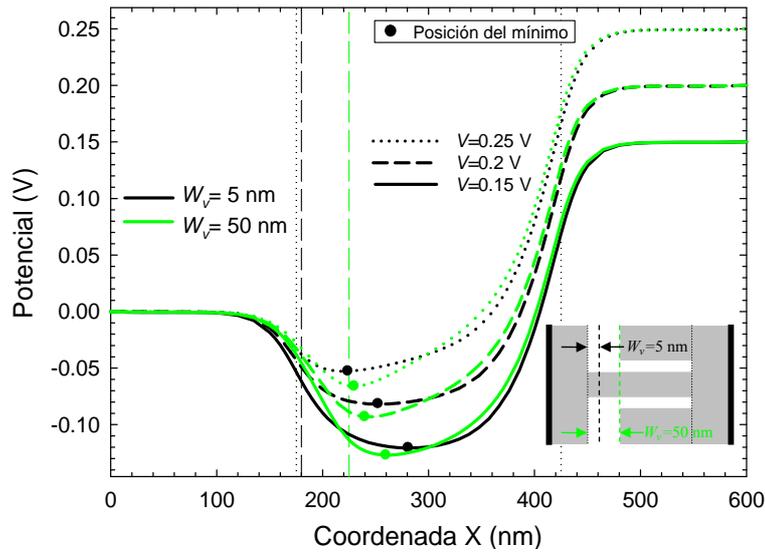


Figura IV.14. Perfiles unidimensionales del potencial eléctrico a lo largo del centro del canal semiconductor para diferentes potenciales aplicados en el diodo de referencia, $W_v=5$ nm, y en otro con $W_v=50$ nm. $W_c=50$ nm, $W_h=5$ nm, $L_c=250$ nm, y $\epsilon_v=\epsilon_h=1$. Las líneas verticales a puntos delimitan el canal, mientras que las de trazos marcan la posición donde termina físicamente la zanja vertical, como se esquematiza en el *inset*.

Para mostrar que la respuesta en frecuencia del diodo está controlada de manera determinante por lo que ocurre cerca de las zanjas verticales, en la Figura IV.15 hemos representado la corriente media dc obtenida en diodos con diferente anchura de la zanja vertical al aplicar una señal periódica de amplitud $V_0=0.25$ V. El máximo que presenta la corriente media es mucho más significativo que cuando la amplitud de excitación era de $V_0=0.5$ V. Cabría esperar una respuesta en frecuencia similar para todas las W_v , ya que la longitud del canal es la misma (así como el tiempo de tránsito de los electrones), sin embargo, observamos una clara dependencia con la anchura de la zanja vertical, destacando que el máximo de rectificación se desplaza hacia frecuencias mayores a medida que la zanja vertical es más ancha. La frecuencia de paso por cero de la corriente rectificadora media también es mayor para los diodos con zanjas verticales más anchas. Por último observamos

que, como anteriormente, aparecen valores negativos a frecuencias superiores a la de corte. Después de tomar valores negativos, la respuesta vuelve a ser cero aproximadamente para la misma frecuencia en los cuatro diodos. Esta frecuencia sí parece marcada por la longitud del canal (limitada por el tiempo de tránsito); nótese que en los diodos con diferente L_C (Figura IV.13) tal frecuencia cambiaba.

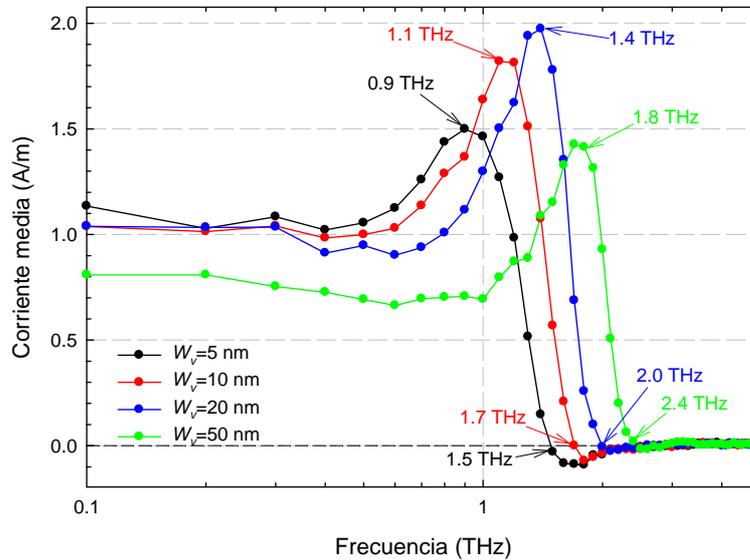


Figura IV.15. Valor medio de la corriente frente a la frecuencia de una señal periódica de amplitud $V_0=0.25$ V aplicada a SSDs como los de la Figura IV.8 modificando la anchura de la zanja vertical $W_v=5, 10, 20$ y 50 nm. Para cada diodo se indican las frecuencias a las que aparece el máximo de la respuesta dc y el paso por cero de la corriente media. La longitud del canal es en todos los casos $L_C=250$ nm.

Para interpretar estos resultados y estudiar el fenómeno, analizamos microscópicamente la variación del número de electrones en una zona de 50 nm a la derecha de la zanja vertical (ver Figura IV.16). Para poder comparar las diferentes estructuras definimos un parámetro que, con respecto a las condiciones estáticas de equilibrio, nos dé cuenta de la cantidad de carga total de esa región (normalizado al dopaje de fondo virtual)

$$\Delta = \frac{N_{db} - n(f)}{N_{db} - n(0)} \quad (\text{IV.1})$$

donde el valor de N_{db} representa el dopaje de fondo de la zona próxima a la zanja, $n(f)$ la concentración de electrones en dicha zona para una frecuencia f de la señal alterna aplicada de amplitud $V_0=0.25$ V y $n(0)$ la concentración de electrones en condiciones estáticas de equilibrio ($V=0$ V). Con esta definición, cuando $\Delta=1$

significa que el número de electrones en ese instante de tiempo es igual al que hay en condiciones estáticas de equilibrio [$n(f)=n(0)$]. $\Delta > 1$ nos indica que existe un exceso de carga positiva (que tiende a abrir el canal) y $\Delta < 1$ un defecto de carga positiva (que

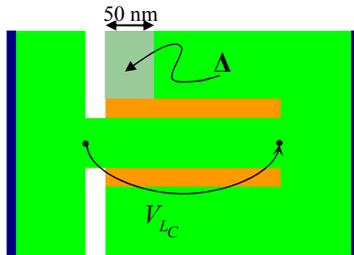


Figura IV.16. Zona del diodo donde se calcula Δ . Potencial entre extremos del canal, V_{Lc} .

tiende a cerrar el canal), respecto a las condiciones de equilibrio. Este parámetro tomaría el valor $\Delta=0$ para la situación en la que el número de electrones compense exactamente el dopaje de fondo $n(f)=N_{db}$, y $\Delta=N_{db}/[N_{db}-n(0)]$ cuando no haya electrones en la zona próxima a la zanja vertical $n(f)=0$.

Dado que es la carga de la zona próxima a la zanja vertical la que controla la conducción del nanocanal, debemos analizar la dependencia temporal tanto de la magnitud representativa de las variaciones de carga Δ , como del potencial que cae entre extremos del nanocanal, V_{Lc} , pues de ambos dependerá el nivel de corriente que se pueda alcanzar. Dichas magnitudes aparecen representadas en la Figura IV.17 para el diodo de referencia con $W_v=5$ nm. Mostramos los resultados para las frecuencias más significativas a la vista de la respuesta de la Figura IV.15. Para 100 GHz estamos en el *plateau* de baja frecuencia, en 1 THz aparece el máximo en la rectificación de la corriente, en 1.5 THz la rectificación es nula (paso por cero) y 2.1 THz corresponde al valor de frecuencia a partir del cual el dispositivo ya no responde y se mantiene en cero la corriente media. Podemos observar que la dependencia temporal tanto de V_{Lc} como de Δ responde a funciones armónicas con un desfase respecto al potencial aplicado, $\delta\phi$ /que depende de la frecuencia de excitación. La amplitud de ambas magnitudes también es función de la frecuencia, y además es asimétrica, como corresponde a la geometría del diodo.

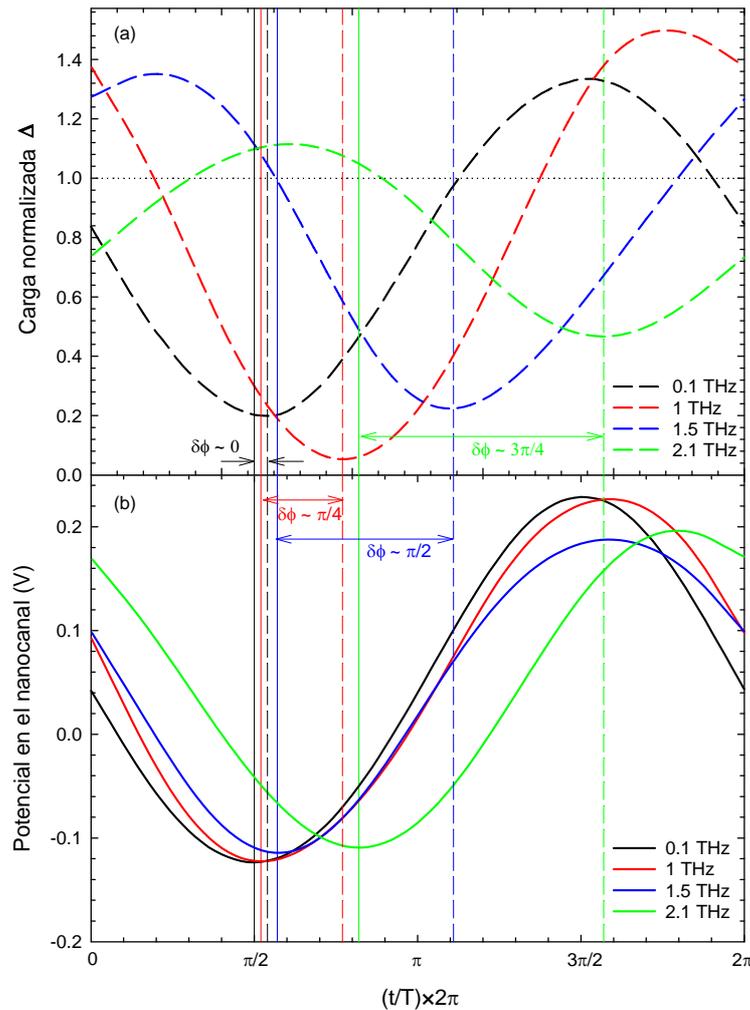


Figura IV.17. Dependencia temporal (a) del efecto de carga y descarga, Δ , de la zona del lado derecho de la zanja vertical y (b) del potencial que cae entre extremos del nanocanal V_{Lc} al aplicar una señal periódica de diferentes frecuencias (0.1, 1, 1.5 y 2 THz) y amplitud $V_0=0.25$ V al terminal derecho del SSD de referencia ($W_v=5$ nm, $L_c=250$ nm). La línea horizontal punteada indica el valor de $\Delta=1$. Las líneas verticales marcan las posiciones de los mínimos de Δ (trazos) y de V_{Lc} (continua).

Vemos que a medida que aumentamos la frecuencia del potencial aplicado, crece el desfase $\delta\phi$ entre V_{Lc} y Δ . Así, para 100 GHz la carga en la zona estudiada (es decir el valor de Δ) y el potencial en el nanocanal están prácticamente en fase con la señal aplicada, de manera que sólo en el semiperiodo positivo del potencial aplicado el diodo conducirá (y viceversa, el diodo está en corte cuando el potencial aplicado sea negativo). Un desfase entre V_{Lc} y Δ significará una reducción en el valor de la rectificación de corriente. Sin embargo, para 1 THz, donde el desfase es ya de $\delta\phi = \pi/4$, hemos observado (Figura IV.15) que aparece un aumento significativo de la corriente dc. Se debe a que a esta frecuencia el máximo que alcanza Δ es mayor (y el mínimo es menor) que para la situación de 100 GHz. Esto significa que la

evolución de la carga (y de la descarga) de la zona que estudiamos es más pronunciada a 1 THz. Luego concluimos que el efecto de la sobre-carga/sobre-descarga de la zona próxima a la zanja vertical juega un papel clave en el valor de la corriente rectificadora dc. Para un desfase de $\delta\phi = \pi/2$, el canal sólo permanecerá abierto ($\Delta > 1$) durante el 4º y 1º cuartos del periodo (aproximadamente desde $3\pi/2$ hasta $\pi/2$ en la Figura IV.17) de oscilación de la caída de potencial en el nanocanal. Y como el signo de V_{Lc} durante ese intervalo de tiempo es mitad positivo y mitad negativo, la corriente rectificadora debe ser nula. En nuestro caso esto ocurre para 1.5 THz, lo cual concuerda perfectamente con el valor de la Figura IV.15. Para frecuencias mayores, el desfase va aumentando de forma que crece el intervalo de tiempo en el que V_{Lc} toma valor negativo siendo $\Delta > 1$. Esto significa que la corriente dc será negativa y explica los valores que aparecen en la Figura IV.15. Por ejemplo para 2.1 THz el desfase vale $3\pi/4$, sin embargo, el efecto de la sobre-carga/sobre-descarga es más débil, es decir el valor del máximo (mínimo) de Δ va disminuyendo (aumentando). Por ello los valores de corriente son menores.

En la Figura IV.18(a) representamos el valor del desfase entre V_{Lc} y Δ para SSDs con las mismas anchuras de $W_v = 5, 10, 20$ y 50 nm que los analizados anteriormente (Figura IV.15). En la Figura IV.18(b) aparece la evolución con la frecuencia del valor del máximo y del mínimo de Δ para los cuatro diodos. Los valores de frecuencia para los cuales la corriente dc toma valor nulo en la gráfica de la Figura IV.15 son 1.5, 1.7, 2.0 y 2.4 THz, que, como podemos comprobar, corresponden exactamente a las frecuencias para las que el desfase $\delta\phi$ toma valor $\pi/2$. Por otra parte, también podemos observar que los valores máximo y mínimo de Δ presentan un extremo en las proximidades de las frecuencias donde la rectificación exhibe el máximo (se han dibujado líneas verticales para facilitar su reconocimiento). Además, la amplitud de Δ disminuye claramente después de dicha frecuencia, lo que concuerda con la caída brusca de la rectificación observada en la Figura IV.15.

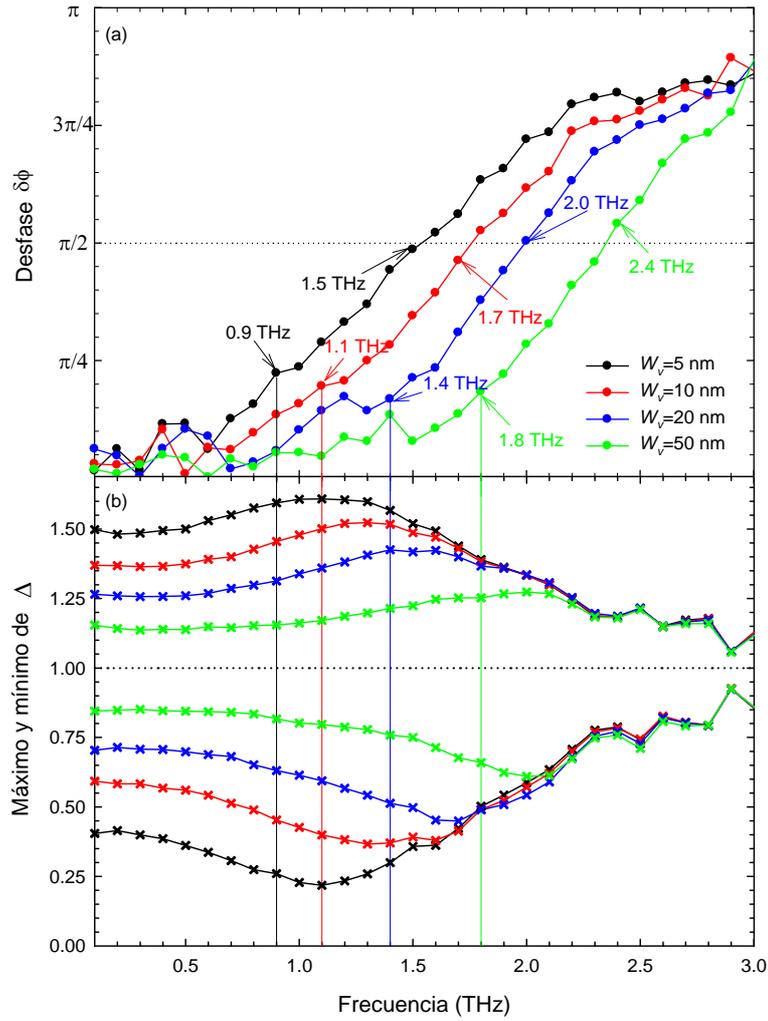


Figura IV.18. Análisis de (a) el desfase $\delta\phi$ entre Δ y V_{Lc} y (b) los valores máximo y mínimo del parámetro Δ en función de la frecuencia para los diodos con anchura de la zanja vertical de $W_v=5, 10, 20$ y 50 nm. La longitud del canal es en todos los casos $L_C=250$ nm. Las líneas verticales marcan la posición del máximo de rectificación para cada diodo. La línea horizontal punteada corresponde al valor $\Delta=1$.

A partir de estos resultados podemos plantear un modelo analítico donde la corriente rectificada dependa tanto del desfase $\delta\phi$ entre V_{Lc} y Δ como de la amplitud de las variaciones de carga representadas por Δ . Proponemos la siguiente expresión (similar a la utilizada en la Ref. 152) para calcular la corriente rectificada a cada frecuencia $I_R(f)$

$$I_R(f) \propto \cos(\delta\phi(f)) \times \{(\Delta_{\max} - \Delta_{\min})(f)\}^2, \quad (\text{IV.2})$$

donde Δ_{\max} y Δ_{\min} son el valor del máximo y mínimo del parámetro Δ . La dependencia con la frecuencia de la amplitud de V_{Lc} no la incorporamos ya que es

bastante reducida. El término $[(\Delta_{\max}-\Delta_{\min})(f)]^\chi$ es el responsable de la modulación de la apertura/cierre del canal, donde el exponente χ se ha ajustado (véase la Figura IV.19) en cada caso para reproducir las amplitudes de los resultados Monte Carlo de la Figura IV.15. Este parámetro se ha incluido para tener en cuenta la no linealidad del control ejercido por la carga de la región estudiada sobre la corriente rectificadora.

Mediante esta expresión quedan claramente explicados varios aspectos de los que hemos hablado hasta el momento. En primer lugar, de acuerdo con la ecuación IV.2, cuando las funciones armónicas V_{Lc} y Δ sean ortogonales ($\delta\phi = \pi/2$), el valor medio de $I_R(f)$ será nulo. Además, como el desfase va creciendo a medida que aumentamos la frecuencia, quedan justificados los valores negativos que aparecían en la Figura IV.15, ya que si $\delta\phi > \pi/2$, $\cos(\delta\phi) < 0$. Por otra parte, los valores negativos son menores que los positivos, ya que la amplitud de Δ es significativamente menor a dichas frecuencias, como se aprecia en la Figura IV.18(b). Por último, se observa una tendencia hacia la saturación en la amplitud de Δ (sólo hemos representado hasta 3 THz ya que los valores siguientes presentan excesivo ruido), de forma que Δ tiende a mantenerse en el valor unidad. Recordemos que $\Delta=1$ significa que el número de electrones es igual que el que hay en condiciones estáticas de equilibrio $n(f)=n(0)$, indicando que la carga de esa zona ya no responde a la frecuencia de excitación, de manera que la corriente rectificadora es nula. Cabe destacar que dicha frecuencia, para la cual Δ no responde a la excitación, depende de L_C (Figura IV.13). Esto se explica por el hecho de que para que Δ pueda seguir al potencial aplicado, los electrones deben llegar desde el contacto derecho a la región cercana a la zanja vertical. Como consecuencia, esa frecuencia estará asociada al tiempo que los electrones tardan en recorrer dicha distancia, del orden de L_C (Figura IV.16). Como resultado final del modelo, en la Figura IV.19 se representan los valores obtenidos mediante la ecuación IV.2 para $I_R(f)$ en cada uno de los diodos, normalizados al valor de 100 GHz. Si se comparan con los de la Figura IV.15 se descubre un ajuste excelente en la región de valores positivos, mientras que la amplitud de la región de valores negativos no se corresponde perfectamente con los resultados Monte Carlo.

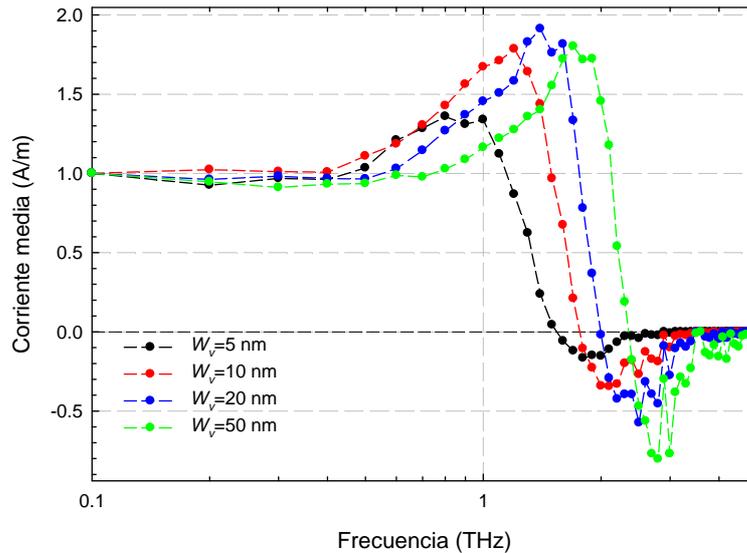


Figura IV.19. Valores de la corriente rectificadora media calculada mediante la ecuación IV.2 para los cuatro diodos estudiados. Los valores del parámetro χ usados en cada caso han sido 3, 2.1, 1.6 y 1.1 respectivamente.

Concluimos que el fenómeno físico que da lugar a este máximo en la rectificación son las oscilaciones de carga que tienen lugar en la zona derecha de la zanja vertical que acopladas por la zanja horizontal, repercuten en la corriente del nanocanal semiconductor. En la siguiente sección analizaremos el ruido en corriente de estos SSDs, en cuyo espectro aparecerá un máximo asociado a este mismo fenómeno.

IV.2.3. Permitividades dieléctricas de las zanjas

En la sección IV.1.2 ilustrábamos la influencia de la permitividad de las zanjas en las características $I-V$. Para completar el análisis de la corriente rectificadora media, en la Figura IV.20 representamos sus valores para los mismos diodos cambiando (a) la permitividad de la zanja horizontal y (b) la de la vertical. En primer lugar, se aprecia que la frecuencia del máximo de corriente solamente es sensible a las modificaciones de la permitividad de la zanja vertical, Figura IV.20(b). Dado que el fenómeno está asociado a las variaciones de carga en las proximidades de la zanja vertical, íntimamente ligadas a la carga y descarga del condensador que representaría dicha zanja, cuando aumentamos W_v el máximo se desplaza hacia frecuencias mayores, mientras que al aumentar ϵ_v el máximo se mueve hacia frecuencias menores. Esto concuerda con la dependencia de dicha capacidad con W_v y ϵ_v ($C_v = \epsilon_v / W_v$). Se observa también una saturación del desplazamiento del máximo a

partir de una permitividad relativa de $\varepsilon_v=4$, para la que su posición se fija a unos 600 GHz. La explicación la daremos en la siguiente sección.

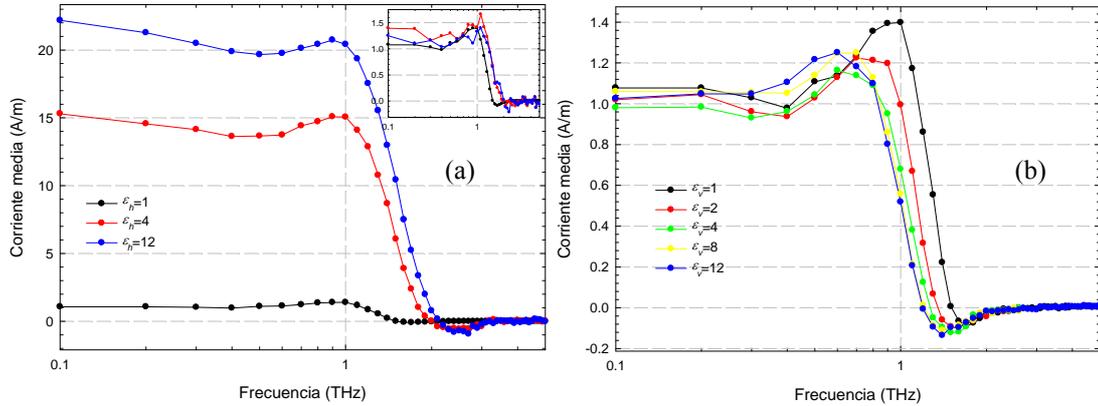


Figura IV.20. Valor medio de la corriente frente a la frecuencia de una señal periódica de amplitud $V_0=0.25$ V aplicada a SSDs como los de la Figura IV.8 ($W_C=50$ nm, $L_C=250$ nm, 5 nm de anchura de zanjas) con diferentes permitividades relativas de (a) la zanja horizontal $\varepsilon_h=1$, 4 y 12 y (b) la vertical $\varepsilon_v=1$, 2, 4, 8 y 12. En el *inset* de (a) aparecen los mismos resultados pero modificando las amplitudes a $V_0=0.075$ V para $\varepsilon_h=4$ y $V_0=0.05$ V para $\varepsilon_h=12$.

En lo relativo a la permitividad de la zanja horizontal ε_h , apenas influye en la posición del máximo de rectificación. La amplitud de la señal aplicada es la misma para los tres, $V_0=0.25$ V, lo que a la vista de las curvas $I-V$, Figura IV.11(a), significa que los valores de la corriente rectificadora media serán muy diferentes, ya que en la respuesta estática el nivel de corriente crece notablemente al aumentar ε_h . Hemos comprobado que si adaptamos la amplitud de la excitación para proporcionar el mismo nivel de corriente en los tres diodos, los resultados en cuanto a la posición en frecuencia del máximo son los mismos, *inset* Figura IV.20(a), y las amplitudes pasan a ser muy similares.

Hemos analizado también el desfase $\delta\phi$ entre V_{Lc} y Δ , así como la amplitud de las variaciones de carga Δ , y hemos calculado la corriente rectificadora media resultante (obtenida mediante la ecuación IV.2) en los SSDs al modificar ε_v . Los resultados se representan en la Figura IV.21. El acuerdo de la corriente dc obtenida con este modelo (*inset* de la Figura IV.21) y los resultados Monte Carlo es de nuevo bastante satisfactorio. Las frecuencias para las que se obtiene un desfase de $\pi/2$ coinciden exactamente con el paso por cero de la corriente media. Además se observa una saturación en la dependencia con ε_v del desfase $\delta\phi$ a partir de una permitividad igual a 4, como ocurría con la posición del máximo en la Figura

IV.20(b). Nótese también que como la longitud del canal es igual para todos los diodos, la frecuencia a la que dejan de responder como rectificadores es la misma.

