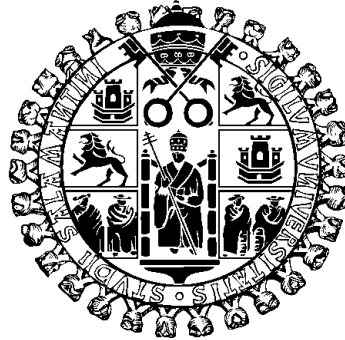


UNIVERSIDAD DE SALAMANCA  
FACULTAD DE CIENCIAS



Departamento de Física Aplicada

**Estudio de HEMTs basados en semiconductores  
de gap estrecho. Desde los materiales al  
dispositivo.**

Tesis Doctoral

Helena Rodilla Sánchez-Cuadrado

Salamanca, 2010



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

CERTIFICA:

Que el trabajo de investigación que se recoge en la presente Memoria, titulada *Estudio de propiedades de transporte en semiconductores de gap estrecho y heteroestructuras asociadas*, y presentada por **Helena Rodilla Sánchez-Cuadrado** 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.

Y AUTORIZA SU PRESENTACIÓN.

Salamanca, a 22 de julio de 2010

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



## AGRADECIMIENTOS

No habría podido concluir esta memoria sin la ayuda de una cuantas personas, a las que es de justicia que exprese ahora mi gratitud más sincera.

Para empezar, he contraído una deuda impagable con el profesor Javier Mateos López, director de esta tesis, que no sólo la ha leído meticulosamente línea a línea, corrigiendo errores y sugiriendo mejoras, sino que siempre ha estado disponible, sin perder la paciencia y el buen humor, e infundiéndome ánimos en las horas bajas.

Me considero privilegiada por haber podido trabajar en el área de Electrónica de la Universidad de Salamanca. Los profesores Daniel Pardo Collantes y Tomás González Sánchez han sabido crear un clima de colaboración amistosa muy estimulante, que facilita mucho el trabajo. Tengo multitud de razones para estar agradecida a todos los miembros del área. Desde luego a los doctores Pardo Collantes y González Sánchez, que han intervenido en diversos momentos de la elaboración de esta tesis. Pero también a Manolo, Enrique, María Jesús, Susana, Raúl, Elena, Ana y Jose, que me han brindado amistad y apoyo, y me han prestado ayuda siempre que la he necesitado. Estoy muy especialmente agradecida a la profesora Beatriz Vasallo por la ayuda que me ha prestado en relación con la ionización por impacto.

Quisiera también expresar mi gratitud al Prof. Jan Grahn, director del Laboratorio de Electrónica de Microondas del Departamento de Nanotecnología y Nanociencia de la Chalmers University of Technology de Göteborg por acogerme en el seno de su equipo durante mi estancia en la primavera de 2009, así como al Dr. Per-Åke Nilsson, que me familiarizó con el trabajo en la Sala Blanca y a Giuseppe Moschetti, que me explicó pacientemente el proceso de fabricación de los Sb-HEMTs. En Göteborg Ulf Södervall se preocupó por mi bienestar y me facilitó un

alojamiento confortable. Le estoy muy agradecida por ello. Muchos de los datos experimentales que he utilizado en este trabajo proceden de investigaciones de Mikael Malmkvist. Lamento muy profundamente no poder expresarle ya mi gratitud.

A lo largo de estos años mis padres han soportado mis horas de mal humor y de inseguridad, y en todo momento me han animado a culminar mi trabajo. A ellos y a mis amigos, entre ellos sobre todo a Carlos, les estoy muy agradecida por su apoyo. Una gratitud muy especial debo a Ignacio, que siempre está ahí cuando se le necesita, dispuesto a echar una mano, y animarme en los malos momentos.

# ÍNDICE

<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
<b>CAPÍTULO I</b>	
<b>Herramienta de simulación. El método Monte Carlo</b>	<b>9</b>
<hr/>	
I.1. EL MÉTODO MONTE CARLO	10
I.2. SIMULADOR MONTE CARLO DE PARTÍCULA ÚNICA	11
I.2.1. Estructura del programa	12
Duración del recorrido libre	13
Elección del mecanismo de <i>scattering</i>	16
Determinación del estado final del portador	16
I.2.2. Electrones y huecos	18
Bandas de energía	19
I.2.3. Mecanismos de <i>scattering</i>	20
I.2.4. Ionización por impacto	22
I.2.5. Obtención de valores medios	23
I.3. SIMULADOR MONTE CARLO DE DISPOSITIVOS	23
I.3.1. Estructura del programa	24
I.3.2. Resolución del campo eléctrico	26
I.3.3. Degeneración	36
Principio de exclusión de Pauli	36
<i>Scattering</i> con impurezas	37

Cálculo autoconsistente de la temperatura electrónica y del nivel de Fermi	37
I.3.4. Inyección de portadores	39
Problemas técnicos encontrados en la inyección en la heteroestructura de AlSb/InAs	42
I.3.5. Rugosidad de la heterounión	44
I.3.6. Ionización por impacto y movimiento de huecos	45
I.4 SIMULACIÓN DE PARÁMETROS DINÁMICOS	46

## CAPÍTULO II

### Transporte de electrones y huecos en InAs, InSb, AlSb y

### **AllnSb** **51**

---

II.1. OBTENCIÓN Y AJUSTE DE PARÁMETROS DE SIMULACIÓN	52
II.1.2. InAs	53
II.1.2. InSb	57
II.1.3. AlSb	62
II.2. ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE	65
II.2.3. Materiales binarios	66
Electrones	66
Huecos	70
II.2.3. Materiales ternarios	73
$\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$	73
$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	76

## CAPÍTULO III

### Heteroestructuras con semiconductores de gap estrecho:

### **AlSb/InAs y AllnSb/InSb** **79**

---

III.1 HETEROESTRUCTURAS A ESTUDIAR	79
III.2 HETEROESTRUCTURA DE AlSb/InAs	80



III.2.1. Resultados en equilibrio	81
III.2.2. Resultados fuera de equilibrio	86
III.3 HETEROESTRUCTURA $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}/\text{InSb}$	94
III.3.1. Resultados en equilibrio	96
III.3.2. Resultados fuera de equilibrio	100
III.3.3. Optimización	110

## CAPÍTULO IV

### **Sb-HEMTs: fabricación** **113**

---

IV.1 ESTRUCTURA EPITAXIAL DEL Sb-HEMT	113
IV.2 FABRICACIÓN DEL DISPOSITIVO	115

## CAPÍTULO V

### **Sb-HEMTs: simulación** **125**

---

V.1 VALIDEZ DEL SIMULADOR: COMPARACIÓN CON RESULTADOS EXPERIMENTALES	125
V.1.1. Características estáticas	130
V.1.2. Características dinámicas	132
V.2 Sb-HEMTs DE PUERTA AISLADA FRENTE A Sb-HEMTs DE PUERTA SCHOTTKY.	138
V.2.1. Influencia de la profundidad del <i>recess</i>	139
V.2.2. Influencia de la presencia del óxido	142
Grosor y tipo de óxido	145
Posición del óxido	149
V.2.3. Influencia de la carga superficial en el fondo del <i>recess</i>	152
V.3 INFLUENCIA DE LAS VARIACIONES EN $n_s$ .	155
V.4 ESTIMACIÓN DE $f_c$ y $f_t$	161

---

**CAPÍTULO VI****Sb-HEMTs: ionización por impacto** **165**

---

**VI.1 DESCRIPCIÓN DEL MODELO FÍSICO** 165**VI.2 CARACTERÍSTICAS ESTÁTICAS** 166**VI.3 ORIGEN MICROSCÓPICO DEL EFECTO KINK** 170**CONCLUSIONES** **181****APÉNDICE** **191****BIBLIOGRAFÍA** **193****ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS** **205**

---

**SUMMARY** 205**CONCLUSIONS** 231**BIBLIOGRAPHY** 237

---

## INTRODUCCIÓN

El papel crucial que han adquirido las comunicaciones en la sociedad actual ha acrecentado la exigencia de conseguir una velocidad cada vez mayor en la transmisión de datos. Se necesitan dispositivos electrónicos capaces de realizar el procesamiento de bits con mayor rapidez y trabajando a frecuencias cada vez más elevadas. En las situaciones en las que se requiere una elevada frecuencia de operación, como sucede en el caso de los receptores de radioastronomía, comunicaciones vía satélite, radares, etc., no sólo hacen falta dispositivos que funcionen a muy alta frecuencia, sino también que el ruido asociado a ellos sea muy bajo, dado que suelen trabajar con señales muy débiles. En este contexto los HEMTs (transistores de electrones de alta movilidad) de InAlAs/InGaAs han demostrado poseer la frecuencia de corte más elevada que se ha conseguido hasta el momento junto con el mejor comportamiento en ruido que se ha encontrado en dispositivos de tres terminales [Lai *et al.* 2007, Kim *et al.* 2008].

Un transistor de electrones de alta movilidad (HEMT) es un transistor de efecto de campo basado en una heteroestructura que confina los portadores en un canal formado por un semiconductor de alta movilidad no dopado [Schwierz and Liou 2003]. La heteroestructura consta principalmente de un material de gap pequeño y alta movilidad, que forma el canal, y otro con una constante de red similar y mayor gap, que forma la barrera que confina los electrones en el canal. En este transistor los

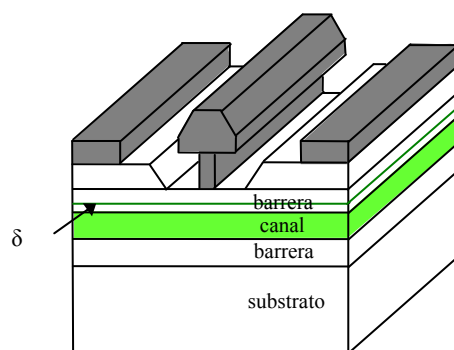
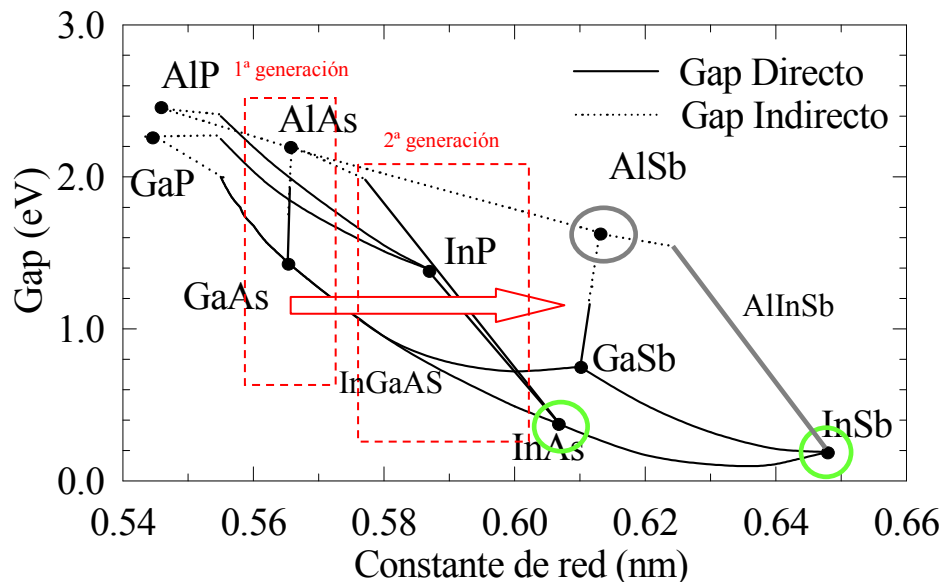


Figura 1.: Esquema de HEMT de doble barrera

electrodos de fuente y drenador controlan el campo eléctrico longitudinal en el canal, mientras que la puerta gobierna la concentración de portadores. En la primera generación de transistores, estos contaban con una sola heterounión, en la que se formaba un gas de electrones bidimensional (2DEG). Posteriormente se introdujeron los HEMTs de doble heterounión, en los que por medio de dos heterouniones entre los materiales de gap ancho y estrecho los electrones quedan mejor confinados en el canal de alta movilidad. Un esquema de este tipo de dispositivos se presenta en la figura 1. Con el fin de minimizar el *scattering* con impurezas ionizadas, el canal está formado por un material no dopado, y los portadores se introducen mediante una capa atómica muy dopada, la capa  $\delta$ , que se encuentra en el material de la barrera a una cierta distancia del canal, separado de él por una capa denominada *spacer*.



**Figura 2:** Energía del gap en función de la constante de red para algunos semiconductores III-V binarios y ternarios.

Una primera generación de HEMTs se basó en heteroestructuras de AlGaAs/GaAs [Benett *et al.* 2005]. La búsqueda de otro tipo de heterouniones que permitieran aumentar el producto  $n_s \mu$  [Schwierz and Liou. 2003] (densidad de portadores en el canal por su movilidad, factor clave para el buen funcionamiento a altas frecuencias), llevó a considerar el InGaAs como sustituto del GaAs en el canal por su mayor movilidad, que aumenta con la fracción molar de In. Debido al incremento en la constante de red del semiconductor del canal, se consideró tanto el

AlGaAs como el InAlAs para formar la barrera, dependiendo de la fracción molar de In en el canal. El salto en la banda de conducción en las heterouniones AlGaAs/InGaAs y InAlAs/InGaAs es mayor que en el caso del AlGaAs/GaAs, y aumenta para mayor contenido de In, reforzando de esta forma el confinamiento de los electrones en el canal [Boos *et al.* 1998]. En la Figura 2 se representan los gaps de los diferentes semiconductores en función de su constante de red (que debe ser similar para que la heterounión pueda fabricarse sin defectos).

Con el fin de mejorar las características dinámicas de los HEMTs, se ha recurrido típicamente al escalado de los mismos, obteniendo muy buenos resultados al reducir el tamaño de puerta hasta 30 nm. De hecho, HEMTs basados en canales con alta proporción de In y longitud de puerta menor de 100 nm, alcanzan frecuencias de corte por encima de 500 GHz con niveles de ruido mínimos [Yamashita *et al.* 2002]. Sin embargo, cuando se reduce la longitud de puerta por debajo de los 30 nm, la presencia de elementos parásitos unida a la aparición de efectos de canal corto limita el aumento de las frecuencias de corte y urge a buscar otra vía para mejorar las características dinámicas de estos transistores. Una posibilidad es utilizar nuevos materiales que proporcionen mayor movilidad y velocidad de los electrones en el canal. Explorar esa posibilidad es precisamente el objeto de esta tesis.

En los semiconductores III-V el aumento de la movilidad, o lo que es lo mismo, la disminución de la masa efectiva del valle principal, va de la mano de la disminución del gap [Fawcett *et al.* 1969]. Así, los transistores fabricados con semiconductores de gap estrecho en el canal (principalmente InAs y InSb), buscando mejorar el comportamiento en frecuencia con bajo ruido, pueden ser considerados como una tercera generación de HEMTs [Bolognesi *et al.* 1999, Boos *et al.* 1998, Kruppa *et al.* 2007, Malmkvist *et al.* 2008, Orr *et al.* 2006b, Herbert *et al.* 2005], Figura 2. No obstante, el pequeño gap de estos materiales favorece la aparición de procesos de ionización por impacto. Eso limita la tensión máxima que se puede aplicar entre terminales y restringe la utilización de este tipo de dispositivos a aplicaciones a baja potencia [Chang *et al.* 2007].

Debido al elevado coste de fabricación de este tipo de transistores, el desarrollo de modelos de simulación numérica es de inestimable ayuda a la hora de facilitar los procesos de optimización de los mismos. En estos HEMTs, la altísima movilidad del

material del canal hace que el transporte a su través se vuelva balístico o al menos cuasibalístico, de tal modo que modelos comúnmente utilizados en la simulación numérica de dispositivos, como el de deriva-difusión o el hidrodinámico, dejan de ser válidos. En este contexto el método Monte Carlo (MC) cobra gran transcendencia, revelándose como la técnica de simulación más adecuada para estudiar estos transistores. Este método proporciona una visión física de las características del dispositivo a partir de los procesos microscópicos que acontecen en el interior del mismo [Jacoboni y Reggiani 1983, Jacoboni y Lugli 1989, Fischetti y Laux 1988, Hess 1991, Moglestue 1993, Tomizawa 1993].

El objetivo de esta tesis es, pues, el estudio de los HEMTs basados en materiales de gap estrecho utilizados para aplicaciones a muy alta frecuencia, bajo ruido y baja potencia, a partir de los resultados obtenidos con simulaciones MC.

Para la obtención de los resultados expuestos en esta memoria se han utilizado dos de los simuladores MC con los que cuenta el Grupo de Investigación en Dispositivos Semiconductores de la Universidad de Salamanca<sup>\*</sup>: uno de partícula única [González *et al.* 1993a, González *et al.* 1993b] y otro *ensemble* acoplado a una resolución bidimensional de la ecuación de Poisson [Mateos *et al.* 1999, Mateos *et al.* 2000b]. Ambos simuladores se han adaptado de forma adecuada para la correcta simulación de los semiconductores de gap estrecho y las heteroestructuras en las que se basan los HEMTs, así como los dispositivos mismos [Rodilla *et al.* 2009a, Rodilla *et al.* 2009b]. Tanto estas modificaciones como los puntos clave de la simulación, se encuentran recogidas en el primer capítulo de esta memoria. La validez de nuestros simuladores ha sido contrastada en todo momento mediante la comparación con resultados experimentales obtenidos de la literatura para materiales y heterouniones, y por el grupo del Prof. Jan Grahn en la Chalmers University of Technology (Göteborg) en el caso de transistores [Malmkvist *et al.* 2008].

A la hora de estudiar de forma correcta cualquier dispositivo desde el punto de vista de la simulación, es imprescindible la caracterización previa de cada uno de los semiconductores que lo forman. El primer paso de este trabajo ha consistido en el estudio de los materiales que más tarde formarán tanto el canal como el

---

<sup>\*</sup> <http://www.usal.es/gelec>

semiconductor de la barrera mediante los resultados obtenidos con un simulador MC de partícula única.

Hemos estudiado dos semiconductores de los considerados de gap estrecho, InAs e InSb, con el fin de estudiar más tarde hasta qué punto su utilización en el canal de un HEMT consigue mejorar el comportamiento, tanto estático como dinámico, del transistor. Ambos semiconductores, de gap directo, poseen una pequeñísima masa efectiva relativa del valle  $\Gamma$  (0.014 para el del InSb y 0.023 en el caso del InAs), por lo que alcanzan una altísima movilidad (entre  $2 \times 10^4$  y  $3.3 \times 10^4$   $\text{cm}^2/\text{Vs}$  a 300 K en el caso del InAs, y unos  $7 \times 10^4$   $\text{cm}^2/\text{Vs}$  en el caso del InSb) [Madelung 2004]. De hecho, el InSb es el semiconductor III-V binario de gap más pequeño, 0.18 eV, mientras que el InAs tiene un gap de 0.35 eV; de ahí su denominación de “materiales de gap estrecho”. La distancia energética a los valles superiores es grande en comparación con el gap (1.1 eV entre  $\Gamma$  y L del InAs, y 0.45 eV entre  $\Gamma$  y X del InSb) favoreciendo una “velocidad de pico” elevada. El uso de este tipo de semiconductores de gap estrecho en el canal aumenta enormemente la movilidad de los portadores, dando lugar a mayores frecuencias de operación. Sin embargo, la potencia que proporcionan queda limitada por la aparición de procesos de ionización por impacto debido al pequeño gap de los mismos (especialmente en el caso del InSb) junto con la pequeñísima masa del valle principal.

Una vez estudiados los semiconductores de gap estrecho que integrarán el canal, hemos estudiado dos semiconductores que suelen utilizarse para formar la barrera. En el caso del InAs es claro, por similitud en la constante de red, que el AlSb debe ser el encargado de confinar los portadores en el canal. En el caso del InSb la elección no resulta tan clara por no existir ningún semiconductor III-V con una constante de red similar. Para hacer frente a este problema, una opción es utilizar un semiconductor ternario, el  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ . Cuanto mayor es la proporción de Al, mayor es la barrera en la banda de conducción entre en InSb y el  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ , pero más distintas son ambas constantes de red. Nosotros consideraremos  $x=0.15$  en nuestras simulaciones, por ser la fracción molar de Al más utilizada en la literatura la hora de formar barrera con el InSb [Orr *et al.* 2006a]. Una vez estudiados estos semiconductores, tres de ellos binarios (InAs, InSb, AlSb) y uno de ellos ternario (AlInSb), hemos analizado otro semiconductor ternario, el InGaAs. Nuestro objetivo

ha sido identificar las mejoras que supone el aumento de la fracción molar de In en el InGaAs (con vistas a formar el canal de los HEMTs) asociadas al aumento tanto de la movilidad del semiconductor como de la distancia energética entre el valle principal y los superiores.

Como ya se ha mencionado, los HEMTs son transistores basados en heteroestructuras. Una vez estudiado el comportamiento de cada uno de los semiconductores por separado, el siguiente paso es investigar el comportamiento de los portadores en el interior de las heteroestructuras que forman y en las que estarán basados los HEMTs que estudiaremos más adelante: AlSb/InAs y  $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb/InSb}$ . Con nuestro simulador MC bidimensional, convenientemente adaptado para incluir estos semiconductores de gap estrecho y sus correspondientes materiales de barrera, hemos examinado las características del transporte de electrones en las dos heteroestructuras bajo estudio.

Después de exponer los resultados obtenidos para los semiconductores y las heteroestructuras, hemos pasado finalmente a analizar el transistor propiamente dicho. Pese a que hemos investigado dos heteroestructuras (AlSb/InAs y AlInSb/InSb), la falta de resultados experimentales de HEMTs basados en InSb, unida a la cercanía profesional con el grupo del Prof. Grahn en Chalmers, cuya actividad de fabricación estaba centrada en HEMTs basados en InAs, han hecho que, llegados a este punto, focalicemos nuestra atención en los HEMTs con InAs en el canal y barrera de AlSb.

Tres capítulos de esta memoria versan sobre los HEMTs de InAs/AlSb. En el primero de ellos se hace un breve resumen de la fabricación de los dispositivos, en la cual participé de forma directa durante mi estancia en Chalmers, permitiéndome obtener una visión más amplia y clara de los dispositivos estudiados, así como de los problemas con que se tropieza en el proceso de fabricación de los mismos. Dos son las principales dificultades en este punto: la rápida oxidación del AlSb al entrar en contacto con el aire, y el elevado valor que tiene la corriente de puerta. Con el fin de minimizar ambos problemas, en los dispositivos fabricados se ha fomentado la aparición de un óxido nativo bajo la puerta [Lefevre *et al.* 2009]. Llamaremos a estos dispositivos “HEMTs de puerta aislada”. En el segundo capítulo dedicado a los HEMTs se ha estudiado el comportamiento tanto estático como dinámico de estos



---

transistores a través de nuestros resultados MC. En un primer momento hemos validado nuestro simulador gracias a la comparación con los resultados experimentales de Chalmers, hecho lo cual se ha realizado un estudio intrínseco de las consecuencias que conlleva el aislamiento de la puerta. En este capítulo no hemos considerado la ionización por impacto en nuestras simulaciones, dado que siempre hemos mantenido la polarización por debajo de 0.3 V de tensión aplicada en el drenador, región en la que las características dinámicas y de ruido del dispositivo son mejores. No podíamos concluir este trabajo sin estudiar el efecto que tiene la ionización por impacto en este tipo de transistores, dado que es ésta la que limita sus aplicaciones a las de baja potencia. En el tercer capítulo dedicado a los HEMTs de InAs, último de esta memoria, se analizan los efectos que tienen en las características estáticas del transistor tanto la ionización por impacto como la presencia de los huecos que esta genera.



# **CAPÍTULO I**

## **HERRAMIENTA DE SIMULACIÓN. EL MÉTODO MONTE CARLO**

El objeto de esta tesis es el estudio detallado de las características tanto estáticas como dinámicas de HEMTs basados en semiconductores de gap estrecho a partir de los resultados obtenidos mediante simulaciones MC comparados con las correspondientes medidas experimentales. El método MC descrito a continuación es, por consiguiente, la herramienta básica de este trabajo.

Para la obtención de los resultados expuestos en esta memoria, primero se ha utilizado un simulador MC de partícula única para el estudio de las propiedades de transporte en los semiconductores involucrados en este tipo de dispositivos, tanto en los semiconductores de gap estrecho (InAs y InSb) como en los semiconductores que forman la barrera (AlSb y AlInSb). Posteriormente se ha utilizado un simulador MC de dispositivos para estudiar tanto las heteroestructuras en las que está basado este tipo de HEMTs (Sb-HEMTs) como las características estáticas y dinámicas de los transistores propiamente dichos.

En este capítulo empezaremos exponiendo brevemente la finalidad del método MC y a continuación pasaremos a comentar los dos simuladores utilizados para la obtención de los resultados presentados en este trabajo: el de partícula única y el de dispositivos.

## I.1. EL MÉTODO MONTE CARLO

La posibilidad de obtener una solución numérica de ecuaciones no lineales, cuya solución analítica requeriría aproximaciones drásticas, así como la posibilidad de conocer los mecanismos internos descritos por las ecuaciones físicas, ha consolidado la simulación numérica como un método ampliamente utilizado tanto en física como en ingeniería [Boardman 1980].

El método de MC es una técnica de simulación que permite trabajar con funciones de probabilidad altamente complejas a través de funciones de distribución pseudo-aleatorias. Su denominación contiene una evidente alusión al casino de Montecarlo, catedral de la aleatoriedad y el azar, donde la ruleta opera como un generador de números aleatorios. Su utilización en la investigación proviene de los estudios llevados a cabo en el laboratorio de Los Álamos durante la segunda guerra mundial. Expondremos brevemente a continuación las bases matemáticas del método.

Consideremos  $p(\phi)$  y  $p(r)$ , las densidades de probabilidad asociadas a una distribución física compleja y a una distribución pseudo-aleatoria respectivamente. Para cada  $r$  existe un  $\phi$  que verifica que

$$\int_0^{\phi} p(\phi') d\phi' = \int_0^r p(r') dr'. \quad (\text{I.1})$$

Si tomamos una distribución pseudo-aleatoria uniforme  $p(r)=1$ , tenemos,

$$r = \int_0^{\phi} p(\phi') d\phi' \Rightarrow \phi = \phi(r). \quad (\text{I.2})$$

De esta forma  $\phi=\phi(r)$  nos proporciona valores aleatorios de  $\phi$  en función de  $r$  (de acuerdo con su distribución de probabilidad), siendo  $r$  un número aleatorio uniformemente distribuido entre 0 y 1.

La aplicación de este método MC de simulación al estudio del comportamiento de dispositivos electrónicos nos permite conocer la dinámica de los portadores en el interior del dispositivo, transformando las distribuciones de probabilidad complejas por las que se caracterizan este tipo de sistemas, por funciones de probabilidad pseudo-aleatorias. Este método de simulación es particularmente útil, porque, al tratarse de un modelo totalmente microscópico en el dominio del tiempo, permite no sólo el estudio de las características estáticas del dispositivo, sino también de las dinámicas e incluso del ruido. En este sentido tiene considerables ventajas frente a otros modelos de simulación como el de deriva-difusión o el hidrodinámico.