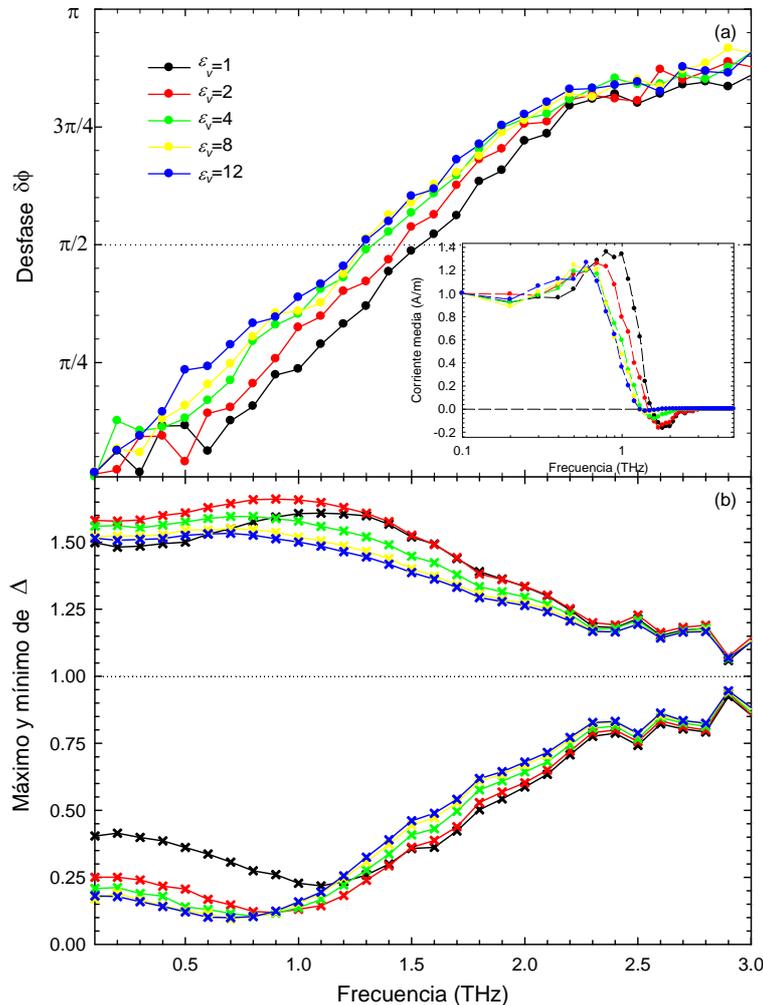


Figura IV.21. Representación de (a) el desfase $\delta\phi$ entre Δ y V_{Lc} y (b) los valores del máximo y mínimo del parámetro Δ en función de la frecuencia para diodos con diferentes permitividades de la zanja vertical $\epsilon_v=1, 2, 4, 8$ y 12 . *Inset*: Corriente rectificadora media calculada mediante la ecuación IV.2. Los valores del parámetro χ usados en cada caso han sido 3, 3.1, 4.3, 7 y 8, respectivamente.

IV.2.4. Anchura de la zanja horizontal

El estudio de la respuesta dinámica lo debemos cerrar, por paralelismo con los resultados de la sección IV.1.2, analizando la influencia de la anchura de la zanja horizontal, W_h (Figura IV.22). En estos cálculos, dado que el potencial umbral depende fuertemente de W_h , Figura IV.10(a), a fin de mantener un nivel de corriente similar para los tres diodos (~ 1.7 A/m), la excitación de 0.1 V se aplica sobre potenciales dc diferentes de valor $V=0.185, 0.4$ y 0.7 V para $W_h=5, 10$ y 20 nm, respectivamente. Al igual que ocurría con la permitividad de esta zanja, la posición

del máximo es prácticamente independiente de su anchura. El valor de corriente es más bajo para las zanjas anchas, ya que el acoplamiento que controla la apertura del canal es menor.

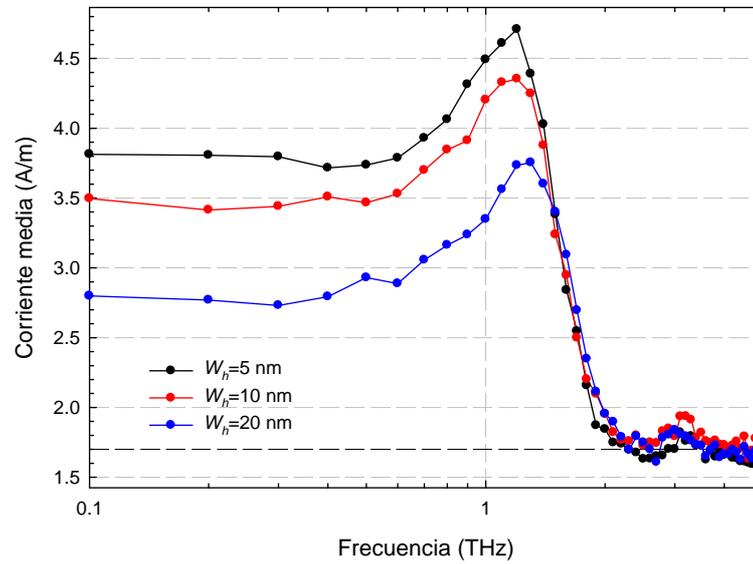


Figura IV.22. Valor medio de la corriente frente a la frecuencia de una señal periódica de amplitud $V_0=0.1$ V aplicada a SSDs como los de la Figura IV.8 ($W_C=50$ nm, $L_C=250$ nm, 5 nm de anchura de zanjas) con diferentes anchuras de la zanja horizontal W_h . La señal periódica se aplica sobre diferentes valores de polarización de $V=0.185$, 0.4 y 0.7 V para $W_h=5$, 10 y 20 nm, respectivamente.

IV.3. ANÁLISIS DEL RUIDO

El ruido, originado por las fluctuaciones aleatorias de la carga eléctrica, es uno de los grandes problemas que se presenta en el diseño de SSDs para aplicaciones de muy alta frecuencia, ya que puede llegar a enmascarar señales débiles a detectar o los armónicos a generar.

En la técnica de simulación Monte Carlo los procesos microscópicos aleatorios que producen el ruido en los dispositivos aparecen de forma natural y sin ninguna suposición acerca de su fuente o sus correlaciones, por lo que se trata de un formalismo muy adecuado para el análisis del ruido electrónico. En esta sección prestaremos especial atención al estudio de la densidad espectral del ruido en corriente $S_I(f)$ de los SSDs. Veremos cómo el ruido *shot* (a bajo potencial aplicado) y el ruido de difusión (en alta polarización) son los dominantes a baja frecuencia (en el *plateau* más allá del ruido $1/f$). La densidad espectral para altas frecuencias muestra dos máximos con orígenes claramente diferenciados que limitan su funcionamiento. Estudiaremos y discutiremos las características del espectro y su dependencia con la topología de los diodos, dando indicaciones para mejorar la relación señal/ruido de estos dispositivos.^{90,91} El objetivo fundamental será reducir al máximo el ruido para que en la región de interés de las aplicaciones (algunos THz) no enmascare la señal.

Los niveles de corriente (sensibilidad) en estos diodos son muy pequeños. Sin embargo, la facilidad de integración por tratarse de una estructura planar permite la fabricación de forma relativamente sencilla de un conjunto de SSDs en paralelo. De este modo se aumenta el nivel de corriente total de la señal de interés. Además, un *array* de N SSDs en paralelo hace que no sólo consigamos reducir la impedancia total (siempre deseable desde el punto de vista de la adaptación de impedancias con los aparatos de medida y las líneas de transmisión estándar) y las constantes de tiempo asociadas a elementos parásitos, sino que también se espera que la relación señal/ruido sea menor que para un solo SSD. En efecto, el ruido en la corriente se incrementa en un factor \sqrt{N} , mientras que el nivel de corriente aumenta en un factor N , de forma que se mejora de la relación señal/ruido en un factor \sqrt{N} .^{51,54}

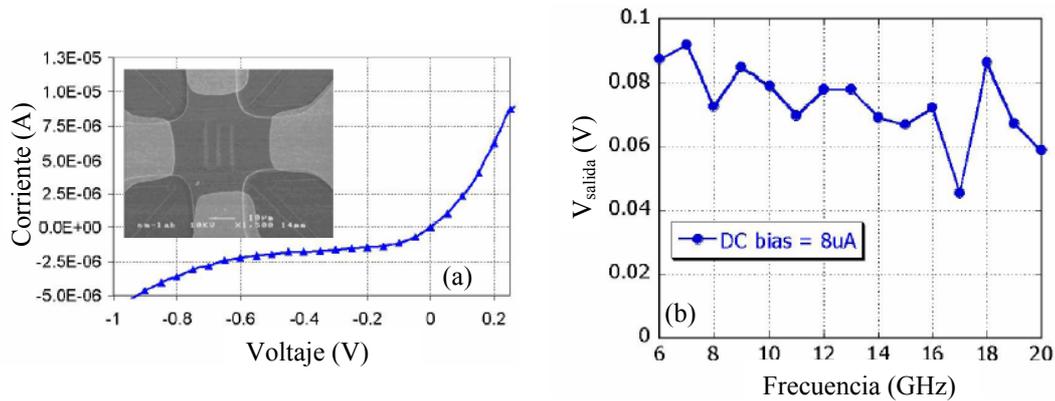


Figura IV.23. (a) Característica de un *array* de 45-SSDs (*inset*) medido a temperatura ambiente y en oscuridad. (b) Sensibilidad microondas del *array*, llegando a 800 mV por mW de potencia de entrada pese a la desadaptación de impedancias. Extraído de la Ref. 51.

Para mostrar la mejora en la sensibilidad al poner varios diodos en paralelo, en la Figura IV.23 mostramos algunos resultados experimentales. La Figura IV.23(a) muestra la curva $I-V$ para un *array* de 45 SSDs en donde el potencial umbral es nulo. Los resultados de la respuesta en frecuencia (una vez compensada la desadaptación)⁵¹ hasta 20 GHz para una potencia de entrada de -10 dBm aparecen en la Figura IV.23(b). La mayor sensibilidad que se obtiene es de 800 mV/mW para 6 GHz polarizando con una corriente dc de $8 \mu\text{A}$. Incluso sin polarización dc se han obtenido 400 mV/mW. Se están realizando estructuras compuestas de 100 diodos en las que, reduciendo las anchuras de las zanjas usando litografía de haz de electrones de alta resolución y grabado seco, se incrementa la no linealidad y la sensibilidad del conjunto. Desde el punto de vista tecnológico el hecho de que en estos dispositivos la salida obedezca una ley cuadrática,⁵⁰ Figura I.14(d), junto a la posibilidad de excitar mediante radiación electromagnética toda la superficie de la estructura, sitúa al SSD como un dispositivo de estado sólido, sensible, compacto, escalable y muy prometedor como detector de THz a temperatura ambiente.

IV.3.1. Análisis microscópico

IV.3.1.a. Barreras de potencial

El SSD que utilizaremos en nuestro estudio, dibujado en la Figura IV.8, presenta idéntica geometría que el estudiado en la sección anterior. Para comprender los resultados del ruido del SSD es necesario tener presente el origen del funcionamiento del diodo. Por ello recordamos aquí brevemente las bases que permiten entender la rectificación que aparece en la característica $I-V$. Ésta está

determinada por la presencia de la barrera de potencial en el canal. En la Figura IV.5(b) dibujábamos los perfiles del potencial eléctrico a lo largo del centro del dispositivo para los potenciales aplicados más representativos. Se observa la típica barrera inducida por la carga negativa de los estados superficiales (Figura IV.6), que es la que controla el flujo de electrones en las dos direcciones. La asimetría de la geometría del diodo provoca que la barrera para los electrones que se mueven hacia la derecha sea mucho menor en directa que en inversa, de manera que aparece el comportamiento rectificador típico de los SSDs, *inset* de la Figura IV.24. La corriente en directa presenta una dependencia exponencial con el potencial aplicado para pequeña polarización (mientras esté presente la barrera de potencial), y después es lineal (comportamiento resistivo), con una tendencia a la saturación para los potenciales aplicados mayores debido a efectos de potadores calientes.

IV.3.1.b. Ruido *shot* y térmico

En nuestro simulador Monte Carlo el cálculo de la densidad espectral del ruido en corriente se efectúa a partir de la función de autocorrelación de acuerdo con las ecuaciones II.29 y II.30, en donde el valor instantáneo de la corriente se calcula cada 1.0 fs. En la Figura IV.24 se han representado los valores obtenidos para la densidad espectral de las fluctuaciones de corriente a baja frecuencia (*plateau* más allá del ruido $1/f$) $S_I(0)$, comparados con el valor $2qI$ del ruido *shot*, siendo q la carga elemental. También se ha dibujado el correspondiente factor de Fano $F=S_I(0)/2qI$. Mientras la barrera que limita la corriente sea significativa (mayor que aproximadamente 0.1 eV, es decir, $4K_B T$ a temperatura ambiente), el SSD presenta ruido *shot* total (para polarización directa e inversa), lo que indica que el transporte está controlado por la barrera y que son los portadores descorrelacionados que superan la misma los que proporcionan la corriente en la estructura. Para potenciales altos, la barrera de cátodo a ánodo se reduce o incluso desaparece (Figura IV.6), la resistencia del canal disminuye, y los accesos difusivos al canal se vuelven cada vez más importantes en el ruido del dispositivo. En consecuencia, $S_I(0)$ corresponde esencialmente al ruido de difusión en la resistencia serie y tiene un valor inferior al del ruido *shot* total (ruido suprimido, $F<1$). Para polarizaciones de inversa, como se aprecia en la Figura IV.5(b), la barrera persiste y siempre aparece ruido *shot* total (Figura IV.24). Este comportamiento del ruido en un SSD es el típico mientras el transporte en el canal sea balístico o cuasibalístico.

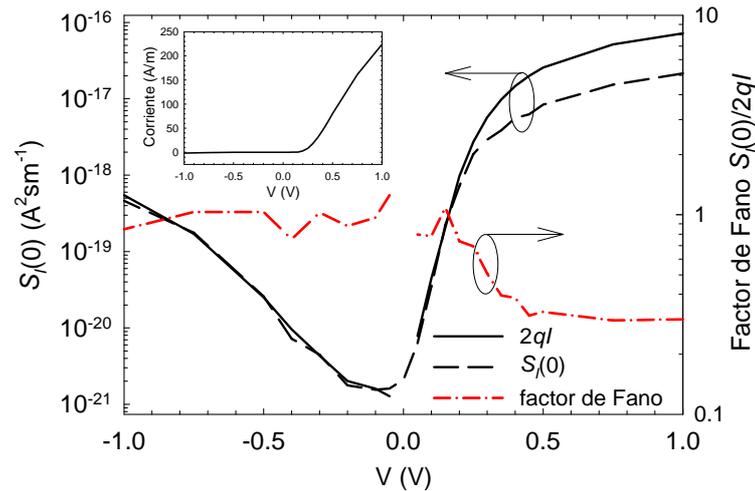


Figura IV.24. Valores Monte Carlo de $S_I(0)$ comparados con $2qI$ (eje izquierdo) y factor de Fano $S_I(0)/2qI$ (eje derecho) en función del potencial aplicado. El *inset* muestra la característica $I-V$ del diodo en escala lineal.

IV.3.1.c. Temperatura de ruido

También hemos calculado la temperatura equivalente del ruido¹⁵³ del diodo $T_n = S_I(0)R/4K_B$ en función de la corriente en directa (Figura IV.25). R es la resistencia incremental de baja frecuencia calculada como la pendiente de la curva $I-V$. La temperatura de ruido es un parámetro muy importante en la caracterización experimental de las propiedades del ruido de diodos.^{139,154} Para corrientes pequeñas, correspondientes a la región exponencial de la característica $I-V$, la temperatura de ruido es la mitad de la temperatura de la red, $T_n = T_{300}/2$. Este hecho está asociado a la dependencia de la corriente en directa con el potencial aplicado, que es una exponencial ideal [$I \propto \exp(qV/K_B T_{300})$] y que típicamente aparece junto con el ruido *shot* total comentado previamente. Cuando la corriente se incrementa, el ruido térmico de la resistencia serie se hace más importante, ya que la resistencia del canal decrece exponencialmente, y la temperatura de ruido aumenta hacia el valor de la temperatura de la red ($T_{300} = 300$ K). Una vez que la barrera desaparece (para $V > 0.4$ V, $I > 50$ A/m), se produce un fuerte calentamiento de los electrones y la temperatura crece de manera muy significativa debido principalmente a un aumento de R , y no tanto de $S_I(0)$. Este comportamiento de la temperatura de ruido es muy similar al que aparece en otro dispositivo controlado por barrera, como es el diodo Schottky,^{139,142,154} excepto en el incremento brusco que se observa en los SSDs una vez desaparece la barrera.

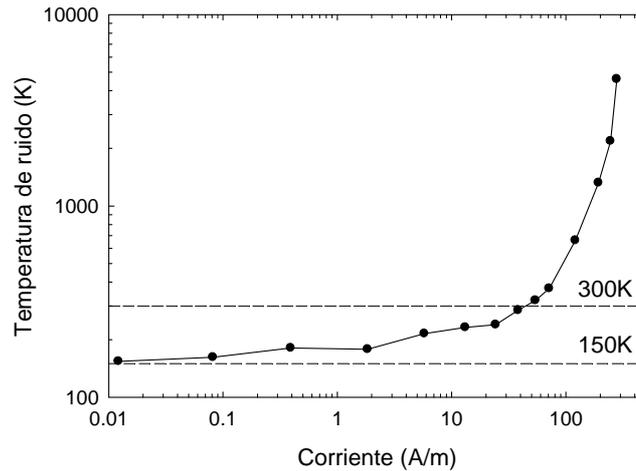


Figura IV.25. Temperatura de ruido en función de la corriente en directa. Las líneas horizontales indican la temperatura ambiente y su mitad.

IV.3.1.d. Ocupación del valle L

Para entender el fenómeno relativo al calentamiento de portadores, en la Figura IV.26 hemos representado los perfiles del potencial eléctrico y de la ocupación del valle L a lo largo del centro del canal del diodo para diferentes condiciones de polarización en directa.

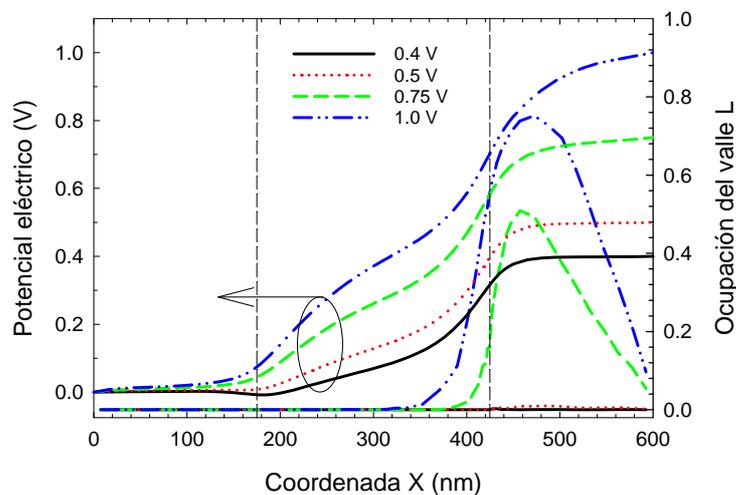


Figura IV.26. Perfiles del potencial eléctrico (eje izquierdo) y de la ocupación del valle L (eje derecho) a lo largo de del centro del canal del diodo para diferentes condiciones de polarización. Las líneas verticales indican los límites del canal.

Para $V \leq 0.5$ V, el potencial aplicado no es lo suficientemente elevado como para producir mecanismos de transferencia intervalle desde el valle inferior Γ al L ($\Delta E_{\Gamma-L} = 0.45$ eV en InGaAs), fenómeno que sí ocurre para valores mayores de V . Debido a que el movimiento de los electrones en el canal es cuasibalístico, apenas

pierden la energía aportada por el campo eléctrico, de modo que obtienen una energía del orden V/q al final de su trayecto en el canal. Por esta razón aparece un número significativo de electrones en el valle L, cuya mayor masa efectiva hace que la resistencia diferencial se incremente. Como consecuencia se produce el abrupto crecimiento de la temperatura de ruido que hemos observado.

IV.3.1.e. Influencia de la anchura del canal

Hemos simulado SSDs con diferente anchura del canal $W_C=40, 50$ y 60 nm, manteniendo el resto de parámetros de la geometría constantes como en el diodo de referencia. La Figura IV.27 muestra los valores calculados para $S_I(0)$ comparados con $2qI$ en condiciones de polarización directa. En trazo punteado aparece la altura de la barrera de cátodo a ánodo para las diferentes anchuras. El comportamiento de $S_I(0)$ es esencialmente el mismo que el que hemos explicado en el caso de anchura de 50 nm: ruido *shot* total cuando la barrera que limita la corriente es mayor que $4K_B T$, y ruido de difusión, de manera que $S_I(0)$ es menor que $2qI$, cuando desaparece la barrera. La diferencia al modificar la anchura del canal es el valor del potencial aplicado para el que $S_I(0)$ se separa de $2qI$. La explicación es sencilla, la modificación de W_C hace que la altura de la barrera cambie. Así, al reducir la anchura del canal, las cargas superficiales de ambos lados estarán más próximas, produciendo una mayor barrera y, por tanto mayor será el potencial V necesario para reducir el valor de la barrera por debajo de $4K_B T$ ($V=0.1, 0.175$, y 0.26 V para $W_C=40, 50$ y 60 nm, respectivamente).

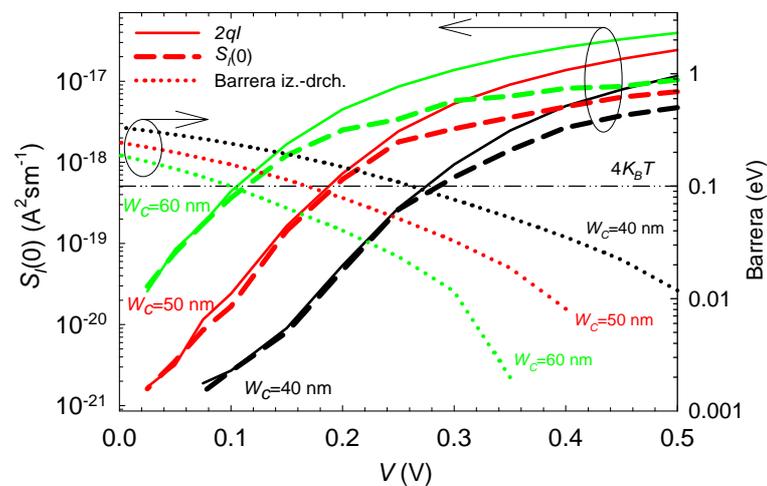


Figura IV.27. $S_I(0)$ comparado con $2qI$ en función del potencial de directa aplicado para SSDs con diferente anchura de canal $W_C=40, 50$ y 60 nm (eje izquierdo). También se representa (eje derecho) la correspondiente barrera de cátodo a ánodo. La línea horizontal indica el valor de $4K_B T$ para la barrera.

IV.3.2. Densidad espectral a alta frecuencia

Dado que el interés de este dispositivo corresponde a su capacidad de funcionar como detector de señales o generador de armónicos a muy alta frecuencia (algunos THz), debemos investigar el origen del ruido intrínseco a dichas frecuencias, ya que éste puede limitar las aplicaciones.

IV.3.2.a. Ruido en corriente y función de autocorrelación

En la Figura IV.28(a) representamos las funciones de autocorrelación de las fluctuaciones de la corriente correspondientes al diodo de referencia ($W_C=50$ nm) en diferentes condiciones de polarización. Estas funciones de autocorrelación son un paso necesario para calcular el espectro de ruido $S_I(f)$ que aparece en la Figura IV.28(b). Apreciamos dos máximos en el espectro del ruido. Las oscilaciones de plasma son el origen del máximo que aparece a mayores frecuencias (sobre 3 THz).⁹⁶ El inverso de esta frecuencia de plasma es igual al periodo de las oscilaciones que aparecen en las funciones de autocorrelación correspondientes de la Figura IV.28(a). Pese a tratarse de un fenómeno típico que ya aparece en simulaciones Monte Carlo de otro tipo de dispositivos,^{132,141} este máximo se analizará con detalle más adelante. A frecuencias algo menores (~ 1.3 THz) el espectro presenta otro máximo. El origen de este máximo lo atribuimos inicialmente (más adelante explicaremos la interpretación de otros autores) a efectos de portadores que se dan la vuelta, denominados *returning carriers*, en las zonas de carga espacial originadas por la carga superficial a ambos lados de las zanjas dieléctricas verticales. Tal y cómo podemos ver en el *inset* de la Figura IV.28(b), si representamos $S_I(f)$ en escala log-log, el espectro muestra el comportamiento f^2 encontrado en diodos de barrera Schottky,^{139,142,154} indicándonos que se trata de un acoplo capacitivo de las fluctuaciones del ruido a los terminales del dispositivo típico de los *returning carriers*. La posición de ambos máximos es prácticamente independiente del potencial aplicado (tanto en directa como inversa) mientras la corriente sea lo suficientemente pequeña.

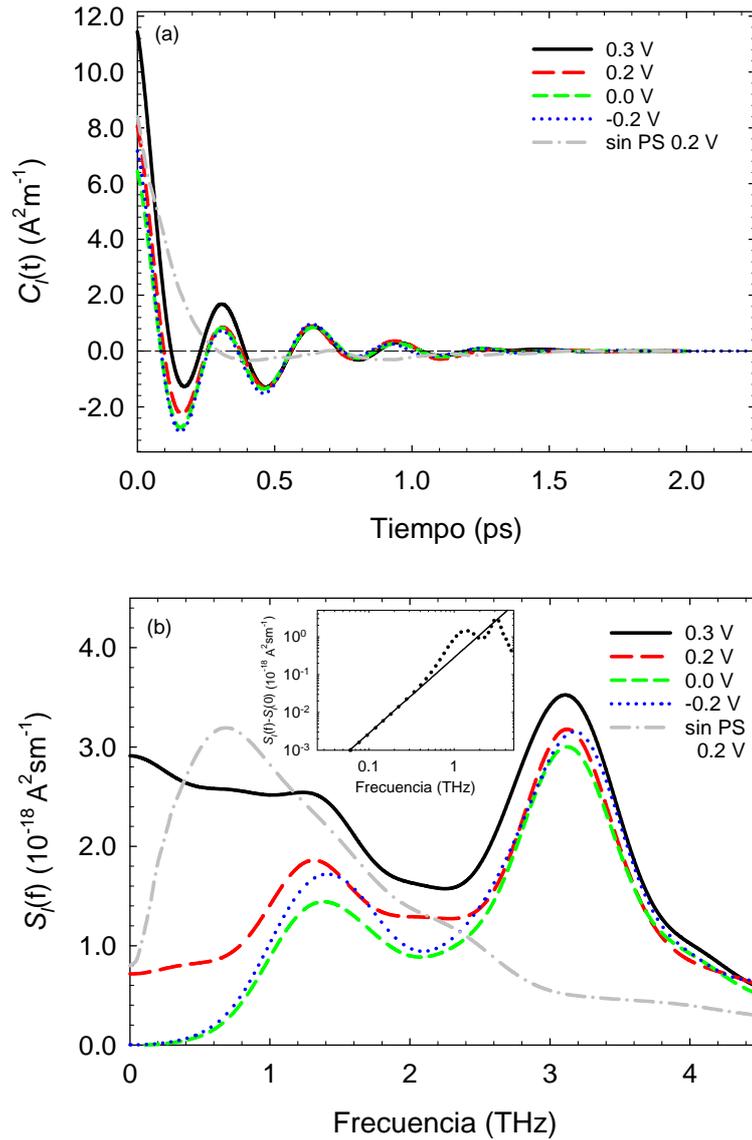


Figura IV.28. (a) Funciones de autocorrelación y (b) densidad espectral de la corriente en diferentes condiciones de polarización para un diodo con $W_c=50$ nm. También se representa el caso en el que no se actualiza la ecuación de Poisson (PS) para $V=0.2$ V. El *inset* de (a) ilustra la dependencia tipo f^2 en el espectro del ruido para $V=0.0$ V.