A continuación comentaremos la estructura del simulador y expondremos brevemente las principales características de los programas de simulación utilizados para la obtención de los resultados expuestos en esta memoria. [González 1994, Martín 1996, Mateos 1997a, Rengel 2002, Vasallo 2005a, Iñiguez de la Torre 2008, Pascual 2010, Jacoboni y Reggiani 1983, Jacoboni y Lugli 1989, Fischetti y Laux 1988, Hess 1991, Moglestue 1993, Tomizawa 1993].

## **I.2. SIMULADOR MONTE CARLO DE PARTÍCULA ÚNICA**

El primer paso para la correcta simulación de un dispositivo es ofrecer una caracterización adecuada de los materiales semiconductores que lo forman. Por eso se ha comenzado este trabajo con el estudio de las propiedades de transporte tanto de los electrones como de los huecos en los semiconductores que posteriormente formarán las heteroestructuras en las que están basados los Sb-HEMTs.

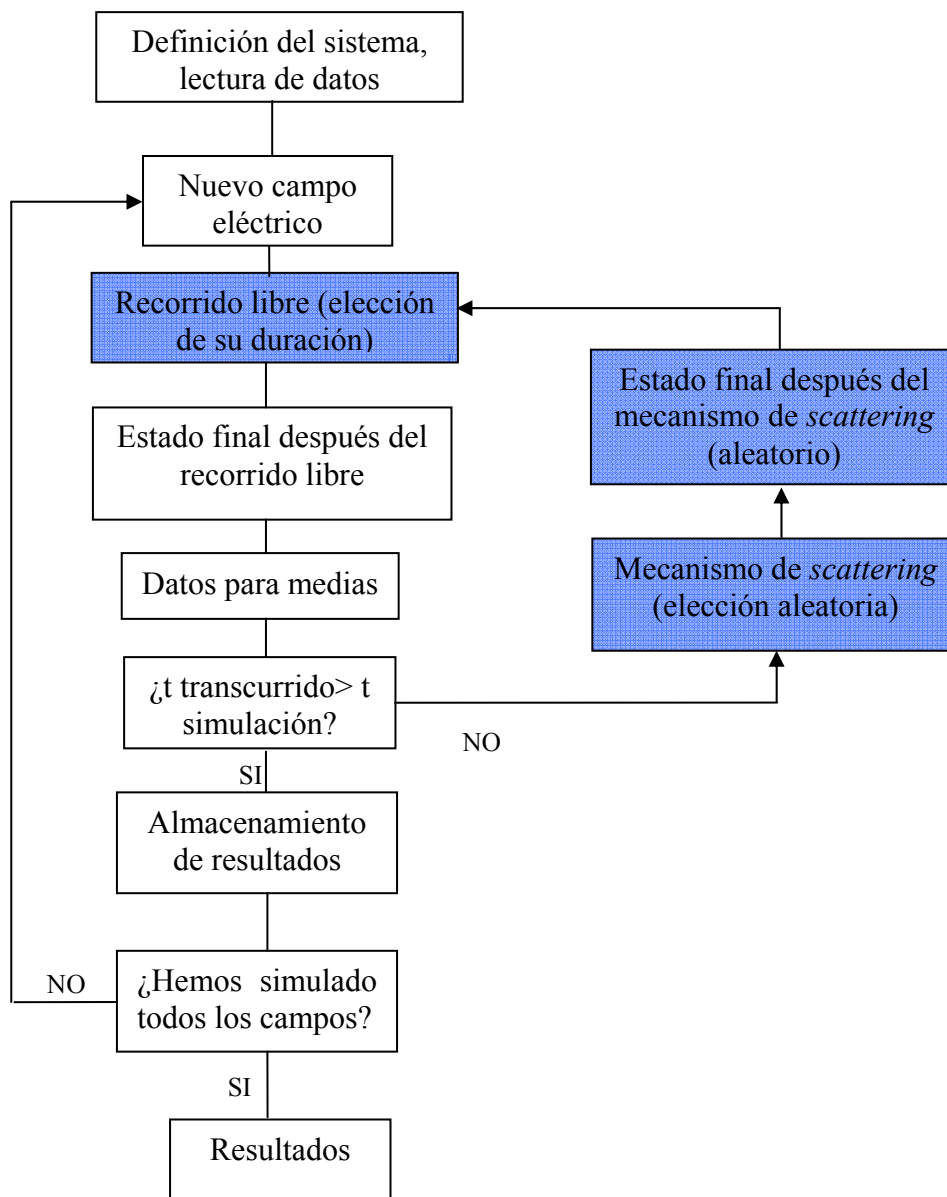
Para el estudio del comportamiento de dichos materiales, así como para la obtención de algunos de sus parámetros, se ha aplicado un programa de simulación MC de partícula única. Haciendo las modificaciones oportunas, este programa ha sido utilizado tanto para electrones como para huecos.

Consideraremos un material ilimitado sometido a un campo eléctrico constante. En consecuencia, el transporte de los portadores en su interior será homogéneo y estacionario, cumpliéndose el principio de ergodicidad. Esto nos asegura que podemos estudiar el comportamiento de muchos portadores de carga en el interior de un material examinando el comportamiento de uno solo durante un tiempo suficientemente largo.

Comenzamos comentando la estructura de nuestro simulador ayudándonos del correspondiente diagrama de bloques y prestando una mayor atención a aquellas partes del programa en las que se hace uso del método MC anteriormente descrito. A continuación expondremos en detalle las partes que consideramos más relevantes en la simulación de semiconductores de gap estrecho.

### I.2.1. Estructura del programa

La estructura de bloques del programa es la siguiente:



**Figura I.1:** Esquema del programa de partícula única, señalando en azul los bloques en los que se hace uso del método MC propiamente dicho.

Nuestras simulaciones comienzan con la definición del sistema que vamos a estudiar, caracterizado tanto por las propiedades del material (estructura de bandas, mecanismos de *scattering* a considerar, etc) como por las condiciones físicas del estudio (temperatura, campo eléctrico, etc). Una vez definido el sistema, se inicializan las variables necesarias para la simulación, así como los distintos contadores, y se le da a la partícula considerada una energía cercana a la térmica, aunque esa energía inicial no será determinante en el proceso.

Un portador, sometido a un campo eléctrico, se acelera. En el caso en el que el portador se encuentre en el interior de un semiconductor, sufre diferentes mecanismos de *scattering* o colisiones (con las impurezas, con los fonones de la red, etc), que hacen que, en promedio, la velocidad del portador sea constante, y por lo tanto no se produzca esa aceleración. El tiempo entre un mecanismo de *scattering* y el siguiente es lo que conocemos como “tiempo de recorrido libre medio”.

Nuestra simulación se basa, por tanto, en la sucesión recorrido libre-*scattering*-recorrido libre-*scattering*, y así sucesivamente hasta que el tiempo simulado sea lo suficientemente largo para poder hacer uso del principio de ergodicidad, y para que, con una sola partícula, tengamos información fiable sobre el comportamiento de los portadores dentro de nuestro material.

Tanto la duración del recorrido libre como la elección del mecanismo de *scattering* y del estado final del portador se hacen de forma aleatoria (bloques señalados en azul en la figura I.1), haciendo uso del método de MC anteriormente expuesto. A continuación explicaremos en detalle cada uno de esos pasos.

### **Duración del recorrido libre**

Un proceso de *scattering*  $n$ , que lleva a nuestro portador de un estado  $\mathbf{K}$ , en el espacio de momentos, a un estado  $\mathbf{K}'$ , viene caracterizado por una tasa de transición

$$S_n(\mathbf{K}, \mathbf{K}'), \quad (\text{I.3})$$

siendo  $n$  uno cualquiera de los  $N$  procesos de *scattering* posibles.

Si partimos de un estado  $\mathbf{K}$ , la probabilidad de *scattering* asociada al proceso  $n$  será simplemente

$$\lambda_n(\mathbf{K}) = \int S_n(\mathbf{K}, \mathbf{K}') d\mathbf{K}' . \quad (\text{I.4})$$

Teniendo en cuenta todos los procesos de *scattering* posibles, tenemos

$$\lambda(\mathbf{K}) = \sum_{n=1}^N \lambda_n(\mathbf{K}). \quad (\text{I.5})$$

Consideremos el tiempo transcurrido durante un recorrido libre  $t$ , y dividamos ese tiempo en  $m$  pequeños intervalos de tiempo,  $t = \delta t_1 + \delta t_2 + \dots + \delta t_m$ . La probabilidad de que nuestro portador sufra un mecanismo de *scattering* en un intervalo de tiempo  $\delta t_i$  viene dada por  $\lambda(\mathbf{K})\delta t_i$  y, por tanto, la probabilidad de que no lo sufra, por  $(1 - \lambda(\mathbf{K})\delta t_i)$ . Según todo esto, la probabilidad de que tengamos un recorrido libre de tiempo  $t$  viene dada por

$$S(t) = \prod_{i=1}^m (1 - \lambda(\mathbf{K})\delta t_i), \quad (\text{I.6})$$

con lo que, tomando logaritmos, y haciendo uso de que  $\lambda(\mathbf{K})\delta t_i \ll 1$ ,

$$S(t) = \exp\left\{-\int_0^t \lambda(\mathbf{K}) dt'\right\}. \quad (\text{I.7})$$

De esta forma la probabilidad de tener un recorrido libre de tiempo  $t$  tras el que se produce un mecanismo de *scattering* toma el valor

$$p(t) = \lambda(\mathbf{K}) \exp\left\{-\int_0^t \lambda(\mathbf{K}) dt'\right\}. \quad (\text{I.8})$$



Nuestro objetivo es poder calcular el tiempo de nuestro recorrido libre a partir de una variable aleatoria,  $r$ , de distribución uniforme entre 0 y 1,  $0 < r < 1$ . Aplicando el método de MC anteriormente expuesto, tenemos

$$r = 1 - \exp\left\{-\int_0^t \lambda(\mathbf{K}) dt'\right\}. \quad (\text{I.9})$$

Sin embargo la obtención de  $t$  como función de  $r$  no tiene solución analítica. Una forma sencilla de hacer frente a este problema es introducir procesos virtuales [Rees 1968]. Para eso añadimos a los procesos reales de *scattering* un proceso más, que denominaremos “autoscattering”, y que viene definido por

$$S_v(\mathbf{K}, \mathbf{K}') = \lambda_v(\mathbf{K}) \delta(\mathbf{K} - \mathbf{K}'). \quad (\text{I.10})$$

Este proceso virtual no modifica el estado del portador. Podemos elegir  $\lambda_v(\mathbf{K})$ , de forma que verifique

$$\lambda_v(\mathbf{K}) = \Gamma - \lambda(\mathbf{K}), \quad (\text{I.11})$$

siendo  $\lambda(\mathbf{K})$  la suma total de las probabilidades de *scattering* reales, y  $\Gamma$  una constante lo suficientemente grande como para evitar las probabilidades negativas. Por tanto  $\lambda_v(\mathbf{K}) > 0$  para cualquiera de los  $\mathbf{K}$  que puedan estar involucrados en el proceso. La tasa total de *scattering*  $\lambda_t(\mathbf{K})$  vendrá dada por

$$\lambda_t(\mathbf{K}) = \lambda(\mathbf{K}) + \lambda_v(\mathbf{K}) = \Gamma. \quad (\text{I.12})$$

De forma que,

$$r = 1 - \exp\left\{-\int_0^t \lambda_t(\mathbf{K}) dt'\right\} = 1 - e^{-\Gamma t}. \quad (\text{I.13})$$

Despejando ahora  $t$ , en función de  $r$  tenemos

$$t = -\frac{1}{\Gamma} \log(r). \quad (\text{I.14})$$

Obtenemos así el tiempo del recorrido libre en función de un número aleatorio  $r$ , uniformemente distribuido entre 0 y 1.

Dado que durante el recorrido libre, lo que tenemos es un portador sometido a un campo constante, es fácil determinar el estado final de energía tras el recorrido libre.

### **Elección del mecanismo de *scattering***

Una vez terminado el recorrido libre, se produce un mecanismo de *scattering*. En el apartado anterior hemos visto que un tipo de mecanismo de *scattering*  $n$ , viene definido por una probabilidad de *scattering*  $\lambda_n(\mathbf{K})$ . Por otra parte, hemos introducido un tipo de proceso de *scattering* que hemos llamado “virtual”, tal que  $\lambda_v(\mathbf{K}) = \Gamma - \lambda(\mathbf{K})$ .

Como después del recorrido libre hemos fijado la energía del portador, podemos pasar fácilmente de  $\lambda_n(\mathbf{K}) \rightarrow \lambda_n(E)$ , siendo  $E$  la energía del portador después del recorrido libre y, por tanto, la energía justo antes del mecanismo de *scattering*. Una vez que tenemos  $\lambda_n(E)$  de todos los mecanismos de *scattering*, elegimos uno de forma aleatoria de acuerdo con las distintas probabilidades de cada uno.

Ahora bien, si el mecanismo elegido es virtual, realizamos un nuevo recorrido libre seguido de un nuevo mecanismo de *scattering* tantas veces como sea necesario hasta tener un proceso real. Tomamos entonces como tiempo de recorrido libre la suma de la duración de los distintos tiempos que concluyen en *autosscatterings* hasta llegar al *scattering* real.

### **Determinación del estado final del portador**

Necesitamos conocer el estado final del portador después de sufrir un mecanismo de *scattering*. Supondremos que los *scatterings* son procesos instantáneos, y que, por tanto, no modifican la posición de la partícula, con lo que sólo necesitamos conocer la energía y el momento del portador justo después del *scattering*.

En cuanto a la energía, si se trata de un *scattering* elástico, la energía del portador no cambia con el mecanismo de *scattering*, por lo que  $E_f = E_i$  (donde  $E_i$  y  $E_f$  son las energías del portador antes y después del mecanismo de *scattering* respectivamente). Por el contrario, si se trata de un mecanismo de *scattering* inelástico, la energía después del mecanismo será

$$E_f = E_i + \Delta E, \quad (\text{I.15})$$

donde  $\Delta E$ , que puede tomar valores positivos o negativos, dependerá del mecanismo de *scattering*, siendo, por ejemplo,  $\Delta E = \hbar\omega$  en el caso de la absorción de un fonón. Veamos ahora lo que sucede con el vector de onda. En este caso tenemos que diferenciar entre procesos isótropos, en los que la probabilidad de *scattering* no depende del ángulo formado entre los vectores de onda antes y después del *scattering*, y procesos anisótropos, en los que sí depende de él.

Comencemos por el caso isótropo. Descompongamos el estado de nuestro portador en ángulo polar y azimutal  $\theta$  y  $\phi$ , de forma que

$$K'_x = |\mathbf{K}'| \text{sen} \theta \cos \phi \quad (\text{I.16})$$

$$K'_y = |\mathbf{K}'| \text{sen} \theta \text{sen} \phi$$

$$K'_z = |\mathbf{K}'| \cos \theta.$$

$|\mathbf{K}'|$  es conocido, ya que la  $E_f$  y, como veremos más adelante, la relación  $E(\mathbf{K})$  son conocidas. Por tanto, sólo necesitamos conocer los ángulos polar y azimutal. Para ello recurriremos al método MC. De esta forma obtendremos  $\theta$  y  $\phi$  en función de dos números aleatorios  $r_1$  y  $r_2$  correspondientes a una distribución uniforme entre 0 y 1, es decir, obtendremos  $\theta = \theta(r_1)$  y  $\phi = \phi(r_2)$  con  $0 < r_1 < 1$  y  $0 < r_2 < 1$ . La densidad de probabilidad de que nuestro estado final  $\mathbf{K}'$  forme un ángulo  $\theta$  con  $K_z$  es proporcional al número de estados disponibles en la circunferencia de radio  $|\mathbf{K}'| \text{sen}(\theta)$ . Por tanto  $P(\theta) \propto \text{sen}(\theta)$ . Normalizando de forma que  $\int_0^\pi P(\theta) d\theta = 1$ , y haciendo uso del

método de MC, obtenemos

$$\cos(\theta) = 1 - 2r_1. \quad (\text{I.17})$$

Dado que en el caso del ángulo azimutal todos tienen la misma probabilidad, normalizando y aplicando el método de MC tenemos

$$\phi = 2\pi r_2. \quad (\text{I.18})$$

En el caso de un mecanismo de *scattering* anisótropo, lo que conocemos es la probabilidad asociada al ángulo que forman los vectores de onda inicial y final  $\theta$ . A partir de esa probabilidad y la ecuación (I.2) obtenemos  $\theta$  en función de un primer número aleatorio,  $r_1$ , uniformemente distribuido entre 0 y 1.

Mediante dos rotaciones del sistema de referencia se obtiene [González 1994]

$$K'_x = |\mathbf{K}'|(\cos \beta \cos \alpha \sin \theta \cos \phi + \cos \beta \sin \alpha \cos \theta - \sin \beta \sin \theta \sin \phi) \quad (\text{I.19})$$

$$K'_y = |\mathbf{K}'|(\sin \beta \cos \alpha \sin \theta \cos \phi + \sin \beta \sin \alpha \cos \theta + \cos \beta \sin \theta \sin \phi)$$

$$K'_z = |\mathbf{K}'|(-\sin \alpha \sin \theta \cos \phi + \cos \alpha \cos \theta),$$

donde  $\alpha$  y  $\beta$  son los ángulos polar y azimutal iniciales de nuestro sistema, y  $\phi$ , dado que todos los ángulos azimutales son igualmente probables, se puede obtener a partir de un segundo número aleatorio,  $r_2$ , uniformemente distribuido entre 0 y 1 a partir de  $\phi = 2\pi r_2$ .

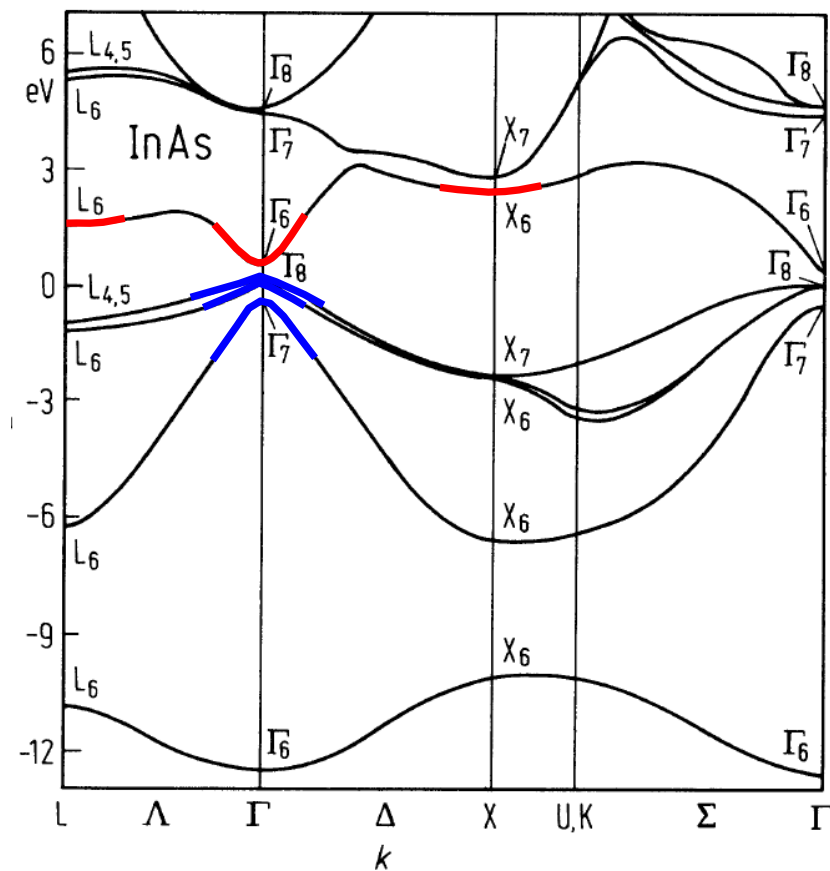
### I.2.2. Electrones y huecos

Pese a que trabajaremos siempre con semiconductores de tipo n, en el caso de alguno de los materiales que nos ocupan (principalmente los de gap más estrecho, InSb e InAs), la ionización por impacto es de vital importancia, como veremos más adelante. Por eso los huecos tienen un papel relevante. Esta es la razón por la que caracterizaremos no solo los electrones sino también los huecos a través de los resultados obtenidos de la utilización del programa de partícula única.

El programa utilizado para electrones y para huecos es en esencia el mismo, aunque entre ellos hay algunas diferencias importantes que veremos a continuación.

### Bandas de energía

La estructura de una banda de energía viene caracterizada por la relación entre la energía y el momento de los portadores [Fig. I.2]. Para nuestra simulación hemos considerado bandas esféricas no-parabólicas para ambos tipos de portadores.



**Figura I.2:** Estructura de bandas del InAs en la que se han señalado los tres valles de la banda de conducción que consideramos en la simulación (en rojo) y los tres máximos de la de valencia (en azul).

En el caso de los electrones trataremos con la banda de conducción. Consideraremos tres mínimos, en rojo en la figura I.2. En torno a estos mínimos podemos aproximar la relación entre la energía y el momento de los portadores mediante

$$E(1 + \alpha E) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (\text{I.20})$$

donde  $E$  es la energía del electrón,  $\mathbf{K}=(K_x, K_y, K_z)$  su momento,  $\alpha$  el coeficiente de no parabolicidad y  $m^*$  la masa efectiva.

En el caso de los huecos, lo que nos ocupa es la banda de valencia. Consideraremos tres sub-bandas centradas en  $\mathbf{K}=0$  (azul en la figura I.2): dos de ellas degeneradas (es decir, tienen la misma energía en el punto  $\mathbf{K}=0$ , pero distinta curvatura), que se conocen como “banda de huecos pesados” y “banda de huecos ligeros”, y una tercera conocida como “split-of-band”, que también está centrada en  $\mathbf{K}=0$ . En este caso, en torno a  $\mathbf{K}=0$  aproximamos la relación entre la energía y el momento de la misma forma que con los electrones [ec. I.20] [Vasallo 2005a, Brudevoll *et al.* 1990].

### I.2.3. Mecanismos de *scattering*

Como dijimos anteriormente, los mecanismos de *scattering* son los responsables de que en un semiconductor en el seno de un campo eléctrico los portadores tengan una velocidad promedio constante (es decir, que no se aceleren indefinidamente).

Dependiendo del material considerado, y de si los portadores son electrones o huecos, la influencia de cada tipo de mecanismo de *scattering* será diferente. A continuación pasaremos a enumerar los distintos mecanismos de *scattering* considerados en la simulación de nuestros materiales.

- Centrándonos en el origen físico del *scattering*, podemos tener:
  - *Scattering* con defectos: los materiales no son perfectos y a menudo están dopados, por lo que contienen impurezas. Un portador puede interactuar con esas impurezas, ya sean ionizadas o neutras. El *scattering* con impurezas más relevante es el *scattering* con impurezas ionizadas, por lo que nosotros solamente consideraremos éste en nuestro trabajo. Otro *scattering* de este tipo es el de aleación, que solamente ha sido considerado en el caso de materiales compuestos.

- *Scattering* portador-portador: la complejidad del uso del método MC en este tipo de *scattering*, junto con su escasa relevancia para densidades de portadores no muy elevadas, hacen que no lo hayamos tenido en cuenta en nuestras simulaciones.
- *Scattering* con la red: los átomos de la red cristalina que forma nuestro semiconductor no están en posiciones totalmente fijas, sino que oscilan alrededor de su posición de equilibrio. La cuantificación de estas vibraciones de la red es lo que se conoce como “fonones”, pudiendo ser acústicos u ópticos (dependiendo de cuál sea su relación de dispersión). Los portadores pueden interaccionar con los fonones de la red. Llamaremos *scattering* no polar al producido mediante un potencial de deformación, mientras que el causado por las fuerzas electrostáticas que producen los desplazamientos de los átomos de la red se conoce como “*scattering* polar” (en el caso de que los fonones sean acústicos, se conoce como “piezoeléctrico”).
- Dependiendo de si el *scattering* produce un cambio de valle o no en el portador, podemos distinguir entre:
  - Procesos intervalle: el *scattering* provoca una transición del portador a otro valle distinto del inicial, ya sea éste equivalente o no.
  - Procesos intravalle: tras el *scattering* el portador continúa en el mismo valle.

En nuestras simulaciones consideraremos:

- *Scattering* con impurezas ionizadas: elástico y anisótropo
- *Scattering* de aleación (sólo en semiconductores compuestos)
- *Scattering* intervalle, ya sea con fonones acústicos como con ópticos: inelástico e isótropo
- *Scattering* acústico polar: elástico e isótropo
- *Scattering* acústico no polar o piezoeléctrico: elástico e isótropo
- *Scattering* óptico polar: inelástico y anisótropo
- *Scattering* óptico no polar: solamente lo consideraremos en los valles L, y se trata de un proceso inelástico e isótropo

Además de los mecanismos de *scattering* mencionados anteriormente, en nuestras simulaciones también hemos tenido en cuenta la ionización por impacto.

Ésta se produce cuando un portador que ha ganado suficiente energía colisiona con un electrón ligado a un átomo de la red, transfiriendo a dicho electrón la energía suficiente como para pasar a la banda de conducción, creándose así un par electrón hueco. Debido a la gran relevancia que tiene tanto en el InSb como en el InAs, en el siguiente apartado veremos con detalle cómo ha sido implementada la ionización por impacto en nuestro simulador MC.

En lo referente a las probabilidades de *scattering*, las expresiones de sus dependencias con la energía han sido extraídas de [Nag 1980, Jacoboni and Lugli 1989, Ferry and Grondin 1991, Tomizawa 1993].

#### I.2.4. Ionización por impacto

El pequeño gap de alguno de los materiales que nos ocupan (InAs e InSb) hace que el estudio de la ionización por impacto sea imprescindible en este trabajo. La probabilidad de que un electrón con energía  $E$  sufra ionización por impacto, creando así un par electrón hueco, es [Fischetti 1991, Vasallo *et al.* 2003, Kalna y Asenov 2003]:

$$P(E) = S \left( \frac{E - E_{th}}{E_{th}} \right)^2 \quad \text{si } E > E_{th} \quad (I.21)$$

$$P(E) = 0 \quad \text{si } E \leq E_{th},$$

donde  $S$  es un parámetro que mide la eficiencia de la ionización por impacto, y  $E_{th}$  la energía umbral (energía mínima que ha de tener el electrón para poder sufrir ionización por impacto). La energía umbral ha de ser mayor que la energía del gap.

Tanto  $S$  como  $E_{th}$  son parámetros que suelen ajustarse a partir de la comparación de los resultados obtenidos en las simulaciones MC para el coeficiente de ionización con los medidos experimentalmente. En nuestro caso para el InSb y el InAs hemos tomado  $E_{th} = 1.08 * E_{gap}$  (donde  $E_{gap}$  es la energía del gap) [Herbert *et al.* 2005].

El electrón que por medio de un mecanismo de ionización por impacto crea un par electrón-hueco queda con una energía final correspondiente a la inicial menos la energía del gap y menos la energía térmica con la que introduzcamos ese par



electrón-hueco (ambos con velocidades en dirección aleatoria), verificándose así el principio de conservación de la energía.