Con la intención de identificar la influencia de las fluctuaciones del campo eléctrico en el espectro del ruido en corriente, hemos realizado simulaciones sin resolver dinámicamente la ecuación de Poisson. Es decir, el campo eléctrico no se recalcula en cada iteración, sino que se adopta un perfil estacionario constante en el tiempo, calculado previamente como el valor medio en un intervalo temporal suficientemente largo en el que sí se actualiza su valor.¹⁴² Estos resultados se muestran para $V=0.2$ V en la Figura IV.28(b). Podemos apreciar cómo en este caso solamente aparece un máximo en el espectro. Cuando congelamos la resolución de la ecuación de Poisson las oscilaciones del campo eléctrico no se acoplan al

movimiento de los portadores, fenómeno que origina las oscilaciones de plasma, y por ello el máximo de alta frecuencia en torno a 3 THz en la densidad espectral desaparece (debido a que no hay oscilaciones en la función de autocorrelación). Por el contrario, el máximo de baja frecuencia del espectro no desaparece; se desplaza a frecuencias menores y aumenta su amplitud, efecto que también se ha observado en diodos Schottky.¹⁴² La parte negativa de la función de autocorrelación, que según nuestra interpretación sería la asociada a los portadores reflejados, es la que provoca el máximo en torno a 1.3 THz en la densidad espectral.¹⁴²

Como era de esperar, tanto resolviendo o no Poisson, la densidad espectral a baja frecuencia toma los mismos valores, correspondientes al ruido *shot* total asociado a los portadores que sobrepasando la barrera alcanzan el ánodo. Para niveles altos de corriente, $V=0.3$ V en Figura IV.28(b), se aprecia un significativo aumento del ruido a baja frecuencia que se extiende hasta frecuencias elevadas.

Sin resolver el campo eléctrico la función de autocorrelación no presenta la oscilación que aparece cuando éste sí se actualiza en cada paso temporal, y su comportamiento se asemeja al de una exponencial decreciente. Por esta razón, sin resolver Poisson no aparece el máximo en torno a 3 THz en la densidad espectral.

IV.3.2.b. Influencia de la geometría. Optimización del escalado

Para ahondar en el origen físico de los máximos del espectro y optimizar el diseño de los SSDs orientado a aplicaciones a alta frecuencia, analizamos la influencia de los diversos parámetros de la geometría en la frecuencia y amplitud de tales máximos.

La Figura IV.29 muestra la densidad espectral $S_I(f)$ calculada en equilibrio modificando cada una de las dimensiones del diodo (manteniendo las otras constantes con valores como en el diodo de referencia): (a) anchura del canal W_C , (b) anchura de las zanjas horizontales W_h y (c) verticales W_v , (d) longitud del canal L_C y (e) longitud de los accesos L_{acc} .

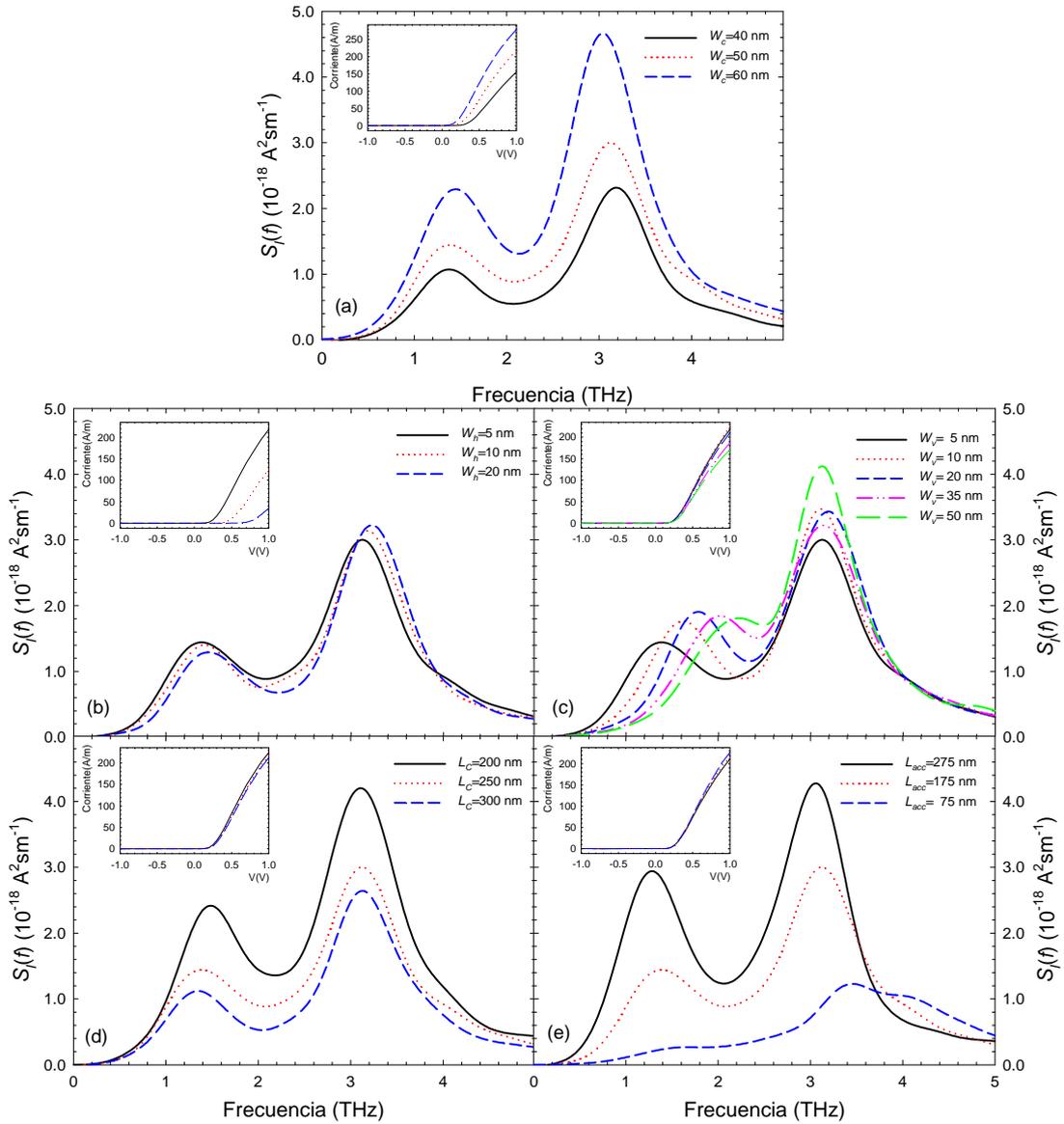


Figura IV.29. Espectro del ruido en corriente en equilibrio ($V=0.0$ V) modificando algunos parámetros de la topología del diodo: (a) anchura del canal $W_c=40, 50$ y 60 nm; (b) anchura de las zanjas horizontales $W_h=5, 10$ y 20 nm y (c) verticales $W_v=5, 10, 20, 35$ y 50 nm; (d) longitud del canal $L_c=200, 250$ y 300 nm; y (e) longitud de los accesos $L_{acc}=275, 175$ y 75 nm. En los *inset* aparecen las características $I-V$ correspondientes.

Ya se describió anteriormente, que mientras la altura de la barrera sea significativa (como en equilibrio), el ruido a baja frecuencia estará esencialmente determinado por el canal, ya que es la barrera la que limita el flujo de electrones a través del diodo, y el ruido asociado a los accesos es despreciable. Por el contrario, a alta frecuencia, las regiones alrededor del canal tienen un peso importante en el ruido. Por ello en la Figura IV.29 el nivel del ruido a alta frecuencia es más elevado cuanto mayor es la impedancia de los accesos comparada con la del canal. Esto

explica, por ejemplo, por qué $S_I(f)$ es mayor cuando disminuye L_C o se incrementa W_C o L_{acc} , mientras que tiene una amplitud similar cuando varía W_h o W_v .

El incremento del ruido en corriente originado por el máximo de baja frecuencia puede ser especialmente problemático en el funcionamiento del diodo, ya que podría limitar el rango de frecuencias donde residen las aplicaciones potenciales de los SSDs. Una primera posibilidad para reducir el ruido asociado al máximo de baja frecuencia sería hacer más pequeña la resistencia de los accesos con respecto a la del canal. La mejor elección para este propósito sería disminuir L_{acc} , Figura IV.29(e), con la finalidad de reducir al mínimo las resistencias parásitas, pero, como es bien sabido, se incrementaría simultáneamente la capacidad parásita entre los electrodos. También tendremos un límite tecnológico que no nos permitirá reducir los accesos tanto como queramos. Por otra parte, si se disminuye W_C (o aumenta L_C) la resistencia del canal crece y se reduce el nivel de corriente, siendo ambos efectos poco deseables para las aplicaciones de detección de potencia. Además, un canal muy largo empobrece el funcionamiento a alta frecuencia, es decir, el SSD sería lento en respuesta, como ya vimos en la sección IV.1.2.

La segunda posibilidad consistiría en intentar desplazar el máximo hacia frecuencias mayores para incrementar la relación señal/ruido en el rango de interés (1–2 THz). Tal y cómo se puede observar en la Figura IV.29, mediante el cambio ya sea de W_C , W_h , L_C , o L_{acc} , apenas varía la posición en frecuencia del máximo. Por el contrario, si incrementamos la anchura de las zanjas verticales W_v , se produce un desplazamiento significativo del máximo hacia frecuencias mayores, Figura IV.29(c). Expliquemos el porqué de este comportamiento. Este máximo del espectro está originado por la dinámica de los portadores en las proximidades de las zanjas verticales, que aparece reflejada en la corriente a través de un acoplo capacitivo. Dicho acoplo de las fluctuaciones originadas por los *returning carriers* a ambos lados de las zanjas a la corriente en terminales está modulado por dos condensadores: uno asociado a las zonas de carga espacial ambos lados de la zanja C_{ZCE} y otro debido a la zanja dieléctrica vertical $C_v = \epsilon_v / W_v$. Por tanto el aumento de W_v , que lleva consigo una disminución de la capacidad C_v , provoca que el máximo de baja frecuencia aparezca a frecuencias mayores. El problema es que si dichas zanjas son excesivamente grandes, comparables con la longitud del canal, se puede deteriorar el efecto rectificador del diodo.

En la sección anterior, habíamos estudiado la respuesta dc de la corriente frente a una señal de alterna, mientras que en esta sección nos hemos centrado en el ruido en corriente. Dado que encontrábamos que la resonancia o máximo de la corriente rectificadora dc aparecía a mayores frecuencias al aumentar W_v y hemos hallado este mismo comportamiento en el ruido en corriente, en la Figura IV.30 comparamos ambas magnitudes. Hemos realizado simulaciones para diferentes amplitudes ($V_0=0.5, 0.25$ y 0.15 V) de la señal sinusoidal que se aplica al terminal derecho del SSD, observando que a medida que ésta es menor, la posición en frecuencia de los máximos de la rectificación y sus amplitudes relativas son más parecidas a las de los máximos de baja frecuencia del espectro del ruido. Todo parece indicar que estamos observando el mismo fenómeno en diferentes magnitudes físicas. Es decir, las fluctuaciones de carga en torno a la zanja vertical se manifiestan tanto en el ruido (fluctuaciones de carga a ambos lados de la zanja) como en la respuesta dc frente a una excitación ac (fluctuaciones de carga en el lado derecho transmitidas al canal a través de la zanja horizontal). Téngase en cuenta que la densidad espectral del ruido en condiciones de equilibrio es proporcional a la admitancia de pequeña señal del dispositivo, mientras que la corriente media dc es causada por la rectificación del diodo y corresponde a condiciones de gran señal. De hecho, aún para la menor amplitud de la señal ac (la situación más próxima a condiciones de pequeña señal), Figura IV.30(c), la posición en frecuencia de los máximos de la corriente dc no coincide exactamente con la de los del ruido. Por otra parte, la rectificación es debida a la corriente que fluye a través del canal, que está desfasada con respecto a las fluctuaciones de carga en torno a la zanja vertical por el acoplo vía la zanja horizontal (que es evidentemente otro condensador). En cambio, en el ruido las fluctuaciones de la corriente que aparecen en terminales en principio están solamente afectadas por el condensador vertical.

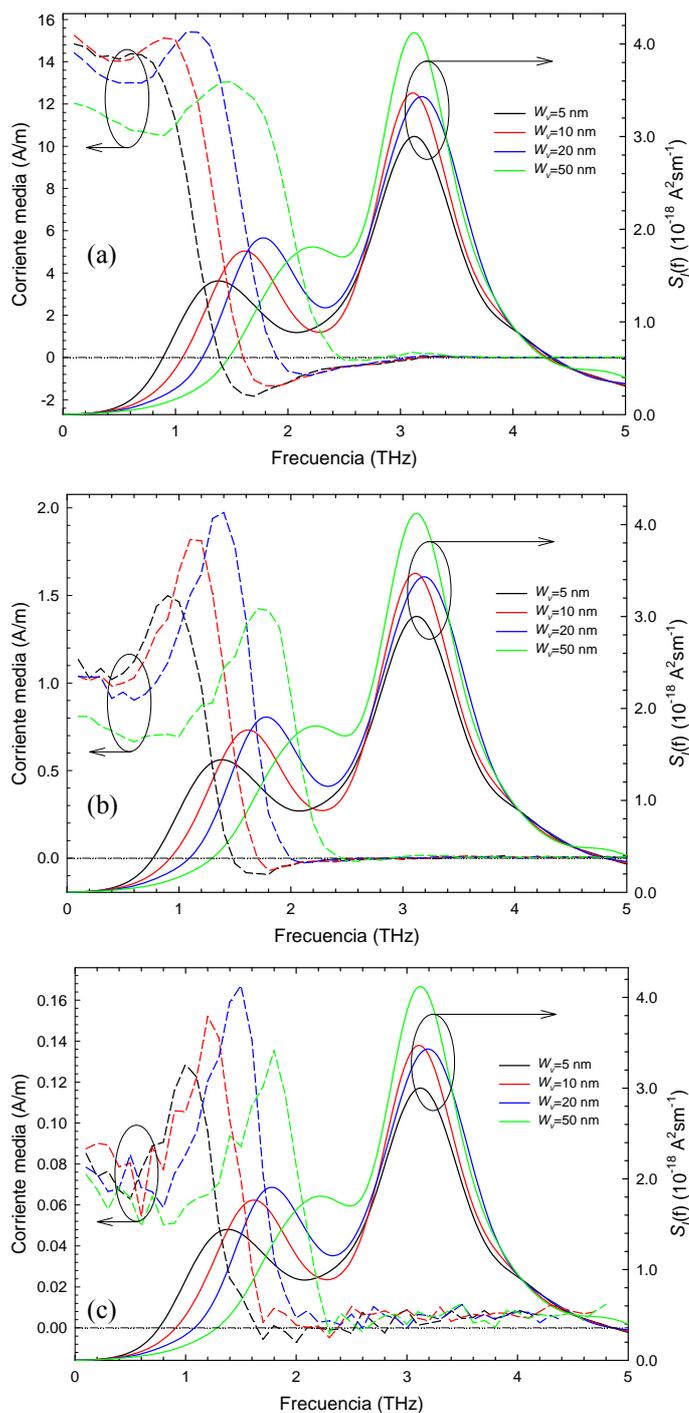


Figura IV.30. Comparación del espectro del ruido (líneas continuas) en corriente en equilibrio ($V=0$ V) con el valor de la corriente rectificadora media (líneas a trazos) en SSDs con diferente anchura de zanja vertical $W_v=5, 10, 20$ y 50 nm para diferentes amplitudes V_0 de la excitación sinusoidal de alterna: (a) 0.5 V, (b) 0.25 V y (c) 0.15 V.

El máximo de alta frecuencia del espectro no aparece en la respuesta de la corriente dc, ya que es debido a un fenómeno volúmico que no afecta a la capacidad rectificadora; se trata de las oscilaciones del potencial eléctrico causadas por una inhomogeneidad en la concentración de portadores. Por otra parte, el efecto de la

sobre-carga/sobre-descarga de la concentración cercana a la zanja vertical que da lugar a la respuesta dc (que representábamos por las variaciones del parámetro Δ en la sección IV.2.2) desaparece a frecuencias menores que las del máximo de alta frecuencia que encontramos en el espectro del ruido.

Por último, dado que el ruido asociado a los *returning carriers* está modulado por el acople capacitivo proporcionado por las zanjas verticales, la modificación de la anchura de las zanjas horizontales no tiene apenas repercusión ni en la amplitud ni en la posición del máximo de baja frecuencia, y simplemente se aprecia un ligerísimo desplazamiento hacia la derecha al aumentar W_h , Figura IV.29(b).

Para completar nuestro análisis continuamos presentando los resultados de las densidades espectrales del ruido concernientes a la modificación de las permitividades de las zanjas aislantes. En la Figura IV.31 se muestran las simulaciones tanto para diferentes ϵ_h como ϵ_v . Mientras que los cambios de la permitividad de la zanja horizontal apenas modifican la posición del máximo de baja frecuencia, la vertical sí que lo hace. Esto refuerza nuestra interpretación de que el fenómeno que da origen a la resonancia de la respuesta dc y al máximo de baja frecuencia del ruido es el mismo, pues la respuesta dinámica, Figura IV.20(a), mostraba el mismo comportamiento. El aumento de $S_I(0)$ en la Figura IV.31(a) es debido a que para $\epsilon_h = 4$ ó 12 la característica $I-V$, Figura IV.11(a), tiene un umbral casi nulo, lo cual significa que el canal está abierto en equilibrio.

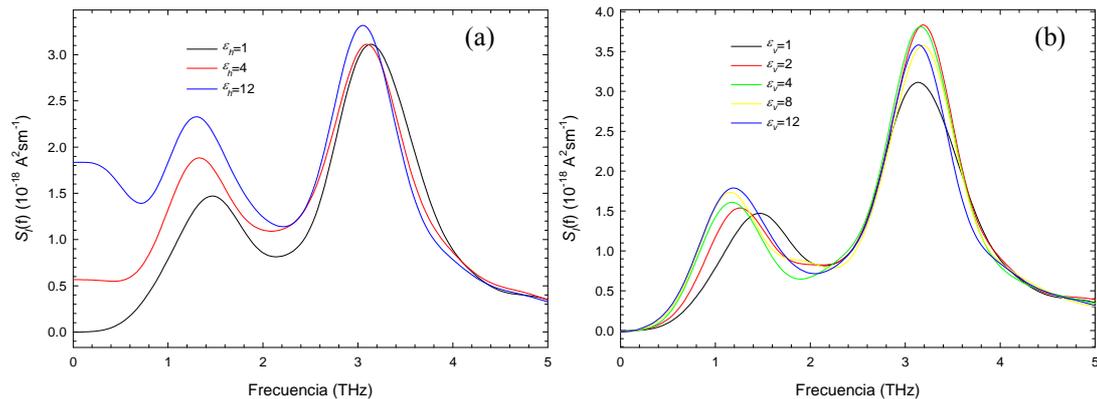


Figura IV.31. Espectro del ruido en corriente en equilibrio ($V=0.0$ V) modificando las permitividades de las zanjas aislantes: (a) horizontales $\epsilon_h=1, 4$ y 12 y (b) verticales $\epsilon_v=1, 2, 4, 8$ y 12.

En cuanto al efecto de ϵ_v , es importante señalar que la dependencia es idéntica a la encontrada en el valor de la corriente rectificada, Figura IV.20(b). El máximo de baja frecuencia en el ruido se desplaza a frecuencias menores al aumentar ϵ_v , y

presenta además el fenómeno ya observado en la respuesta dc consistente en que a partir de una permitividad relativa de $\epsilon_v=4$ su posición permanece fija. Dado que la frecuencia del máximo está ligada a los condensadores C_{ZCE} y C_v , asociados en serie, al aumentar ϵ_v crece C_v , de forma que llegará un momento en que el efecto capacitivo esté gobernado solamente por la capacidad más pequeña. Suponiendo que el valor de C_{ZCE} no dependa de ϵ_v (es lógico, ya que la carga superficial que genera el vaciamiento es similar), no es difícil comprobar (lo expondremos en la siguiente sección) que, para la geometría considerada, a partir de $\epsilon_v=4$ la capacidad equivalente está fijada únicamente por C_{ZCE} . Para certificar que la posición del máximo es modulada por la capacidad de la zanja vertical, en la Figura IV.32 representamos el ruido para un diodo con zanja vertical de 5 nm y permitividad $\epsilon_v=1$ junto con el de otro con $W_v=20$ nm y $\epsilon_v=4$, de forma que el valor de C_v sea idéntico. Observamos que ambos espectros son prácticamente idénticos, lo que confirma aún más la interpretación que hemos dado acerca de la aparición y posición en frecuencia de los máximos del espectro.

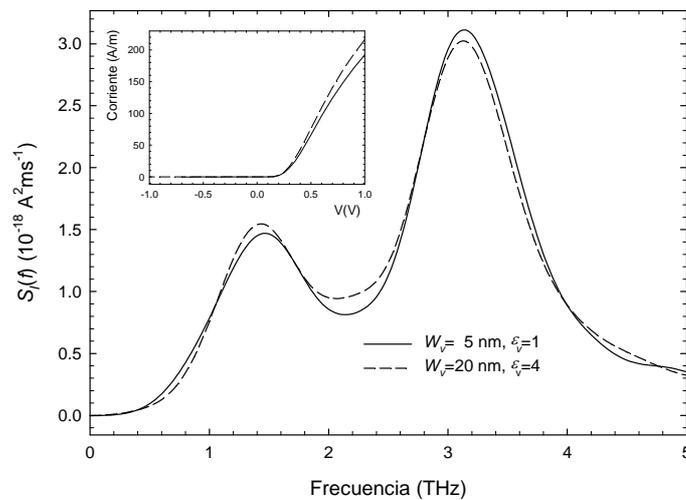


Figura IV.32. $S_I(f)$ para dos diodos en los que se mantiene constante el valor de su capacidad vertical C_v . $W_v=5$, $\epsilon_v=1$ y $W_v=20$, $\epsilon_v=4$.

En lo que respecta al análisis de la dependencia con la longitud del canal, en la sección anterior (respuesta de la corriente dc) se estudiaron diodos con canales más largos (Figura IV.13) que los que hemos investigado hasta el momento, Figura IV.29(d). Por ello, en la Figura IV.33, de la misma forma que hemos hecho para W_v , comparamos los resultados de la rectificación con los obtenidos para la densidad espectral del ruido en SSDs con longitudes de 0.1–1 μm . La amplitud usada en los cálculos de la respuesta dc es de $V_0=0.25$ V. Se observa que, pese a no estar situado

exactamente a la misma frecuencia, la posición del máximo de baja frecuencia y su amplitud relativa dependen con la longitud de la misma forma en la respuesta dc y en el ruido. Por otra parte se detecta un aumento significativo del máximo de la resonancia dc al disminuir la amplitud de la excitación (véase la Figura IV.13, donde $V_0=0.5$ V). El comportamiento que observamos en la posición de los máximos del espectro del ruido lo explicaremos en la sección IV.3.4 con la ayuda de un circuito equivalente sencillo.

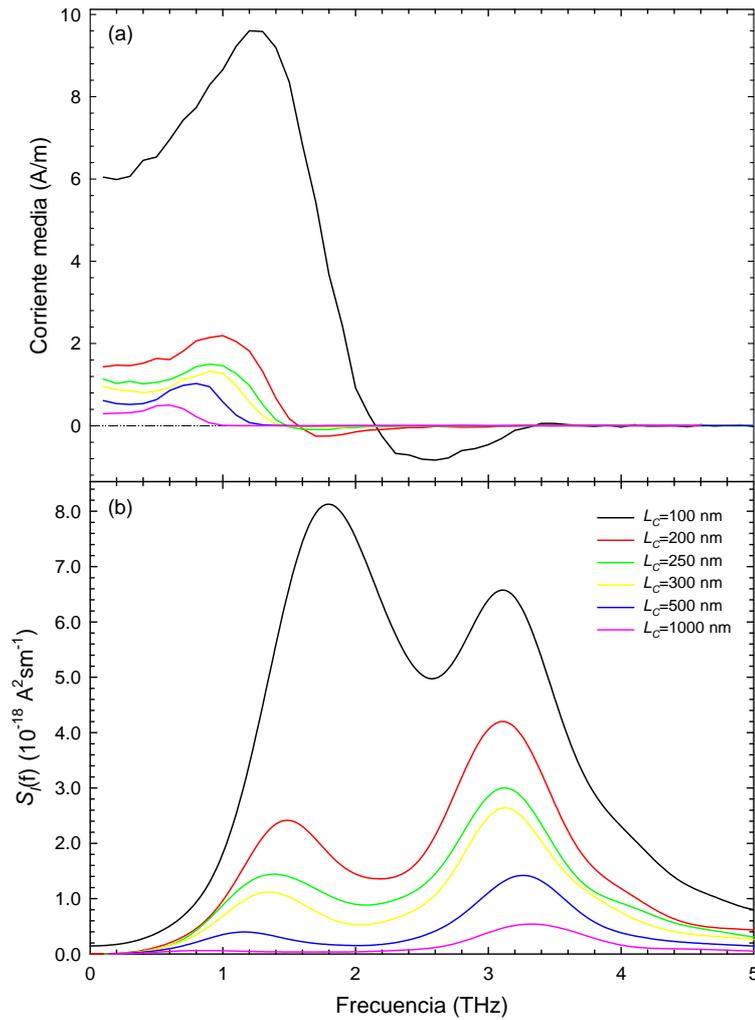


Figura IV.33. (a) Valor de la corriente rectificadora media y (b) espectro del ruido en corriente en equilibrio ($V=0.0$ V,) al modificar la longitud $L_C=100, 200, 250, 300, 500$ y 1000 nm del nanocanal semiconductor del SSD. La amplitud usada para la excitación sinusoidal ac es de $V_0=0.25$ V.