### I.2.5. Obtención de valores medios

Las simulaciones MC de partícula única nos proporcionan la información necesaria para el estudio del transporte de portadores, como pueden ser la velocidad media de los portadores, la probabilidad de ocupación de cada valle etc. Para la obtención de esas magnitudes, durante los recorridos libres hemos ido guardando valores instantáneos, para poder calcular así la media de una magnitud cualquiera  $A(\mathbf{K})$ , durante un tiempo de simulación  $T$  como [Jacoboni *et al.*1983]

$$\langle A \rangle_T = \frac{1}{T} \int_0^T A(\mathbf{K}(t')) dt' = \frac{1}{T} \sum_i \int_0^{t_i} A(\mathbf{K}(t')) dt', \quad (I.22)$$

donde la integral a todo el tiempo simulado  $T$  se ha separado como la suma de integrales de los  $i$  recorridos libres de duración  $t_i$ .

## I.3. SIMULADOR MONTE CARLO DE DISPOSITIVOS

Para el estudio de las heteroestructuras en las que están basados los Sb-HEMTs, así como el de los HEMTs propiamente dichos, hemos hecho uso de un programa de simulación MC en dos dimensiones que resuelve la ecuación de Poisson de forma autoconsistente con la distribución espacial de portadores.

Hasta ahora hemos estudiado un bloque de material infinito, donde el transporte era homogéneo y estacionario, cumpliéndose el principio de ergodicidad, por lo que considerábamos una sola partícula un tiempo lo suficientemente largo. Ahora bien, cuando queremos simular un dispositivo, tenemos que incluir restricciones espaciales que delimiten nuestro dispositivo. Esto nos lleva a introducir condiciones de contorno que establezcan el comportamiento de los portadores en las fronteras del material. Por otro lado, al no poder hacer uso del principio de ergodicidad, tendremos que introducir en nuestro dispositivo un número elevado de partículas. Para hallar ahora el potencial dentro del dispositivo, resolvemos la ecuación de Poisson de forma

autoconsistente con la posición de los portadores en el interior del dispositivo mediante un mallado espacial y una discretización temporal adecuada.

Comenzaremos este apartado exponiendo la estructura del simulador de dispositivos. Hecho esto centraremos la atención en los aspectos que cobran mayor relevancia en la simulación de dispositivos con semiconductores de gap estrecho en el canal, como son la resolución del campo eléctrico junto con las condiciones de contorno, la degeneración, punto éste de vital importancia en nuestras simulaciones debido a la pequeñísima masa efectiva del valle principal que poseen estos semiconductores de gap estrecho, así como la inyección, que juega un papel importantísimo sobre todo en la simulación de heteroestructuras AlSb/InAs debido al gran salto en la banda de conducción así como al lento proceso de termalización de los electrones causado por la altísima degeneración.

### **I.3.1. Estructura del programa**

Igual que en el programa de partícula única, el simulador de dispositivos comienza con la definición del sistema a simular, así como con la lectura de los parámetros de los materiales utilizados. Para la obtención del campo eléctrico la resolución de la ecuación de Poisson ha de ser autoconsistente con la distribución de portadores. Para conseguirlo simularemos la totalidad de las partículas en cada una de las iteraciones, siendo el número de partículas el suficiente para dar una solución correcta del campo.

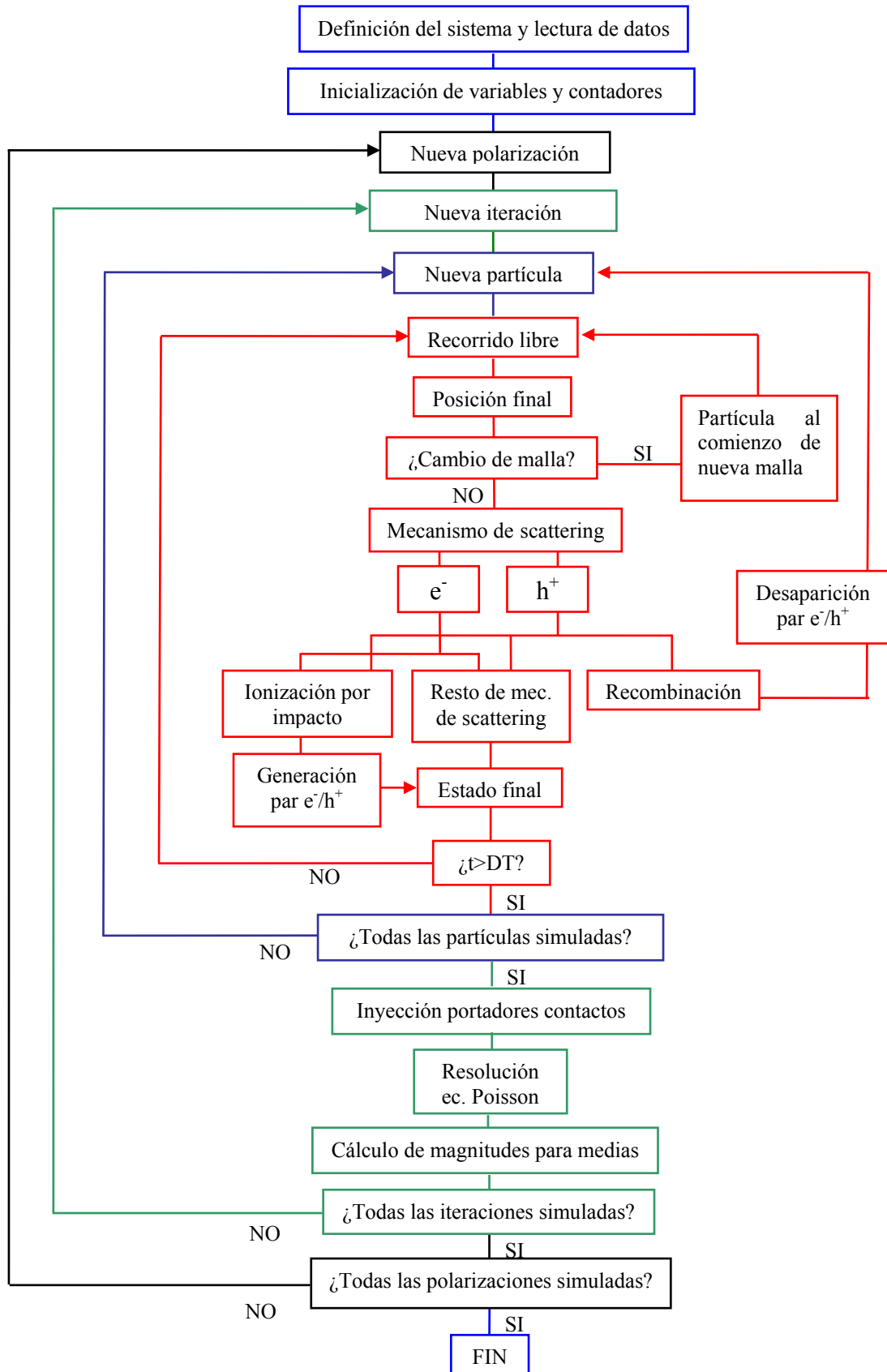


Figura I.3: Esquema del simulador MC de dispositivos.

A continuación veremos los puntos clave para la correcta simulación tanto de las heteroestructuras basadas en semiconductores de gap estrecho como de los Sb-HEMTs propiamente dichos.

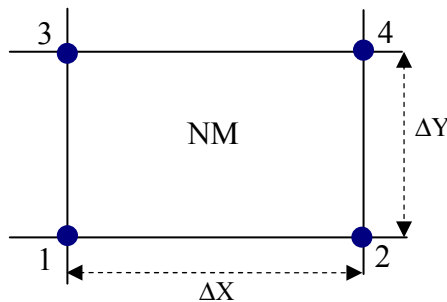
### I.3.2. Resolución del campo eléctrico

Una de las diferencias más importantes entre el MC de partícula única y el de dispositivo es la necesidad de resolver la ecuación de Poisson para el cálculo del campo eléctrico en el de dispositivos. Para ello lo primero que haremos es una discretización de nuestro sistema mediante un mallado espacial. Dividiremos nuestro sistema en  $NH$  mallas horizontales y  $NV$  verticales, teniendo por tanto  $NH \cdot NV$  mallas y  $(NH+1) \cdot (NV+1)$  nodos. Para facilitar una mejor resolución del campo el mallado no tiene por qué ser uniforme, pudiendo hacerse una resolución más minuciosa en aquellos lugares en los que la no homogeneidad del campo sea más pronunciada. Respecto al tamaño del mallado, éste debe cumplir la condición de que las dimensiones de las mallas sean menores que la longitud de Debye en cada punto, que viene dada por

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_r K_B T}{e^2 n}}, \quad (I.23)$$

donde  $K_B$  es la constante de Boltzman,  $T$  la temperatura y  $n$  la concentración de portadores. En nuestro caso, para InAs con  $n=10^{18} \text{ cm}^{-3}$  tenemos  $\lambda_D=1.32 \text{ nm}$ .

Consideremos una malla  $NM$  cualquiera de nuestro mallado [Fig. I.4]



**Figura I.4:** Esquema del mallado.

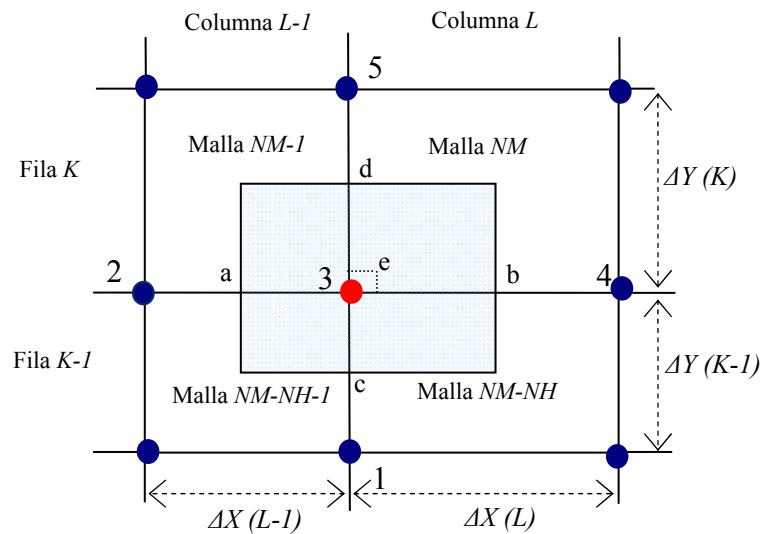
Obtendremos el campo eléctrico de cada malla en función del potencial de los cuatro nodos que rodean la malla

$$E_x^{NM} = -\nabla_x \varphi = -\frac{1}{2} \left( \frac{\varphi_4 - \varphi_3}{\Delta X} + \frac{\varphi_2 - \varphi_1}{\Delta X} \right) \quad (I.24)$$

$$E_y^{NM} = -\nabla_y \varphi = -\frac{1}{2} \left( \frac{\varphi_3 - \varphi_1}{\Delta Y} + \frac{\varphi_4 - \varphi_2}{\Delta Y} \right),$$

de modo que, para obtener el campo en cada una de las mallas, hemos de resolver la ecuación de Poisson en cada uno de los nodos.

Consideremos un nodo cualquiera de nuestro mallado, el número 3 de la figura I.5



**Figura I.5:** Esquema del mallado con la notación que usaremos, donde NM es el número de la malla considerada, NH el número de mallas horizontales y el punto e es el centro del rectángulo formado por las cuatro mallas en torno al nodo 3.

La ecuación que tenemos que resolver es:

$$\nabla(\epsilon \nabla \varphi) = \rho. \quad (I.25)$$

Suponiendo  $\varepsilon$  constante, en dos dimensiones la ecuación (I.25) toma la forma

$$\left( \frac{\partial}{\partial X} \left( \frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left( \frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial Y} \right) \right) = \rho . \quad (\text{I.26})$$

Utilizando el método de diferencias finitas, la primera derivada del potencial respecto a  $x$ , en el punto medio entre los nodos 2 y 3,  $a$ , se puede poner como

$$\left( \frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial X} \right)_a = \frac{\varphi_3 \varepsilon - \varphi_2 \varepsilon}{\Delta X (L-1)}, \quad (\text{I.27})$$

donde  $\varepsilon$  es la permitividad en la separación de las mallas NM-1 y NM-NH-1. Si en ambas celdas tenemos el mismo material, no hay problema. Pero si son materiales diferentes, tomaremos la permitividad en la separación entre dos celdas como la media de las permitividades de los materiales de ambas celdas,

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_{NM-1} + \varepsilon_{NM-NH-1}}{2}, \quad (\text{I.28})$$

y por tanto

$$\left( \frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial X} \right)_a = \frac{\varphi_3 - \varphi_2}{\Delta X (L-1)} \frac{\varepsilon_{NM-1} + \varepsilon_{NM-NH-1}}{2}. \quad (\text{I.29})$$

De igual forma tendremos

$$\left( \frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial X} \right)_b = \frac{\varphi_4 - \varphi_3}{\Delta X (L)} \frac{\varepsilon_{NM} + \varepsilon_{NM-NH}}{2} \quad (\text{I.30})$$

$$\left( \frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial Y} \right)_c = \frac{\varphi_3 - \varphi_1}{\Delta Y (K-1)} \frac{\varepsilon_{NM-NH-1} + \varepsilon_{NM-NH}}{2}$$

$$\left(\frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial Y}\right)_d = \frac{\varphi_3 - \varphi_3}{\Delta Y(K)} \frac{\varepsilon_{NM-1} + \varepsilon_{NM}}{2}.$$

La derivada segunda en la dirección X en el punto medio entre a y b será

$$\left(\frac{\partial}{\partial X}\left(\frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial X}\right)\right) = \frac{\left(\frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial X}\right)_b - \left(\frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial X}\right)_a}{\frac{\Delta X(L-1)}{2} + \frac{\Delta X(L)}{2}}. \quad (I.31)$$

Y en la dirección Y, en el punto medio entre d y c

$$\left(\frac{\partial}{\partial Y}\left(\frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial Y}\right)\right) = \frac{\left(\frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial Y}\right)_d - \left(\frac{\partial(\varepsilon\varphi)}{\partial Y}\right)_c}{\frac{\Delta Y(K-1)}{2} + \frac{\Delta Y(K)}{2}}. \quad (I.32)$$

De este modo, aunque lo que realmente hacemos es discretizar la ecuación de Poisson en el punto e, y no en el nodo 3, obtenemos una expresión que liga los potenciales de los cinco nodos, que es lo que queríamos.

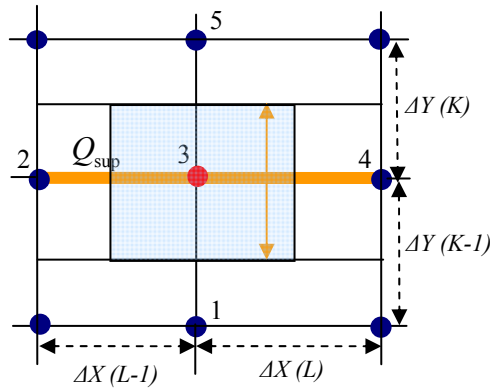
Para poder expresar la ecuación de Poisson de este nodo, ya sólo nos falta el segundo miembro: la densidad de carga asociada al nodo. Consideraremos dos contribuciones de carga a este nodo:

1. La carga debida a los portadores del interior del dispositivo. La densidad de carga será en este caso la correspondiente a los portadores que se encuentren dentro del rectángulo que forman los puntos a, b, c y d de la figura I.5, y vendrá dada por

$$\begin{aligned} \rho_{vol} = & \left[ \bar{\rho}(NM - NH - 1)\Delta X(L-1)\Delta Y(K-1) + \bar{\rho}(NM - NH)\Delta X(L)\Delta Y(K-1) \right. \\ & \left. + \bar{\rho}(NM - 1)\Delta X(L-1)\Delta Y(K) + \bar{\rho}(NM)\Delta X(L)\Delta Y(K) \right] \\ & / (\Delta X(L-1) + \Delta X(L))(\Delta Y(K-1) + \Delta Y(K)), \end{aligned} \quad (I.33)$$

Siendo  $\bar{\rho}(N)$  la densidad de carga asociada a la malla  $N$  calculada durante el intervalo de tiempo  $dt$  inmediatamente anterior a la resolución de la ecuación de Poisson.

2. La carga superficial asociada a una heterounión o a una interfaz con un dieléctrico. En el caso en el que nuestro nodo se encuentre en una discontinuidad con una carga superficial  $Q_{sup}$  asignaremos a este nodo la densidad de carga correspondiente a dicha carga. Lo que hacemos realmente es expandir nuestra carga superficial en la dirección perpendicular a la superficie cargada [Fig. I.6]. Una vez hecho esto, asignamos al nodo 3 la carga como en el caso anterior (la correspondiente al rectángulo azul de la figura I.6).



**Figura I.6:** Carga asociada a una heterounión.

Obteniendo, si la carga superficial está en la interfaz en dirección X (como en la figura I.6),

$$\rho_{sup} = \frac{2Q_{sup}}{(\Delta Y(K) + \Delta Y(K-1))}. \quad (I.34.a)$$

Y si se encuentra en la dirección Y,

$$\rho_{sup} = \frac{2Q_{sup}}{(\Delta X(L) + \Delta X(L-1))}. \quad (I.34.b)$$



Con todo esto, la ecuación de Poisson para el nodo 3 [ec. I.25] toma la forma:

$$\begin{aligned}
& \varphi_1 \left[ 2 \frac{\Delta X(L-1) + \Delta X(L)}{\Delta Y(K-1)} \left( \frac{\varepsilon_{NM-NH-1} + \varepsilon_{NM-NH}}{2} \right) \right] + \varphi_2 \left[ 2 \frac{\Delta Y(K-1) + \Delta Y(K)}{\Delta X(L-1)} \left( \frac{\varepsilon_{NM-1} + \varepsilon_{NM-NH-1}}{2} \right) \right] + \\
& \varphi_3 \left[ -2 \frac{\Delta Y(K-1) + \Delta Y(K)}{\Delta X(L-1)} \left( \frac{\varepsilon_{NM-1} + \varepsilon_{NM-NH-1}}{2} \right) \right. \\
& \quad \left. -2 \frac{\Delta Y(K-1) + \Delta Y(K)}{\Delta X(L)} \left( \frac{\varepsilon_{NM} + \varepsilon_{NM-NH}}{2} \right) \right. \\
& \quad \left. -2 \frac{\Delta X(L-1) + \Delta X(L)}{\Delta Y(K-1)} \left( \frac{\varepsilon_{NM-NH-1} + \varepsilon_{NM-NH}}{2} \right) \right. \\
& \quad \left. -2 \frac{\Delta X(L-1) + \Delta X(L)}{\Delta Y(K)} \left( \frac{\varepsilon_{NM-1} + \varepsilon_{NM}}{2} \right) \right] + \\
& \quad \varphi_4 \left[ 2 \frac{\Delta Y(K-1) + \Delta Y(K)}{\Delta X(L)} \left( \frac{\varepsilon_{NM} + \varepsilon_{NM-NH}}{2} \right) \right] + \\
& \quad \varphi_5 \left[ 2 \frac{\Delta X(L-1) + \Delta X(L)}{\Delta Y(K)} \left( \frac{\varepsilon_{NM-1} + \varepsilon_{NM}}{2} \right) \right] \\
& \quad = SM_{vol} + SM_{sup}, \tag{I.35}
\end{aligned}$$

siendo

$$SM_{vol} = \rho_{vol} [\Delta X(L) + \Delta X(L-1)] [\Delta Y(K) + \Delta Y(K-1)] \tag{I.36}$$

$$SM_{sup} = \rho_{sup} [\Delta X(L) + \Delta X(L-1)] [\Delta Y(K) + \Delta Y(K-1)].$$

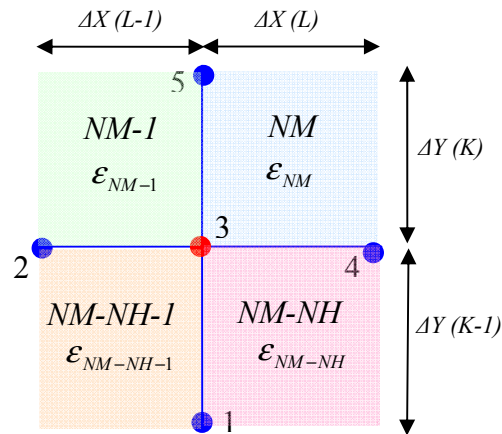
De esta forma obtenemos la ecuación de Poisson en términos de los potenciales en los cinco nodos, 1, 2, 3, 4 y 5.

Hasta ahora hemos tratado el caso general de una malla en el interior del recinto simulado. Veamos a continuación qué sucede si el nodo asociado a la malla considerada se encuentra en un borde o en una esquina de nuestro dominio de resolución. En este caso tendremos que hacer uso de ciertas condiciones de contorno.

### Tipos de malla:

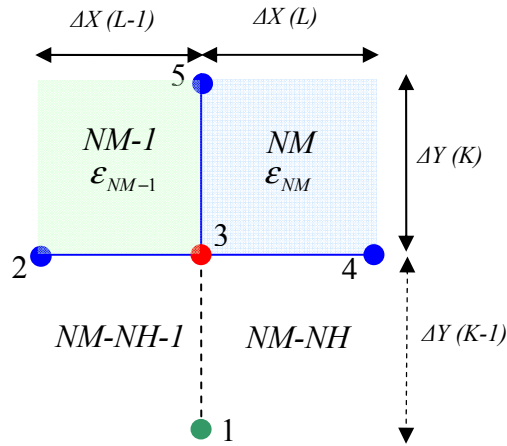
A la hora de obtener los coeficientes de la ecuación de Poisson para los distintos nodos, tendremos que tener en cuenta el tipo de malla asociada al nodo con la que podemos encontrarnos dependiendo de la geometría del dispositivo. Podemos encontrarnos con los siguientes casos:

- Malla general: Nos encontramos ante un caso en el que nuestro nodo (el nodo 3 en la figura I.7) es un nodo interior del recinto simulado. Independientemente de si las cuatro mallas circundantes son de diferentes materiales o dieléctricos, nos encontramos en el mismo caso. La ecuación de Poisson para este nodo es la general [ec. I.33].



**Figura I.7:** Esquema de una malla general.

- Borde de resolución: Entendemos por “borde de resolución” el borde del recinto simulado que aparece como consecuencia de la finitud de nuestro dominio de simulación. Veamos como ejemplo el borde inferior de resolución.



**Figura I.8:** Esquema de un borde inferior de resolución. Las mallas  $NM-NH-1$  y  $NM-NH$  no existen, pero han sido representadas para seguir la misma notación. El nodo 1 (en verde) es un nodo ficticio.

Por tratarse de un borde donde termina la simulación, independientemente de si en las mallas  $NM-I$  y  $NM$  tenemos semiconductor o dieléctrico, consideraremos un nodo ficticio (nodo 1, en color verde en la figura I.8.), situado a la misma distancia del nodo 3 que el nodo 5, y por tanto  $\Delta Y(K-1) = \Delta Y(K)$ . La creación de este nodo ficticio lleva consigo la aparición de dos celdas ficticias  $NM-NH-1$  y  $NM-NH$  que consideraremos del mismo material que  $NM-I$  y  $NM$  respectivamente. Imponemos que el potencial en el nodo ficticio 1 sea igual que el potencial en el nodo 5 (es decir,  $\varphi_1 = \varphi_5$ ). Esto supone considerar que el campo en la dirección normal a este borde es nulo, por lo que esta condición debe ser aplicada a una distancia suficientemente grande de la región de interés de nuestra simulación, para que ésta no sea perturbada.

Basta imponer estas condiciones en la ecuación de la malla general para que obtengamos

$$\varphi_2 \left( 4 \frac{\Delta Y(K)}{\Delta X(L-1)} \varepsilon_{NM-I} \right) + \varphi_3 \left( -4 \left( \frac{\Delta Y(K)}{\Delta X(L-1)} \varepsilon_{NM-I} + \frac{\Delta Y(K)}{\Delta X(L)} \varepsilon_{NM} + \right. \right.$$

$$\frac{\Delta X(L-1) + \Delta X(L) \left( \frac{\varepsilon_{NM} + \varepsilon_{NM-1}}{2} \right)}{\Delta Y(K)} \Bigg) + \varphi_4 \left( 4 \frac{\Delta Y(K)}{\Delta X(L)} \varepsilon_{NM} \right) + \varphi_5 \left( 4 \frac{\Delta X(L-1) + \Delta X(L) \left( \frac{\varepsilon_{NM-1} + \varepsilon_{NM}}{2} \right)}{\Delta Y(K)} \right) = SM_{vol} + SM_{sup}, \quad (I.37)$$

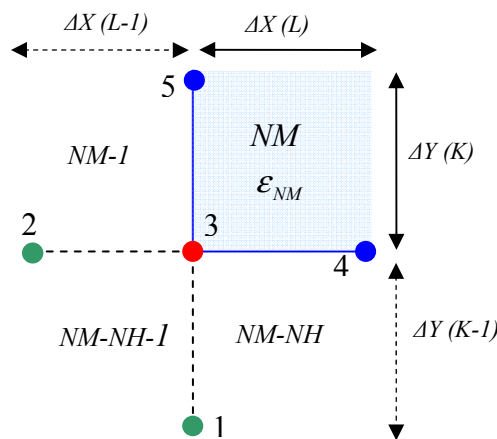
donde

$$SM_{vol} = 2(\bar{\rho}(NM-1)\Delta X(L-1)\Delta Y(K) + \bar{\rho}(NM)\Delta X(L)\Delta Y(K)). \quad (I.38)$$

En caso de haber una discontinuidad con una carga superficial asociada en el borde, la expansión de dicha carga será en la dirección perpendicular a la carga superficial, igual que antes, pero la inclusión del nodo ficticio anteriormente detallada requiere la duplicación de la densidad volúmica de carga asociada a la densidad de carga superficial, obteniendo

$$SM_{sup} = 4Q_{sup} (\Delta X(L) + \Delta X(L-1)). \quad (I.39)$$

- Esquina de resolución. Veamos como ejemplo la esquina inferior izquierda de resolución.



**Figura I.9:** Esquema de la esquina inferior izquierda de resolución. Aunque las celdas NM-1, NM-NH-1 y NM-NH no existen, las hemos dibujado para utilizar la notación habitual. Los nodos 1 y 2 (en verde) son nodos ficticios.

La ecuación de Poisson para el nodo 3, que es el que nos ocupa, se obtiene considerando la existencia de dos nodos ficticios: nodos 1 y 2 de la figura I.9, el nodo 1 con mismo potencial que el nodo 5, y el 2 con el mismo que el 4. Siguiendo un razonamiento análogo al expuesto en el caso del borde inferior de resolución, la consideración de los nodos ficticios nos lleva a imponer

$$\begin{aligned}\varphi_1 &= \varphi_5 \text{ y } \varphi_2 = \varphi_4 & (I.40) \\ \Delta X(L-1) &= \Delta X(L) \text{ y } \Delta Y(K-1) = \Delta Y(K) \\ \varepsilon_{NM-1} &= \varepsilon_{NM-NH} = \varepsilon_{NM-NH-1} = \varepsilon_{NM}\end{aligned}$$

en la ecuación (I.34), obteniendo para el caso de este nodo

$$\begin{aligned}\varphi_3 \left( -8 \left( \frac{\Delta Y(K)}{\Delta X(L)} + \frac{\Delta X(L)}{\Delta Y(K)} \right) \varepsilon_{NM} \right) &+ \varphi_4 \left( 8 \frac{\Delta Y(K)}{\Delta X(L)} \varepsilon_{NM} \right) + \varphi_5 \left( 8 \frac{\Delta X(L)}{\Delta Y(K)} \varepsilon_{NM} \right) \\ &= SM_{vol} + SM_{sup}\end{aligned} \quad (I.41)$$

siendo

$$SM_{vol} = 4\bar{\rho}(NM)\Delta X(L)\Delta Y(K) \quad (I.42)$$

Supongamos una discontinuidad con una densidad de carga asociada  $Q_{sup}$  que se encuentra tanto en la superficie que une los nodos 3 y 5 como en la que une los nodos 3 y 4 (ver figura I.9). Igual que sucedía en el caso del borde de resolución, la consideración de la parte exterior de la discontinuidad hace que tengamos que duplicar la densidad volúmica de carga asociada a la discontinuidad, y por tanto

$$SM_{sup} = 4Q_{sup}(\Delta X(L) + \Delta Y(K)). \quad (I.43)$$

Una vez obtenida la ecuación de Poisson para cada uno de los nodos del dominio de simulación, obtenemos  $(NH+1)*(NV+1)$  ecuaciones, que forman un sistema

pentadiagonal que resolveremos mediante una descomposición LU [Press *et al.* 1989].

### I.3.3. Degeneración

Como veremos más adelante en esta memoria, algunos de los materiales que vamos a tratar son altamente degenerados. Por eso la consideración de la degeneración es un punto de vital importancia para su correcta simulación. La degeneración aparece como consecuencia de una fuerte influencia del principio de exclusión de Pauli, que hace que la distribución de energías no se pueda aproximar por la estadística de Maxwell-Boltzman sino que tengamos que recurrir a la función de distribución de Fermi-Dirac.

La degeneración estará presente en nuestras simulaciones, tanto en el proceso que incorpora el principio de exclusión de Pauli como en el factor de apantallamiento del *scattering* con impurezas, a través del nivel de Fermi y la temperatura electrónica, que, como veremos, calculamos de forma autoconsistente a partir de la densidad de portadores y la energía de los mismos.

#### Principio de exclusión de Pauli

En el caso de materiales degenerados, puede que el estado energético seleccionado para el portador tras un proceso de *scattering* esté ya ocupado. En este caso es el principio de exclusión de Pauli el que evita que se produzcan procesos de este tipo. En nuestro simulador el principio de exclusión de Pauli ha sido introducido mediante una técnica de rechazo. Como no nos es posible conocer si un estado está ocupado o no, consideraremos que la probabilidad de ocupación de un estado de energía  $E$  vendrá dada por la estadística de Fermi-Dirac

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{fer}(NM)}{K_B T_{el}(NM)}\right)}, \quad (I.44)$$

donde  $E_{fer}$  es el nivel de Fermi y  $T_{el}$  la temperatura media de los portadores en la malla considerada. En nuestro modelo solamente tendremos en cuenta la degeneración del valle principal, dado que la densidad de estados de los valles

superiores es mayor y su ocupación es muy pequeña. Más adelante veremos el cálculo autoconsistente de la temperatura electrónica y el nivel de Fermi.

Una vez que disponemos de este valor de  $f(E)$ , recurrimos al método MC para decidir si el mecanismo de *scattering* es rechazado o no [Bosi and Jacoboni 1976, Lugli and Ferry 1985]. Para ello tomamos un número aleatorio  $r$  uniformemente distribuido entre 0 y 1. Recordemos que  $f(E)$  es la probabilidad de que el estado de energía  $E$  esté ocupado, y ésta será por tanto igual a la probabilidad de que  $r$  se encuentre entre 0 y  $f(E)$ , en cuyo caso el mecanismo de *scattering* será rechazado. De esta forma el método MC será capaz de reproducir la función de distribución de Fermi-Dirac.

### **Scattering con impurezas**

El calentamiento de los electrones en el valle de menor energía afecta a la probabilidad de *scattering* con impurezas a través del factor de apantallamiento  $\beta$  [Kalna *et al.* 2005]

$$\beta^2 = \frac{n \cdot e^2}{\epsilon K_B T_{el}(NM)} \frac{\mathcal{F}_{-1/2}(\eta)}{\mathcal{F}_{1/2}(\eta)}, \quad (I.45)$$

siendo  $\mathcal{F}_j(\eta) = \frac{F_j(\eta)}{\Gamma(j+1)}$  con  $\Gamma(n) = (n-1)!$  y  $F_j(\eta) = \int_0^\infty \frac{\epsilon^j d\epsilon}{1 + \exp(\epsilon - \eta)}$  la integral de

Fermi de orden  $j$ , cuyo valor tomaremos de una aproximación analítica [Aymerich-Humet *et al.* 1981]. Necesitamos conocer la temperatura media de los electrones de la malla. Para ello, una vez resuelto el cálculo autoconsistente de la temperatura del valle de menor energía y el nivel de Fermi que veremos a continuación, calcularemos la temperatura global de los portadores promediando las de los tres valles pesadas por la ocupación de los mismos. (Recordemos que para los valles superiores la consideración de la función de distribución de Maxwell-Boltzman nos lleva a  $E = 3/2 K_B T_{el}$ ).

### **Cálculo autoconsistente de la temperatura electrónica y del nivel de Fermi**

Calcularemos la temperatura media de los electrones presentes en una determinada malla y el nivel de Fermi de forma autoconsistente a partir de los valores de la concentración y la energía media de los portadores en dicha malla en las

iteraciones previas [Kalna *et al.* 2005]. En nuestro modelo consideramos solamente la degeneración en el valle de menor energía, donde, por tanto, usaremos la función de distribución de Fermi-Dirac. En los valles superiores supondremos, en cambio, que se cumple la de Maxwell-Boltzman, porque la densidad de estados es mucho mayor y la ocupación normalmente es baja [Miranda and Sebastian 1997, Yamada 1991].

Considerando bandas de energía esféricas no parabólicas con coeficiente de no parabolicidad  $\alpha$ , y utilizando la función de distribución de Fermi-Dirac y la aproximación de  $\alpha E \ll 1$ , obtenemos para la concentración de electrones en el valle de menor energía [Blakemore 1982]

$$n \approx N_c \left[ \mathcal{F}_{1/2}(\eta) + \frac{15\alpha K_B T_{NV\min}}{4} \mathcal{F}_{3/2}(\eta) \right], \quad (\text{I.46})$$

siendo  $\eta = \frac{E_F}{K_B T_{NV\min}}$ ,  $N_c = 2 \left[ \frac{2\pi m^* K_B T_{NV\min}}{\hbar^2} \right]^{3/2}$ ,  $E_F$  el nivel de Fermi, y  $T_{NV\min}$  la

temperatura electrónica del valle principal, o valle de mínima energía. Por tanto necesitamos tanto la integral de Fermi de orden 1/2 como la de orden 3/2 para obtener la densidad de electrones.

A través de un cálculo similar al realizado para la densidad de portadores, y haciendo uso también de la función de distribución de Fermi-Dirac, obtenemos la energía media de los portadores

$$E \approx \frac{3}{2} K_B T_{NV\min} \frac{\mathcal{F}_{3/2}(\eta)}{\mathcal{F}_{1/2}(\eta)}. \quad (\text{I.47})$$

Para obtener la temperatura del valle principal y del nivel de Fermi en cada malla de una forma autoconsistente con la energía y la concentración locales resolvemos las ecuaciones I.46 y I.47 haciendo uso del método de Newton-Raphson. Esto se realiza durante toda la simulación, cada cierto número de iteraciones.



### I.3.4. Inyección de portadores

La inyección de portadores a través de los contactos es muy importante en nuestras simulaciones, sobre todo si el transporte es balístico o cuasibalístico. De ahí que una buena elección no sólo del número de portadores inyectados, sino también de su estadística temporal de inyección y su distribución de velocidades, sea determinante. En los contactos óhmicos impondremos condiciones de contorno de Dirichlet, fijando el potencial de los electrodos. Además impondremos equilibrio térmico en los contactos, a pesar de que en ellos tengamos corriente de portadores. Consideraremos que en la malla a la que se encuentra pegado el contacto la concentración es la de equilibrio [González and Pardo 1996]. Por tanto, en cada iteración introducimos en el dispositivo a través de los contactos (con una distribución temporal aleatoria) tantos portadores como sean necesarios para verificar dicha condición. Por otro lado, todos los portadores libres que lleguen al contacto salen del dispositivo.

La función de distribución de la velocidad con la que se inyectan los portadores viene dada por la estadística de Fermi-Dirac ponderada con la componente de la velocidad perpendicular a la superficie de los contactos

$$f_{iny} = v_x f_{Fermi-Dirac} \quad (I.48)$$

Para calcular las velocidades  $v_x$  de los portadores inyectados, generamos las componentes del momento del portador inyectado mediante tres números aleatorios uniformemente distribuidos entre 0 y 1 (con  $K_x$  tomando sólo valores positivos). La velocidad en la dirección  $X$  (dirección perpendicular a la superficie del contacto) será por tanto

$$v_x = \frac{\hbar K_x}{m^* (1 + 2\alpha E)}, \quad (I.49)$$

siendo  $E$  la energía del portador con las componentes del momento anteriormente calculadas. De ese modo obtenemos para la distribución de velocidades de los portadores inyectados

$$f_{iny}(E) = \frac{\hbar K_x}{m^*(1+2\alpha E)} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T}\right)}, \quad (I.50)$$

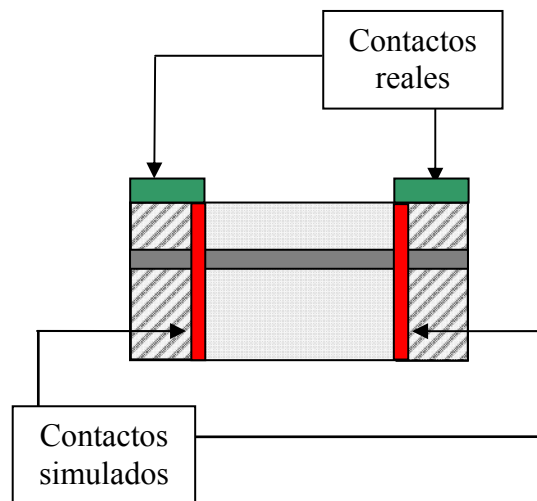
donde  $T$  es la temperatura ambiente, bajo la hipótesis de que no hay calentamiento de los portadores en los contactos.

Calculamos el valor máximo de esta distribución,  $F_{max}$ , mediante un barrido en  $\mathbf{K}$ . Para que la distribución de velocidades inyectadas sea la de Fermi-Dirac, tomamos un número aleatorio,  $r$ , uniformemente distribuido entre 0 y 1. Si se cumple

$$f_{iny}(E) \geq F_{max} r, \quad (I.51)$$

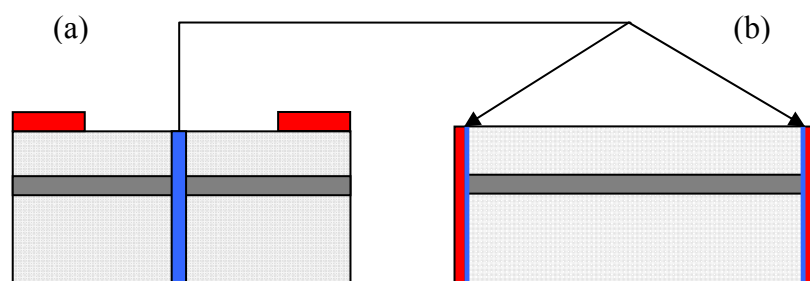
las componentes del momento elegidas cumplen la función de distribución deseada. Si no se cumple, elegimos nuevas componentes para el momento del portador a inyectar hasta que consigamos unas que cumplan la distribución de Fermi-Dirac. De esta forma reproducimos la distribución de energía de los electrones en las zonas limítrofes a los contactos.

Hata aquí hemos considerado que los contactos se encuentran sobre un único material. Pese a que en los dispositivos reales los contactos se encuentran en la parte superior del dispositivo, nosotros los simularemos a los lados del mismo [Fig. I.10] con el fin de disminuir el número de electrones simulados y además reproducir la penetración de los contactos óhmicos en la estructura de capas.



**Figura I.10:** Esquema de la posición de los contactos en un dispositivo real cualquiera y en nuestras simulaciones.

Al tener electrodos en contacto con distintas capas de diferentes semiconductores, necesitamos fijar no sólo un perfil de potencial en el contacto sino también un perfil de inyección de electrones, ya que ni el potencial ni la concentración van a ser constantes a lo largo de ese contacto. Para calcular el perfil de inyección en el caso de la simulación de los contactos verticales, como éstos abarcan distintos materiales, calcularemos un primer perfil de inyección de equilibrio inyectando con los contactos en posición horizontal de forma que se cumpla la condición de que la concentración de la malla contigua al contacto sea igual al dopaje [Fig. I.11(a)]. Registramos los perfiles de concentración y potencial en el centro del dispositivo, y tomamos esos perfiles como situación de equilibrio para la inyección lateral [Fig. I.11(b)].

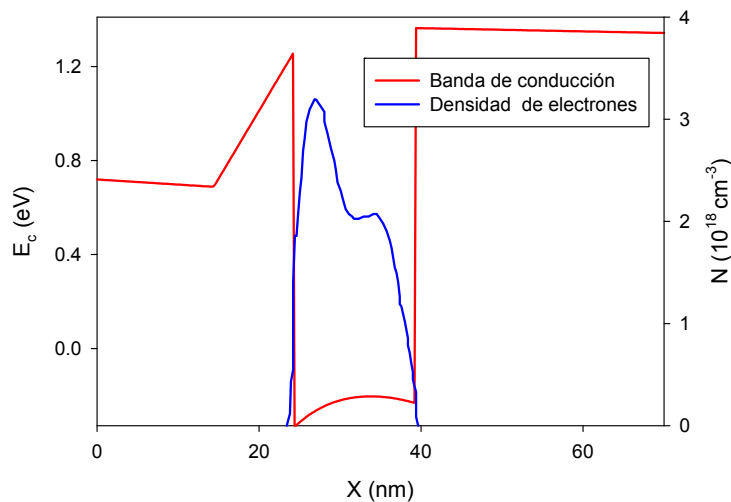


**Figura I.11:** Esquema del cálculo del perfil de inyección en el caso de que los contactos sean laterales. La zona azul representa la posición donde se obtienen los valores de concentración y dopaje.

### Problemas técnicos encontrados en la inyección en la heteroestructura de AlSb/InAs

En el estudio concreto de la heteroestructura con canal de InAs (AlSb/InAs) la enorme discontinuidad de la banda de conducción entre estos dos materiales imposibilita el intercambio de portadores entre la capa  $\delta$  y el canal, haciendo que los electrones eyectados en la capa  $\delta$  no sean capaces de alcanzar el canal y que los del canal no puedan abandonarlo, con lo cual el resultado final dependerá de las condiciones iniciales de inyección.

Mediante una resolución autoconsistente de las ecuaciones de Schrödinger y de Poisson [programa cedido por O. Schuler y D. Théron del I.E.M.N], vemos que en nuestro caso, para todos los valores de  $\sigma$  (densidad de carga superficial) analizados, la totalidad de la densidad de carga se localiza en el canal [Fig. I.12], y, por tanto, la restricción de la inyección únicamente al canal soluciona en parte nuestro problema.

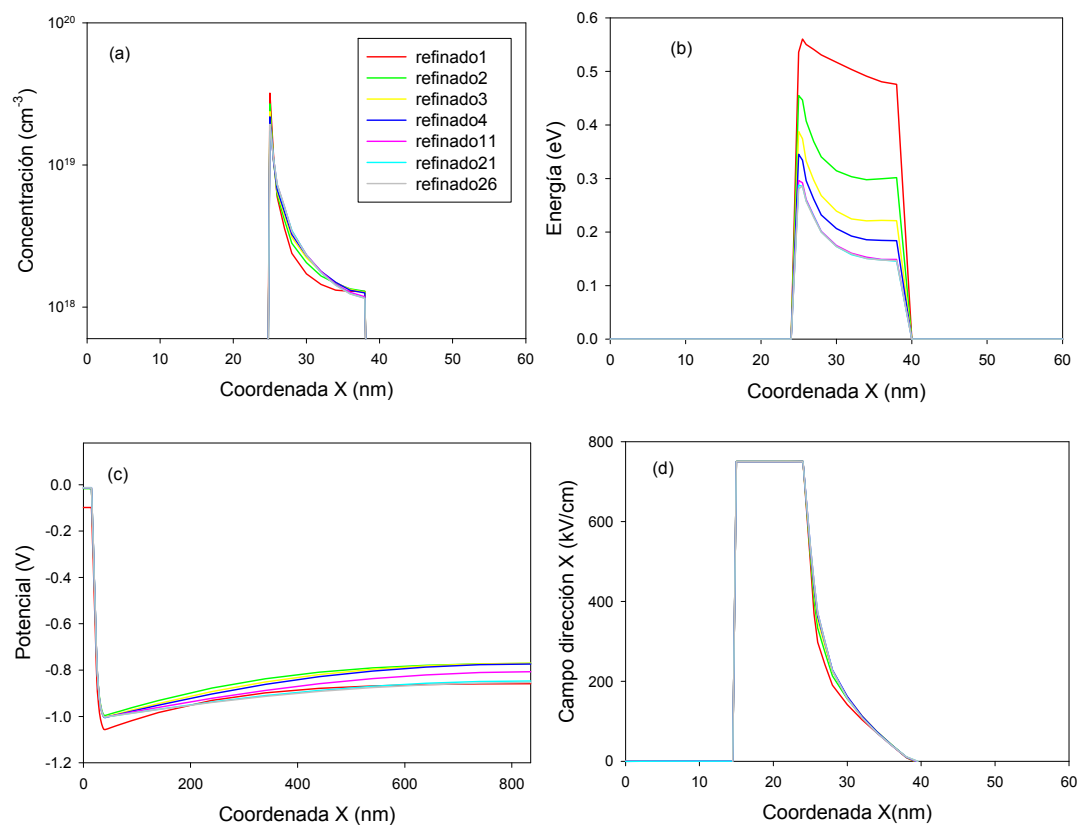


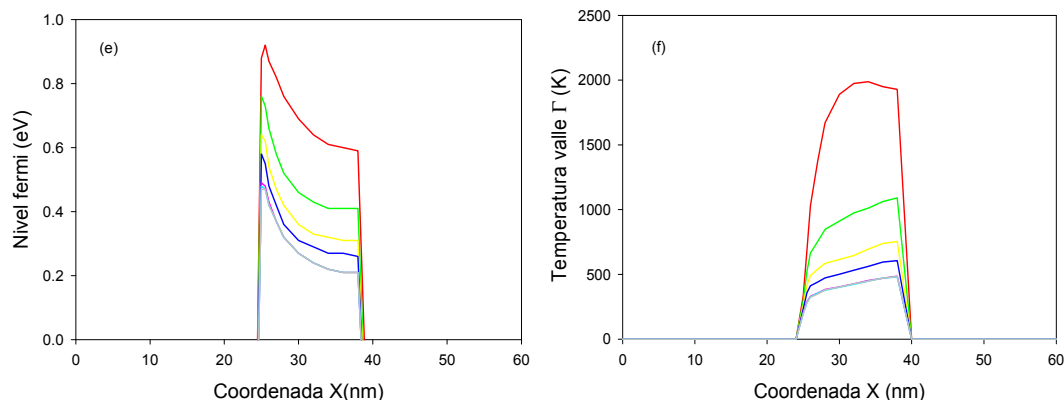
**Figura I.12:** Banda de conducción y densidad de electrones de nuestro dispositivo utilizando una resolución autoconsistente de las ecuaciones de Schrödinger y Poisson en la heteroestructura AlInSb/InSb de la figura III.1 con una densidad de carga superficial en la interfaz semiconductor-aire de  $2 \times 10^{12} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ .

Como explicamos anteriormente, para obtener el perfil de inyección necesitamos conocer un perfil de equilibrio. Debido a la gran diferencia que existe entre las bandas de conducción del InAs y del AlSb, así como a la pequeña masa efectiva del valle principal del InAs, en nuestras simulaciones el proceso de termalización es muy lento y las condiciones de inyección influyen en gran parte del interior del

dispositivo proporcionando perfiles de energía y temperatura erróneos. Para acelerar la adaptación de los perfiles de inyección a la situación de equilibrio en el interior del dispositivo vamos a utilizar la siguiente estrategia: cada cierto número de iteraciones (50000 siendo cada iteración de 1fs) obtenemos los perfiles de potencial y concentración en el centro del dispositivo, y los usamos como perfil de inyección en las iteraciones siguientes y así sucesivamente.

Veamos un ejemplo de cómo varían la temperatura, la energía y el nivel de Fermi en la heteroestructura de InAs a medida que vamos realizando este proceso de refinado [Fig. I.13].





**Figura I.13:** Perfiles en la dirección vertical de (a) concentración, (b) energía, (c) potencial, (d) campo eléctrico en la dirección X, (e) nivel de Fermi y (f) temperatura electrónica del valle  $\Gamma$  en los sucesivos refinados de los perfiles de inyección.

Estas gráficas muestran cómo el refinado sucesivo del perfil de inyección acelera el proceso de termalización y cómo los valores de estas variables convergen para un cierto número de refinados. Si prestamos atención, por ejemplo, al valor de la temperatura de los electrones [Fig. I.13(f)], observamos que para el primer refinado ésta toma valores de hasta 2000K, en lugar de los 300K que tendríamos que encontrar en equilibrio. Con los sucesivos refinados conseguimos bajar la temperatura hasta valores alrededor de 400K, que, aun siendo todavía un valor elevado, ya puede considerarse un resultado razonable. Es destacable también que tanto el perfil de la concentración como el del potencial no cambian significativamente en el proceso.

### I.3.5. Rugosidad de la heterounión

Para una correcta reproducción de los resultados experimentales tanto de las heteroestructuras como de los dispositivos, y sobre todo en los casos en los que la tecnología de fabricación no es del todo madura (como es el caso de los dispositivos recogidos en esta memoria), es necesario considerar en las simulaciones la rugosidad en las heterouniones.

Existen modelos detallados para el *scattering* de rugosidad que consideran la dependencia de la probabilidad con el vector de onda del electrón [Bolognesi *et al.* 1992, Gold 1987]. En nuestro caso, como una primera aproximación hemos implementado para la rugosidad un modelo global y simple, en el que un porcentaje

de las reflexiones de los electrones en la heterounión son tratadas como difusivas en lugar de cómo especulares. Cada vez que un electrón llega a la interfaz, el carácter difusivo o especular de la reflexión viene determinado por el método MC mediante un número aleatorio uniformemente distribuido entre 0 y 1. En el caso de tratarse de una reflexión difusiva será tratada como un *scattering* isótropo.

### **I.3.6. Ionización por impacto y movimiento de huecos**

La consideración de la ionización por impacto en los dispositivos semiconductores basados tanto en InAs como en InSb es crucial a la hora de reproducir las características del dispositivo por encima de ciertos voltajes de drenador debido al pequeño gap de estos materiales. A la hora de estudiar las heterouniones formadas por los materiales de gap estrecho (Cap. III), así como las características estáticas y dinámicas de los HEMTs de puerta aislada (Cap. V), no hemos considerado la ionización por impacto, centrándonos en las polarizaciones drenador-fuente bajas, donde las características tanto dinámicas como de bajo ruido son óptimas. Sin embargo, con el fin de completar el estudio de este tipo de transistores, en el capítulo VI hemos estudiado las consecuencias que tiene en las características estáticas tanto la consideración de la ionización por impacto como el movimiento de los huecos para voltajes de drenador lo suficientemente altos.

En nuestro modelo de simulación de dispositivos, no sólo introducimos la ionización por impacto, sino que también consideramos el movimiento de los huecos en el interior del dispositivo teniendo en cuenta tanto la distribución de electrones como la de los huecos a la hora de resolver la ecuación de Poisson [Vasallo *et al.* 2005, Vasallo *et al.* 2003]. La ionización por impacto se introduce en el simulador 2D de la misma forma que se hizo en el simulador de partícula única (Cap. I.2.4), a través de la ecuación (I.21). El movimiento de los huecos es equivalente al de los electrones pero con sus bandas de energía (Cap. I.2.2.) y mecanismos de *scattering* (Cap. I.2.3). En el simulador bidimensional, al considerar el movimiento de los electrones y los huecos simultáneamente tenemos que introducir el proceso de recombinación de pares electrón-hueco.

Para la recombinación de pares electrón-hueco consideramos un modelo simple en el que la recombinación de los huecos es tratada como un *scattering* más de los

huecos [Vasallo *et al.* 2003]. Asumimos que los huecos se recombinan cada unidad de tiempo  $\tau_{\text{rec}}$ , teniendo por tanto una probabilidad de recombinación  $1/\tau_{\text{rec}}$ . Tras el proceso de recombinación el hueco que ha sufrido el *scattering* desaparece, así como un electrón elegido de forma aleatoria de entre los cercanos al hueco. Tomaremos el tiempo de recombinación de los huecos que suele ser del orden de los ns, como un parámetro ajustable siempre dentro ese rango.

#### I.4 SIMULACIÓN DE PARÁMETROS DINÁMICOS

Después de estudiar el comportamiento de los portadores en los materiales y las heteroestructuras, la finalidad de este trabajo ha sido la simulación de los Sb-HEMTs para la obtención de sus características estáticas y dinámicas. En apartados anteriores hemos explicado cómo a través del método MC podemos obtener valores instantáneos de las magnitudes internas de los dispositivos, lo que nos permite un estudio de las características estáticas del mismo. Una vez caracterizado estáticamente un dispositivo, el siguiente paso es estudiar cómo responde ante señales variables en el tiempo, o lo que es lo mismo, su circuito equivalente.

Pese a que experimentalmente la caracterización de un dispositivo a pequeña señal suele hacerse en función de los parámetros  $S$ , que pueden ser medidos directamente, nosotros nos basaremos en los parámetros admitancia,  $Y$ , por comodidad en su obtención por medio de la simulación [González y Pardo 1995]. Como es sabido, ambas representaciones son equivalentes, pudiéndose pasar de una a la otra de una forma sencilla [Beneking 1994].

Para un punto de operación dado y para cada frecuencia, el parámetro  $Y_{ij}$  relaciona la variación de la corriente  $i$  al producirse una variación de pequeña amplitud en el potencial aplicado al electrodo  $j$ , lo que en el caso de un dispositivo de tres terminales en configuración de fuente común, como es nuestro caso, se traduce en:

$$\begin{aligned} i_G(f) &= Y_{11}(f)v_G(f) + Y_{12}(f)v_D(f) \\ i_D(f) &= Y_{21}(f)v_G(f) + Y_{22}(f)v_D(f) \end{aligned} \quad (\text{I.52})$$

donde hemos considerado 1=G y 2=D.