IV.3.3. Fluctuaciones de plasma y *returning carriers*

El origen físico del máximo de la corriente rectificadora también se ha analizado recientemente por otros autores.^{54,152} Para identificar la procedencia del máximo que se observa en la respuesta dc de la corriente de un SSD al someterlo a un potencial de alterna, en la Ref. 152 se investigan las posibles resonancias de la estructura, ya que el gas de electrones podría experimentar algún tipo de oscilación de plasma en el rango de los THz. Para ello se aplica un salto de potencial entre terminales con la finalidad de excitar los posibles modos de plasma y estudiar su transitorio. Durante la simulación, se monitorizan las variaciones de potencial cercanas a la parte derecha de la zanja vertical del SSD antes y después de aplicar el salto de potencial externo. La oscilación que aparece presenta una frecuencia similar a la del máximo de dc, persiste durante unos pocos periodos y se va amortiguado hasta el nivel del ruido. Por esta razón los autores concluyen que el máximo de la corriente rectificadora procede de un acoplamiento resonante entre una oscilación “local” de plasma y la señal ac externa. Para encontrar el mecanismo físico que provoca dichas oscilaciones se realizan diversos cálculos modificando la longitud del canal y el tamaño del dispositivo (longitud de los accesos o contactos óhmicos). No se halla ninguna dependencia, pero sí se confirma que la densidad de electrones sólo varía en unas pocas decenas de nanómetros próximos a las zanjas verticales. Con ello se concluye que las oscilaciones del potencial no son debidas a oscilaciones de plasma de material (*bulk*). Finaliza el trabajo sugiriendo la posibilidad de que el origen sean las llamadas oscilaciones de plasma de superficie localizadas (LSP, *localized surface plasma*) como las observadas en estructuras MIM (*metal-insulator-metal*).¹⁵⁵ Según los autores, la resonancia es prácticamente independiente de la anchura de las zanjas verticales, en contradicción con lo observado en nuestras simulaciones tanto de la corriente rectificadora dc como de la densidad espectral del ruido, que sí dependen de W_v (Figura IV.15 y Figura IV.29(c), respectivamente). En la Ref. 152 se propone la expresión $f_{LSP} = f_P / \sqrt{1 + \epsilon_v}$ para la frecuencia de las oscilaciones LSP, donde f_P es la frecuencia de plasma (ecuación II.33) y ϵ_v la permitividad dieléctrica de la zanja vertical, y obtienen un buen acuerdo entre esta expresión analítica y los valores de las simulaciones Monte Carlo.¹⁵²

Para compatibilizar esta interpretación con la nuestra, explicada en términos de efectos del tiempo de tránsito de los *returning carriers*, nos apoyamos en los

resultados de la Ref. 139 acerca del ruido en diodos de barrera Schottky. La dinámica de los portadores en la zona de carga espacial originada por la barrera Schottky está gobernada, suponiendo un dopaje uniforme (linealidad en la variación del campo eléctrico), por una ecuación de movimiento en la que la velocidad del electrón es del tipo $v(t)=v(0)\cos(2\pi f_P t)$, con f_P la frecuencia del plasma y $v(0)$ la velocidad inicial. Los portadores que entran en la zona de carga espacial y no tienen energía suficiente para superar la barrera metal–semiconductor regresan a la zona neutra (por esta razón se les llama *returning carriers*) en un tiempo característico τ_R de valor $\tau_R=1/(2f_P)$ independiente de su velocidad inicial. Estos electrones no proporcionan corriente dc al dispositivo. Sin embargo, la frecuencia característica asociada a sus fluctuaciones, de valor $f_R=1/(2\pi\tau_R)=f_P/\pi$, es del orden de las frecuencias de las aplicaciones de interés. La contribución a la parte real de la admitancia de este tipo de portadores tiene una dependencia del tipo f^2 para baja frecuencia y alcanza un máximo para una frecuencia de 1.4 veces f_R .¹³⁹ Esto indica que la dinámica de los *returning carriers* está ligada de algún modo a las oscilaciones de plasma.

Se ha de tener en cuenta que en nuestro caso particular del SSD, la barrera de potencial no es originada por el contacto metal–semiconductor como en el diodo Schottky, sino que se trata de una frontera semiconductor–dieléctrico en donde hay una zona de carga espacial o de vaciamiento originada por la carga superficial. Por otra parte, además de las reflexiones debidas al campo eléctrico, en un SSD puede haber también, para portadores con mucha energía, rebotes con la frontera propiamente dicha. Recuérdese que en un diodo de barrera Schottky los portadores con energía mayor que la barrera la superan y contribuyen a la corriente dc, pero no a la admitancia en la región de frecuencias de interés.¹³⁹

Si calculamos la frecuencia de plasma dada por la ecuación II.33, para el InGaAs se obtiene que $f_P=3.55$ THz para $N_D=10^{17}$ cm⁻³, con $\epsilon_r=13.88$ y $m^*=0.046$ (se ha tenido en cuenta el factor $1+2\alpha\epsilon$ de la no parabolicidad). De acuerdo con las expresiones que acabamos de presentar, se tendría un valor de frecuencia para el máximo asociado a los *returning carriers* de $1.4 f_P/\pi=1.58$ THz. Nótese que es del orden de la frecuencia del máximo de baja frecuencia del espectro del ruido (reforzando dicha interpretación), siempre teniendo en cuenta que, como hemos explicado anteriormente, éste viene modulado por los condensadores asociados a la zanja vertical y a las zonas de carga espacial. Además, el modelo analítico descrito

utiliza alguna aproximación, como por ejemplo asumir que el campo eléctrico varía linealmente en la zona de carga espacial y despreciar los efectos de relajación dieléctrica o acoplamiento campo eléctrico velocidad en ella (que son determinantes en el comportamiento de las fluctuaciones). Dado que las oscilaciones son debidas tanto a fenómenos de inercia de los portadores como a sus interacciones coulombianas repulsivas, y que la frecuencia de plasma aparece explícitamente en la dinámica de los *returning carriers*, parece claro que las interpretaciones del origen del máximo en términos de los *returning carriers*, y de las oscilaciones de plasma de superficie localizadas (LSP) no se pueden considerar contradictorias. Lo que sí se confirma es que la zona de interés donde reside el origen del mecanismo causante de la resonancia corresponde a las proximidades de la zanja vertical. El hecho de que en el espectro del ruido el máximo del plasma volúmico no aparezca exactamente a la frecuencia f_p se explica a continuación.

Para profundizar más en la interpretación dada al origen de los máximos de la densidad espectral, hemos realizado simulaciones utilizando el modelo de carga superficial constante. Para ello se han definido dos zonas en la geometría del SSD con diferentes valores de carga superficial σ y dopaje de fondo N_{db} . Las dimensiones del diodo son las del de referencia, y están indicadas en la Figura IV.34(a). Denominaremos zona 1 (verde) a la constituida por el canal y los accesos laterales y zona 2 (rojo) a la formada por las partes superior e inferior al canal.

En primer lugar, para confirmar que el máximo de alta frecuencia es debido a oscilaciones 3D de plasma o de *bulk*, hemos multiplicado y dividido por dos el dopaje de fondo N_{db2} de la región 2 con respecto al de la zona 1, $N_{db1}=10^{17} \text{ cm}^{-3}$. El valor de la carga superficial de la zona 1 se mantiene invariable ($\sigma_1=0.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), mientras que el de la otra zona σ_2 es el doble o la mitad según sea N_{db2} , con el fin de mantener el mismo nivel de vaciamiento lateral. Se observa que el máximo de alta frecuencia aparece a frecuencias mayores a medida que se aumenta la concentración de la zona 2, Figura IV.34(b).

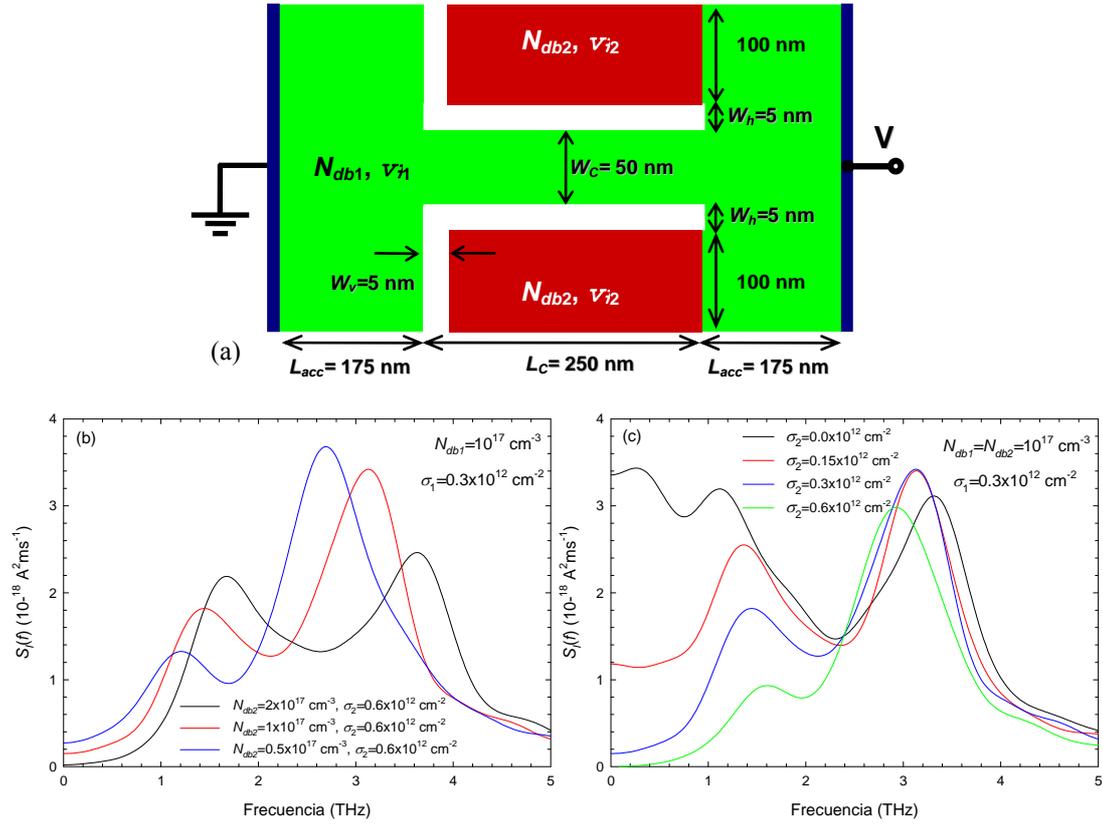


Figura IV.34. Densidades espectrales del ruido en corriente calculadas con el modelo de carga superficial constante. En la geometría del SSD (a) se definen dos regiones (zona 1 en verde y 2 en rojo) con diferentes valores de la densidad de fondo N_{db} y carga superficial σ . En (b) mantenemos constante $N_{db1} = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $\sigma_1 = 0.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y se modifica N_{db2} a su valor doble y mitad, mientras que σ_2 se adecua al dopaje N_{db2} para que provoque el mismo vaciamiento lateral que para el SSD de referencia. En (b) nos centramos en el papel de σ_2 , manteniéndose constantes $N_{db1} = N_{db2} = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $\sigma_1 = 0.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Podemos explicar lo que está ocurriendo basándonos en algunos trabajos que versan sobre estructuras n^+nn^+ .^{132,141} En ellos se utiliza un circuito equivalente para reproducir los resultados Monte Carlo. Se sabe que el espectro del ruido en corriente posee un máximo correspondiente a las oscilaciones de plasma sólo cuando hay alguna inhomogeneidad en la concentración de portadores. La posición del máximo del espectro del ruido en estructuras n^+nn^+ depende del dopaje y longitud de las diferentes regiones. Una posible expresión analítica para tal dependencia (que reproduce con bastante precisión la posición del máximo en estructuras n^+nn^+) es¹⁴¹

$$f_P^2 \cong f_{P1}^2 \frac{L_2}{L_1 + L_2} + f_{P2}^2 \frac{L_1}{L_1 + L_2}, \quad (\text{IV.3})$$

donde f_{P1} y f_{P2} son las frecuencias de plasma (ecuación II.33), y L_1 y L_2 las longitudes de las regiones n^+ y n , respectivamente. Podemos utilizar esta ecuación para analizar nuestra estructura. Obviamente, se trata de un modelo simple, ya que la transición de concentración es gradual, el campo no es homogéneo y, debido al vaciamiento, la concentración no es igual al dopaje de fondo. En nuestro caso suponemos que las dos regiones son por un lado las correspondiente a los accesos, con $L_1=2\times L_{acc}=350$ nm (la suma de las dos), y por otro las zonas adyacentes al canal, con $L_2=L_C=250$ nm. La frecuencia de plasma para $N_{db1}=10^{17}$ cm⁻³ es $f_{P1}=3.55$ THz. Admitiendo que podemos representar toda la zona 2 por una concentración de portadores de valor mitad a su dopaje de fondo N_{db2} (debido al efecto de vaciamiento de la carga superficial), para el caso del diodo de referencia ($N_{db2}=10^{17}$ cm⁻³) se obtiene, utilizando la ecuación IV.3, que $f_P=3$ THz. Este valor concuerda satisfactoriamente con el encontrado en la simulación Monte Carlo de la Figura IV.34(b), curva roja. En los otros dos casos, para $N_{db2}=2\times 10^{17}$ cm⁻³ y 0.5×10^{17} cm⁻³, mediante la ecuación IV.3 se obtiene que $f_P=3.55$ THz y 2.66 THz, respectivamente. Podemos comprobar que estos valores se ajustan perfectamente a los resultados Monte Carlo (curva negra y azul, respectivamente) de la Figura IV.34(b).

Se han realizado diversas comprobaciones para verificar que también existe una dependencia de la frecuencia del máximo con L_1 y L_2 . De hecho dicha dependencia ya se podía vislumbrar en la Figura IV.29(e), en la que para el diodo de referencia, si se aumentaba L_1 hasta $2\times L_{acc}=2\times 275=550$ nm se intuía que el máximo aparecía a frecuencias menores (de acuerdo con la ecuación IV.3). Mediante la ecuación IV.3 también se justificaría el hecho de que el máximo del plasma se encuentre a menores frecuencias al disminuir la longitud del canal (Figura IV.33), ya que en ese caso la influencia en f_P de f_{P1} es menor, pues viene pesada por $L_2=L_C$. En cuanto al máximo de baja frecuencia, en la Figura IV.34(b) observamos que también aparece a frecuencias mayores a medida que se aumenta N_{db2} . Dado que hemos mantenido constante la anchura de la zanja vertical (C_v) y la de la zona de carga espacial (C_{ZCE}) adecuando σ_2 al valor de N_{db2} , como el origen de este máximo de baja frecuencia es el discutido anteriormente (*returning carriers*), su posición dependerá de la frecuencia de plasma f_P , lo que coincide exactamente con los valores representados en la Figura IV.34(b).

En segundo lugar, podemos investigar aisladamente el efecto de la carga superficial de la zona 2. Como hemos visto hasta ahora, el comportamiento de los portadores en esta zona del diodo es el principal responsable del máximo de baja frecuencia del espectro del ruido (no olvidar que en el lado izquierdo de la zanja tenemos también el mismo tipo de oscilaciones). En la Figura IV.34(c) aparecen los resultados cuando se modifica $\sigma_2=(0.0, 0.15, 0.3 \text{ y } 0.6)\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ manteniendo constantes $\sigma_1=0.3\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $N_{db1}=N_{db2}=10^{17} \text{ cm}^{-3}$. El pequeño desplazamiento del máximo de alta frecuencia hacia valores menores cuando aumenta σ_2 es atribuido al mayor vaciamiento de la zona 2 originado por la carga superficial. Pero el resultado más importante es que el máximo de baja frecuencia aparece a frecuencias mayores si se incrementa la carga superficial σ_2 . Esto ocurre debido a que C_{ZCE} disminuye influyendo sobre la capacidad total que acopla las fluctuaciones de corriente de los *returning carriers* a los contactos. El valor de baja frecuencia $S_I(0)$ aumenta al reducir σ_2 , pues el vaciamiento del canal es menor, de forma tal que llega a estar abierto incluso en equilibrio.

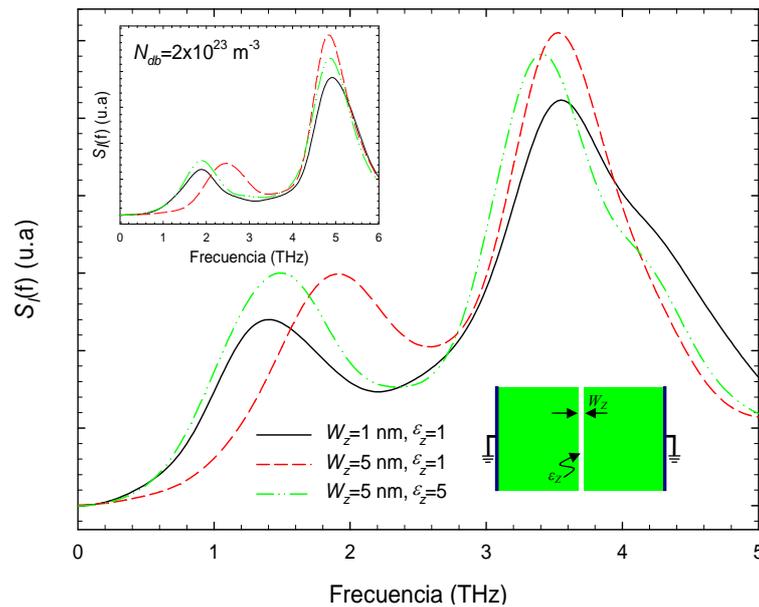


Figura IV.35. Densidades espectrales del ruido en corriente para una estructura como la del *inset* con dos regiones semiconductoras ($N_{db}=10^{17} \text{ cm}^{-3}$) de InGaAs separadas por una zanja aislante de anchura W_z y permitividad ϵ_z . En el *inset* superior izquierdo se representan los mismos resultados para una concentración doble de electrones ($N_{db}=2\times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). Se ha usado un valor de $\sigma/q=0.15\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Para terminar esta parte de las simulaciones Monte Carlo, y con el fin de demostrar que es el acople capacitivo a través de la zanja vertical el que modula la

frecuencia del máximo de baja frecuencia del espectro, hemos realizado diversos cálculos en una estructura sencilla, consistente en dos zonas semiconductoras separadas por una zanja aislante de anchura W_z y permitividad ε_z (*inset* de la Figura IV.35). De esta manera demostramos que no hace falta físicamente el canal, y que son las regiones superior e inferior al mismo las causantes de la aparición del máximo de baja frecuencia en el espectro. Obviamente, en el caso de la rectificación sí que es preciso un canal para obtener la respuesta resonante, pues sin él no habría corriente dc.

Hemos escalado los valores de la anchura y la permitividad para mostrar que es el valor de la capacidad de la zanja la que desplaza el máximo de baja frecuencia. En la Figura IV.35 advertimos que el espectro es prácticamente idéntico (misma posición del máximo de baja frecuencia) para los casos en que $W_z=1$, $\varepsilon_z=1$ y $W_z=5$, $\varepsilon_z=5$, mientras que aparece a frecuencias mayores si disminuimos la capacidad asociada a la zanja, como en la estructura con $W_z=5$, $\varepsilon_z=1$. También es interesante observar que si doblamos la concentración de electrones del semiconductor ($N_{ab}=2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), todo ocurre de igual manera pero con el espectro desplazado en un factor $\sqrt{2}$ (*inset* superior izquierdo de la Figura IV.35). Si cuando $N_{ab}=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ el máximo del plasma *bulk* se encuentra a 3.55 THz y el asociado a los *returning carriers* o plasma superficial local (LSP) está en 1.4 THz para el caso de $W_z=1$, $\varepsilon_z=1$, cuando $N_{ab}=2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ aparecen a 5 y 2 THz respectivamente. La variación es la misma en el caso de la estructura con $W_z=5$, $\varepsilon_z=1$, indicándonos sin duda que el origen de ambos máximos está relacionado con la frecuencia de plasma.

En vista de los resultados presentados en las dos últimas secciones concernientes al análisis dinámico y del ruido en corriente en los SSDs, concluimos que desde el punto de vista de las aplicaciones a alta frecuencia resulta necesario reducir el ruido a las frecuencias de interés, es decir, hasta algún THz. Hemos visto que esto lo podemos conseguir aumentando la anchura de la zanja vertical siempre que no se llegue a un tamaño que sea comparable con la longitud del canal, ya que en tal caso se deteriora la capacidad de rectificación del diodo. También se ha concluido que la dinámica de los electrones de las proximidades de la zanja vertical es la causante del aumento del ruido en torno a estas frecuencias.

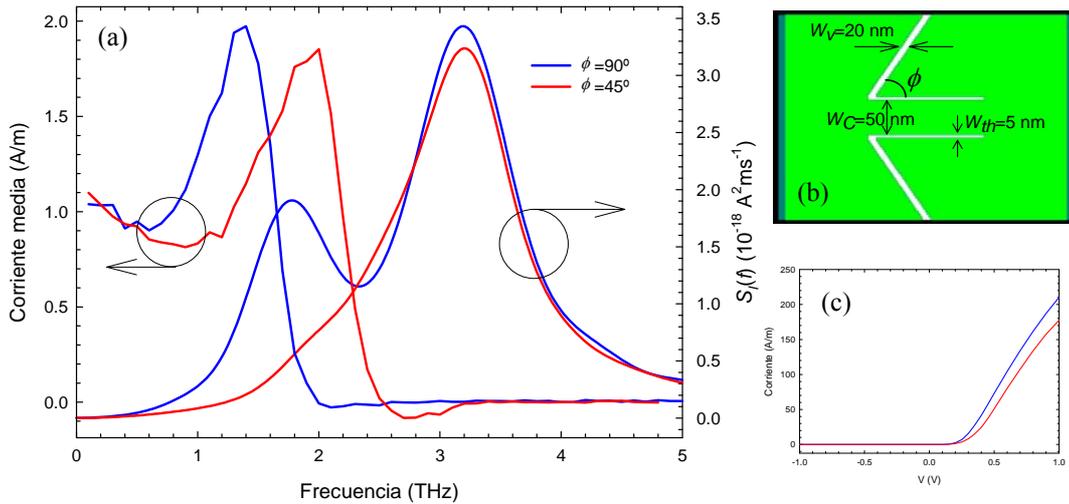


Figura IV.36. (a) Densidad espectral del ruido y valor de la corriente rectificadora media para un diodo como el representado en (b), en donde se ha inclinado la zanja vertical ($\phi = 45^\circ$), comparadas con las de un SSD con la misma anchura de zanjas, $W_v = 20 \text{ nm}$ y $W_h = 5 \text{ nm}$, y la geometría habitual ($\phi = 90^\circ$). (c) Corriente para ambos diodos.

Estas conclusiones nos han animado a simular un SSD en el que se modifica la inclinación ϕ de la zanja vertical con respecto al canal. En la Figura IV.36(a) mostramos los resultados para un diodo en donde $\phi = 45^\circ$ comparados con los de un SSD convencional con $\phi = 90^\circ$, ambos con la misma anchura de zanjas, $W_v = 20 \text{ nm}$ y $W_h = 5 \text{ nm}$. En la Figura IV.36(c) se presentan las corrientes para ambos diodos. Se puede apreciar que en el caso $\phi = 45^\circ$ se tiene una significativa reducción del nivel del ruido en la zona de frecuencias que de interés (1–2 THz). En cuanto a la corriente rectificadora dc, observamos que el máximo de la resonancia se desplaza significativamente (unos 600 GHz) hacia frecuencias mayores. Parece claro entonces que una buena alternativa para aumentar la relación señal/ruido (o mantenerla, pero a frecuencias más elevadas) sería el diseño de SSD con sus zanjas verticales inclinadas. De esta forma podríamos detectar señales de frecuencias muy elevadas sin estar afectados por valores de ruido excesivamente grandes. Es ahora el momento de recordar también la posibilidad de fabricar varios SSDs en paralelo. Ello hace no sólo que se incremente el nivel de señal y se reduzca la impedancia total, sino también que la relación señal/ruido se reduzca en un factor \sqrt{N} , siendo N el número de diodos en paralelo.

IV.3.4. Circuito Equivalente

Para completar el estudio del ruido, hemos intentado reproducir parte de los resultados Monte Carlo representando el SSD por medio de un circuito equivalente sencillo. Utilizaremos un circuito como el de la Figura IV.37 para dar una interpretación de las dependencias de los máximos que aparecen en los espectros del ruido con la geometría de los SSDs.⁹⁰ En equilibrio el espectro del ruido en corriente, mediante el teorema de Nyquist, se puede expresar en términos de la admitancia $Y(f)$ dependiente de la frecuencia como $S_I(f) = 4K_B T \text{Re}[Y(f)]$. De esta forma, representando cada una de las partes del SSD (o del dispositivo objeto de estudio) por diferentes circuitos, como podemos ver en el dibujo, se puede calcular el ruido en corriente a partir de la impedancia $Z(f) = 1/Y(f)$ equivalente de pequeña señal en equilibrio. Los parámetros necesarios para calcular los elementos de cada parte del circuito equivalente se determinan a partir de la geometría del diodo o se estiman mediante resultados de las simulaciones microscópicas Monte Carlo. Hemos empleado circuitos del tipo $R-L-C$ (Figura II.17) como los que introducimos en la sección II.4.3 para representar las regiones donde el transporte es difusivo. Se usan parámetros con subíndice 1 para la zona de los accesos al canal y con subíndice 2 para las regiones externas por encima y por debajo de él. Como vimos anteriormente, la diferente concentración de estas regiones es la responsable de la no homogeneidad que da lugar a la aparición de las oscilaciones de plasma en el ruido en corriente.

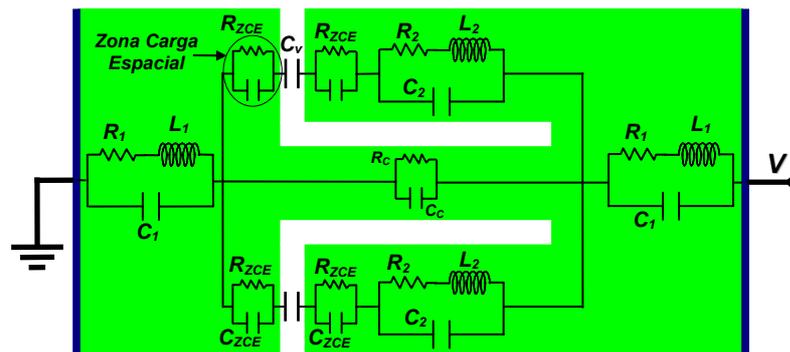


Figura IV.37. (a) Circuito equivalente propuesto para un SSD.