Para calcular esos parámetros admitancia para todas las frecuencias, aplicamos un salto de potencial  $\Delta V_j$  en un electrodo,  $j$ , en el instante de tiempo  $t=0$  [Laux 1985]. Mediante el análisis de Fourier de la respuesta transitoria en la corriente a este salto,  $I_i(t)$ , obtenemos  $Y_{ij}(f)$

$$Y_{ij}(f) = \frac{\int_0^{\infty} [I_i(t) - I_i(0)] e^{-j2\pi ft} dt}{\int_0^{\infty} \Delta V_j(t) e^{-j2\pi ft} dt} = \frac{\int_0^{\infty} [I_i(t) - I_i(0)] e^{-j2\pi ft} dt}{\frac{j\Delta V_j(t)}{\omega}}, \quad (I.53)$$

quedando las partes real e imaginaria de  $Y_{ij}(f)$  de la forma,

$$\text{Re}[Y_{ij}(f)] = \frac{I_i(\infty) - I_i(0)}{\Delta V_j} + \frac{\omega}{\Delta V_j} \int_0^{\infty} [I_i(t) - I_i(\infty)] \text{sen}(2\pi ft) dt \quad (I.54)$$

$$\text{Im}[Y_{ij}(f)] = \frac{\omega}{\Delta V_j} \int_0^{\infty} [I_i(t) - I_i(\infty)] \cos(2\pi ft) dt \quad (I.55)$$

donde  $I_i(0)$  e  $I_i(\infty)$  son las corrientes estacionarias de el electrodo  $i$  antes y después del salto en voltaje aplicado en el electrodo  $j$ .

Para la correcta caracterización de los parámetros  $Y$  de un transistor (4 parámetros) necesitaremos aplicar el salto de voltaje en dos terminales, drenador y puerta.

Los parámetros  $Y$  no nos proporciona mucha información sobre el funcionamiento intrínseco del dispositivo, dado que lo consideran como una “caja negra” y además dependen de la frecuencia. Para un mejor estudio del comportamiento dinámico de un transistor, hemos de calcular su circuito equivalente de pequeña señal, obteniendo así magnitudes fácilmente relacionables con la física interna del dispositivo, y además independientes de la frecuencia.

El circuito equivalente que usaremos es el más extendido para el estudio del comportamiento de HEMTs en pequeña señal [Mateos *et al.* 2000b, Dambrine *et al.* 1988], y es el mostrado en la figura I.14.



de la corriente de drenador en función de la tensión de puerta, y da una idea del control que la puerta ejerce sobre la corriente de drenador, pudiéndose escribir de la siguiente forma

$$g_m = g_{m0} e^{-j\omega\tau}, \quad (I.56)$$

donde  $\tau$  es el tiempo de tránsito de los portadores bajo la región de carga espacial.

Una vez calculados los parámetros admitancia, los parámetros del circuito equivalente intrínseco pueden escribirse en función de éstos de la siguiente forma [Dambrine *et al* 1988]:

$$C_{gd} = -\frac{\text{Im}(Y_{12})}{\omega} \quad (I.57)$$

$$C_{gs} = -\frac{\text{Im}(Y_{11}) - \omega C_{gd}}{\omega} \left( 1 + \frac{(\text{Re}(Y_{11}))^2}{(\text{Im}(Y_{11}) - \omega C_{gd})^2} \right) \quad (I.58)$$

$$R_i = \frac{\text{Re}(Y_{11})}{(\text{Im}(Y_{11}) - \omega C_{gd})^2 + (\text{Re}(Y_{11}))^2} \quad (I.59)$$

$$g_{m0} = \sqrt{((\text{Re}(Y_{21}))^2 + ((\text{Im}(Y_{21}) + \omega C_{gd})^2)(1 + \omega^2 C_{gs}^2 R_i^2))} \quad (I.60)$$

$$\tau = \frac{1}{\omega} \arcsen \left( \frac{-\omega C_{gd} - \text{Im}(Y_{21}) - \omega C_{gs} R_i \text{Re}(Y_{21})}{g_m} \right) \quad (I.61)$$

$$C_{ds} = \frac{\text{Im}(Y_{22}) - \omega C_{gd}}{\omega} \quad (I.62)$$

$$g_{ds} = \text{Re}(Y_{22}) \quad (I.63)$$

\* \* \*

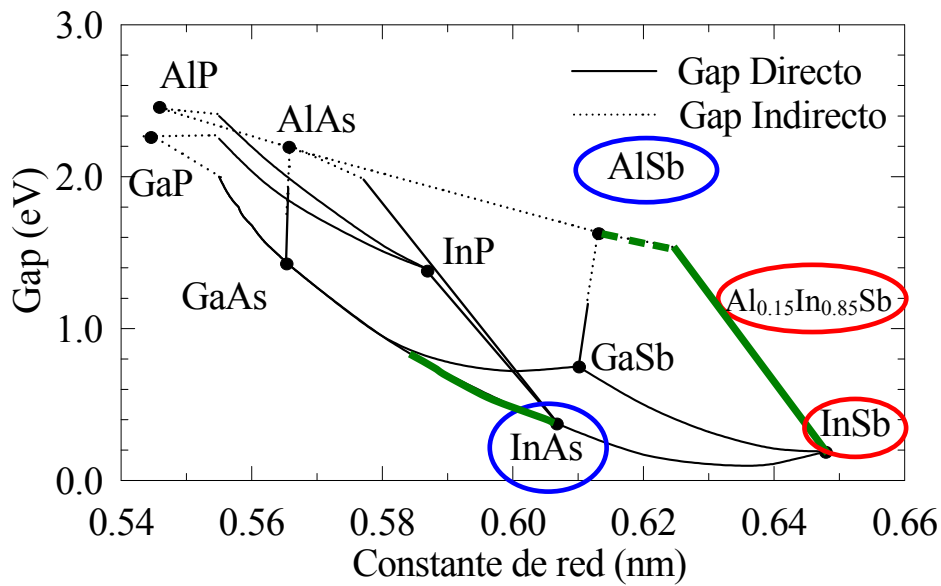
En este capítulo hemos expuesto los puntos clave de los simuladores con los que se han obtenido los resultados expuestos en esta memoria. Se ha prestado especial importancia a las modificaciones que han sido necesarias a la hora de simular semiconductores de gap estrecho y sus dispositivos, así como a los puntos más delicados al tratar con estos semiconductores tan degenerados.



## **CAPÍTULO II**

# **TRANSPORTE DE ELECTRONES Y HUECOS EN InAs, InSb, AlSb Y AlInSb**

Como primer paso para la correcta simulación de los HEMTs basados en semiconductores de gap estrecho, en este capítulo de la memoria se estudian las propiedades de transporte en los semiconductores que formarán parte de los dispositivos sometidos a estudio. Por un lado estudiaremos dos semiconductores de gap estrecho, InAs e InSb, que formarán el canal. Por otro los materiales encargados de confinar los portadores en ese canal, los semiconductores de la barrera, que son respectivamente AlSb y AlInSb. Como vimos en la introducción, el aumento de la fracción molar de In en el InGaAs (material típicamente utilizado en el canal de HEMTs basados en InP), buscando una mayor frecuencia de operación y movilidad, ha llevado a la consideración de estos materiales de gap estrecho como una posibilidad muy atractiva a la hora de mejorar este tipo de dispositivos. Es por tanto interesante estudiar los beneficios que supone el aumento en la fracción molar de In en el InGaAs a través de la transición del  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  al InAs.



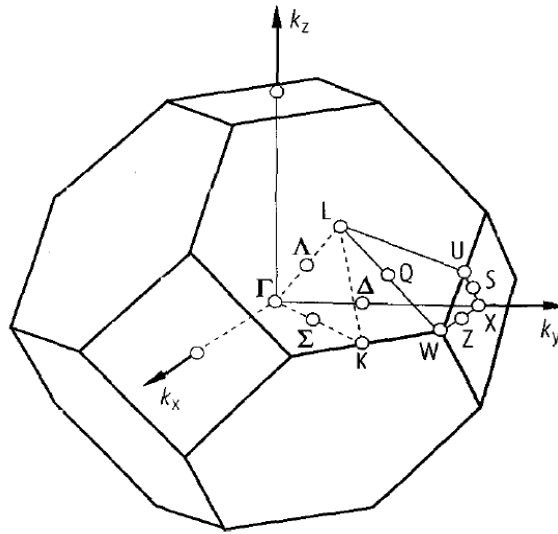
**Figura II.1:** Energía del Gap frente a la constante de red de algunos semiconductores III-V.

Antes de estudiar cualquier semiconductor el primer paso es determinar cuidadosamente cada uno de los parámetros necesarios para la simulación. Por consiguiente comenzamos este capítulo discutiendo los parámetros usados en la simulación de cada semiconductor estudiado. En este punto la bibliografía es clara en unos casos, pero en otros no lo es tanto. Por eso el estudio bibliográfico realizado al respecto es de vital importancia. Posteriormente estudiaremos las propiedades de transporte tanto de los electrones como de los huecos en los semiconductores bajo estudio.

## II.1. OBTENCIÓN Y AJUSTE DE PARÁMETROS DE SIMULACIÓN

Los parámetros necesarios para la simulación MC de los semiconductores ternarios los hallaremos por interpolación lineal de los binarios que los forman. Necesitamos por tanto conocer solamente los parámetros de simulación de tres semiconductores binarios: el InAs, el InSb y el AlSb. Los tres en condiciones normales cristalizan en red cúbica Zincblenda. Los tres mínimos de la banda de conducción considerados en nuestras simulaciones se encuentran situados en los puntos  $\Gamma$ , L y X, y por tanto, si nos fijamos en la primera zona de Brillouin [Fig.

II.2] tenemos: 6 medios valles X (3 valles X equivalentes), 8 medios valles L (4 valles L equivalentes), y un solo  $\Gamma$ .



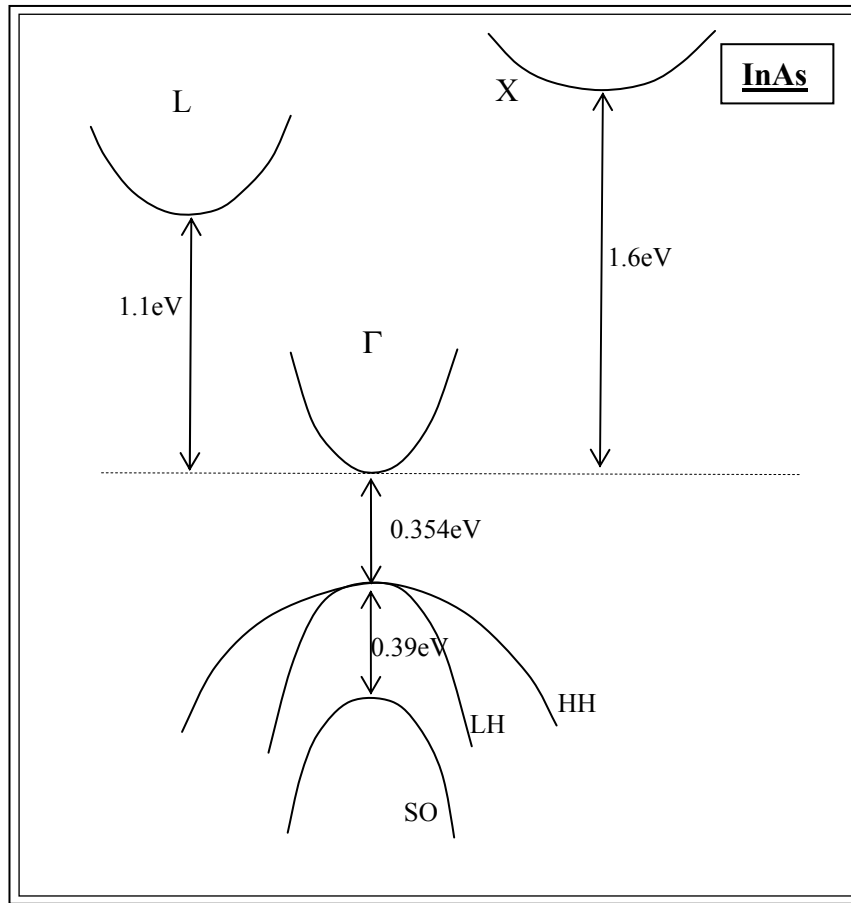
**Figura II.2:** Primera zona de Brillouin del InSb, InAs y AlSb.

### II.1.2. InAs

El aumento de la fracción molar de In en el InGaAs para la mejora de las propiedades de transporte en HEMTs ha llevado al uso del InAs como material para formar el canal de este tipo de dispositivos.

El InAs es un semiconductor de los que se conocen como de gap estrecho, con un gap de 0.35eV. Como hemos dicho anteriormente, por cristalizar en la red cúbica Zinblenda tiene un valle  $\Gamma$ , cuatro L equivalentes, y tres X.

El esquema de las bandas de energía del InAs se presenta en la figura II.3. Como vemos, hay un gran salto energético entre el valle principal y los valles superiores, siendo éste mucho mayor que el gap. Por tanto, la ionización por impacto aparece antes que los procesos de *scattering* intervalle.



**Figura II.3:** Estructura de bandas considerada en nuestras simulaciones para el InAs.

Debido al pequeño gap del InAs, la ionización por impacto jugará un papel importante incluso para campos eléctricos bajos, por lo que el estudio de los huecos se hace indispensable. En el caso de este material, aunque los parámetros no están definidos de forma unánime en la literatura, hemos encontrado bastante uniformidad. En la Tabla II.1 se presentan los parámetros utilizados para la simulación tanto de electrones como de huecos [Madelung 2004, Fischetti 1991, Vurgaftman *et al.* 2001, Cobweb, web Ioffe].

Densidad ( $\text{Kg/m}^3$ )	5667
Velocidad del sonido (m/s)	4282
Permitividad relativa estática	12.25
Permitividad relativa óptica	15.15

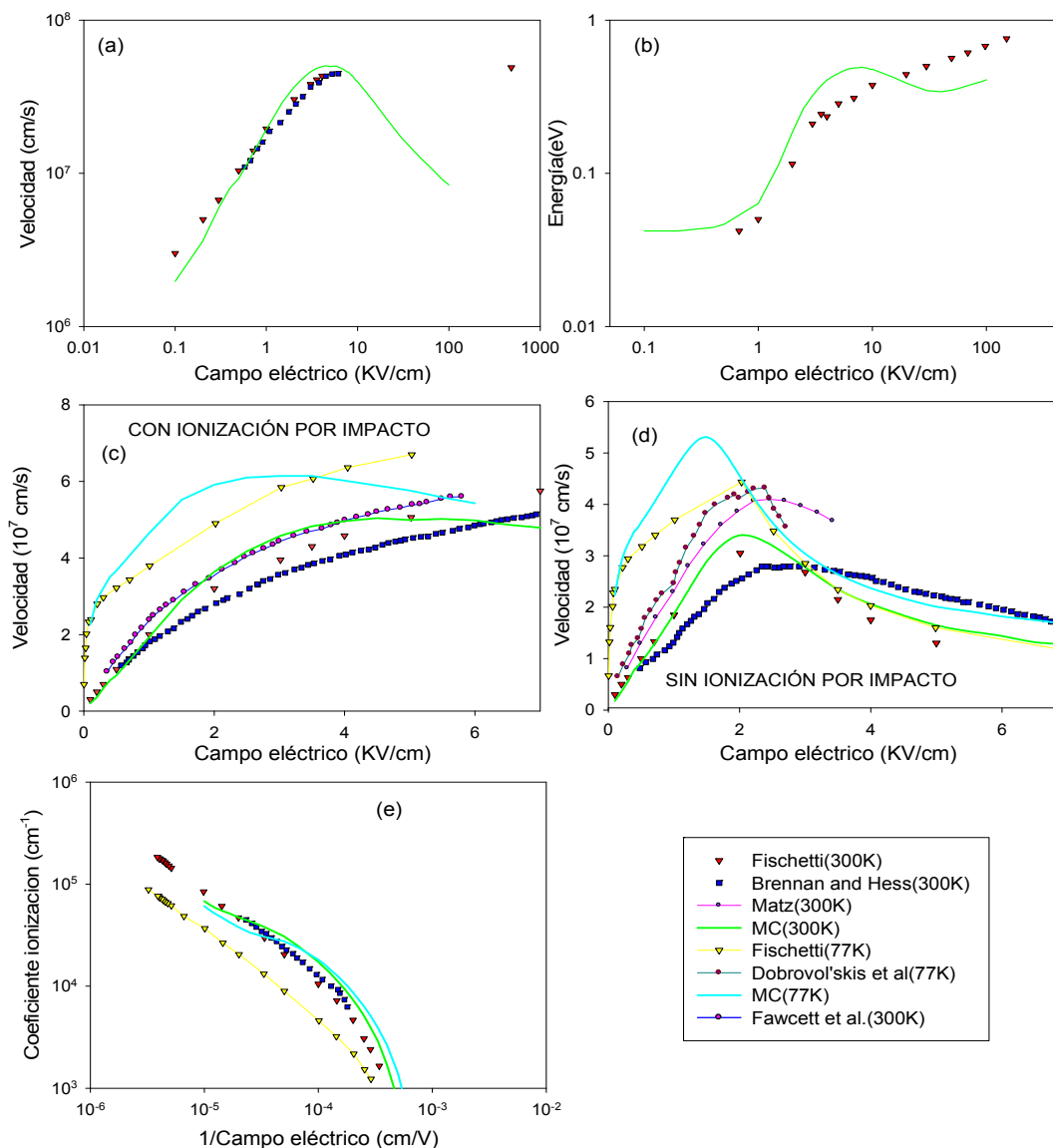


GAP (eV)	0.354		
Gap split-off (eV)	0.39		
Constante de red (Å)	6.0583		
Energía fonón óptico (eV)	0.03		
	Γ	L	X
Masa efectiva ( $m^* / m_0$ )	0.023	0.290	0.640
Coef. no parabolicidad ( $eV^{-1}$ )	1.39	0.54	0.90
Energía desde el valle Γ (eV)	0.0	1.1	1.6
Pot. def. acústico (eV)	5.93	7.23	9.02
Pot. def. óptico (eV)	0.0	2.28	0.0
Pot. def. intervale ( $10^{10}$ eV/m)			
desde Γ	0.0	5.59	6.35
desde L	5.59	6.35	5.59
desde X	6.35	5.59	3.36
Energía fonón intervale (eV)			
desde Γ	0.0	0.01745	0.01923
desde L	0.01745	0.01923	0.01745
desde X	0.01923	0.01745	0.01926
	HH	LH	SO
Masa efectiva ( $m^* / m_0$ )	0.570	0.025	0.140
Coef. no parabolicidad ( $eV^{-1}$ )	1.0	0.9	0.8
Energ umbral ioniz. por imp.(eV)	0.38232		
Pot. def. óptico huecos (eV/m)	11.3		
Pot. def. acústico huecos (eV)	20.0		
Parámetro ioniz. por imp. S ( $10^{12}s^{-1}$ )	ajustable entre 0-1		

**Tabla II.1:** Parámetros de los electrones y huecos en el InAs.

Comparemos ahora los resultados que hemos obtenido en nuestras simulaciones, en las que hemos utilizado los parámetros anteriormente descritos en la tabla II.1,

con otros resultados para este mismo material obtenidos de la literatura [Fischetti 1991, Brennan and Hess 1984, Dubrovol'skis *et al.* 1989 y Matz 1968].

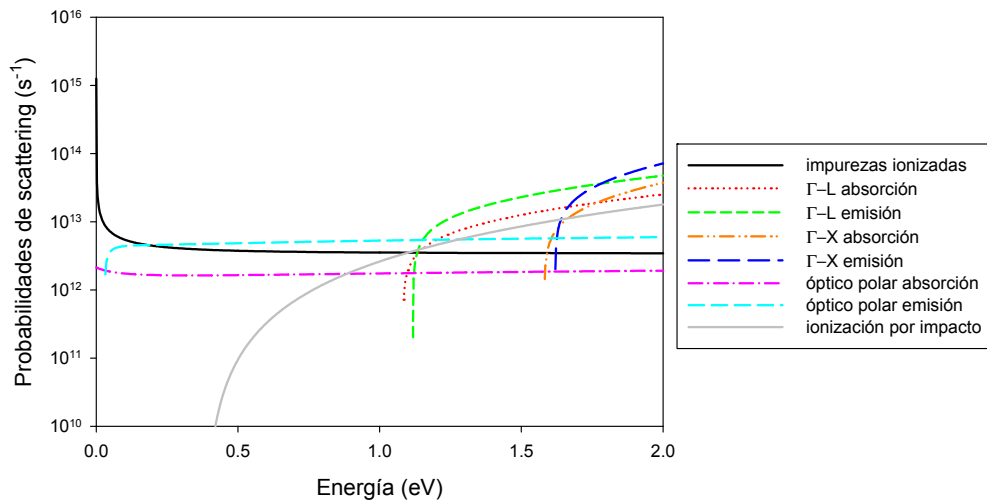


**Figura II.4:** (a) Velocidad y (b) energía con ionización por impacto en función del campo eléctrico para valores del campo de hasta 100 kV/cm. Velocidad (c) con y (d) sin ionización por impacto ( $S=10^{12} \text{ s}^{-1}$ ) para valores del campo eléctrico entre 0 y 7 kV/cm, y (e) coeficiente de ionización frente al inverso del campo. Todo ello para InAs con nuestro MC en comparación con los resultados que aparecen en [Fischetti 1991, Brennan and Hess 1984, Dubrovol'skis *et al.* 1989 y Matz 1968].

Sin entrar de momento a comentar las características del InAs, que se explicarán con detalle más adelante en este mismo capítulo, las gráficas de la figura II.4

muestran que los resultados obtenidos con nuestros parámetros reproducen de forma bastante adecuada los obtenidos por Fischetti [Fischetti 1991, Brennan and Hess 1984, Dubrovol'skis *et al.* 1989 y Matz 1968], corroborando la adecuación de nuestros parámetros de simulación.

En la figura II.5 representamos las probabilidades de *scattering* del InAs obtenidas con los parámetros de la tabla II.1. En ella se verifica que, como mencionamos anteriormente, la ionización por impacto es un *scattering* clave en la simulación de este tipo de semiconductores, actuando de forma importante para energías menores que el *scattering* intervalo.



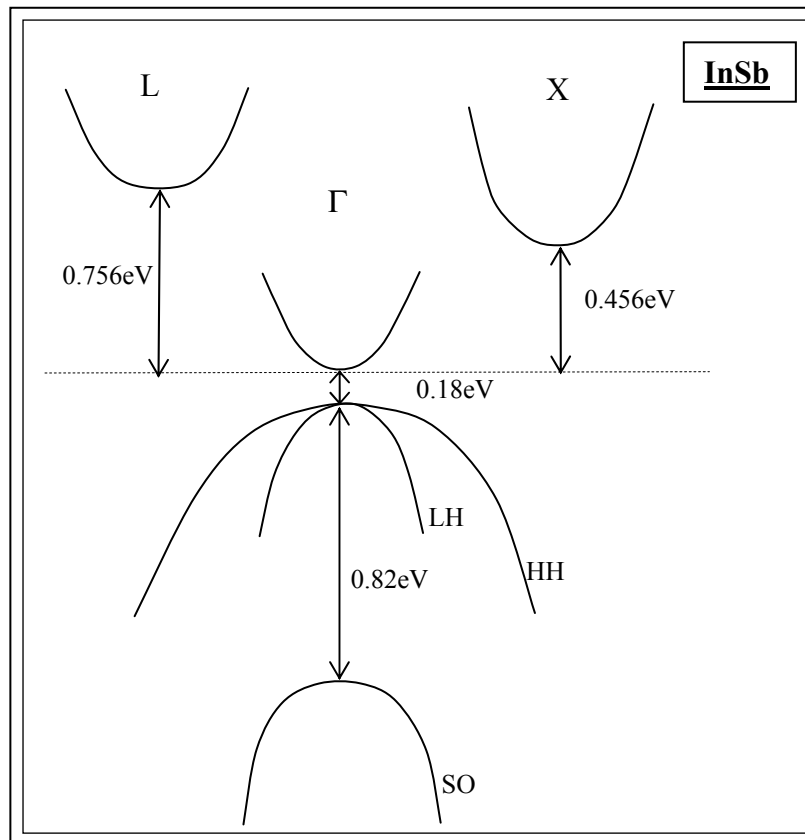
**Figura II.5:** Probabilidades de *scattering* de electrones en el valle  $\Gamma$  del InAs en función de la energía considerando  $S=10^{12} \text{ s}^{-1}$ .

### II.1.2. InSb

El interés práctico de este semiconductor se debe a la pequeñísima masa efectiva del valle principal, lo que le da una altísima movilidad ( $78000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  a 300 K), en realidad la mayor dentro de los semiconductores que se conocen. También es conocido por tener el menor gap ( $0.18 \text{ eV}$  a 300 K) y la mayor constante de red ( $6.479 \text{ \AA}$ ) de los semiconductores III-V.

Debido a que la utilización de este semiconductor es bastante reciente, sus parámetros de simulación no se encuentran descritos de forma única en la bibliografía, sino que varían de unas referencias a otras [Madelung 2004, Herbert *et*

*al.* 2005, Özbaş and Akarsu. 2002, Sijerčić *et al.* 2005, web ioffe, Vurgaftman *et al.* 2001, web Damocles]. Para algunos parámetros físicos, como la densidad, velocidad del sonido, permitividad a alta y baja frecuencia, podemos encontrar cierta unanimidad en la literatura, mientras que para otros, principalmente los relacionados con su estructura de bandas, tales como la masa efectiva en los diferentes valles, la energía de éstos o la constante de no-parabolicidad, la elección no es tan clara. Prestaremos una especial atención a los parámetros más controvertidos y a la justificación de la elección de unos valores con respecto a los otros. En relación con la energía de los valles, mientras algunas referencias dan una ordenación  $\Gamma$ -L-X, en orden creciente de energía, en artículos como [Herbert *et al.* 2005] la ordenación es  $\Gamma$ -X-L. Hemos considerado más oportuno tomar las energías de Herbert *et al.*, de forma que las bandas de energía del InSb toman la forma:



**Figura II.6:** Estructura de bandas del InSb considerada en nuestras simulaciones.

Centrémonos en la masa efectiva de los valles. La masa efectiva relativa del valle  $\Gamma$  está fijada en la bibliografía con valores similares, en torno a 0.014, mientras que para las masas de los valles L y X encontramos más discrepancias. Nosotros tomaremos los valores recogidos en la tabla expuesta a continuación. Hay que destacar que en este material los parámetros relevantes son los relativos al valle  $\Gamma$ , ya que los valles superiores tendrán ocupaciones muy pequeñas al estar situados en energías muy altas, por lo que su influencia en las propiedades de transporte de los electrones será mínima.

En relación a los coeficientes de no parabolicidad, y en especial el del valle  $\Gamma$ , que será el más relevante en nuestras simulaciones, los valores no están recogidos de forma unívoca en la bibliografía. En lo que sí hay unanimidad es en el elevado valor de este coeficiente [Sijerčić *et al.* 2005, web ioffe]. En los siguientes capítulos veremos las consecuencias que este hecho tiene en la energía.

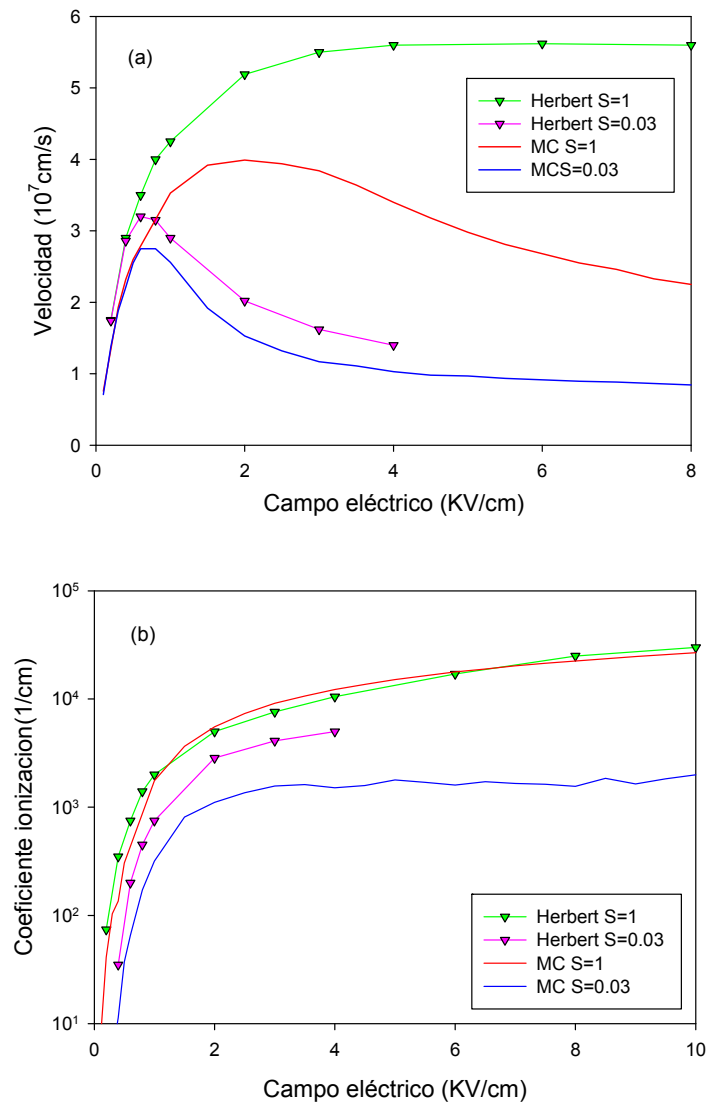
Al igual que ocurría en el InAs, debido al pequeño gap de este material la ionización por impacto jugará un papel de vital importancia. Por tanto tenemos que tener en cuenta el transporte de los huecos a pesar de que los semiconductores utilizados habitualmente sean de tipo n. Los parámetros utilizados en nuestras simulaciones tanto para el caso de los electrones como para el de los huecos se presentan en la tabla II.2.

Densidad (Kg/m <sup>3</sup> )	5790		
Velocidad del sonido (m/s)	4060		
Permitividad relativa estática	15.68		
Permitividad relativa óptica	17.65		
GAP (eV)	0.18		
Gap split-off (eV)	0.82		
Constante de red (Å)	6.479		
Energía fonón óptico (eV)	0.0244		
	$\Gamma$	L	X
Masa efectiva ( $m^* / m_0$ )	0.014	0.220	0.130
Coef. no parabolicidad (eV <sup>-1</sup> )	5.72	5.72	5.72

Energía desde el valle $\Gamma$ (eV)	0.0	0.756	0.456
Pot. def. acústico (eV)	5.960	5.960	5.960
Pot. def. óptico (eV)	0.0	2.5	0.0
Pot. def. intervale ( $10^{10}$ eV/m)			
desde $\Gamma$	0.0	5.0	5.0
desde L	5.0	5.0	10.0
desde X	5.0	10.0	5.0
Energía fonón intervale (eV)			
desde $\Gamma$	0.0	0.0199	0.0199
desde L	0.0199	0.0199	0.0199
desde X	0.0199	0.0199	0.0199
	HH	LH	SO
Masa efectiva ( $m^* / m_0$ )	0.420	0.016	0.430
Coef. no parabolicidad ( $eV^{-1}$ )	1.0	0.9	0.8
Energ umbral ioniz. por imp.(eV)	0.19		
Pot. def. óptico huecos (eV/m)	11.3		
Pot. def. acústico huecos (eV)	22.0		
Parámetro ioniz. por imp. S ( $10^{12}s^{-1}$ )	ajustable entre 0-1		

**Tabla II.2:** Parámetros de los electrones y huecos en el InSb.

Teniendo en cuenta las discrepancias existentes en la bibliografía en cuanto a los parámetros de este semiconductor, la figura II.7 nos permite comparar los resultados de nuestra simulación frente a los de la referencia [Herbert *et al.* 2005], de donde procede la mayoría de los parámetros que hemos utilizado, por ejemplo la energía de las bandas y los parámetros de los mecanismos de *scattering*.

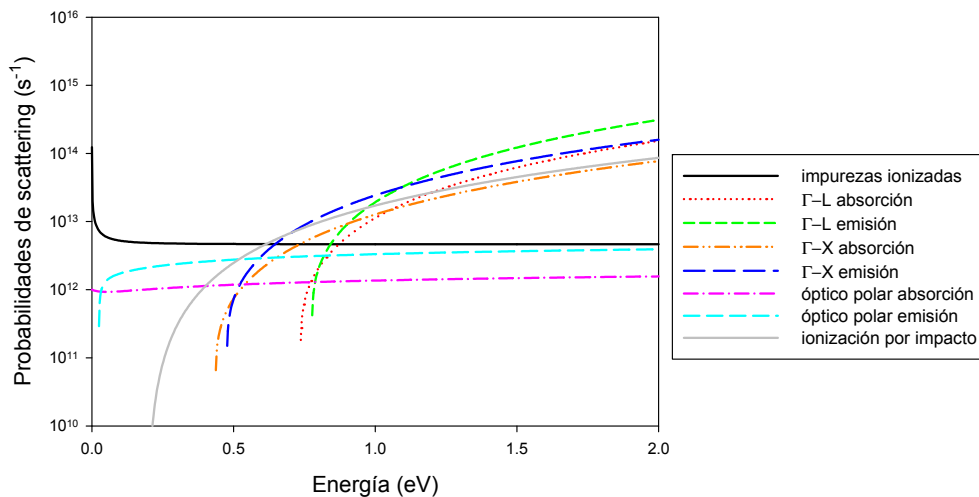


**Figura II.7:** (a) Velocidad de los electrones y (b) coeficiente de ionización en función del campo eléctrico en el InSb obtenidas mediante nuestras simulaciones MC en comparación con las de [Herbert *et al.* 2005].

En estas gráficas observamos que nuestros resultados tienen un comportamiento similar a los de Herbert, aunque los resultados no son idénticos, debido a las discrepancias en los valores de muchos de los parámetros existentes en la bibliografía [Herbert *et al.* 2005]. No entraremos ahora a discutir en profundidad los detalles de la figura II.7 puesto que estudiaremos el comportamiento de los portadores en el InSb más adelante.

Con los parámetros de la tabla II.2 obtenemos las probabilidades de *scattering* para el InSb que se representan en la figura II.8. Al igual que sucedía en el InAs, la

ionización por impacto en el InSb tiene lugar antes que los procesos intervalle y para energías muy pequeñas, más aún que en el caso del InAs. Esto supone que aunque los parámetros de los valles superiores no sean del todo precisos, los que son relevantes a la hora de una correcta simulación son los del valle  $\Gamma$ .



**Figura II.8:** Probabilidades de *scattering* de los electrones en el valle  $\Gamma$  en función de la energía en el InSb considerando  $S=1 \times 10^{12} \text{s}^{-1}$ .

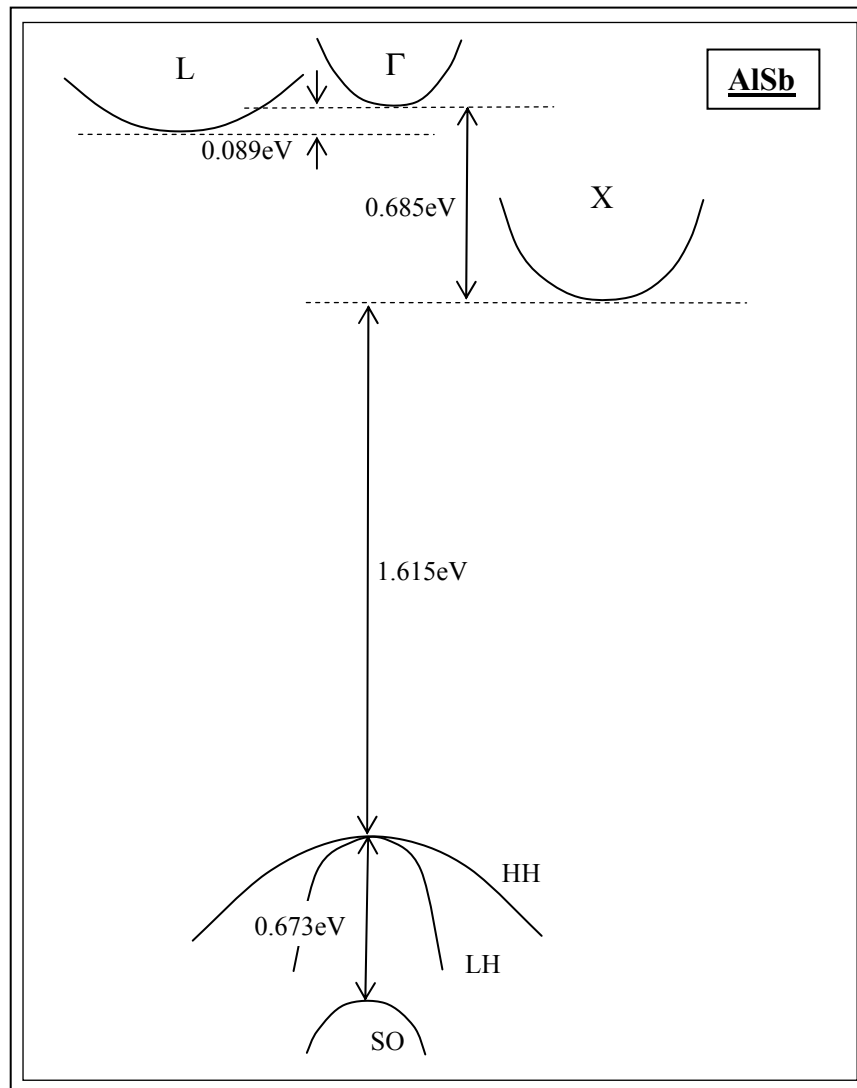
### II.1.3. AlSb

La utilidad de este material radica en que en su constante de red es muy similar a la del InAs, por lo que es usado para formar la heterounión con él. No nos interesa por tanto su movilidad, que es muy baja, sino el hecho de que posee un gap (1.6 eV) mucho mayor que el InAs.

A pesar de que este material, como el resto de los que hemos estudiado, cristaliza en la red cúbica, aparece una pequeña diferencia respecto al número de valles equivalentes. El mínimo correspondiente al valle X no se encuentra exactamente en ese punto, sino en la dirección  $\Delta$ . Esto hace que nuestro tercer valle, al que incurriendo en un abuso del lenguaje designaremos “valle X” por analogía con el InSb y el InAs, en lugar de tener tres valles equivalentes, tenga seis, dado que ahora no se trata de medios valles, sino de valles completos.

En la figura II.9 se muestra un esquema de la estructura de bandas de este semiconductor.





**Figura II.9:** Esquema de los valles que utilizaremos en nuestras simulaciones MC para el AlSb.

Si prestamos atención a la estructura de bandas, vemos que estamos ante un material de gap indirecto, dado que el primer mínimo de la banda de conducción no se encuentra en el punto  $\Gamma$  sino en el X (o, mejor dicho, en la dirección  $\Delta$ ). Asimismo los valles  $\Gamma$  y L se encuentran muy próximos entre sí. Debido a la considerable diferencia de energía entre los dos primeros valles (el X y el L), como veremos más adelante, los electrones permanecerán en el primer valle hasta valores del campo considerablemente grandes.

A pesar de que en este material la ionización por impacto carece de relevancia, cuando forma parte de la heterounión los huecos de los otros materiales pueden pasar

a éste, y por tanto la importancia del estudio del transporte de los huecos en el AlSb es la misma que en el InSb o en el InAs. A continuación exponemos los parámetros utilizados en nuestras simulaciones tanto para los electrones del AlSb como para los huecos (Tabla II.3) [Madelung 2004, Bocchi *et al.* 1996, web Damocles, Theodorou and Tsegas 2000, Glaser *et al.* 1996].

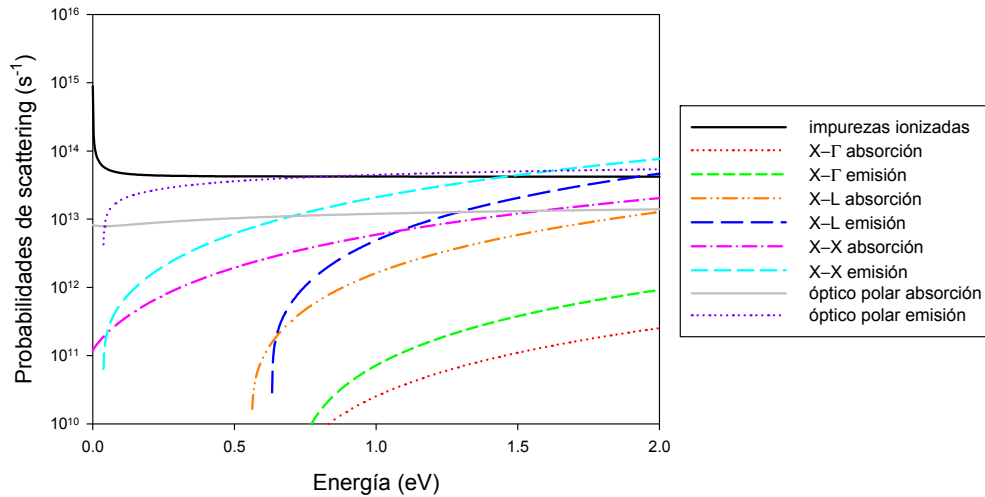
Densidad (Kg/ m <sup>3</sup> )	4260		
Velocidad del sonido (m/s)	4250		
Permitividad relativa estática	10.24		
Permitividad relativa óptica	12.04		
GAP (eV)	1.615		
Gap split-off (eV)	0.673		
Constante de red (Å)	6.1353		
Energía fonón óptico (eV)	0.036		
	Γ	L	X
Masa efectiva (m <sup>*</sup> / m <sub>0</sub> )	0.14	0.70	0.5343
Coef. no parabolicidad (eV <sup>-1</sup> )	5.72	5.72	5.72
Energía desde el valle Γ (eV)	0.0	-0.089	-0.685
Pot. def. acústico (eV)	2.2	2.2	2.2
Pot. def. óptico (eV)	0.0	1.0	0.0
Pot. def. intervalle (10 <sup>10</sup> eV/m)			
desde Γ	0.0	1.0	1.0
desde L	1.0	1.0	1.0
desde X	1.0	1.0	1.0
Energía fonón intervalle (eV)			
desde Γ	0.0	0.036	0.036
desde L	0.036	0.036	0.036
desde X	0.036	0.036	0.036
	HH	LH	SO
Masa efectiva (m <sup>*</sup> / m <sub>0</sub> )	0.6035	0.1070	0.2200
Coef. no parabolicidad (eV <sup>-1</sup> )	1.0	0.9	0.8

Pot. def. óptico huecos (eV/m)	11.3
Pot. def. acústico huecos (eV)	6.54

**Tabla II.3:** Parámetros de los electrones y huecos en el AlSb.

Como vemos en la tabla anterior, la masa del primer valle (el valle X) es bastante mayor que las del primer valle del InSb y el InAs (valle  $\Gamma$ ), por lo que podemos considerar este material como material de “electrones lentos”.

En la figura II.10 mostramos las probabilidades de *scattering* obtenidas para el AlSb haciendo uso de los parámetros de la tabla II.3.



**Figura II.10:** Probabilidades de *scattering* de los electrones en el valle  $\Gamma$  en función de la energía en el AlSb.

## II.2. ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE

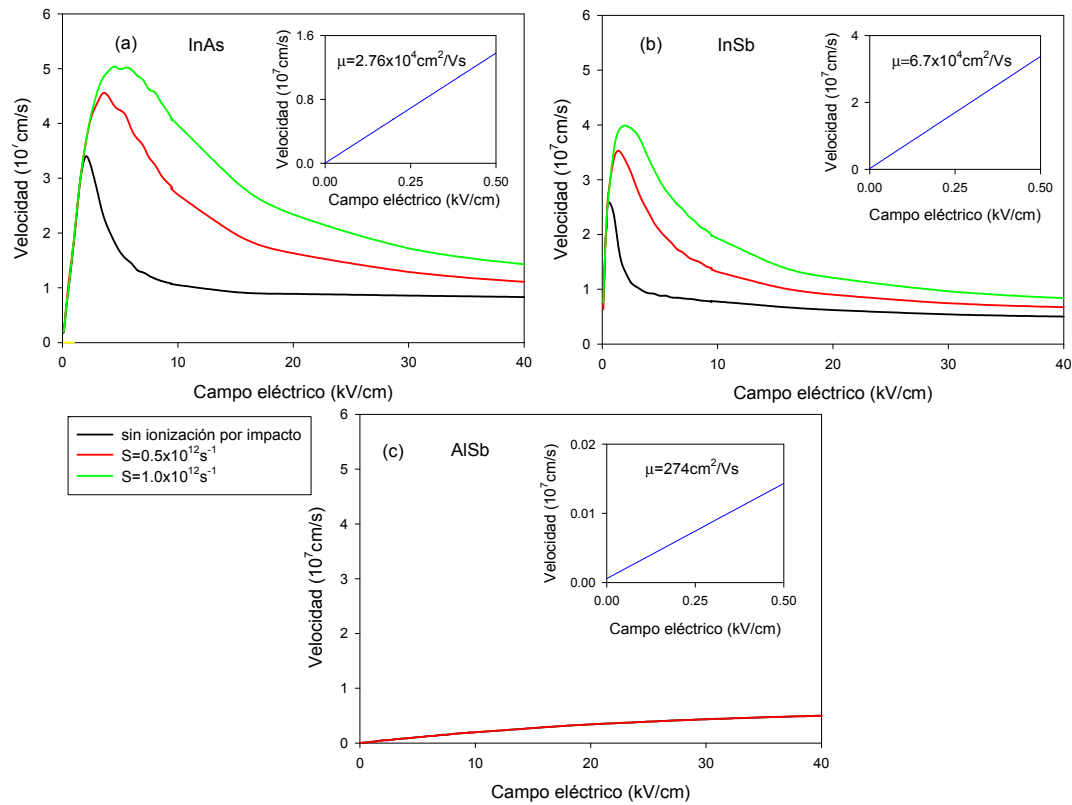
Una vez fijados los parámetros para la simulación, estudiaremos el comportamiento de los portadores en el interior de los semiconductores con el programa de partícula única. Comenzaremos por los semiconductores binarios para a continuación, a partir de éstos, estudiar los ternarios.

### II.2.3. Materiales binarios

En este apartado examinamos el comportamiento tanto de los electrones como de los huecos en el interior del InAs, InSb y AlSb.

#### Electrones

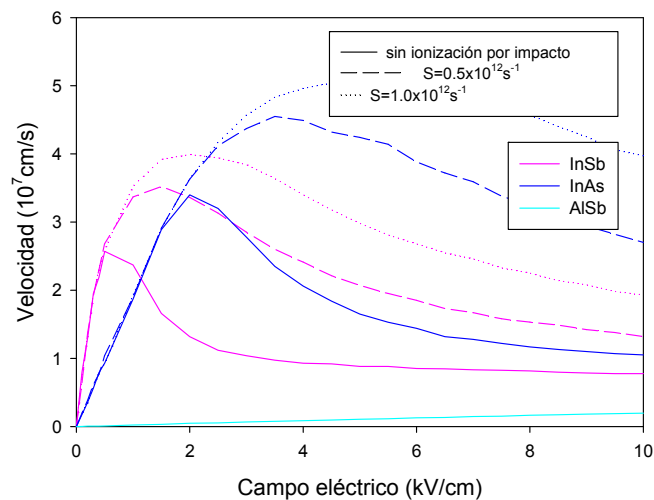
Una de las propiedades más interesantes del comportamiento de los portadores dentro de un semiconductor es su característica velocidad-campo eléctrico. Veamos esta característica velocidad-campo de los electrones en estos tres semiconductores hasta campos de 40 KV/cm.



**Figura II.11:** Características velocidad-campo de los electrones obtenidas mediante la simulación MC para el (a) InAs, (b) InSb y (c) el AlSb. En todas ellas se ha incluido un inset con la representación de la zona de bajo campo a partir de la cual extraemos la movilidad del material. En el caso del InAs y del InSb se han considerado diferentes valores para el parámetro de ionización,  $S$ .

Se observa que tanto en el InSb como en el InAs los portadores pueden alcanzar velocidades muy elevadas, frente al caso del AlSb donde ésta es pequeña. Esto es

debido a la pequeña masa efectiva relativa del primer mínimo (el valle  $\Gamma$ ) del InAs y del InSb (0.023 y 0.014 respectivamente), mientras que en el caso del AlSb, la masa efectiva relativa del primer mínimo (el valle X en este caso) es grande (0.14). Tanto en el caso del InSb como en el InAs el hecho de que la masa sea tan pequeña en el primer valle hace que a partir de campos relativamente bajos los electrones tengan energía suficiente para pasar a los valles superiores, donde tienen una masa mayor, produciéndose así una caída en la velocidad.



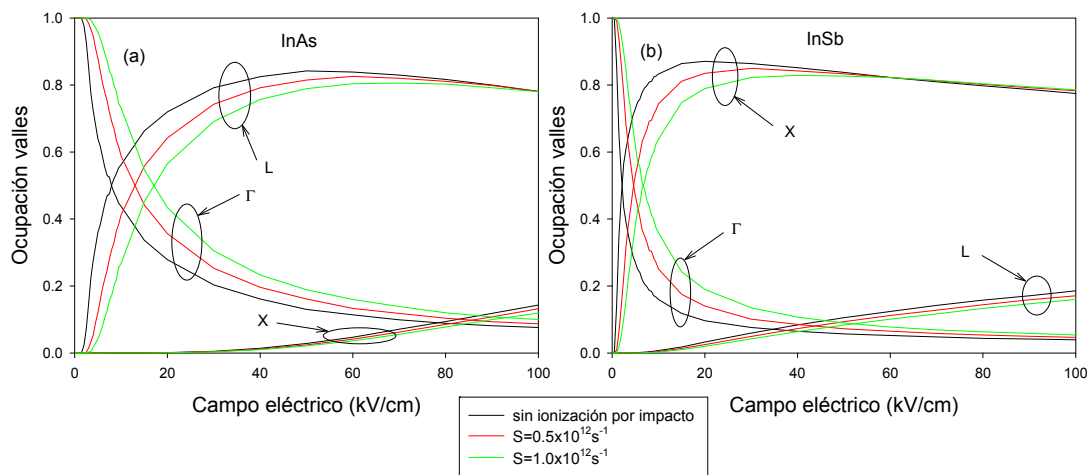
**Figura II.12:** Comparación de las características velocidad-campo de los tres materiales, InSb, InAs y AlSb. Tanto para el InSb como para el InAs han sido considerados tres valores diferentes del parámetro de ionización.

En la figura II.12 observamos que el máximo de la velocidad es más alto en el caso del InAs que en del InSb, cuando podría pensarse lo contrario dado que la masa del valle  $\Gamma$  es menor en el caso del InSb. Esto se debe principalmente al elevado valor del coeficiente de no parabolicidad del InSb frente al del InAs, que hace que su masa efectiva aumente rápidamente para energías crecientes, junto con un mayor salto de energía entre el valle principal y el segundo valle en el caso del InAs.

En cuanto a la movilidad, hemos comprobado su altísimo valor en los materiales que serán utilizados para formar el canal (InAs e InSb), sobre todo en el InSb ( $6.7 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ), mientras que en el semiconductor de barrera, el AlSb, esta es pequeña ( $270 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ).

Si prestamos atención al campo para el que se produce el máximo [Fig. II.12], observamos que en el caso del InSb el máximo se produce para campos más pequeños. Esto se debe a que el salto de energía entre el valle  $\Gamma$  y el siguiente valle (el X en el caso del InSb y el L en el caso del InAs) es menor en el caso del InSb (0.456 eV para el caso del InSb y 1.1 eV en el caso del InAs).

Veamos ahora qué sucede con la ocupación de los valles a medida que aumentamos el campo aplicado, lo que nos servirá para entender la posición de esos máximos de la curva velocidad-campo.

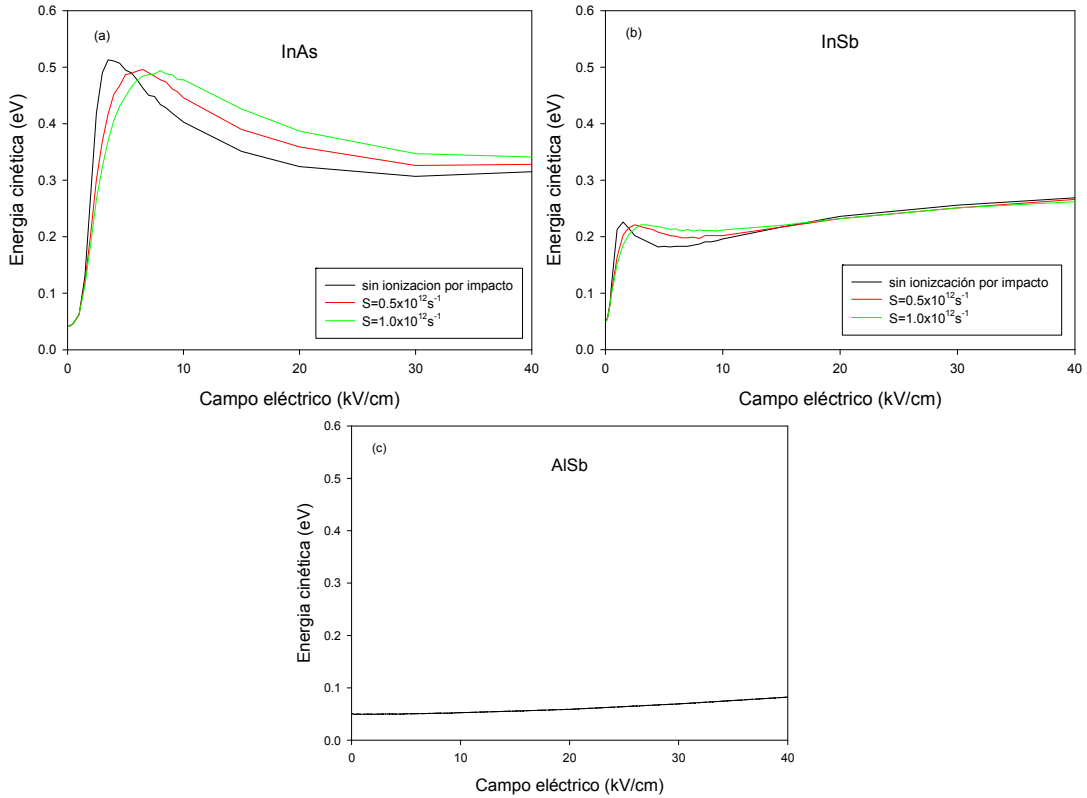


**Figura II.13:** Ocupación de los valles frente al campo eléctrico para distintos parámetros de ionización en el (a) InAs y (b) InSb, obtenida con la simulación MC.