El canal, donde el transporte es balístico o cuasibalístico, se representa por un circuito paralelo tipo R_C-C_C . La resistencia se obtiene de la característica $I-V$ descontando la parte correspondiente a los accesos y toma un valor de $R_C = 0.19 \Omega\text{m}$ para el diodo de referencia. La capacidad la hemos calculado evaluando la variación

de la concentración de electrones en la zona del canal para pequeños incrementos del potencial aplicado en torno al equilibrio, obteniéndose $C_C \sim 10^{-12}$ F/m. En lo que respecta a la capacidad geométrica asociada a las zanjas verticales, la determinamos como $C_v = \epsilon_v / W_v$ donde ϵ_v es la permitividad. Por último, la representación circuital de una zona de carga espacial (ZCE) viene dada por una resistencia R_{ZCE} en paralelo con un condensador C_{ZCE} , Figura IV.37. El cálculo de la C_{ZCE} lo hacemos a partir de la hipótesis de vaciamiento total para la zona de carga espacial, de forma que se puede expresar como

$$C_{ZCE} = \sqrt{\frac{q \epsilon_o \epsilon_r N_{db}}{2(V_s - V)}}, \quad (IV.4)$$

donde q es la carga elemental, $\epsilon_o \epsilon_r$ es la permitividad del semiconductor (con $\epsilon_r = 13.88$ para InGaAs en nuestro caso), N_{db} es la densidad de carga fija y V el potencial aplicado ($V=0$ en nuestro caso ya que se trata de equilibrio). Por último, V_s es la altura de la barrera o potencial de superficie en la frontera de la zanja. Este valor lo determinamos a través de la carga superficial σ (usamos un valor de $\sigma/q = 0.5 \times 10^{12}$ cm⁻²), que a partir de la ecuación I.4 toma la siguiente forma

$$V_s = \sigma^2 / (2qN_{db}\epsilon_o\epsilon_r). \quad (IV.5)$$

Para calcular el valor de R_{ZCE} usamos la expresión de la densidad de corriente derivada de la emisión termoiónica (teoría de Bethe)¹⁵⁶ obteniéndose

$$\begin{aligned} R_{ZCE} &= K_B T / (qJ_o), \\ J_o &= \frac{qm^*(K_B T)^2}{2\pi^2 \hbar^3} e^{-\frac{q(E_F - V_s)}{K_B T}}, \\ E_F &= -\frac{K_B T}{q} \log\left(\frac{N_D}{N_C}\right), \\ N_C &= 2 \left(\frac{m^* K_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}. \end{aligned} \quad (IV.6)$$

Por el momento analizamos simplemente la influencia de la anchura de la zanja vertical, calculando el valor de $\text{Re}[1/Z(f)]$, Figura IV.38, para varios valores de la anchura de las zanjas W_v (y de su capacidad C_v asociada) mediante el circuito que se muestra en la Figura IV.37. El circuito equivalente es capaz de reproducir al menos cualitativamente las principales características del espectro del ruido. Vemos cómo

$\text{Re}[1/Z(f)]$ presenta los dos máximos observados en $S_I(f)$ para valores de frecuencia similares a los obtenidos en las simulaciones Monte Carlo. Además, la reducción de C_v debido a unas zanjas verticales más anchas provoca el desplazamiento del primer máximo hacia frecuencias más altas (disminuyendo el ruido en el rango de interés de las posibles aplicaciones). Esto refrenda la interpretación dada a este máximo.

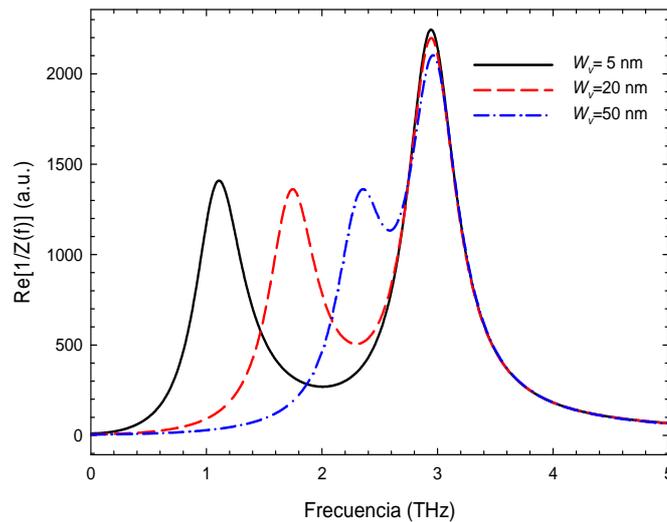


Figura IV.38. Parte real de la admitancia obtenida mediante simulación del circuito de la Figura IV.37 para varios valores de la anchura de la zanja vertical W_v (que proporcionan diferentes valores de la capacidad C_v).

Al final del apartado anterior anunciamos que se explicaría el porqué de la saturación en la posición del máximo de baja frecuencia al ir aumentando la permitividad de la zanja vertical. Gracias de nuevo a un circuito equivalente sencillo podemos esclarecer el motivo. Para ello prestamos especial atención a la región clave del SSD, la zona de vaciamiento formada en las proximidades de la zanja vertical, que aparece señalada en la Figura IV.37, y que está representada en la Figura IV.39(a).^{119,157} Realizamos los cálculos para una anchura de $W_v=5$ nm y para los mismos valores de $\epsilon_v=1, 2, 4, 8$ y 12 que en las simulaciones Monte Carlo, Figura IV.31(b). Para dichas permitividades, C_v por unidad de longitud no simulada es, en F/m, 1.77×10^{-10} , 3.54×10^{-10} , 7.08×10^{-10} , 1.41×10^{-9} y 2.13×10^{-9} , respectivamente. En nuestro caso, los valores de R_{ZCE} y C_{ZCE} de la zona de vaciamiento son $6.2 \times 10^{-2} \Omega\text{m}$ y 2.45×10^{-10} F/m.

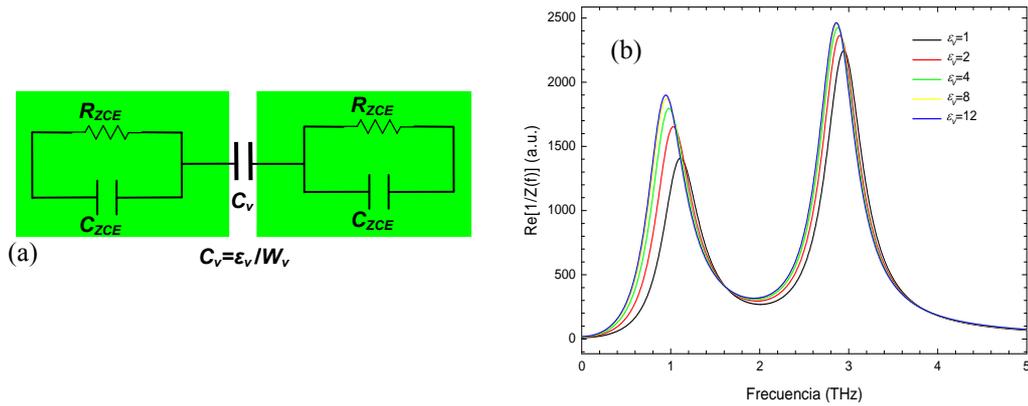


Figura IV.39. (a) Circuito equivalente propuesto para representar la zona próxima a la zanja vertical de un SSD y (b) parte real de la conductancia para varios valores de la permitividad de la zanja vertical ϵ_v y una anchura $W_v=5$ nm constante.

Los resultados de las simulaciones usando el circuito equivalente los presentamos en la Figura IV.39(b). El máximo de baja frecuencia se traslada hacia frecuencias menores al aumentar ϵ_v , llegando a presentar una saturación en dicho desplazamiento a partir de un valor de $\epsilon_v=4$. La explicación es sencilla y reside en la relación entre el valor de las capacidades C_v y C_{ZCE} . Dado que R_{ZCE} es muy grande, las capacidades están básicamente en serie, de forma que en su equivalente dominará la más pequeña de ellas. En el momento que C_v supere en un orden de magnitud a C_{ZCE} , la capacidad equivalente vendrá fijada únicamente por ésta última, ya que es siempre la menor. A partir de los valores numéricos de dichas capacidades podemos observar que el fenómeno aparecerá a partir de $\epsilon_v=4$, que es cuando C_v supera aproximadamente en un orden de magnitud a C_{ZCE} .

Por último, para estudiar la influencia de la longitud del canal en el espectro del ruido, también con el circuito equivalente, en la Figura IV.40 representamos los resultados para tres longitudes del canal $L_C=200, 250$ y 300 nm. Podemos observar que el máximo de alta frecuencia se desplaza hacia frecuencias menores al reducir L_C , como explicábamos mediante la ecuación IV.3 y veíamos en los resultados Monte Carlo de la Figura IV.33. Además, también reproducimos el comportamiento del máximo de baja frecuencia, que aparece a frecuencias mayores para canales más cortos (Figura IV.33). Concluimos que el circuito equivalente es capaz de reproducir las principales características del espectro del ruido de los SSDs.

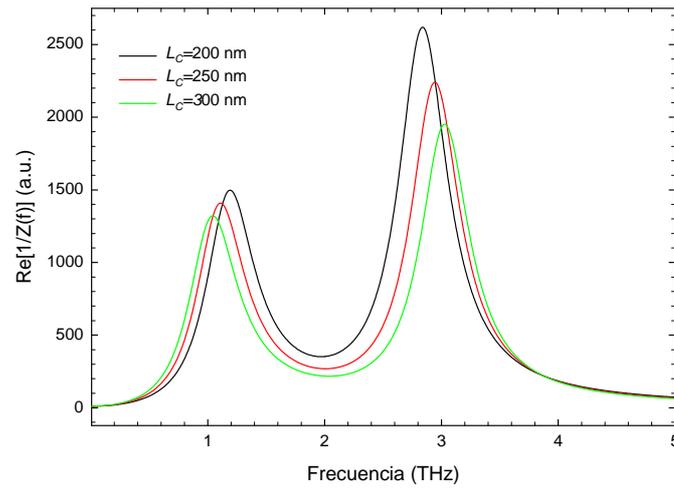


Figura IV.40. Parte real de la conductancia para varios diodos con diferente longitud del canal $L_c=200$, 250 y 300 nm. El resto de los tamaños de la geometría se mantiene igual que en el diodo de referencia.

IV.4. OTRAS ESTRUCTURAS BASADAS EN SSDs

Una vez entendido el funcionamiento básico de un diodo autoconmutante, nos proponemos el diseño de dispositivos alternativos y de circuitos basados en él con el fin de explotar su funcionalidad como rectificador. En esta sección, a modo de ejemplo analizamos dos posibles configuraciones.

Además, dado que el funcionamiento del SSD no se basa en el transporte balístico, su fabricación es posible con materiales como el silicio, cuya tecnología esta mucho más avanzada. Daremos alguna información acerca de esta posibilidad.

IV.4.1. *Self-Switching Transistor*

Mediante una pequeña modificación en la geometría de un SSD, añadiendo un terminal de control (o puerta lateral), Figura IV.41(a), se puede conseguir un transistor autoconmutante o *Self-Switching Transistor* (SST).^{48,75} Por medio de este tercer terminal, que actúa como la puerta de un transistor de efecto de campo (FET) típico, se obtienen unas características como las de la Figura IV.41(b).

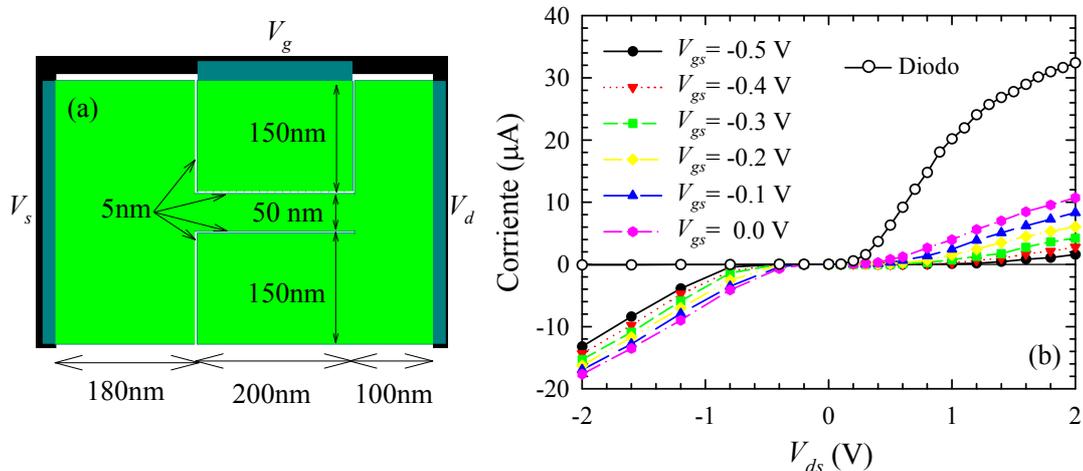


Figura IV.41. (a) Geometría de un SST y (b) características $I-V$ en función del potencial de puerta junto a la de un SSD con igual geometría.

Si comparamos las características $I-V$ con la de un SSD con la misma geometría (200 nm de longitud de canal), podemos apreciar que la presencia de la puerta lateral degrada el poder rectificador del dispositivo (menor corriente en directa y mayor corriente de pérdidas de inversa). Esto ocurre porque el potencial de drenador, V_d , que es el que proporciona la rectificación en los SSDs, no controla de manera eficiente la barrera de potencial en el interior del canal del SST, que en este caso está fijada en mayor medida por el potencial de puerta V_g . La optimización del

funcionamiento del dispositivo, con el fin de mantener la autoconmutación en el SST, se consigue cuando el control sobre el potencial presente en las discontinuidades superior e inferior del canal se reparte entre la puerta y el drenador. Para reducir la influencia del contacto de puerta (que acabamos de ver que es dominante en esta geometría) se debe aumentar la anchura d de la zanja entre canal y puerta. La contrapartida evidente es que dicha modificación reduce el control de la puerta sobre la corriente de drenador, y consecuentemente la transconductancia del SST disminuye. En la Ref. 75 se ha comprobado cómo ésta pasa de $20 \mu\text{S}$ para $d=5 \text{ nm}$ a $10 \mu\text{S}$ para $d=20 \text{ nm}$ y $7 \mu\text{S}$ para $d=30 \text{ nm}$.

IV.4.2. Puerta lógica

El segundo circuito sencillo del que presentamos resultados obtenidos con las simulaciones Monte Carlo es una puerta lógica tipo OR basada en dos SSDs.⁴⁸ Se trata de dos diodos dispuestos en paralelo, Figura IV.42(a), con sus terminales izquierdos comunes (V_{salida} , al aire) y los derechos aislados por una zanja dieléctrica (V_A y V_B).

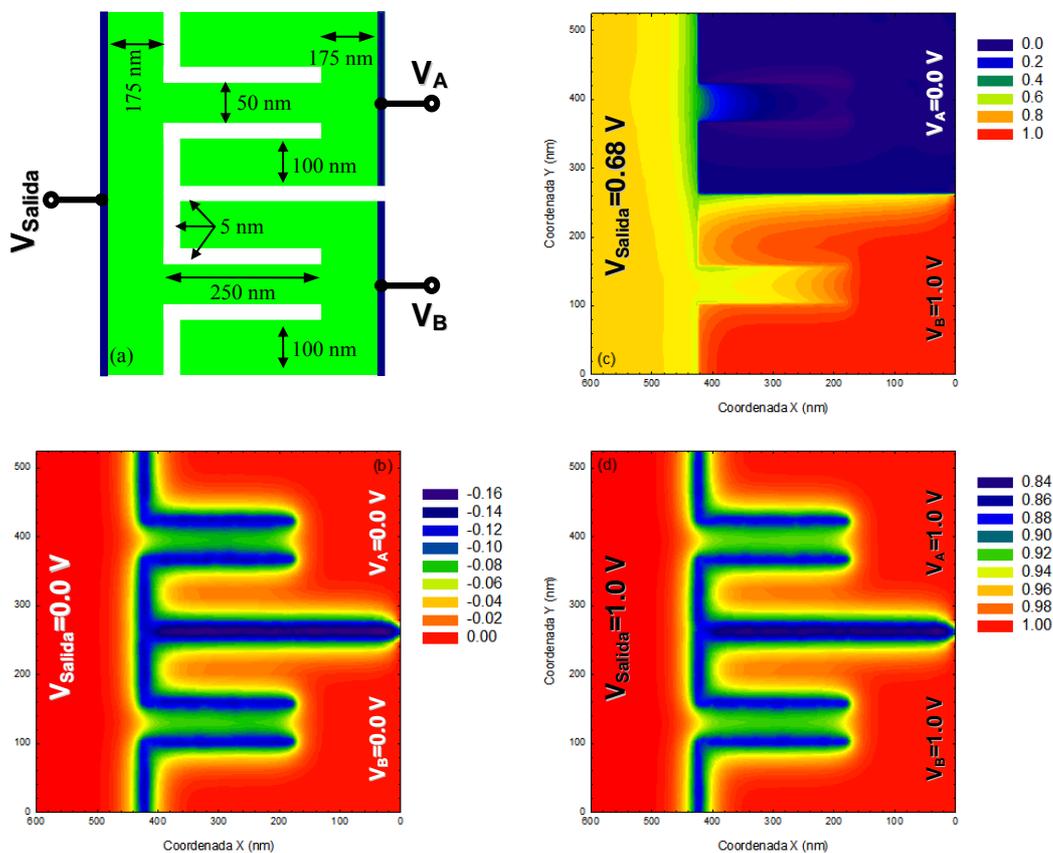


Figura IV.42. (a) Geometría la puerta rectificadora OR y mapas de potencial eléctrico para diferentes casos (b) $V_A=0.0 \text{ V}$, $V_B=0.0 \text{ V}$, (c) $V_A=0.0 \text{ V}$, $V_B=1.0 \text{ V}$ y (d) $V_A=1.0 \text{ V}$, $V_B=1.0 \text{ V}$.

El funcionamiento es muy sencillo de entender; cuando aplicamos un potencial positivo a uno de los dos diodos abrimos el canal correspondiente, de manera que éste se comporta como una resistencia muy pequeña. Por el contrario, si el potencial aplicado es nulo, el canal está cerrado, de modo que no hay flujo de electrones a través de él, es decir, su imagen sería la de una resistencia muy grande. Así, en el caso de $V_A=0.0$ V, $V_B=1.0$ V de la Figura IV.42(c), el potencial de salida es más próximo a la unidad, ya que, el potencial aplicado apenas cae en el diodo inferior, que está abierto, mientras que sí lo hace de manera significativa en el superior, que está cortado.

Los casos de la Figura IV.42(b) y (d), en los que los potenciales aplicados en las entradas son iguales, están en equilibrio, el potencial de salida es el mismo que el de la entrada, siendo ambos perfiles de potencial iguales salvo desplazamiento de escala. En la Figura IV.43 hemos representado los valores del potencial de salida para las diferentes entradas junto a la tabla de verdad del circuito lógico, que funcionaría como una puerta OR (con una lógica definida positiva).

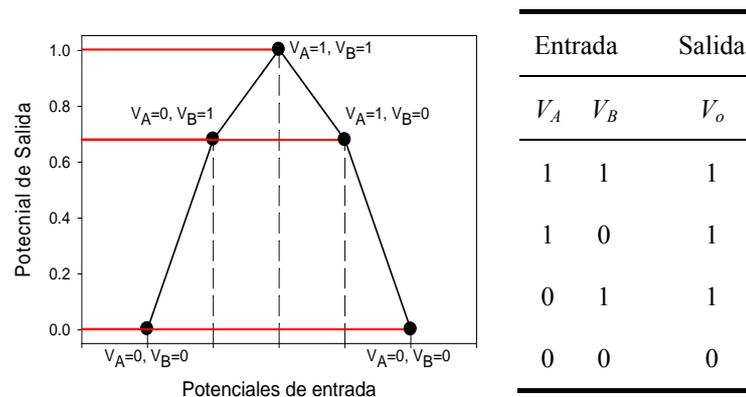


Figura IV.43. Valores del potencial de salida y tabla de verdad en función de las diferentes entradas (suponiendo una lógica definida positiva, “0”→0.0 V, “1”→1.0 V).

IV.4.3. SSD de Silicio

Debido a que el principio de operación de los SSDs no está basado en el transporte balístico ni en el uso de materiales de alta movilidad, se abre la posibilidad de diseñar diodos en obleas de silicio SOI (*silicon-on-insulator*).⁵² La tecnología del silicio está mucho más extendida que la de los materiales III–V (y además es compatible con los métodos CMOS), sin embargo, el uso de materiales de alta

movilidad como el InGaAs permite alcanzar mayor frecuencia de corte, derivada de los efectos de sobrevelocidad asociados a su naturaleza balística.

Para mostrar las posibilidades de los diodos fabricados con silicio mostramos resultados preliminares referentes a la corriente rectificada media en función de la frecuencia de la señal aplicada.¹⁵⁸ Estos cálculos muestran una dependencia similar a la encontrada en SSDs de InGaAs, pero con una frecuencia de corte que es un orden de magnitud inferior. En la Figura IV.44 observamos cómo al disminuir la longitud del canal o la temperatura de operación, el diodo responde a frecuencias más altas, proporcionando además valores de corriente mayores, lo que significa que el transporte electrónico posee un carácter más balístico. Concluimos entonces que utilizando el silicio como material del canal se podrían fabricar SSDs que respondieran a frecuencias de hasta centenas de GHz si se redujera lo suficiente su longitud.

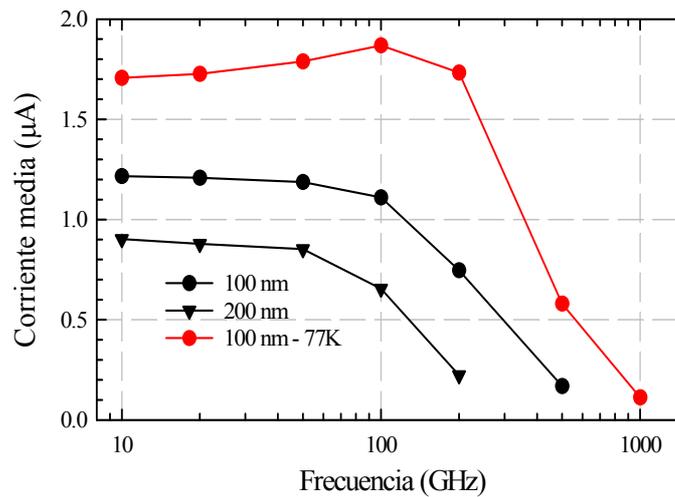


Figura IV.44. Valor medio de la corriente de un SSD de Si frente a la frecuencia de la excitación para dos longitudes de canal diferentes de 100 y 200 nm a temperatura ambiente y para una temperatura de $T=77$ K.

CAPÍTULO V

DIODOS DE MEMORIA

Al poco tiempo de empezar a estudiarse la física y las aplicaciones de los SSD, en 2005, también A. M. Song *et al.*,^{55,56} basándose en el mismo tipo de nanoestructura, realizaron unas medidas en las que observaban un efecto de histéresis en la característica $I-V$ del diodo. Se le denomina *Self-Switching Memory* (SSM), ya que sus aplicaciones están dirigidas a la fabricación de dispositivos de memoria. Este tipo de dispositivo de sólo dos terminales presenta experimentalmente una retención de carga de unas 10h a temperatura criogénica y de unos pocos minutos a temperatura ambiente.

Tomando como base de partida los resultados experimentales, en este capítulo estudiaremos los efectos de histéresis que aparecen en la rectificación de la corriente en este diodo mediante el uso de nuestro simulador Monte Carlo.^{92,93} Los detalles del algoritmo empleado para el tratamiento de los efectos de superficie se explicaron con detalle en la sección [II.3.2.c](#). Explicaremos el ciclo de histéresis en términos de la carga/descarga de los estados superficiales. También analizaremos la influencia de la geometría y de los parámetros del modelo de manera muy detallada, ayudándonos de resultados microscópicos de perfiles de carga superficial, concentración o potencial eléctrico.

V.1. RESULTADOS EXPERIMENTALES

V.1.1. Efecto memoria

El diodo de memoria posee un principio de funcionamiento diferente a las memorias semiconductoras convencionales. Se trata de un dispositivo basado en efectos superficiales de carga. A día de hoy, las memorias de referencia son las dinámicas de acceso aleatorio (DRAM) y las *flash*.¹⁵⁹ Las de tipo DRAM tienen tiempos de acceso muy cortos (por debajo de 20 ns) y una vida elevada en términos de lectura y escritura ($>10^{15}$ ciclos). Sin embargo, son memorias volátiles por lo que la información tiene que refrescarse en tiempos muy cortos, de milisegundos. Por otra parte, las *flash* (no volátiles), tienen tiempos de memoria de hasta 10 años, pero con una velocidad de escritura muy lenta ($\sim\mu\text{s}$) y escasa durabilidad (10^6 ciclos). Recientemente, y como consecuencia del auge de la nanotecnología están apareciendo nuevos tipos de memorias (en fase de investigación) basadas en diferentes mecanismos físicos para almacenamiento como: el magnético (MRAM), de un solo electrón (SET), memorias moleculares, memorias de cambio de resistencia de un aislante (MIM) o también un tipo de memorias basadas en estructuras de puntos cuánticos.^{160,161} Estas últimas están limitadas únicamente por el tiempo de relajación de los portadores de carga (orden de ps) y pueden alcanzar cortísimos tiempos de escritura de hasta 6 ns.¹⁶² Todas estas memorias, junto con las que se proponen en este capítulo (las SSM, basadas en efectos de carga), ofrecen grandes posibilidades en términos de escalado. En lo que respecta a las SSM, se busca mejorar sus prestaciones relativas a velocidad, tiempo de retención, coste y consumo de potencia, con la finalidad de hacerlas competitivas.

Centrándonos en las memorias SSM basadas en efectos de carga, veamos entonces cuál es la topología y características de salida del dispositivo objeto de nuestro estudio. En el *inset* de la Figura V.1 aparece la imagen AFM de un SSM. La topología es idéntica a la de los SSDs del Capítulo IV. Se trata de una estructura donde se crece un pozo cuántico de $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}$ sobre InP mediante la técnica *MetalOrganic Vapour Phase Epitaxy* (MOVPE). Las zonas oscuras constituyen las zanjais aislantes obtenidas mediante ataque de la capa del gas bidimensional (2-DEG) que se encuentra a 40 nm por debajo de la superficie. Las propiedades de la heteroestructura son $4.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ para la densidad de portadores y una movilidad

de $4.5 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ a $T=4.2 \text{ K}$. A temperatura ambiente estas magnitudes son $4.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $1.2 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ respectivamente.⁵⁵

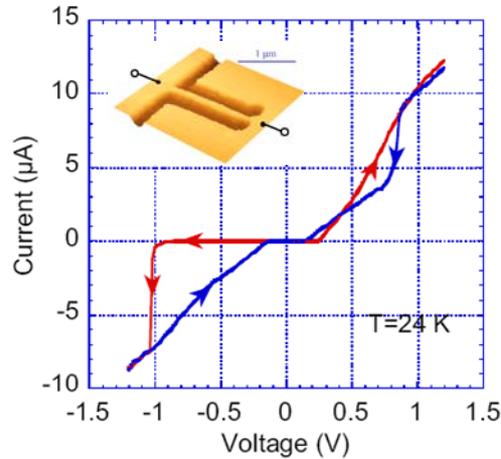


Figura V.1. Características I - V medidas a 24 K en un diodo SSM. El sentido del aumento o disminución del potencial aplicado se indica con flechas sobre las curvas. *Inset*: imagen AFM. Extraído de la Ref. 55.