Una vez en el segundo valle, la masa efectiva de los electrones es mayor que en el primer valle. Por tanto los electrones se hacen más lentos, de modo que les cuesta más pasar al tercer valle, al que pasan muy pocos y ya para campos muy elevados.

Ya hemos comentado la importancia que tiene la ionización por impacto en estos dos materiales. En las figuras II.13(a) y (b) puede observarse que la ionización por impacto hace que los electrones permanezcan en el valle  $\Gamma$  hasta campos más elevados. Esto se debe a que los electrones que originan la ionización por impacto pierden gran cantidad de energía en la creación de pares electrón-hueco. El aumento de la ocupación en el valle  $\Gamma$  hace que la velocidad de los portadores sea mayor si se considera la ionización por impacto [Fig. II.11(a) y Fig. II.11(b)]. Respecto al AlSb,

la masa efectiva del primer mínimo (valle X) es grande, de modo que un campo aplicado de 100 KV/cm no es suficiente para que los electrones pasen a los valles superiores. Por eso se encuentran todos en el X (resultado no mostrado).

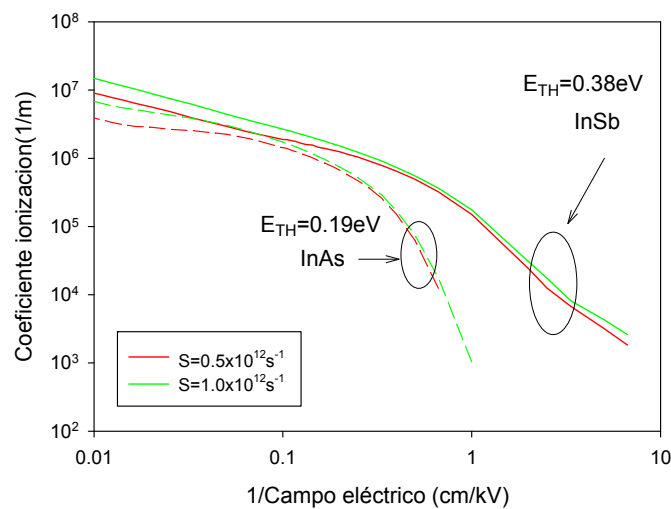


**Figura II.14:** Energía cinética de los electrones en función del campo, en (a) InAs, (b) InSb y (c) AlSb.

Respecto a la energía, la pequeña masa del primer valle hace que para campos pequeños la energía media de los portadores crezca muy rápidamente tanto para el caso del InAs como del InSb. Eso hace que esos portadores sean capaces de pasar a los valles superiores, sufriendo una brusca caída de la energía, hecho que vemos reflejado en las figuras II.14(a) y II.14(b). Una vez en el segundo valle, la energía crece más rápido en el caso del InSb que en el del InAs, porque la masa equivalente relativa del segundo valle del InSb es menor que la del InAs. En el caso del AlSb, por el contrario, la elevada masa efectiva relativa del primer valle hace que a los electrones les cueste ganar energía del campo eléctrico y no sean capaces de pasar a los valles superiores.

Como vemos en la figura II.14, para campo eléctrico nulo la energía es ligeramente mayor que  $3/2K_B T$ . Esto se debe a la corrección que hay que imponer a la energía térmica por causa de la no parabolicidad. Este término será apreciable en los casos en los que el coeficiente de no parabolicidad sea grande, como sucede tanto en el AlSb y como en el InSb.

Dada la importancia de la ionización por impacto en los dos materiales de gap estrecho (InSb e InAs), tiene interés que veamos ahora los resultados obtenidos para el coeficiente de ionización [Fig. II.15].



**Figura II.15:** Coeficiente de ionización en función del campo para el InSb y el InAs.

La figura II.15 corrobora la gran importancia que tiene tanto en el InSb como en el InAs la ionización por impacto, que es la que limita el campo eléctrico al que podemos someter estos materiales cuando forman parte de dispositivos. Vemos que como el InSb tiene un gap aún más pequeño que el InAs (0.18 eV y 0.354 eV respectivamente), la ionización por impacto es relevante para campos más pequeños [Fig. II.15].

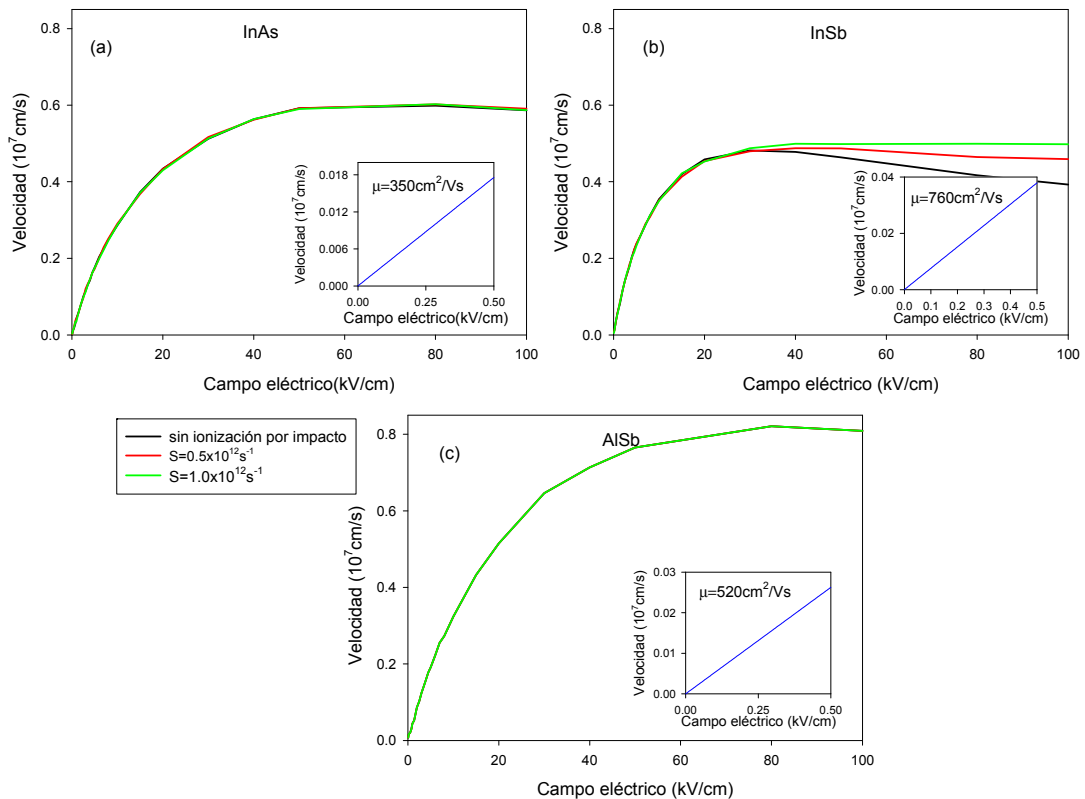
## Huecos

Pese a que los huecos juegan un papel menos relevante que los electrones, ya hemos visto la importancia que tiene la ionización por impacto tanto en InSb como en InAs. A pesar de que usualmente se trabaja con semiconductores tipo n, la



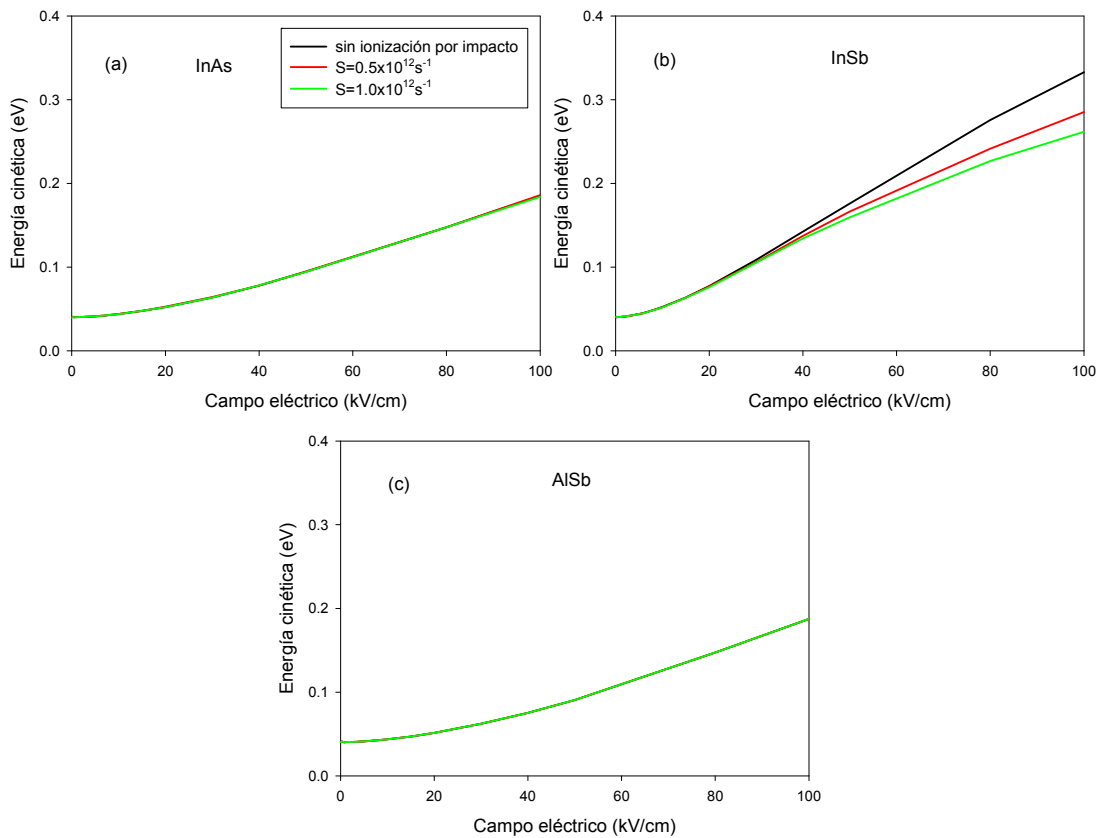
ionización por impacto genera una buena cantidad de huecos que se desplazan por los dispositivos.

Como vemos en la figura II.16, la velocidad de los huecos y su movilidad es pequeña en comparación con la que teníamos para los electrones en los tres materiales. Esto se debe a la elevada masa equivalente del valle de los huecos pesados (que es donde se concentra la mayoría de la ocupación, Fig. II.18).



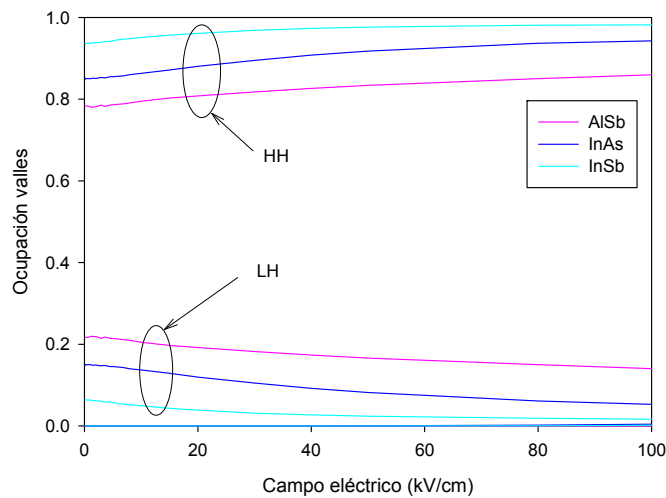
**Figura II.16:** Velocidad de los huecos en función del campo eléctrico en (a) InAs, (b) InSb y (c) AlSb. En el caso del InSb y del InAs el estudio se hace para  $S=0.0$ ,  $S=0.5 \times 10^{12} \text{s}^{-1}$  y  $S=1 \times 10^{12} \text{s}^{-1}$ .

La masa efectiva de los huecos pesados del InSb es menor que la del InAs y la del AlSb, lo que hace que ganen energía más rápidamente [Fig. II.17(a) y II.17(b)]. Este hecho, unido al menor gap del InSb, hace que las consecuencias de la ionización por impacto en las velocidades de los huecos del InSb para campos menores de 100 kV/cm sean apreciables, mientras que en el InAs no.



**Figura II.17:** Energía de los huecos en (a) InSb, (b) InAs y (c) AlSb en función del campo eléctrico.

Independientemente de la ionización por impacto, entre un 80% y un 95% de los huecos de estos tres materiales se encuentran en la banda de huecos pesados, y el resto en la de huecos ligeros [Fig. II.18]. El AlSb es el que más ocupación muestra en la banda de huecos ligeros, lo que hace que sea el material en el que los huecos adquieren una velocidad más elevada [Fig. II.16(c)].



**Figura II.18:** Ocupación de valles en función del campo eléctrico en el InSb, InAs y AlSb.

### II.2.3. Materiales ternarios

Una vez estudiadas las propiedades de transporte en los tres semiconductores binarios, pasamos a examinar dos materiales ternarios, el AlInSb y el InGaAs.

Veremos por qué se usa comúnmente el  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$  con  $x=0.15$  como material de barrera para el InSb. Para determinar los parámetros de simulación del  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$  hacemos una interpolación lineal entre los parámetros del InSb y del AlSb. En esa transición podemos observar las diferencias entre un material que se usa para el canal (InSb) y uno que se usa para formar la barrera (AlSb).

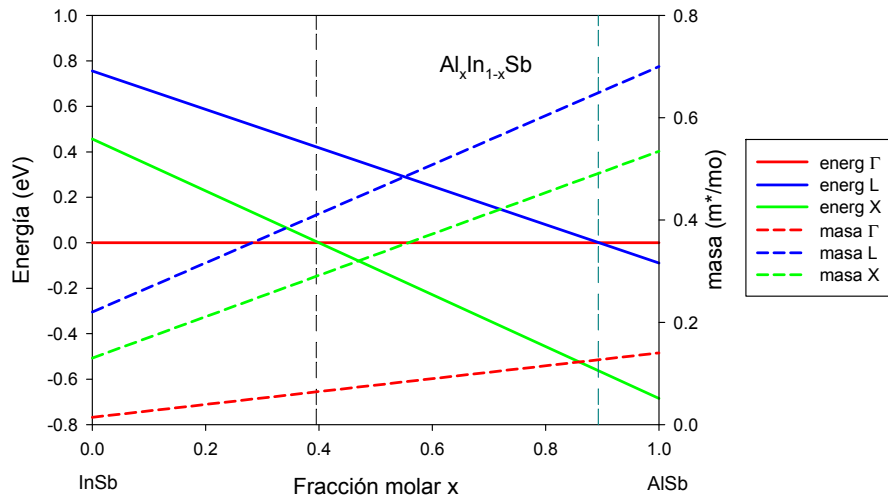
Observaremos también la transición del  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  con  $x=0.53$  al InAs ( $x=1.0$ ) con el fin de poner de manifiesto las mejoras que acarrea el aumento de la fracción molar de In en el InGaAs para su utilización como material en el canal de un HEMT.

#### $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$

Comencemos con la transición del InSb, material con un gap directo muy pequeño (0.18 eV) y una masa efectiva del primer valle también muy pequeña (0.014) y por tanto material de “electrones rápidos”, al AlSb, de gap indirecto con valor de 1.61 eV, y masa efectiva del valle principal, el valle X, de 0.53, y que es material de “electrones lentos”.

Antes de comentar cómo influye la variación de la fracción molar de aluminio del  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$  en la velocidad, energía, y ocupación de valles, examinemos un esquema

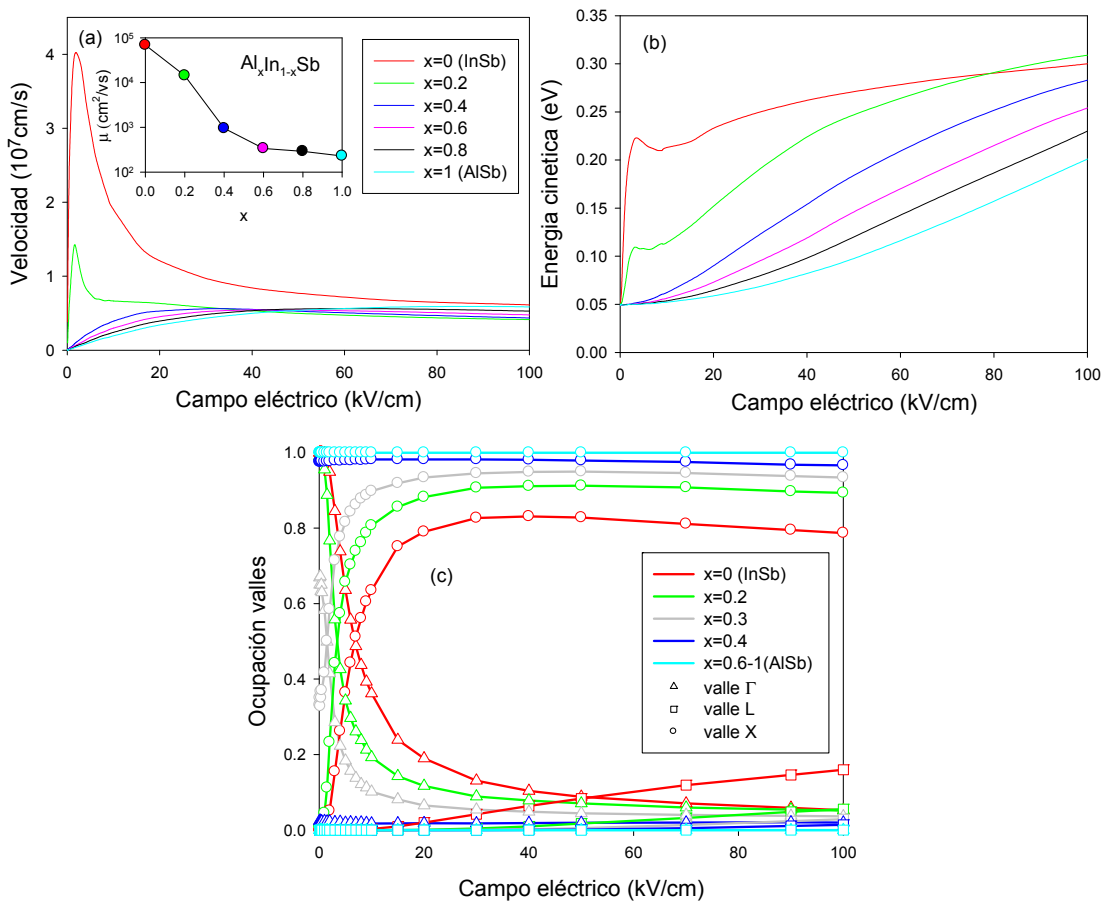
que refleja cómo varía la energía de los tres valles (tomando como referencia el  $\Gamma$ ) y sus respectivas masas equivalentes al cambiar la fracción molar de Al e In.



**Figura II.19:** Variación de la energía y de la masa efectiva relativa de los tres valles del  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ . Resultados obtenidos a partir de una interpolación lineal de los parámetros de simulación del InSb y el AlSb.

Como vemos en la figura II.19, para una fracción molar de Al de aproximadamente 0.395 este semiconductor pasa de ser un material de gap directo a uno de gap indirecto (recordemos que en ambos materiales el máximo de la banda de valencia se encuentra en el punto  $\Gamma$ ). Obsérvese también que a partir de  $x=0.89$  el valle  $\Gamma$  pasa a tener más energía que el L, quedando los valles ordenados X, L,  $\Gamma$  de menor a mayor energía.

Respecto a las masas efectivas, las tres aumentan al aumentar la fracción molar de Al, pero la del valle  $\Gamma$  tiene un aumento menos acusado que las otras dos, mientras que las masas efectivas de los valles X y L pasan a tener unos valores muy elevados para el AlSb.



**Figura II.20:** (a) Velocidad, (b) energía y (c) ocupación de valles en función del campo eléctrico para diferentes fracciones molares de Al en Al<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>Sb. En el inset de (a) se muestra la movilidad en función de la fracción molar.

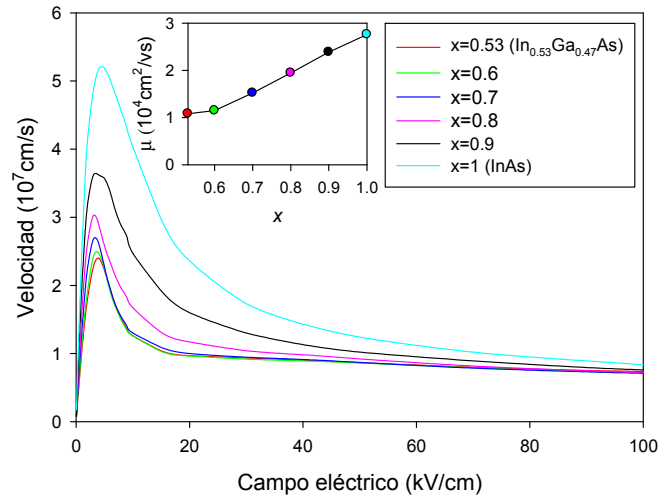
Al aumentar el contenido de Al en esta transición pasamos de un material de alta movilidad utilizado para el canal (el InSb con  $\mu=6.7 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ) a uno de baja movilidad, que solamente utilizaremos para formar la barrera que confine los electrones en el canal (el AlSb  $\mu=270 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ). Esta transición se produce del siguiente modo. La velocidad cae rápidamente al disminuir la proporción de In [Fig. II.20(a)], produciendo un descenso brusco de la movilidad. Esta caída es ya relevante para  $x=0.2$  ( $\mu=1.4 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ) y se debe al rápido aumento de la masa efectiva del valle  $\Gamma$ . Esto sigue produciéndose hasta  $x=0.4$  ( $\mu=940 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ), momento en el que se convierte en un material de gap indirecto, pasando el valle X a ser el valle principal. Por ser la masa de este valle (el X) mucho mayor que la del  $\Gamma$ , a partir de esta fracción molar los electrones permanecerán en este primer valle hasta campos muy elevados (más de 100 KV/cm), sin pasar a los valles superiores [Fig. II.20(c)]. Este

aumento en la masa del valle principal disminuye la velocidad y energía de los portadores, pasando a ser un material de “electrones lentos”. En este rango, la disminución de la movilidad al aumentar  $x$  se hace de forma más gradual. Al aumentar la fracción molar de Al (para  $x > 0.4$ ) aumenta tanto la masa efectiva del valle X como el gap entre el primer y el segundo valle. Eso hace aún más difícil que los electrones sean capaces de pasar a los valles superiores, como se aprecia en la figura II.20(c).

### **In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As**

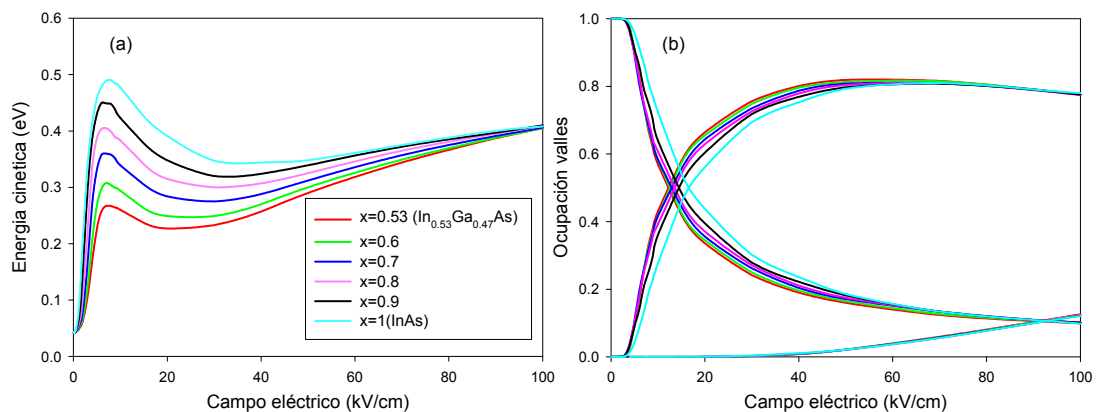
A continuación estudiaremos la transición entre un semiconductor de alta movilidad, el In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As (material de parámetros bastante bien conocidos al ser el utilizado en HEMTs de AlInAs/InGaAs basados en InP), y otro con una movilidad aún más alta, el InAs (prometedor semiconductor de gap estrecho estudiado anteriormente y que augura mejorar la frecuencia de corte y la movilidad en los HEMTs basados en InP). Los parámetros que utilizaremos para el In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As son los de la referencia [Mateos *et al.* 2000b] y para el InAs los expuestos en la Tabla II.1.

La importancia de esta transición radica en que a medida que la fracción molar de In va aumentando, disminuye la masa efectiva del valle  $\Gamma$  (primer mínimo) y se incrementa la distancia en energía entre éste y el siguiente (el L), aumentando de esta forma considerablemente la movilidad del semiconductor [inset Fig. II.21]. Este aumento de la movilidad es prácticamente lineal, pasando de un valor de  $1.08 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  para  $x=0.53$  a  $\mu=2.7 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  para el InAs.



**Figura II.21:** Velocidad en función del campo para diferentes fracciones molares de In en el  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

La disminución de la masa efectiva del valle  $\Gamma$  hace que los portadores aumenten su energía a gran velocidad al aplicar el campo eléctrico. Pero como al mismo tiempo la energía necesaria para poder pasar a los valles superiores es mayor. El campo para el cual la velocidad empieza a descender no cambia mucho al cambiar la fracción molar. Esto puede observarse tanto en el valor del campo para el cual aparece el máximo de velocidad [Fig. II.21] como en el punto en el que se cruzan la ocupación del primer valle y la del segundo, que casi no cambia [Fig. II.22]. Como se ve en la figura II.22, la ocupación de los valles es prácticamente independiente de la fracción molar de In.



**Figura II.22:** (a) Energía y (b) ocupación en función del campo eléctrico aplicado para distintos valores de fracción molar  $x$  de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

\* \* \*

En este capítulo, se ha puesto de manifiesto las indudables ventajas que se encontrarían a priori al hacer uso de estos semiconductores de gap estrecho en el canal de los HEMTs, debido a la altísima movilidad de los mismos junto con una elevada distancia energética a los valles superiores. Estas ventajas sólo se ven ensombrecidas por prematura aparición de la ionización por impacto debido al pequeño gap de estos semiconductores.