Si el potencial aplicado está en el rango de $+0.8$ a -0.8 V , la curva I - V de la Figura V.1 es independiente de la dirección de barrido del potencial aplicado. Superado este valor, cuando aplicamos un potencial de aproximadamente -1.0 V aparece un significativo efecto de histéresis asimétrica en la corriente. Una vez alcanzados altos valores de corriente de inversa, si cambiamos la dirección de polarización y vamos hacia potenciales mayores (menos negativos) se obtiene una característica I - V muy diferente. Se observa que la corriente es significativamente mayor respecto a la situación anterior. Este fenómeno que hemos descrito para polarización inversa también aparece en la parte positiva de la característica. Se observa que en la rama de bajada los valores de corriente son algo menores que los que presenta el diodo en la rama de subida. Una vez alcanzado un potencial aplicado de $+1.0 \text{ V}$ la curva I - V recupera los valores anteriores de forma que la corriente es nula en el régimen de inversa. Nótese que este comportamiento es diferente al fenómeno de ruptura de un diodo normal, donde la curva I - V es independiente de la dirección de barrido del potencial aplicado.

V.1.2. Aplicaciones y principio de funcionamiento

El efecto de histéresis puede utilizarse para aplicaciones de memoria. En la Figura V.2 hemos representado esquemáticamente cómo sería la respuesta de la corriente en función del potencial aplicado para pulsos *test* de $V=-0.5 \text{ V}$. Mientras el

potencial aplicado se mantenga en la región por encima de -0.8 V la corriente es nula (correspondería a un estado de memoria que llamamos “1”). Para poder cambiar (escribir) de estado de memoria necesitamos aplicar un pulso de $V=-1.0$ V y así tener valores de corrientes no nulos. Una vez hecho esto, al aplicar pulsos *test* de lectura de $V=-0.5$ V tendríamos una corriente de $I=-2.5$ μ A (correspondería a un estado de memoria que llamamos “0”). Si continuamos aplicando pulsos en el tiempo vemos que el estado de memoria se mantiene en “0”. Este tipo de medidas se han confirmado experimentalmente y ya las mostramos en el Capítulo I, en la Figura I.17(b) y (c). La mayor retención del estado de memoria, de hasta 10 horas, se obtiene para temperaturas de 24 K. Finalmente, el cambio (escritura) al estado de memoria “1” se realiza aplicando un potencial de $V=+1.0$ V y a continuación pulsos *test* de $V=-0.5$ V para corroborar valores nulos de nuevo en la corriente.

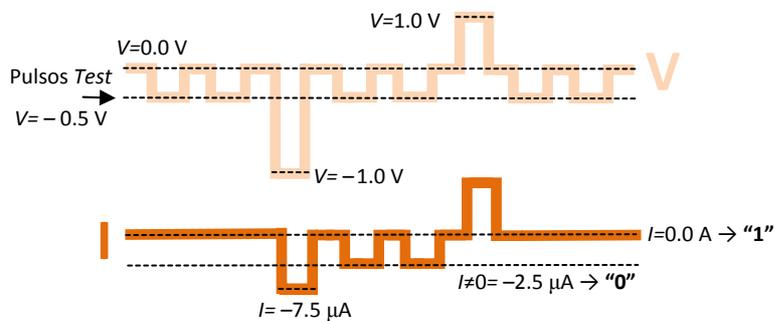


Figura V.2. Representación esquemática del efecto memoria en un diodo SSM. Pulsos *test* de -0.5 V. Pulsos para cambio de estado de memoria ± 1 V.

En la Figura V.3 mostramos medidas experimentales del efecto de histéresis para una señal triangular de entrada de frecuencia 10 kHz. Los resultados se han obtenido a temperatura ambiente. Estas medidas indican que el tiempo característico del principio físico subyacente a este comportamiento es menor o al menos del orden de los μ s. A esta temperatura el tiempo de retención está alrededor de los minutos, bastante mayor que el de las típicas memorias DRAM. Además se espera que futuras optimizaciones de diseño, nuevos materiales y tratamiento superficial permitan a los SSMs competir con las memorias de tipo flash actuales.

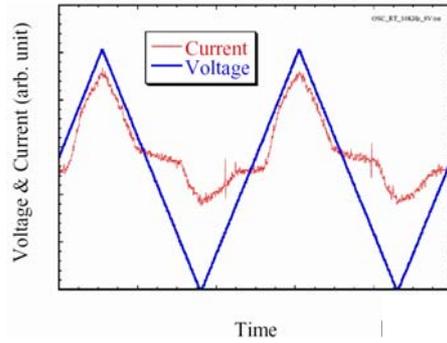


Figura V.3. Medidas experimentales de la corriente y potencial aplicado para una señal triangular de frecuencia $f=10$ kHz y amplitud pico–pico $V_{pp}=8$ V ($T=300$ K). Comunicación privada de A. M. Song.

Por último conviene recalcar que por ser un dispositivo de dos terminales, así como por la simplicidad de su proceso de fabricación, es posible la implementación y paralelización de un gran número de SSM en un solo chip. Se reducen así el coste y las dificultades de los procesos actuales de litografía, que precisan de múltiples y muy complicados procesos de alineamiento.

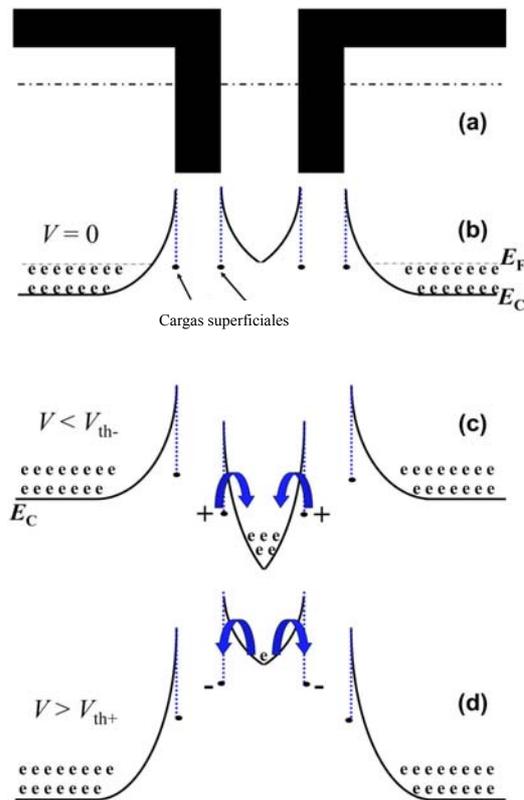


Figura V.4. (a) Representación gráfica de un SSM. (b) Bandas de conducción a lo largo de la línea de puntos de (a). (c) Cuando el potencial aplicado supera un umbral negativo V_{th-} los estados superficiales se descargan transfiriendo su carga al canal. (d) La situación contraria se produce si el potencial aplicado supera un umbral positivo V_{th+} . Extraído de la Ref. 55.

El principio de funcionamiento de este dispositivo es totalmente diferente al de una memoria semiconductor convencional. Para explicar el efecto memoria, en la Ref. 55 se ha propuesto el siguiente modelo. La base reside en las capturas y emisiones de carga por parte de los estados superficiales en las fronteras con las zanjas dieléctricas o aislantes.

En la Figura V.4(b) se ilustra la forma de la banda de conducción a lo largo de un corte perpendicular al canal [línea de puntos de la Figura V.4(a)]. Ésta presenta la forma típica, curvada hacia arriba al acercarse a la pared de la zanja debido a la carga negativa de los electrones en los estados superficiales. Como se explicó en el Capítulo I, la posición en energía de los estados superficiales se encuentra en la zona intermedia del gap con una distribución estrecha en energía. Para potencial nulo, los estados superficiales están en equilibrio con el 2-DEG, y el nivel de Fermi cerca de la superficie, E_F , se encuentra aproximadamente en la mitad del gap, ya que esta región se encuentra completamente vaciada. La situación cambia bajo polarización aplicada. Si se supera un umbral negativo, V_{th-} , la banda de conducción en el canal baja significativamente en energía, de manera que los estados superficiales se pueden descargar, Figura V.4(c), ya sea por procesos túnel o excitación térmica, según la temperatura y el perfil del potencial. De esta forma la carga en las superficies laterales del canal será menos negativa, de manera que el campo eléctrico vacía menos el canal, aumentando la conductancia del dispositivo como hemos visto que ocurre experimentalmente. Nótese que esta situación solamente se alcanza a partir de un determinado potencial aplicado, para el cual la barrera de potencial entre el canal y los estados superficiales es lo suficientemente estrecha para que la descarga por efecto túnel sea apreciable. El escenario contrario se presenta mediante la aplicación de un potencial positivo elevado, $V > V_{th+}$, que induce el proceso opuesto de transferencia de carga (emisión termoiónica) desde el canal hacia los estados superficiales, Figura V.4(d). Esta imagen permite interpretar cualitativamente los resultados pero, como se indica en la Ref. 55, se requiere de simulaciones numéricas con un modelo completo del efecto memoria para estudiar en detalle las cargas superficiales y los perfiles de potencial, y para permitir la futura optimización del dispositivo.

V.2. SIMULACIONES MONTE CARLO

Tratemos ahora de usar nuestro simulador Monte Carlo (con el modelo de carga superficial auto-consistente desarrollado) para explicar el funcionamiento de este dispositivo.^{92,93} Los detalles del refinado del modelo se describieron en la sección II.3.2.c, por lo que aquí nos limitamos a presentar los resultados obtenidos. Recordemos los valores de los parámetros fundamentales del modelo $N_{IQSE}=500$, $N_{car}=N_{db}/50$, $N_{des}=N_{db}/100$, $\Delta\sigma=10^{10}$ cm⁻² y un valor máximo de carga de $\sigma_{max}/q=0.5\times 10^{12}$ cm⁻². Hemos realizado simulaciones *top-view* del canal de InGaAs de un SSM con la geometría mostrada en la Figura V.5. Las dimensiones específicas de la estructura cuyos resultados mostramos a continuación son $W_C=60$ nm, $L_C=250$ nm, $W_h=W_v=10$ nm y $L_{acc}=175$ nm.

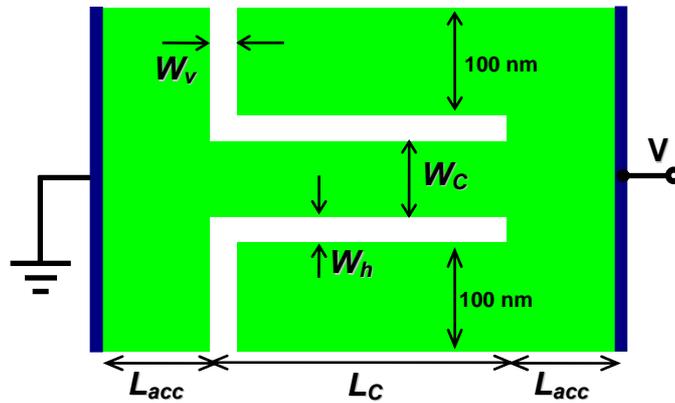


Figura V.5. Geometría del SSM. W_C anchura, L_C longitud del canal y $W_h=W_v$ anchura de las zanjas.

V.2.1. Histéresis en las características $I-V$

Recordemos brevemente la filosofía del modelo que se usa en la simulación de estos dispositivos. Los parámetros que se introdujeron para reproducir los procesos de carga y descarga de los estados superficiales hacían referencia al campo eléctrico perpendicular a las interfaces, E^\perp . Así, en el algoritmo de actualización de la carga superficial implementado dentro del simulador se precisa calcular el valor del campo eléctrico normal a la separación del canal con el dieléctrico y compararlo con dos cotas que denominamos umbral de carga y umbral de descarga, E_{car} y E_{des} , respectivamente. En la Figura V.6 se han representado de forma esquemática las diferentes situaciones que se pueden dar en el modelo.

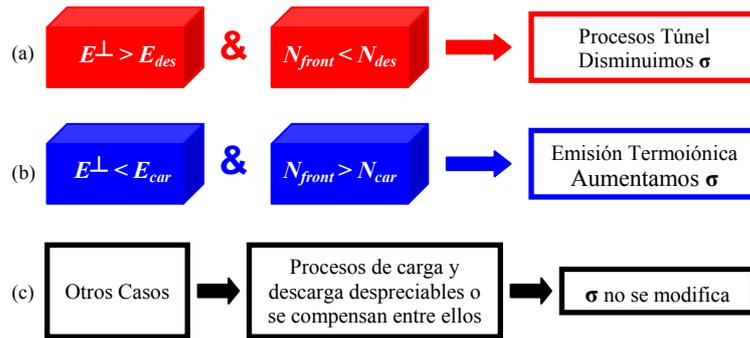


Figura V.6. Esquema representativo de las diferentes situaciones que se pueden presentar en términos del campo eléctrico normal E_{\perp} y de la concentración N_{front} con respecto a los diferentes parámetros: campo umbral de descarga E_{des} , y de carga E_{car} , niveles de concentración inferior o de descarga N_{des} y superior o de carga N_{car} . (a) Descarga de estados superficiales por efecto túnel. $N_{front} < N_{des}$ y $E_{\perp} > E_{des}$. (b) Carga de estados superficiales desde el canal por emisión termoiónica. $N_{front} > N_{car}$ y $E_{\perp} < E_{car}$. (c) En el resto de casos no se modifica la carga superficial.

La Figura V.7, muestra la característica $I-V$ obtenida para diferentes valores del campo umbral de descarga E_{des} (siempre con el mismo campo umbral de carga $E_{car}=20$ kV/cm). Las curvas $I-V$ presentan un efecto de histéresis que explicamos con ayuda de la ocupación de los estados superficiales de las fronteras del canal, Figura V.7(b). Todas las simulaciones se han realizado a temperatura ambiente.

El ciclo de polarización comienza en +2.0 V, donde todos los estados superficiales están ocupados, y continúa siguiendo la dirección de las flechas de la gráfica. Al ir disminuyendo V hacia 0.0 V (rama de bajada que representaremos con \downarrow), la corriente toma el mismo valor para los diferentes valores de E_{des} debido a que la carga superficial permanece esencialmente constante, como se aprecia en la Figura V.7(b). Al llegar a potenciales negativos, la carga superficial de las paredes del canal disminuye significativamente, permitiendo así un flujo de corriente (recordar que para valores menores de $\sigma/q \approx 0.3 \times 10^{12}$ cm⁻², donde $W_d \approx W_c/2$, el canal se abre). Podemos apreciar que cuanto mayor es el valor del umbral de descarga mayor es el potencial de inversa que es necesario aplicar para vaciar los estados de superficie y tener por tanto una corriente no nula. Éste sería el potencial umbral negativo V_{th-} del que hablábamos en la sección anterior. Además, el nivel de dicha corriente de inversa es menor para E_{des} altos debido a la elevada cantidad de carga superficial presente todavía en las fronteras laterales para un potencial dado, como se aprecia en la Figura V.7(b). El aumento de la corriente en inversa al sobrepasar el valor de V_{th-} no es tan acusado como en los resultados experimentales. La primera razón es que dichas

medidas son a baja temperatura mientras que nuestros resultados Monte Carlo son a temperatura ambiente y, por otra parte, pueden estar ocurriendo fenómenos de ionización por impacto que nosotros no hemos incorporado por el momento.

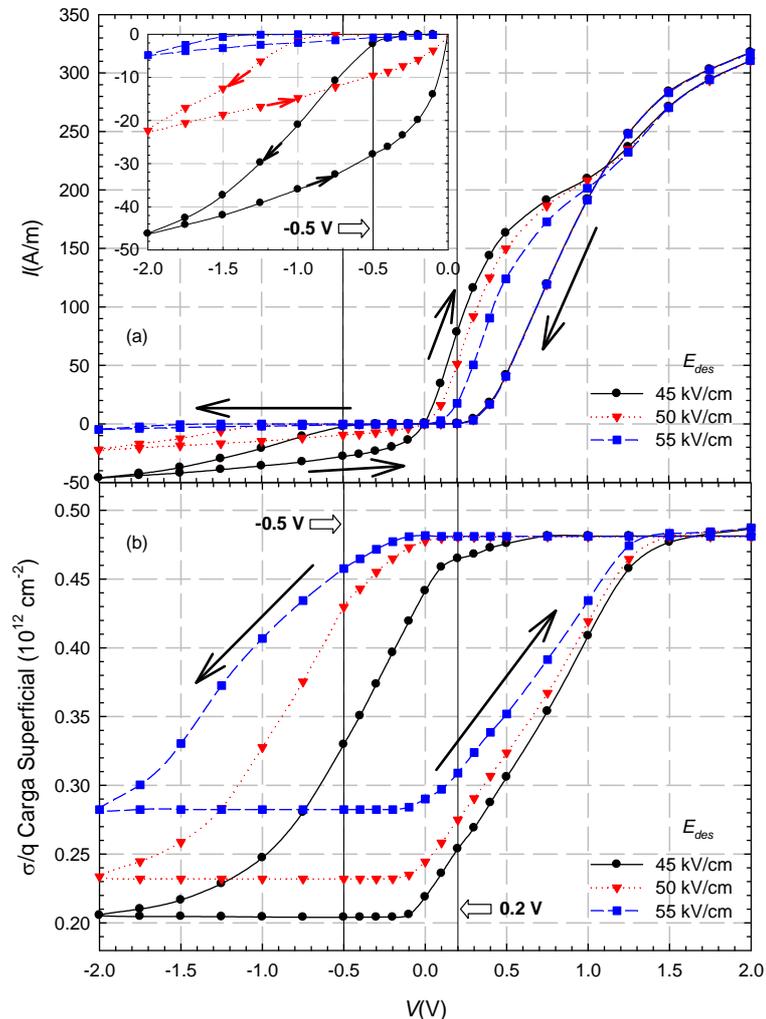


Figura V.7. (a) Características I - V de un SSM para diferentes valores del campo de descarga E_{des} . El *inset* muestra un *zoom* del ciclo en la región de polarización inversa. (b) Valor medio de la carga superficial en los laterales interiores de las zanjas. $E_{car}=20$ kV/cm.

Una vez alcanzado el valor de $V=-2.0$ V, al aumentar al potencial aplicado (rama de subida que representaremos con \uparrow) la carga superficial apenas se modifica hasta que un número significativo de electrones llenan el canal y $N_{front} > N_{car}$, condición que sólo se alcanza para potenciales positivos. En contraposición, en la rama de bajada la corriente en directa ahora sí es diferente para cada valor de E_{des} ya que, aunque la evolución con V es similar, los valores de partida de la carga superficial no son los mismos. Podemos observar un interesante fenómeno que también aparece en las medidas experimentales.⁵⁵ Se trata de un cruce en la curva I - V alrededor de +1 V entre la rama de subida y la de bajada. En la Figura V.7(b) se

aprecia que para dicho valor de V las cargas superficiales presentan una saturación en la rama descendente, pero no en la ascendente, donde aún siguen aumentando. Es decir, que el perfil de carga superficial sigue evolucionando. De hecho, justo antes de ese valor, en torno a $V=+0.5$ V, hay un punto de inflexión en la curva del valor medio de la carga superficial, lo que se ve reflejado en una diferente evolución de la corriente, mostrando un menor incremento con respecto a V , y provocando por ello un cruce en la característica de salida.

Atendiendo a la evolución de la corriente con la carga superficial, parece claro que si el potencial aplicado en inversa no es capaz de vaciar los estados superficiales, la curva $I-V$ del dispositivo corresponderá a la rectificación estándar de un SSD típico^{48,76} sin ningún fenómeno de histéresis. En nuestro caso, podemos distinguir dos estados binarios de memoria diferentes tanto para $+0.2$ V como para -0.5 V. El cambio (o escritura) entre estados se puede realizar mediante la aplicación de pulsos de valor ± 2.0 V ($+2.0$ V para fijar un estado “1”, de no conducción y -2.0 V para un estado “0”, de conducción), y para la lectura se usarían pulsos *test* de $+0.2$ ó -0.5 V.

A continuación mostramos los resultados obtenidos al modificar no ya el campo umbral de descarga sino el de carga, E_{car} . La Figura V.8, muestra la influencia de este parámetro en las curvas $I-V$ así como en los valores medios de la carga superficial de las fronteras del canal (siempre con el mismo campo umbral de descarga $E_{des}=50$ kV/cm). La repercusión de variar el campo umbral de carga se aprecia fundamentalmente en la parte de polarización directa del ciclo. Podemos observar que tanto las corrientes como las cargas superficiales en la región de inversa son básicamente iguales. Las mayores diferencias las encontramos en la subida hacia potenciales positivos. El valor del potencial aplicado para el cual empieza a crecer la carga superficial depende del umbral de carga, siendo mayor para valores bajos de E_{car} (pues la condición es $E^{\perp} < E_{car}$, Figura V.6, se alcanza con mayor dificultad). Éste sería el potencial umbral positivo V_{th+} del que hablábamos en la sección anterior. La evolución de las cargas superficiales es similar pero su valor es significativamente diferente, lo que da lugar a una corriente distinta en función del campo umbral de carga usado, *inset* de la Figura V.8(a).

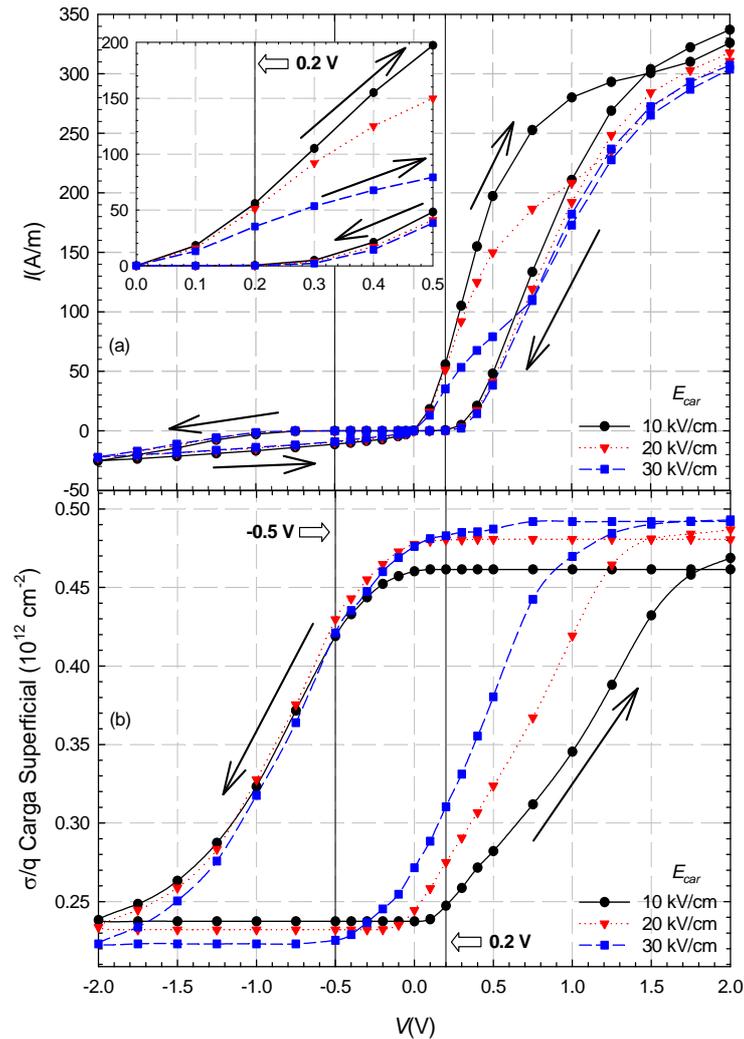


Figura V.8. (a) Influencia en las características I - V de un SSM del campo de carga E_{car} . El *inset* muestra un zoom del ciclo en la región de polarización directa. (b) Valor medio de la carga superficial en los laterales interiores de las zanjas. $E_{des}=50$ kV/cm.

V.2.2. Análisis microscópico

El uso de una herramienta como el simulador Monte Carlo permite el estudio pormenorizado de diferentes magnitudes microscópicas. A continuación presentamos los resultados obtenidos para el potencial eléctrico, la carga superficial y la concentración de electrones en las distintas regiones del ciclo de polarización del SSM para el caso específico del SSM con $E_{des}=50$ kV/cm y $E_{car}=20$ kV/cm.

Empezamos describiendo la forma del potencial eléctrico a lo largo del centro del canal en diferentes configuraciones de polarización (Figura V.9). Para $V=+0.2$ V \downarrow , el potencial presenta una barrera muy pronunciada para el movimiento de los electrones en ambas direcciones (canal cerrado). Por el contrario, en la rama

de subida en la que los estados superficiales aún no se han cargado (están descargados ya que venimos de potenciales negativos), la barrera de potencial para los electrones de izquierda a derecha desaparece, de forma que tenemos un flujo de electrones que da lugar a una corriente no nula. Un resultado similar se puede apreciar para el caso de $V=-0.5$ V, donde después de la descarga de los estados superficiales (llegando a -2.0 V y regresando a potenciales aplicados mayores), la barrera de derecha a izquierda prácticamente desaparece, dando lugar a una corriente de inversa. Para $V=-0.5$ V \downarrow la corriente es nula, pues el perfil de potencial presenta una barrera muy elevada al movimiento en las dos direcciones. En los *insets* de la Figura V.9 hemos representado las curvas $I-V$ para apreciar con claridad en qué punto de la característica nos encontramos.

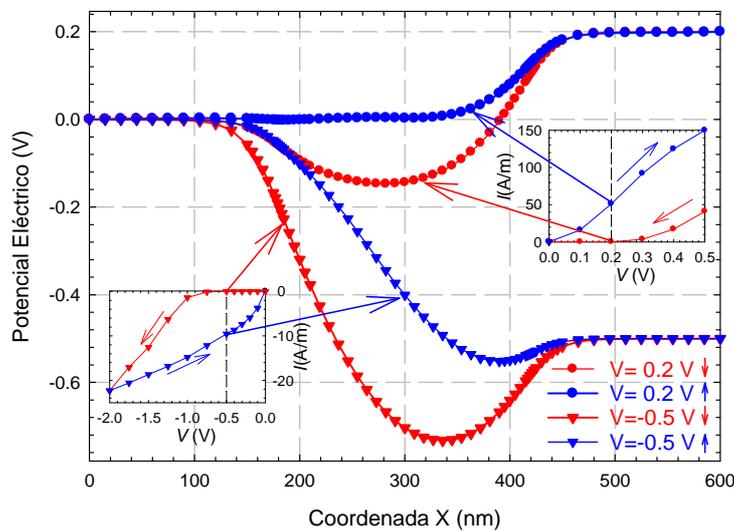


Figura V.9. Perfiles del potencial eléctrico a lo largo del canal en diferentes condiciones de polarización. Los *insets* muestran la característica $I-V$ en directa y en inversa ($E_{des}=50$ kV/cm y $E_{car}=20$ kV/cm).

Para completar la información, en la Figura V.10 hemos representado los mapas bidimensionales correspondientes a las ramas de bajada y subida para las polarizaciones de $+0.2$ y -0.5 V. También aparecen los valores de las barreras de potencial eléctrico en todo el ciclo. Los aspectos más relevantes que podemos señalar son los siguientes. Es interesante observar como para $V=+0.2$ V \downarrow la curvatura del potencial en la dirección “y” transversal al canal es muy acusada debido a los altos valores de carga superficial. En cuanto a las barreras, se observa cómo en la rama descendente, Figura V.10(c), los valores son muy altos, de hecho mayores que los $4K_B T=0.1$ eV de los que hablábamos en el capítulo anterior, de forma que la corriente es nula. Estos estados darían lugar al estado de memoria que hemos

denominado “1” o de no conducción. Sin embargo, vemos cómo en la rama ascendente, en un caso la barrera de derecha a izquierda (para $V=-0.5$ V) y en otro la de izquierda a derecha (para $V=+0.2$ V) son menores que 0.1 eV, dando lugar al estado denominado “0” o de conducción.

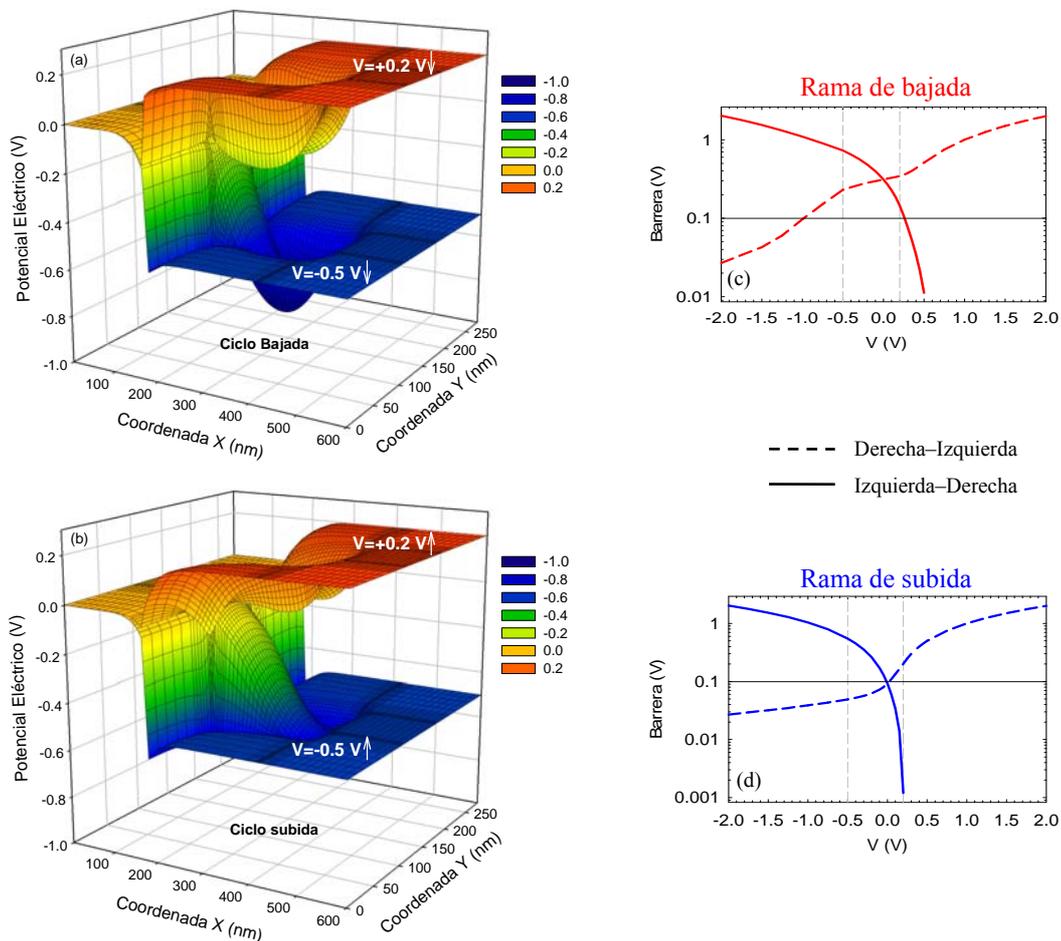


Figura V.10. Mapas bidimensionales del potencial eléctrico en las ramas de bajada (a) y subida (b) para los casos de $V=+0.2$ y -0.5 V. Valores de las barreras de potencial “vistas” por los electrones en su movimiento en ambas direcciones tanto en la rama de bajada (\downarrow) (c) como en las de subida (\uparrow) (d).

Prestamos ahora atención a los perfiles de carga superficial y concentración de electrones. En la Figura V.11(a) se aprecia cómo los elevados valores de carga superficial para el caso de $V=+0.2$ V \downarrow son los causantes del vaciamiento del canal, de manera que la concentración de portadores es nula a lo largo del mismo. Sin embargo, para $V=+0.2$ V \uparrow la concentración es significativamente mayor (debido al menor valor de carga superficial), de manera que el canal está abierto. La forma de este perfil es característica de un transporte balístico, ya que a medida que los portadores se acercan al contacto positivo acelerados por el campo eléctrico, aumentan su velocidad y disminuyen en número a fin de mantener constante la

densidad de corriente.^{117,146} Para el potencial de -0.5 V la situación es la siguiente. En el rama descendente (\downarrow) la carga superficial está empezando a disminuir (para este caso de campo umbral de descarga) en la zona cercana al contacto izquierdo, pero sigue siendo suficiente para vaciar totalmente el canal ($\sigma/q > 0.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y $W_d \approx W_C/2$), como se percibe en la concentración. Por el contrario, en la rama ascendente (\uparrow) la carga superficial en la zona izquierda ya sí que es suficientemente pequeña como para permitir el paso de electrones que contribuyan a la corriente. Este aspecto queda reflejado evidentemente en la concentración de electrones que, aunque pequeña, no es nula.

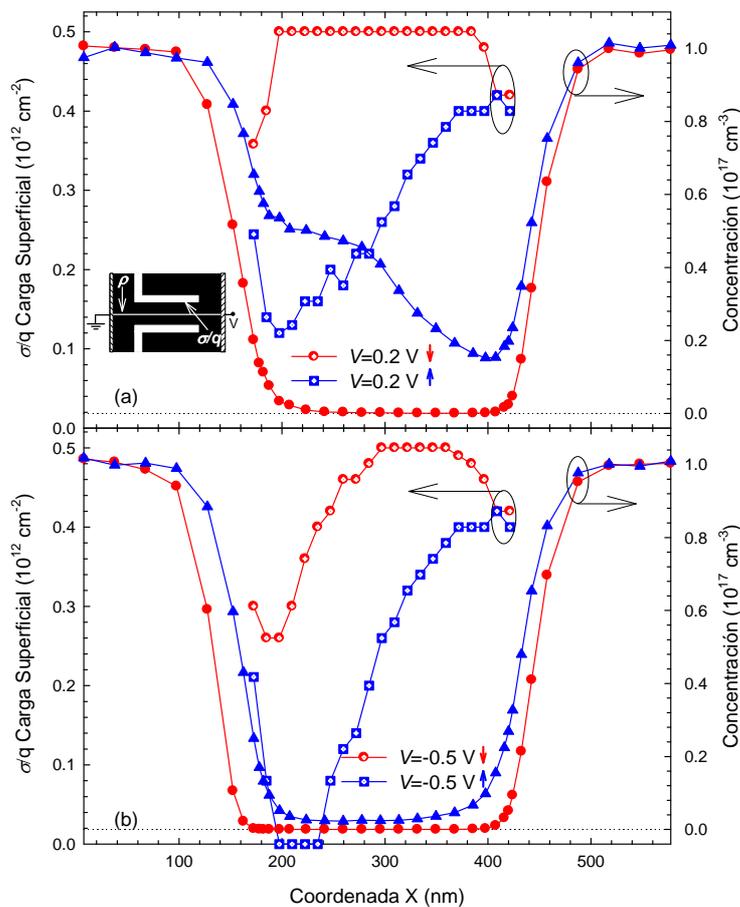


Figura V.11. Perfiles de carga superficial y concentración de electrones en las ramas de subida (\uparrow) y bajada (\downarrow) para $E_{des}=50$ kV/cm y $E_{car}=20$ kV/cm. (a) $V=+0.2$ V y (b) $V=-0.5$ V.

V.2.3. Influencia de la geometría

Con el objetivo de intentar optimizar el efecto memoria, hemos realizado una serie de simulaciones de diferentes SSMs con varias anchuras W_C y longitudes L_C del canal (Figura V.12). Cuanto más estrecho es el canal, mayor es el potencial negativo que es necesario aplicar para apreciar una histéresis en la corriente. De forma similar,

el potencial umbral positivo de conducción es mayor para los diodos más estrechos. En lo que se refiere a la longitud del diodo, en los largos la corriente es menor (debido a una mayor resistencia) y el fenómeno de histéresis en inversa es menos pronunciado, presentando potenciales umbrales mayores.

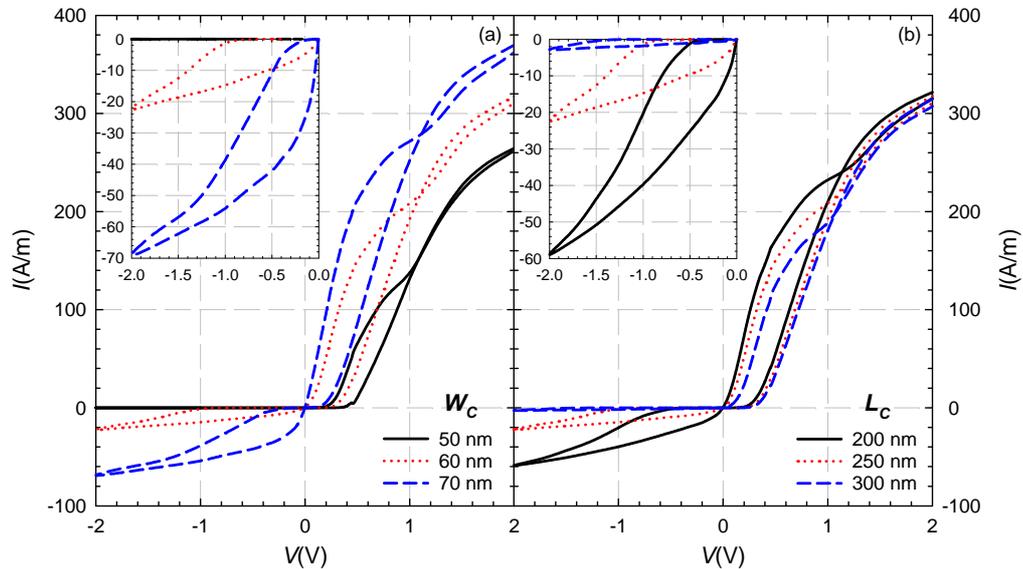


Figura V.12. Influencia de (a) la anchura y (b) longitud del canal en las características $I-V$. $E_{des}=50$ kV/cm y $E_{car}=20$ kV/cm.

De forma general, cuando la relación de aspecto (L_c/W_c) es pequeña, la barrera de potencial que limita el flujo de portadores disminuye, de forma que la condición para la descarga de los estados superficiales de las paredes laterales se alcanza para potenciales menores (ciclo de histéresis blando) y la corriente de inversa es más acusada.

CONCLUSIONES

De acuerdo con las líneas establecidas en la introducción de esta Memoria, hemos empleado la herramienta de simulación Monte Carlo para estudiar el comportamiento de dos tipos de nanodispositivos, las uniones en T de tres terminales (TBJs) y los diodos autoconmutantes (SSDs). Estos dispositivos están basados en canales conductores de materiales de alta movilidad como el InGaAs, lo que, unido a sus reducidas dimensiones, los hacen sumamente interesantes para aplicaciones que pueden alcanzar el rango de los THz. Precisamente por su pequeño tamaño, los efectos de superficie son claves en el funcionamiento de estos nanodispositivos, ya que la relación superficie/volumen es muy elevada. En esta Tesis hemos propuesto un nuevo modelo de carga superficial auto-consistente, que aplicado a la simulación de TBJs y SSDs nos permite extraer las conclusiones siguientes:

o **Uniones de tres terminales en forma de T**

En el caso de una unión balística en T polarizada en modo *push-pull* ($V=V_R=-V_L$), el potencial del fondo de la rama vertical V_C es siempre negativo con una dependencia cuadrática con V para valores pequeños, de hasta 0.25 V. Experimentalmente se ha encontrado que dicho potencial V_C toma valores más negativos (mayor curvatura de V_C-V) cuando la rama vertical se hace más estrecha.

Se ha efectuado un ajuste de los parámetros del modelo auto-consistente de carga superficial para reproducir las características experimentales de las uniones en T. Se ha logrado un buen acuerdo cualitativo de las curvas V_C-V , en donde la curvatura es mayor a medida que se disminuye la anchura de la rama vertical W_{VER} . Además, se reproducen excepcionalmente bien las características $I-V$ obtenidas experimentalmente. Describiremos cuáles son los principales resultados obtenidos:

✓ Adecuación de la carga superficial

Las medidas experimentales estiman que para el $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ el vaciamiento lateral W_d provocado por las cargas de superficie es de 40 ± 10 nm. En el modelo auto-consistente la carga superficial reproduce ese valor para canales anchos, mientras que se adapta a las condiciones del problema cuando las dimensiones son muy pequeñas. Así, para anchuras W menores que el doble del valor de vaciamiento teórico ($W < 2W_d$), la carga superficial en equilibrio queda limitada al valor que produce un vaciamiento total ($W_d \approx W/2$), es decir $\sigma/q = W_d N_{db} = (W/2) N_{db}$.

✓ Influencia de la rama vertical

Los valores de V_{HC} son independientes de la anchura de la rama vertical W_{VER} e incluso de la presencia o ausencia de ésta. La adecuación de la carga superficial con la polarización, y su dependencia con la posición en las superficies laterales de la rama vertical, hacen que las variaciones con respecto al equilibrio del potencial central V_{HC} no se transmitan de igual manera al fondo de la rama, haciéndose más negativo el valor de V_C al reducir W_{VER} . De esta forma, la rama vertical ya no es un simple elemento pasivo de medida, sino que se trata un una zona activa con influencia sobre los valores del potencial de salida.

✓ Dimensiones de la rama horizontal

Hemos simulado otro tipo de TBJs variando las dimensiones de la rama horizontal. A medida que se disminuye la longitud de ésta los valores del potencial de fondo, V_C , son más negativos. Ocurre lo mismo al reducir la anchura de la rama horizontal.

Para disminuir la resistencia de las TBJs, se han simulado y medido experimentalmente uniones con la rama horizontal más ancha, de hasta 500 nm (a pesar de que los valores de V_C son menos negativos, se esperaría una mejor respuesta dinámica al reducirse la influencia de los elementos extrínsecos). En estas uniones la adaptación de la carga superficial de la rama horizontal a la polarización es poco significativa, de forma que los valores negativos de V_C son esencialmente debidos a un efecto vertical, originado por la variación de carga superficial de la rama vertical con la polarización.

La mayor curvatura (valores más negativos) que se obtiene al modificar las dimensiones de las uniones (W_{VER} , L^{HOR} y W^{HOR}) puede aprovecharse para mejorar el

rendimiento en rectificación, detección de potencia y sensibilidad específicas de estos dispositivos asociadas a la respuesta cuadrática de la salida ($V_C = -\alpha V^2$).

✓ Respuesta en frecuencia

En la región de bajas frecuencias (<1 MHz) se han realizado medidas experimentales de mezclado de señales. Para pequeñas amplitudes de las señales aplicadas (<0.25 V) aparecen los armónicos con frecuencias doble, suma y diferencia de las frecuencias aplicadas, ligados a la respuesta cuadrática. Por otra parte, si la amplitud es mayor aparecen nuevos armónicos, ya que en este caso la forma del potencial de salida V_C ya no puede aproximarse simplemente por una parábola.

Se ha mostrado la capacidad de operar a alta frecuencia de las TBJs. Desde el punto de vista intrínseco, proporcionado por las simulaciones Monte Carlo, hemos comprobado que dichos nanodispositivos son capaces de funcionar como dobladores de frecuencia hasta unos 100 GHz y rectificar incluso hasta algún THz. La posibilidad de doblado y detección de fase se ha validado experimentalmente hasta 4 GHz.

○ **Diodos autoconmutantes**

El otro dispositivo que hemos estudiado con profundidad en este trabajo por sus potenciales aplicaciones a frecuencias de terahertzios es el SSD.

✓ Comportamiento estático

La rectificación de la corriente se explica en términos de la apertura o cierre del nanocanal como consecuencia de la carga superficial de las discontinuidades laterales. Debido a la asimetría de las fronteras en forma de L, el potencial aplicado V , no sólo modifica el perfil del potencial a lo largo de la dirección longitudinal del canal, sino que también aumenta o disminuye su anchura efectiva de conducción. Así, mientras que para $V > 0$ el efecto puramente electrostático del campo eléctrico abre el canal permitiendo el paso de corriente, para $V < 0$ el potencial negativo inducido a ambos lados del canal lo cierra completamente.

La modificación de la geometría (anchura o longitud del canal, anchura o permitividades de la zanjas) permite controlar el nivel de corriente y el potencial umbral de conducción. Cuanto más estrecho sea el canal o más anchas las zanjas horizontales, mayor es el potencial umbral de conducción, ya que el vaciamiento

lateral es más acusado o el control ejercido por el potencial aplicado sobre el canal es más débil. Para conseguir valores elevados de corriente se deben emplear canales cortos, zanjas horizontales estrechas y materiales de alta permitividad para rellenarlas.

✓ Respuesta dinámica

La dependencia con la frecuencia de la corriente rectificadora presenta un máximo pronunciado a frecuencias de THz, que sitúa a este dispositivo como un potencial detector de señales de alta frecuencia con enormes posibilidades que van desde la espectroscopía a la radioastronomía, pasando por multitud de aplicaciones médicas, militares, de seguridad, telecomunicaciones, etc.

El cambio de las propiedades de la zanja vertical, su anchura o permitividad, permiten un cierto carácter selectivo en la posición en frecuencia del máximo de la corriente media dc. A menor permitividad o mayor anchura de la zanja vertical, el SSD presenta un mejor comportamiento a alta frecuencia.

El principio físico que da lugar a la resonancia en la rectificación tiene su origen en las oscilaciones de carga en las zonas adyacentes al canal, que acopladas a éste por la zanja horizontal aparecen en la corriente. El desfase entre la carga eléctrica de dicha zona y el potencial entre extremos del nanocanal, así como la amplitud del efecto de sobre-carga/sobre-descarga, determinan la respuesta en frecuencia de la corriente rectificadora.

✓ Densidad espectral del ruido en corriente

A muy baja frecuencia, cuando el transporte está controlado por la barrera de potencial del canal, el SSD presenta ruido *shot* ya que son los portadores descorrelacionados que superan dicha barrera los que contribuyen a la corriente. La temperatura de ruido en este rango es aproximadamente la mitad de la temperatura de la red. Cuando desaparece la barrera, para valores elevados de corriente, el ruido de difusión es el que domina y la temperatura de ruido crece más allá de la temperatura de la red debido a un efecto de portadores calientes.

A alta frecuencia aparecen dos máximos en el espectro de ruido. El máximo de mayor frecuencia (3 THz) está asociado a un efecto volúmico de oscilaciones de plasma. Se ha estudiado cómo reducir el ruido en el rango de frecuencias del primer máximo (1–2 THz) modificando la geometría del dispositivo, ya que es esta región

donde residen las potenciales aplicaciones del SSD. El nivel del ruido es más alto cuanto mayor es la impedancia de los accesos comparada con la del canal. La reducción de los accesos o el aumento de la anchura de la zanja vertical parecen ser las mejores opciones para reducir el nivel del ruido siempre que no se deteriore la capacidad rectificadora ni la respuesta en frecuencia del SSD.

El máximo de menor frecuencia está asociado a efectos de tiempo de tránsito de los *returning carriers* en las zonas de carga espacial originadas por la carga superficial a ambos lados de las zanjas dieléctricas verticales. El acoplo de estas fluctuaciones del ruido a los terminales del dispositivo es de tipo capacitivo (dependencia f^2), y viene modulado por dos capacidades, una asociada a la zona de carga espacial C_{ZCE} y otra debida a la zanja dieléctrica vertical C_v . Este máximo aparece a superiores frecuencias cuando la anchura de la zanja vertical W_v es mayor o su permitividad ϵ_v menor, comportamiento claramente ligado al efecto del condensador C_v asociado a esta zanja. Por otro lado, la dependencia en frecuencia con la geometría de la zanja horizontal es mínima.

La dependencia con respecto a la geometría de los espectros de corriente rectificada media y ruido son similares tanto en la posición en frecuencia de los máximos de baja frecuencia (1–2 THz) como en sus amplitudes relativas. Pese a tratarse de distintas magnitudes físicas (el ruido está calculado en equilibrio y es proporcional a la admitancia de pequeña señal, mientras que la corriente media dc es consecuencia de la rectificación y corresponde a condiciones de gran señal), concluimos que ambos resultados tienen esencialmente el mismo origen.

Para justificar el máximo de la corriente rectificada, otros autores proponen las denominadas oscilaciones de plasma de superficie localizadas. Esta interpretación es compatible con la nuestra, asociada a los *returning carriers*, ya que la dinámica de éstos y su frecuencia característica están íntimamente ligadas a la frecuencia de plasma.

Si modificamos la inclinación de la zanja vertical se obtiene una significativa reducción del nivel de ruido en la zona de frecuencias de 1–2 THz. El máximo de la rectificación aparece a 2 THz, de forma que el diseño de SSDs con zanjas verticales inclinadas supone una buena alternativa desde el punto de vista de las aplicaciones, ya que se consigue mejorar la relación señal/ruido.

Por medio de un circuito equivalente sencillo hemos sido capaces de reproducir cualitativamente las principales propiedades del espectro del ruido en términos de la impedancia de pequeña señal del dispositivo.

Por último resaltar que, puesto que el principio de operación de los SSDs no está basado en el transporte balístico ni en el uso de materiales de alta movilidad, éstos se pueden fabricar usando el silicio como material semiconductor para el canal, pese a que las frecuencias de corte se verían reducidas aproximadamente en un orden de magnitud.

○ **Diodos de memoria**

Los diodos autoconmutantes presentan un ciclo de histéresis en la característica $I-V$ que puede aprovecharse para aplicaciones de memoria. Por esta razón se le denomina *Self-Switching Memory* (SSM). Con nuestro modelo hemos reproducido cualitativamente los resultados experimentales introduciendo en el algoritmo de tratamiento de los efectos de superficie la influencia de los posibles mecanismos túnel que cargan/descargan los estados superficiales de las discontinuidades. Para ello, no sólo se analiza la concentración de portadores de la región próxima a la interfase (carga/descarga por emisión termoiónica), sino que también se considera el campo eléctrico normal a las fronteras, ya que de su valor dependerá la probabilidad de efecto túnel. Para potenciales aplicados superiores a un cierto umbral, tanto en la rama de bajada como de subida del potencial aplicado, aparece una histéresis que se explica en términos de la carga y descarga de los estados superficiales que controlan la conductancia del nanocanal.

Esta Tesis Doctoral se ha realizado con la ayuda de una beca de **Formación de Profesorado Universitario**, del Ministerio de Educación y Ciencia.

Forma parte del trabajo desarrollado por el **Grupo de Investigación en dispositivos semiconductores** del Área de Electrónica en los siguientes **Proyectos de Investigación**:

- Nanodispositivos balísticos para aplicaciones a temperatura ambiente en el rango de THz (TEC2004–05231/MIC). Ministerio de Educación y Ciencia–Dirección General 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.

Parte de los resultados que se han presentado en esta Memoria se encuentran publicados en los siguientes **artículos de revistas**:

- Iñiguez–de–la–Torre I., González T., Pardo D. and Mateos J., “Monte Carlo analysis of memory effects in nano–scale rectifying diodes”, *Physica Status Solidi (c)* **5**, 82 (2008).
- González T., Iñiguez–de–la–Torre I., Pardo D., Mateos J., Bollaert S., Roelens Y. and Cappy A., “Monte Carlo simulation of surface charge effects in T–branch nanojunctions”, *Physica Status Solidi (c)* **5**, 94 (2008).
- Iñiguez–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).
- Iñiguez–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).

- Iñiguez-de-la-Torre I., González T., Pardo D. and Mateos J., “Hysteresis phenomena in nanoscale rectifying diodes: A Monte Carlo interpretation in terms of surface effects”, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 063504 (2007).

Igualmente, parte de los resultados se han presentados en comunicaciones de congresos y están recogidos en los siguientes **proceedings**:

- Iñiguez-de-la-Torre I., Mateos J., Pardo D. and González T., “Microscopic analysis of noise in self-switching diodes”, *Proceedings of the 19th International Conference on Noise and Fluctuations*, AIP Conference Proceedings **922**, 317 (2007).
- Iñiguez-de-la-Torre I., Mateos J., González T., Pardo D., Bollaert S., Roelens Y. and Cappy A., “Surface charge effects in ballistic T-branch nanojunctions”, *6th Spanish Conference on Electronic Devices CDE, IEEE Catalog* **07EX1644**, 48 (2007). (2º premio a la mejor presentación oral).

Se ha efectuado una estancia de tres meses de duración (17/09/07–17/12/07) en el *Institut d'Electronique de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN)* en Lille, Francia.

Para la realización de las simulaciones de esta Memoria se han empleado dos Cluster Linux; uno de 8 nodos biprocesador (2x Intel Xeon 5140, 2 Gb RAM) y otro de 17 nodos biprocesador (2x Intel Xeon 2.4 GHz, 1 Gb RAM). El compilador es el Intel ® Fortran Compiler 10.1.011 para Linux. El tiempo de cálculo depende mucho del número de iteraciones y de las partículas simuladas, siendo de unas pocas horas para las características estáticas y hasta de algunos días para el cálculo del ruido en cada punto de polarización.

BIBLIOGRAFÍA

- ¹Iñiguez-de-la-Torre I. and Iñiguez J., “Cycling and wind: does sidewind brake?”, *Eur J. Phys.* **27**, 71 (2006).
- ²Waser R., editor, *Nanoelectronics and information technology. Advanced electronic materials and novel devices* (Wiley–VCH GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2003).
- ³Rohrer H., “Nanoengineering beyond nanoelectronics”, *Microelectron. Eng.* **41/42**, 31 (1998).
- ⁴Nalwa H. S., editor, *Encyclopedia of nanoscience and nanotechnology*, (American Scientific Publishers, Valencia, CA, 2004).
- ⁵Datta S., *Electronic transport in mesoscopic systems*, (Cambridge University Press, New York, 1995).
- ⁶Lundstrom M., *Fundamentals of carrier transport*, (Cambridge University Press, New York, 2000).
- ⁷Ferry D. K., *Semiconductor transport*, (Taylor & Francis, New York, 2000).
- ⁸Davies J. H., *The physics of low-dimensional semiconductors*, (Cambridge University Press, New York, 1998).
- ⁹Požela J., *Physics of high-speed transistors* (Plenum Press, New York, 1993).
- ¹⁰Palankovski V. and Quay R., *Analysis and simulation of heterostructure devices* (Springer–Verlag, New York, 2004).

-
- ¹¹Song A. M., “Room–temperature ballistic nanodevices”, *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*, **9**, 371, American Scientific Publishers, ISBN: 8182741416 (2004).
- ¹²Song A. M., Omling P., Samuelson L., Seifert W. and Shorubalko I, “Room–temperature and 50 GHz operation of a functional nanomaterial”, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 1357 (2001).
- ¹³Song A. M., Lorke A., Kriele A. and Kotthaus J. P., “Nonlinear electron transport in an asymmetric microjunction: a ballistic rectifier”, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3831 (1998).
- ¹⁴Song A. M., Omling P., Samuelson L., Seifert W., Shorubalko I. and Zirath H., “Operation of InGaAs/InP–based ballistic rectifiers at room temperature and frequencies up to 50 GHz”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **40**, L909 (2001).
- ¹⁵Fleischmann R. and Geisel T., “Mesoscopic rectifiers based on ballistic transport”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 016804 (2002).
- ¹⁶de Haan S., Lorke A., Kotthaus J. P., Wegscheider W. and Bichler M., “Rectification in mesoscopic systems with broken symmetry: quasiclassical ballistic versus classical transport”, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 056806 (2004).
- ¹⁷de Haan S., Lorke A., Kotthaus J. P., Bichler M. and Wegscheider W., “Quantized transport in ballistic rectifiers: sign reversal and step–like output”, *Phys. E* **21**, 916 (2004).
- ¹⁸Knop M., Wieser U., Kunze U., Reuter D. and Wieck A. D., “Ballistic rectification in an asymmetric mesoscopic cross junction”, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 082110 (2006).
- ¹⁹Shorubalko I., Xu H. Q., Maximov I., Omling P., Samuelson L. and Seifert W., “Nonlinear operation of GaInAs/InP–based three–terminal ballistic junctions”, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 1384 (2001).
- ²⁰Shorubalko I., Xu H. Q., Maximov I., Nilsson D., Omling P., Samuelson L. and Seifert W., “A novel frequency–multiplication device based on three–terminal ballistic junction”, *IEEE Electron Device Lett.* **23**, 377 (2002).

-
- ²¹Shorubalko I., Xu H. Q., Omling P., Samuelson L. and Seifert W., “Tunable nonlinear current–voltage characteristics of three–terminal ballistic nanojunctions”, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2369 (2003).
- ²²Hieke K. and Ulfward M., “Nonlinear operation of the Y–branch switch: ballistic switching mode at room temperature”, *Phys. Rev. B* **62**, 16727 (2000).
- ²³Worschech L., Xu H. Q., Forchel A. and Samuelson L., “Bias–voltage–induced asymmetry in nanoelectronic Y–branches”, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 3287 (2001).
- ²⁴Worschech L., Schliemann A., Reitzenstein, Hartmann P., and Forchel A., “Microwave rectification in ballistic nanojunctions at room temperature”, *Microelectron. Eng.* **63**, 217 (2002).
- ²⁵Worschech L., Reitzenstein S., Hartmann P., Kaiser S., Kamp and Forchel A., “Self–switching of branched multiterminal junctions: a ballistic half–adder”, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2462 (2003).
- ²⁶Lewén R., Maximov I., Shorubalko I., Samuelson L., Thylén L. and Xu H. Q., “High frequency characterization of a GaInAs/InP electronic waveguide T–branch switch”, *J. Appl. Phys.* **91**, 2398 (2002).
- ²⁷Reitzenstein S., Worschech L., Hartmann P., Kamp M. and Forchel A., “Capacitive–coupling–enhanced switching gain in an electron Y–branch switch”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 226804 (2002).
- ²⁸Reitzenstein S., Worschech L., Hartmann A. and Forchel A., “Logic AND/NAND gates based on three–terminal ballistic junctions”, *Electronics Lett.* **38**, 951 (2002).
- ²⁹Reitzenstein S., Worschech L. Kesselring M. and Forchel A., “Switching characteristics and demonstration of logic functions in modulation doped GaAs/AlGaAs nanoelectronic devices”, *Phys. E* **13**, 954 (2002).
- ³⁰Reitzenstein S., Worschech L. and Forchel A., “A novel half–adder circuit based on nanometric ballistic Y–branched junctions”, *IEEE Electron Device Lett.* **23**, 625 (2003).
- ³¹Reitzenstein S., Worschech L. Hartmann P. and Forchel A., “Pronounced switching bistability in a feedback coupled nanoelectronic Y–branch switch”, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1980 (2003).

- ³²Reitzenstein S., Worschech L. and Forchel A., “Room temperature operation of an in-plane half-adder based on ballistic Y-junctions”, *IEEE Electron Device Lett.* **25**, 462 (2004).
- ³³Xu H. Q., Shorubalko I., Wallin D., Maximov I., Omling P., Samuelson L. and Seifert W., “Novel nanoelectronic triodes and logic devices with TBJs”, *IEEE Electron Device Lett.* **25**, 164 (2004).
- ³⁴Xu H. Q., Shorubalko I., Maximov I., Seifert W., Omling P. and Samuelson L., “A novel device principle for nanoelectronics”, *Materials Science and Engineering C* **19**, 417 (2002).
- ³⁵Wallin D. and Xu H.Q., “Electrical properties and logic function of multibranch junction structures”, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 253510 (2005).
- ³⁶Wallin D., Shorubalko, Xu H.Q. and Cappy A., “Nonlinear electrical properties of three-terminal junctions”, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 092124 (2006).
- ³⁷Bednarz L., Rashmi, Hackens B., Farhi G., Bayot V., Huynen I., Galloo J. S., Roelens Y., Bollaert S., and Cappy A., “Low and room temperature studies of RF to DC rectifiers based on ballistic transport”, *Microelectron. Eng.* **81**, 194 (2005).
- ³⁸Bednarz L., Rashmi, Hackens B., Farhi G., Bayot V. and Huynen I. “Broad-band frequency characterization of double Y-branch nanojunction operating as room-temperature RF to DC rectifier”, *IEEE Trans on Nanotechnology.* **4**, 576 (2005).
- ³⁹Bednarz 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).
- ⁴⁰Bednarz L., Rashmi, Simon P, Huynen I, González T and Mateos J, “Negative differential transconductance and nonreciprocal effects in a Y-branch nanojunction: High-frequency analysis”, *IEEE Trans on Nanotechnology.* **5**, 750 (2006).
- ⁴¹Bollaert S., Cappy A., Roelens Y., Galloo J. S., Gardès C., Teukam Z., Wallart X., Mateos J., González T., Vasallo B.G., Hackens B., Berdnarz L. and Huynen I.,

- “Ballistic nano–devices for high frequency applications”, *Thin Solid Films* **515**, 4321 (2007).
- ⁴²Müller C. R., L. Worschech L., Höpfner P., Höfling S. and A. Forchel A., “Monolithically integrated logic NOR gate based on GaAs/AlGaAs three–terminal junctions”, *IEEE Electron Device Lett.* **28**, 859 (2007).
- ⁴³Sun J., Wallin D., Brusheim P., Maximov I., Wang Z.G. and Xu H.Q., “Frequency mixing and phase detection functionalities of three–terminal ballistic junctions”, *Nanotechnology* **18**, 195205 (2007).
- ⁴⁴Koyama M., Inoue T., Amano N., Maemoto T., Sasa S. and Inoue M., “Nonlinear electron transport properties and rectification effects in InAs/AlGaSb devices”, *Physica Status Solidi (c)* **5**, 107 (2008).
- ⁴⁵Suyatin D. B., Sun J., Fuhrer A., Wallin D., Fröberg L. E., Karlsson L. S., Maximov I., Wallenberg L. R., Samuelson L. and Xu H. Q., “Electrical properties of self–assembled branched InAs nanowire junctions”, *Nano Letters* **8**, 1100 (2008).
- ⁴⁶Sun J., Wallin D., Maximov I. and Xu H.Q., “A novel SR latch device realized by integration of three–terminal ballistic junctions in InGaAs/InP”, *IEEE Electron Device Lett.* **29**, 540 (2008).
- ⁴⁷Gardès C., Roelens Y., Bollaert S., Galloo J. S., Wallart X., Curutchet A., Gaquiere C., Mateos J., González T., Vasallo B. G., Bednarz L. and Huynen I., “Ballistic nanodevices for high frequency applications”, *Int. J. Nanotechnology.* **5**, 796 (2008).
- ⁴⁸Song 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).
- ⁴⁹Song A. M., Maximov I., Missous M. and Seifert W., “Diode–like characteristics of nanometer–scale semiconductor channels with a broken symmetry”, *Physica E.* **21**, 1116 (2004).
- ⁵⁰Balocco 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., Worshech L. and Xu H.Q., “Microwave detection at 110 GHz by nanowires with broken symmetry”, *Nano Letters* **5**, 1423 (2005).
- ⁵¹Balocco C. and Song A. M., “Novel semiconductor nanodevices for detections of THz signals”, *Proc. of the 1st IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems*, 1292 (2006).
- ⁵²Farhi G., Saracco E., Beerens J., Morris D., Charlebois S. A. and Raskin J. P., “Electrical characteristic and simulations of self-switching-diodes in SOI technology”, *Solid-State Electron.* **51**, 1245 (2007).
- ⁵³Xu K. Y., Wang G. and Song A. M., “Electron transport in self-switching nano-diodes”, *J. Comput. Electron.* **6**, 59 (2007).
- ⁵⁴Xu 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).
- ⁵⁵Song A. M., Missous M., Omling P., Maximov I., Seifert W. and Samuelson L., “Nanometer-scale two-terminal semiconductor memory operating at room temperature”, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 042106 (2005).
- ⁵⁶Song A. M., Missous M. and Seifert W., “A two-terminal semiconductor memory made in a single nanolithography step”, *International Conference on Memory Technology and Design ICMTD*, 171 (2005).
- ⁵⁷Siegel P. H., “Terahertz technology”, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **50**, 910, (2002).
- ⁵⁸Song A. M., “Formalism of nonlinear transport in mesoscopic conductors”, *Phys. Rev. B.* **59**, 9806 (1999).
- ⁵⁹Xu H. Q., “Electrical properties of three terminal ballistic junctions”, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 2064 (2001).
- ⁶⁰Xu H. Q., “A novel electrical property of three-terminal ballistic junctions and its applications in nanoelectronics”, *Phys. E.* **13**, 942 (2002).
- ⁶¹Xu H. Q., “Diode and transistor behaviors of three-terminal ballistic junctions”, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 853 (2002).

-
- ⁶²Landauer R., “Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction”, *IBM J. Res. Dev.* **1**, 223 (1957).
- ⁶³Büttiker M., “Four-terminal phase-coherent conductance”, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1761 (1986).
- ⁶⁴Datta S., *Quantum transport: Atom to transistor*, (Cambridge University Press, New York, 2005).
- ⁶⁵Jacoboni C. and Reggiani L., “The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials”, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 645 (1983).
- ⁶⁶Jacoboni C. and Lugli P., *The Monte Carlo method for semiconductor device simulation*, (Springer-Verlag, New York, 1989).
- ⁶⁷Fischetti M. V. and Laux S. E., “Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space charge effects”, *Phys. Rev. B* **38**, 9721 (1988).
- ⁶⁸Hess K., editor, *Monte Carlo device simulation: Full band and beyond* (Kluwer Academic, Norwell, MA, 1991).
- ⁶⁹Moglestue C., *Monte Carlo simulation of semiconductor devices* (Chapman & Hall, London, 1993).
- ⁷⁰Tomizawa K., *Numerical simulation of submicron semiconductor devices* (Artech House, Boston, MA, 1993).
- ⁷¹Mateos J., Vasallo B. G., Pardo D., González T., Galloo J. S., Roelens Y., Bollaert S. and Cappy A., “Ballistic nanodevices for terahertz data processing: Monte Carlo simulations”, *Nanotechnology* **14**, 117 (2003).
- ⁷²Mateos J., Vasallo B. G., Pardo D., González T., Galloo J. S., Bollaert S., Roelens Y. and Cappy A., “Microscopic modeling of nonlinear transport in ballistic nanodevices”, *IEEE Trans. Electron Devices* **50**, 1897 (2003).
- ⁷³Mateos 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).

-
- ⁷⁴Mateos J., Song A. M., Vasallo B. G., Pardo D. and González T., “A simple approach for the fabrication of ultrafast unipolar diodes”, *5th Spanish Conference on Electronic Devices CDE, IEEE Catalog 05EX965C*, 99 (2005).
- ⁷⁵Mateos J., Song A. M., Vasallo B. G., Pardo D. and González T., “THz operation of self-switching nanodiodes and nanotransistors”, *Nanotechnology II. Proc. of SPIE 5838*, 145 (2005).
- ⁷⁶Mateos 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).
- ⁷⁷González T., Vasallo B. G., Pardo D. and Mateos J., “Room temperature nonlinear transport in ballistic nanodevices”, *Semicond. Sci. Technol.* **19**, S125 (2004).
- ⁷⁸Vasallo B. G., González T., Pardo D. and Mateos J., “Monte Carlo analysis of four-terminal ballistic rectifiers”, *Nanotechnology* **15**, S250 (2004).
- ⁷⁹Galloo J. S., “Composants nanométriques balistiques de type GaInAs/AlInAs/InP pour applications terahertz”, Tesis Doctoral (L’Université des Sciences et Technologies de Lille, 2005).
- ⁸⁰Bednarz L., “Optimizing ballistic nanodevices towards THz applications”, Tesis Doctoral (Université Catholique de Louvain, Laboratoire D’hyperfréquences, Louvain-la-Neuve, 2007).
- ⁸¹Gardès C., “Composants nanométriques balistiques de la filière InGaAs/InAlAs/InP pour applications hautes fréquences”, Tesis Doctoral (L’Université des Sciences et Technologies de Lille, 2008).
- ⁸²González T., “Análisis del ruido electrónico en materiales y dispositivos semiconductores unipolares mediante el método de Monte Carlo”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 1994).
- ⁸³Martín 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).
- ⁸⁴Mateos J., “Modelización microscópica del ruido electrónico en estructuras MESFET y HEMT submicrométricas. Análisis numérico y experimental.”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 1997).

-
- ⁸⁵Rengel R., “Análisis de los fenómenos de transporte y ruido electrónico en transistores MOSFET y SOI submicrométricos”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 2002).
- ⁸⁶Vasallo B. G. “Transporte electrónico en estructuras de heterounión InAlAs/InGaAs: HEMTs y dispositivos balísticos de dimensiones nanométricas”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 2005).
- ⁸⁷Iñiguez-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).
- ⁸⁸Iñiguez-de-la-Torre I., Mateos J., González T., Pardo D., Bollaert S., Roelens Y. and Cappy A., “Surface charge effects in ballistic T-branch nanojunctions”, *6th Spanish Conference on Electronic Devices CDE, IEEE Catalog* **07EX1644**, 48 (2007).
- ⁸⁹González T., Iñiguez-de-la-Torre I., Pardo D., Mateos J., Bollaert S., Roelens Y. and Cappy A., “Monte Carlo simulation of surface charge effects in T-branch nanojunctions”, *Physica Status Solidi (c)* **5**, 94 (2008).
- ⁹⁰Iñiguez-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).
- ⁹¹Iñiguez-de-la-Torre I., Mateos J., Pardo D. and González T., “Microscopic analysis of noise in self-switching diodes”, *Proceedings of the 19th International Conference on Noise and Fluctuations, AIP Conference Proceedings* **922**, 317 (2007).
- ⁹²Iñiguez-de-la-Torre I., González T., Pardo D. and Mateos J., “Hysteresis phenomena in nanoscale rectifying diodes: A Monte Carlo interpretation in terms of surface effects”, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 063504 (2007).
- ⁹³Iñiguez-de-la-Torre I., González T., Pardo D. and Mateos J., “Monte Carlo analysis of memory effects in nano-scale rectifying diodes”, *Physica Status Solidi (c)* **5**, 82 (2008).

- ⁹⁴Ashcroft N. W. and Mermin N. D., *Solid state physics*, (Saunders, Philadelphia, PA, 1976).
- ⁹⁵García-Moliner F. and Flores F., *Introduction to the theory of solid surfaces*, (Cambridge University Press, New York, 1979).
- ⁹⁶Shur M., *GaAs devices and circuits* (Plenum Press, New York, 1987).
- ⁹⁷Gomila G., Cantalapiedra I. R., González T. and Reggiani L., “Semiclassical theory of shot noise in ballistic n^+i-n^+ semiconductor structures: Relevance of Pauli and long-range Coulomb correlations”, *Phys. Rev. B* **66**, 075302 (2002).
- ⁹⁸Galloo J. S., Pichonat E., Roelens Y., Bollaert S., Wallart X., Cappy A., Mateos J. and González T., “Transition from ballistic to ohmic transport in T-branch junctions at room temperature in GaInAs/AlInAs heterostructures”, *Proceedings of the 2004 International Conference on Indium Phosphide and Related Materials IPRM, IEEE Catalog* **04CH37589**, 378 (2004).
- ⁹⁹Boardman A. D., *Computer simulation of hot electron behavior in semiconductors using Monte Carlo methods*, in *Physics Programs*, edited by A. D. Boardman (Wiley, New York, 1980).
- ¹⁰⁰Metropolis N., “The beginning of the Monte Carlo method”, *Los Alamos Science* **15**, 125, (1987).
- ¹⁰¹Snowden C. M., *Introduction to semiconductor device modelling* (World Scientific, Singapore, 1986).
- ¹⁰²Constant E., “Modelling of sub-micron devices”, in *Solid State Devices*, edited by J.E. Carrol, *IOP Conf. Series* **57**, 141 (1980).
- ¹⁰³Warnock T., “Random-number generators”, *Los Alamos Science* **15**, 137 (1987).
- ¹⁰⁴Yamashita S., Endoh A., Shinohara K., Hikosaka K., Matsui T., Hiyamizu S. and Mimura T., “Pseudomorphic $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ HEMTs with an ultrahigh f_T of 562 GHz”, *IEEE Electron Device Lett.* **23**, 573 (2002).
- ¹⁰⁵Hockney R. W. and Eastwood J. W., *Computer simulation using particles*, (IOP, Bristol, 1988).
- ¹⁰⁶Tiwari S., *Compound semiconductor device physics* (Academic Press, New York, 1992).

-
- ¹⁰⁷Ruch J. G. and Fawcett W., “Temperature dependence of the transport properties of gallium arsenide determined by a Monte Carlo method,” *J. Appl. Phys.* **41**, 3843 (1970).
- ¹⁰⁸Matulionis A., Pozela J. and Reklaitis A., “Monte Carlo treatment of electron–electron collisions”, *Solid State Com.* **16**, 1133 (1975).
- ¹⁰⁹Mansour 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).
- ¹¹⁰Nag B. R., *Electron transport in compound semiconductors*, (Springer–Verlag, Berlin, 1980).
- ¹¹¹Ferry D. K. and Grondin R. O., *Physics of submicron devices*, (Plenum Press, New York, 1991).
- ¹¹²Rees H. D., “Calculation of steady state distribution function by exploiting stability”, *Phys. Lett. A* **26**, 416 (1968).
- ¹¹³Bosi S. and Jacoboni C., “Monte Carlo high–field transport in degenerate GaAs”, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **9**, 315 (1976).
- ¹¹⁴Lugli P. and Ferry D. K., “Degeneracy in the ensemble Monte Carlo method for high–field transport in semiconductors”, *IEEE Trans. Electron Devices* **32**, 2431 (1985).
- ¹¹⁵Mateos 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).
- ¹¹⁶González T. and Pardo D., “Physical models of ohmic contact for Monte Carlo device simulaci3n”, *Solid–State Electron.* **39**, 555 (1996).
- ¹¹⁷González T., Mateos J., Pardo D., Bulashenko O. M. and Reggiani L., “Microscopic analysis of shot–noise suppression in nondegenerate ballistic transport”, *Semicond. Sci. Technol.* **13**, 714 (1998).
- ¹¹⁸González T., Mateos J., Pardo D., Varani L. and Reggiani L., “Injection statistics simulator for dynamic analysis of noise in mesoscopic devices”, *Semicond. Sci. Technol.* **14**, L37 (1999).
- ¹¹⁹Yang E. S., *Microelectronics devices* (McGraw–Hill, Singapore, 1988).

-
- ¹²⁰Press 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).
- ¹²¹Wangness, R. K. *Campos electromagnéticos* (Limusa, Méjico, 1994).
- ¹²²Ramo S., “Currents induced by electron motion”, *Proc. IRE*. **27**, 584 (1939).
- ¹²³Shockley W., “Currents to conductors induced by a moving point charge”, *J. Appl. Phys.* **9**, 635 (1938).
- ¹²⁴Yoder 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).
- ¹²⁵Yoder P. D., Gärtner K., Krumbein U. and Fichtner W., “Optimized terminal current calculation for Monte Carlo device simulation”, *IEEE Trans. Comput. Aided Design*. **16**, 1082 (1997).
- ¹²⁶Kim 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).
- ¹²⁷Babiker 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).
- ¹²⁸Van der Ziel A., *Noise, source, characterization, measurement*, (Prentice Hall, New York, 1970).
- ¹²⁹Van der Ziel A., *Noise in solid state devices and circuits*, (Wiley & Sons, New York, 1986).
- ¹³⁰Kuhn T., Reggiani L. and Varani L., “Correlation functions and electronic noise in doped semiconductors”, *Phys. Rev. B*. **42**, 11133 (1990).
- ¹³¹Cappy A., “Noise modelling”, in *Compound Semiconductor Device Modeling*, edited by C. M. Snowden and R. E. Miles (Springer–Verlag, London, 1993).
- ¹³²Varani L., Reggiani L., Kuhn T., González T. and Pardo D., “Microscopic simulation of electronic noise in semiconductor materials and devices”, *IEEE Trans. Electron Devices* **41**, 1916 (1994).

-
- ¹³³González T., Pardo D., Varani L. and Reggiani L., “Monte Carlo analysis of the behavior and spatial origin of electronic noise in GaAs MESFET’s”, *IEEE Trans. Electron Devices* **42**, 991 (1995).
- ¹³⁴McQuarrie D. A., *Statistical mechanics* (Harper and Row, New York, 1976).
- ¹³⁵Shannon C. E., “Communication in the presence of noise”, *Proc. Institute of Radio Engineers* **37**, 10, (1949). Reprint as classic paper in: *Proc. IEEE* **86**, (1998).
- ¹³⁶Van der Ziel A., “Unified presentation of 1/f noise in electron devices: fundamental 1/f noise sources”, *Proc. IEEE* **76**, 233 (1988).
- ¹³⁷Van Vliet C.M., “A survey of results and future prospects on quantum 1/f noise and 1/f noise in general”, *Solid–State Electron.* **34**, 1, (1991).
- ¹³⁸Schottky W., “Small–shot effect and flicker effect”, *Phys. Rev.* **28**, 74 (1926).
- ¹³⁹Trippe M., Bosman G. and Van der Ziel A., “Transit–time effects in the noise of Schottky–barrier diodes,” *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **34**, 1183 (1986).
- ¹⁴⁰González T., Pardo D., Varani L. and Reggiani L., “Monte Carlo analysis of noise spectra in Schottky–barrier diodes”, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 3040 (1993).
- ¹⁴¹Reggiani L., Golinelli P., Faucher E., Varani L., González T. and Pardo D., “Plasma and transit–time effects on electronic noise in semiconductor n^+nn^+ structures”, *Proceedings of the 13th International Conference of Noise in physical systems and 1/f Fluctuations*, edited by V. Bareikis and R. Katilius, 193, World Scientific, Singapore, (1995).
- ¹⁴²González T., Pardo D., Reggiani L. and Varani L., “Microscopic analysis of electron noise in GaAs Schottky barrier diodes”, *J. Appl. Phys.* **82**, 1 (1997).
- ¹⁴³Nyquist H., “Thermal agitation of electric charge in conductors”, *Phys. Rev.* **32**, 110, (1928).
- ¹⁴⁴NanoTera IST project 2001–32517, *Ballistic nanodevices for terahertz data processing*, (Third year and final report, 2005).
- ¹⁴⁵Rosenberg J. J., Yoffa E. J. and Nathan M. I., “Importance of boundary conditions to conduction in short samples”, *IEEE Trans. Electron Devices* **ED–28**, 941 (1981).

-
- ¹⁴⁶González T., Bulashenko O. M., Mateos J., Pardo D. and Reggiani L., “Effect of long-range Coulomb interaction on shot-noise suppression in ballistic transport”, *Phys. Rev. B* **56**, 6424 (1997).
- ¹⁴⁷Jefimenko Oleg D., *Electricity and magnetism: An introduction to the theory of electric and magnetic Fields*, 2nd ed. (Electret Scientific, Star City, 1989).
- ¹⁴⁸Cooley J. W. and Tukey J. W., “An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series”, *Math. Comput.* **19**, 297 (1967).
- ¹⁴⁹Shorubalko I. “Quantum and ballistic nanodevices”, Tesis Doctoral (Lund Institute of Technology, Suecia, 2003).
- ¹⁵⁰Åberg M., Saijets J., Song A. M. and Prunnila M., “Simulation and Modelling of Self-switching Devices”, *Physica Scripta* **T114**, 123 (2004).
- ¹⁵¹Åberg M. and Saijets J., “DC and AC characteristics and modeling of Si SSD-nano devices”, *Proceedings of the 2005 European Conference on Circuit Theory and Design* **1**, I/15 (2005).
- ¹⁵²Xu 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).
- ¹⁵³Zimmermann J. and Constant E., “Application of Monte Carlo techniques to hot carrier diffusion noise calculation in unipolar semiconducting components,” *Solid-State Electron.* **23**, 915 (1980).
- ¹⁵⁴Palczewski S., Jelesnki A., Grüb A. and Hartnagel H. L., “Noise characterization of Schottky barrier diodes for high-frequency mixing applications”, *IEEE Microw. Guided Wave Letters* **2**, 442 (1992).
- ¹⁵⁵Economou E. N., “Surface Plasmons in thin films”, *Phys. Rev.* **182**, 539 (1969).
- ¹⁵⁶Sah Ch., *Fundamental of solid-state electronics* (World Scientific, Singapore, 1991).
- ¹⁵⁷Jelenski A., Kollberg E. L., and Zirath H., “Broad-band noise mechanisms and noise measurements of metal-semiconductor junctions,” *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.* **34**, 1193, (1986).
- ¹⁵⁸Rengel R., comunicación privada.

-
- ¹⁵⁹Brewer J. E., Zhirnov V. V. and Hutchby J. A., “Memory technology for post CMOS era”, *IEEE Circuits and Devices Magazine* **21**, 13 (2005).
- ¹⁶⁰Balocco C., Song A. M. and Missous M., “Room–temperature operations of memory devices based on self–assembled InAs quantum dot structures”, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 5911 (2004).
- ¹⁶¹Müller C. R., L. Worschech L., Schliemann A. and A. Forchel A., “Bias voltage controlled memory effect in–plane quantum–wire transistors with embedded quantum dots”, *IEEE Electron Device Lett.* **27**, 955 (2006).
- ¹⁶²Geller M., Marent A., Nowozin T., Bimberg D., Akçay N. And Öncan N., “A write time of 6 ns for quantum dot–based memory structures”, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 092108 (2008).

VNIVERSITAS
STVDII
SALAMANTIINI