# **CAPÍTULO III**

## **HETEROESTRUCTURAS CON SEMICONDUCTORES DE GAP ESTRECHO: AlSb/InAs Y AlInSb/InSb**

Una vez estudiadas las propiedades de transporte tanto en los materiales de gap estrecho (InAs y AlSb), como en los utilizados para formar sus heterouniones (AlSb y AlInSb), veamos las consecuencias que conlleva en el transporte de los portadores la formación de las heteroestructuras.

### **III.1 HETEROESTRUCTURAS A ESTUDIAR**

En este trabajo estudiamos dos estructuras, la primera con canal de InAs para la que utilizaremos AlSb como material de gap ancho para formar la barrera, y la otra con canal de InSb para la que utilizaremos  $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}$  como barrera. Para facilitar la comparación, comenzaremos estudiando las dos estructuras con una misma geometría, la presentada en la figura III.1. Esta estructura de capas es la típicamente utilizada para fabricar HEMTs con longitudes de puerta de alrededor de 100 nm.

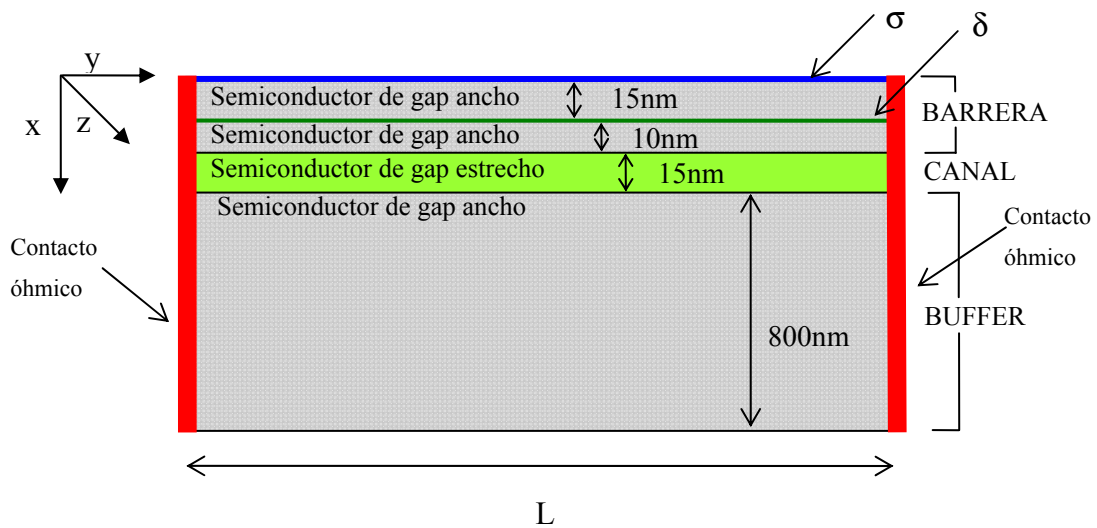


Figura III.1: Geometría de la heteroestructura simulada.

Los portadores de nuestra heteroestructura serán suministrados por una capa en la que se añaden los átomos de las impurezas, la capa  $\delta$ , a la que asignaremos una densidad de carga superficial de  $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . En la interfaz superior del semiconductor colocamos una densidad de carga superficial  $\sigma$  para reproducir el efecto de la carga negativa atrapada en los estados superficiales asociados a la ruptura del potencial periódico del semiconductor.  $\sigma$  es un parámetro que depende del proceso de fabricación. Con él ajustaremos la densidad de electrones en el canal a los valores experimentales. Le hemos asignado valores de  $\sigma/e=0$ ,  $\sigma/e=-2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

### III.2 HETEROESTRUCTURA DE AISb/InAs

En la tecnología de fabricación de HEMTs con canal de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  basados en InP se ha ido aumentando la fracción molar de In porque ello mejora las propiedades de transporte del material, hasta que, llegado un punto, el aumento de la constante de red provoca la sustitución del AlInAs por AISb como material para formar la barrera. Esto ha sido posible por los avances en el crecimiento metamórfico que permiten crecer estos materiales con constantes de red muy diferentes sobre sustratos de InP. Las ventajas de la sustitución del InGaAs por el InAs como material del canal y AlInAs por AISb para formar la barrera son:

- (i) El aumento tanto de la movilidad de los electrones como del máximo de velocidad, llegando ambas prácticamente a duplicarse al pasar de utilizar un canal de  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  a uno de  $\text{InAs}$ , como vimos en el capítulo anterior,
- (ii) La gran barrera de energía entre las bandas de conducción del  $\text{InAs}$  y el  $\text{AlSb}$ , que permite un mejor confinamiento de electrones en el canal [Kruppa *et al.* 2007, Hori *et al.* 1998, Boos *et al.* 1998, Tsai *et al.* 2003, Chou *et al.* 2007].

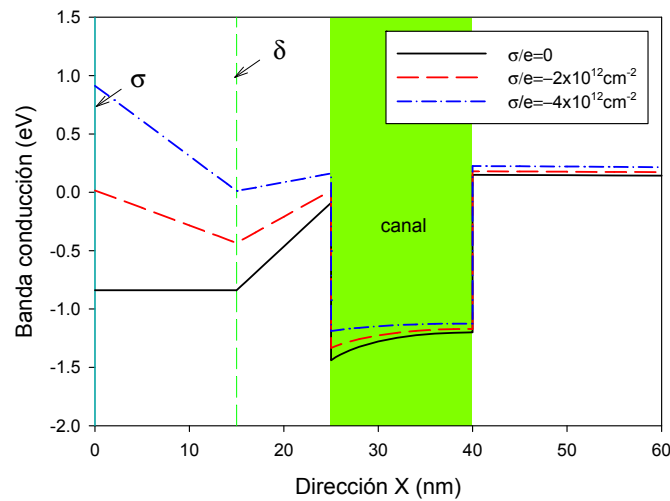
El salto de la banda de conducción entre estos dos semiconductores está fijado en la bibliografía en  $\Delta E_c = 1.35 \text{ eV}$  [Kroemer 2004, Boos *et al.* 1998], sin especificar entre qué valles. Nosotros hemos tomado  $1.35 \text{ eV}$  entre los valles  $\Gamma$  de los dos materiales (aunque debido al elevado valor de esta barrera, los resultados serían iguales si esa distancia fuera entre otros valles).

### III.2.1. Resultados en equilibrio

A continuación expondremos los resultados obtenidos mediante la simulación MC para la heterounión con canal de  $\text{InAs}$  y  $\text{AlSb}$  en la barrera, y la geometría mostrada en la figura III.1.

El enorme salto en la banda de conducción entre estos dos materiales ha originado algunos problemas en la simulación de esta heteroestructura, que, junto con sus soluciones, fueron expuestos en el capítulo I.

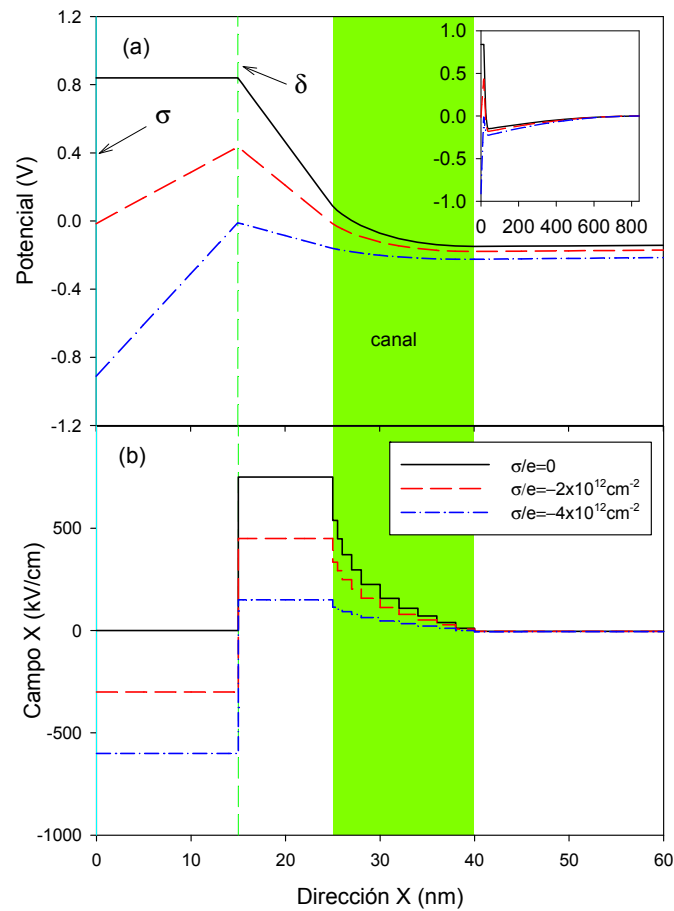
Como veremos más adelante, los electrones están completamente confinados en el canal debido al gran salto en la banda de conducción entre estos dos materiales. Por consiguiente, los tres valores que hemos dado a la densidad de carga superficial ( $\sigma/e=0$ ,  $\sigma/e=-2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) se traducen, por neutralidad de carga, en una densidad de carga en el canal,  $n_s$ , de  $5.0$ ,  $3.0$  y  $1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , respectivamente ( $n_s = \delta - \sigma$ ).



**Figura III.2:** Perfil vertical de la banda de conducción en nuestra heteroestructura obtenido con la simulación MC para tres valores de densidad de carga superficial  $\sigma/e=0$ ,  $\sigma/e=-2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . La posición del canal se indica con el sombreado verde, la capa  $\delta$  con la línea verde discontinua, y la densidad de carga superficial con la línea azul.

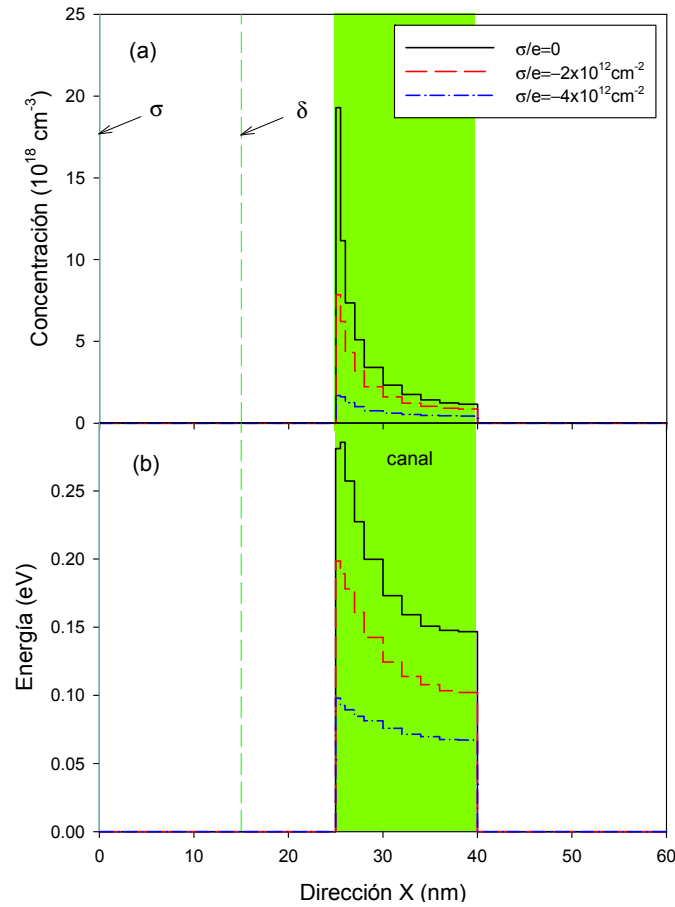
El origen de potencial lo hemos fijado en el fondo del *buffer*, en la posición  $x=840 \text{ nm}$  (en la superficie inferior de la heteroestructura).

La capa  $\delta$ , por tener carga positiva, atrae a los electrones presentes en el canal. Como es lógico, a medida que aumenta la carga superficial esta atracción disminuye, porque la acción de la carga positiva de la capa  $\delta$  se ve contrarrestada por la carga negativa asociada a la densidad de carga superficial,  $\sigma$  [Fig. III.2].



**Figura III.3:** Perfiles verticales de (a) potencial, con inset en el que se muestra el potencial en la totalidad de la heteroestructura simulada y (b) campo eléctrico en la dirección X para las diferentes densidades de carga superficial.

Como vimos en el capítulo I, la densidad de carga superficial  $\sigma$  fija el valor del campo transversal en la superficie superior de nuestro dispositivo. En la figura III.3(b) se observa que cuanto mayor es el valor de la carga superficial, menor es el campo en el canal y por tanto menor será la atracción hacia la parte superior que sufren los electrones del interior del canal.



**Figura III.4:** Perfiles verticales de (a) concentración y (b) energía para las diferentes densidades de carga superficial.

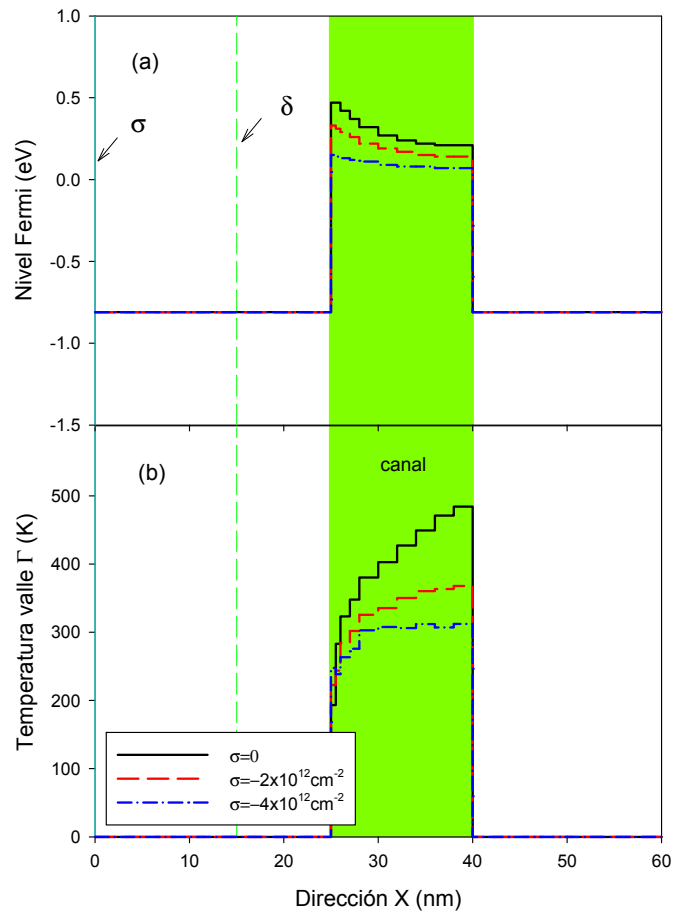
En la concentración [Fig. III.4(a)] observamos que todos los electrones están confinados en el canal. El aumento de la carga superficial hace que la carga en el canal disminuya, cumpliéndose siempre la neutralidad de carga  $n_s + \sigma = \delta$ . Asimismo, el aumento de la carga superficial disminuye la atracción de los electrones del canal hacia la parte superior del mismo, haciendo que el perfil sea más homogéneo (el máximo de concentración no es tan acusado en la parte superior del canal).

Los valores tan elevados de energía [Fig. III.4(b)] proporcionados por el MC son consecuencia de la degeneración, provocada principalmente por el elevado nivel de concentración de electrones en la parte superior del canal. Recordemos que, como vimos en el capítulo I, en el caso degenerado la energía térmica  $E$  viene dada por

$$E = \frac{3}{2} K_B T_{NV \min} \frac{\mathcal{F}_{3/2}(\eta)}{\mathcal{F}_{1/2}(\eta)}. \text{ La estadística de Maxwell-Boltzman daría una energía de}$$

$3/2 K_B T = 0.038 \text{ eV}$  a 300K, un valor muy por debajo de los obtenidos. El caso que

más se asemeja a esta energía es en el que la degeneración tiene menor influencia, o lo que es lo mismo, el de mayor densidad de carga superficial.



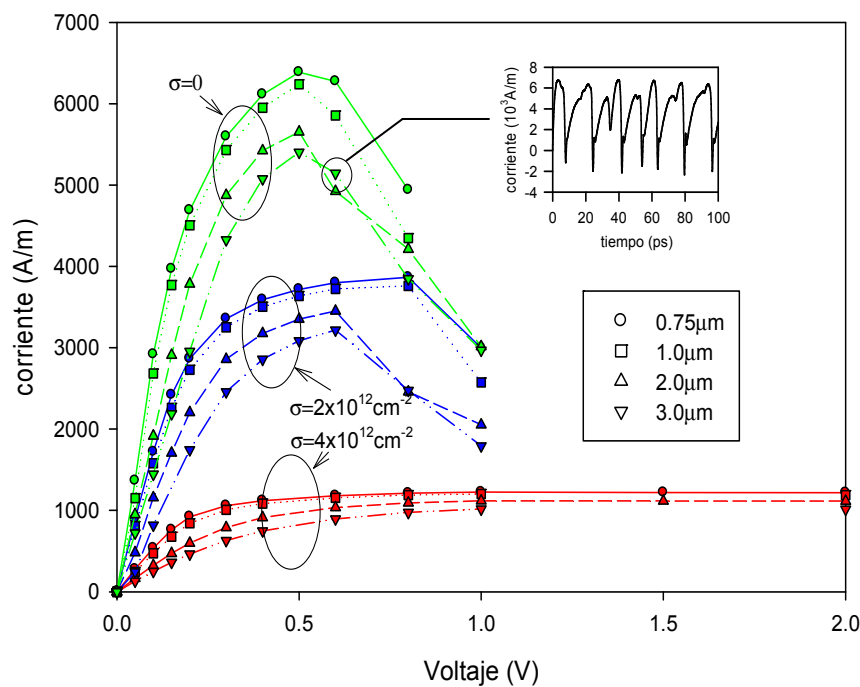
**Figura III.5:** Perfiles verticales de (a) nivel de Fermi y (b) temperatura electrónica para las distintas densidades de carga superficial.

Pese a que la técnica de los refinados sucesivos expuesta en el capítulo I consigue que la temperatura en el equilibrio tome valores razonables [Fig. III.5(b)], esa temperatura sigue siendo alta, sobre todo cuando la densidad de portadores es mayor. Esto ocurre porque nuestro modelo sencillo para la consideración del principio de exclusión de Pauli no funciona perfectamente al tratar con materiales altamente degenerados y donde además hay rápidas variaciones espaciales de concentración de electrones. Para una mayor exactitud, en los casos en los que la degeneración es alta, tendríamos que tener en cuenta los estados ocupados de forma individual, sin hacer aproximaciones sobre la función de distribución. Dado que los valores obtenidos para la temperatura una vez realizados los sucesivos refinados son aceptables, y que el calentamiento de los electrones asociado a la degeneración carecerá de

importancia en cuanto apliquemos tensiones apreciables entre terminales, trabajaremos con la aproximación de que la función de distribución es la de Fermi-Dirac, y usaremos la técnica de rechazo para tener en cuenta el principio de exclusión de Pauli.

### III.2.2. Resultados fuera de equilibrio

Veamos el comportamiento de estas estructuras cuando se aplica una tensión entre sus extremos. Por el momento el *scattering* de rugosidad no ha sido considerado. En la figura III.6 se muestra la corriente en función del voltaje aplicado para diferentes longitudes de la heteroestructura y los tres casos de densidades de carga superficial considerados.



**Figura III.6:** Características I-V para distintas longitudes de la heteroestructura ( $L=0.75, 1.0, 2.0$  y  $3.0 \mu\text{m}$ ) y distintos valores de densidad de carga superficial  $\sigma/e=0$ ,  $\sigma/e=-2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . En el inset se muestra un ejemplo de las oscilaciones Gunn encontradas (caso  $\sigma=0$ ,  $L=3 \mu\text{m}$  y  $0.6 \text{ V}$  aplicados).

Como cabría esperar, la resistencia de la estructura es proporcional a la longitud entre terminales [Fig. III.6] y, para una misma longitud entre terminales, el aumento

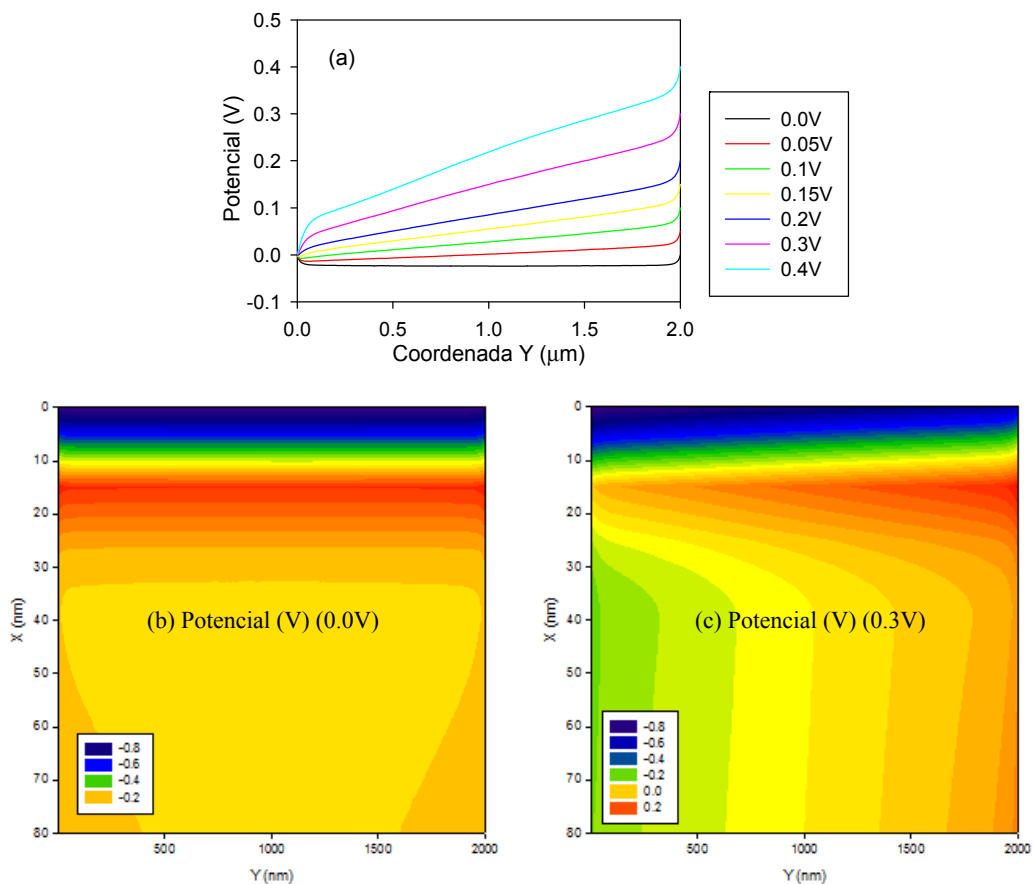


de la densidad de carga superficial hace disminuir la densidad de portadores libres en el canal, y por tanto también la corriente.

Para los casos con mayor número de portadores ( $\sigma/e=0$  y  $\sigma/e=-2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) y elevados valores de tensión, observamos que se produce una caída en la corriente media. Esto se debe a la aparición de oscilaciones Gunn [Shur 1987], que podemos observar en el inset de la figura III.6.

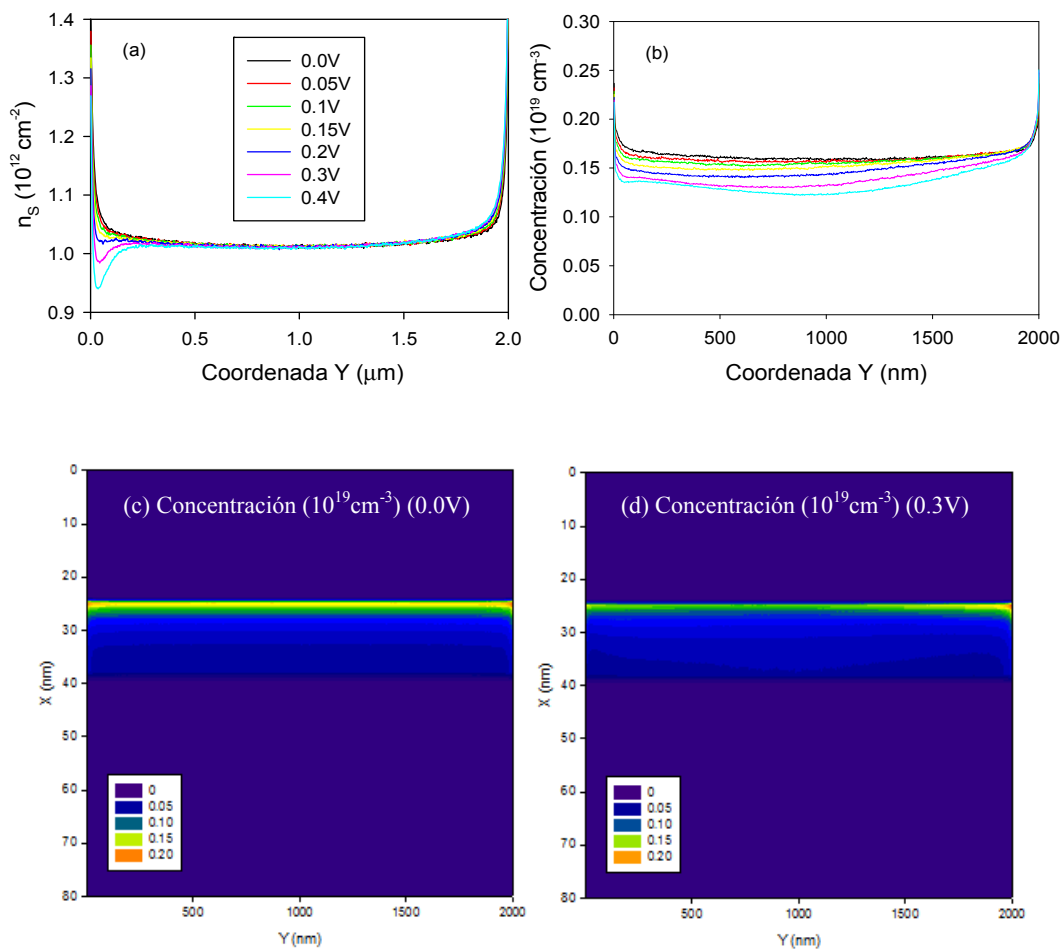
En capítulos anteriores ya se ha visto la importancia de la ionización por impacto en el InAs. Dado que éste material forma el canal de nuestra heterounión, la ionización por impacto será ya relevante para campos bajos en esta estructura. En las simulaciones de la heteroestructura la ionización por impacto no ha sido considerada, y, por tanto, los resultados para tensiones aplicadas por encima de 0.3 V se verían seriamente afectados [Vasallo *et al.* 2003].

A partir de ahora consideraremos el caso de  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  en una heteroestructura de longitud  $2 \mu\text{m}$  para estudiar cómo varían las diferentes magnitudes internas al aplicar tensiones externas [Figs. III.7-11] desde 0 a 0.4 V.



**Figura III.7 :** (a) Perfil horizontal de potencial en la celda superior del canal ( $x=25$  nm) para distintos valores de potencial aplicado entre terminales. Mapas de potencial (b) para equilibrio y (c) para 0.3 V aplicados.

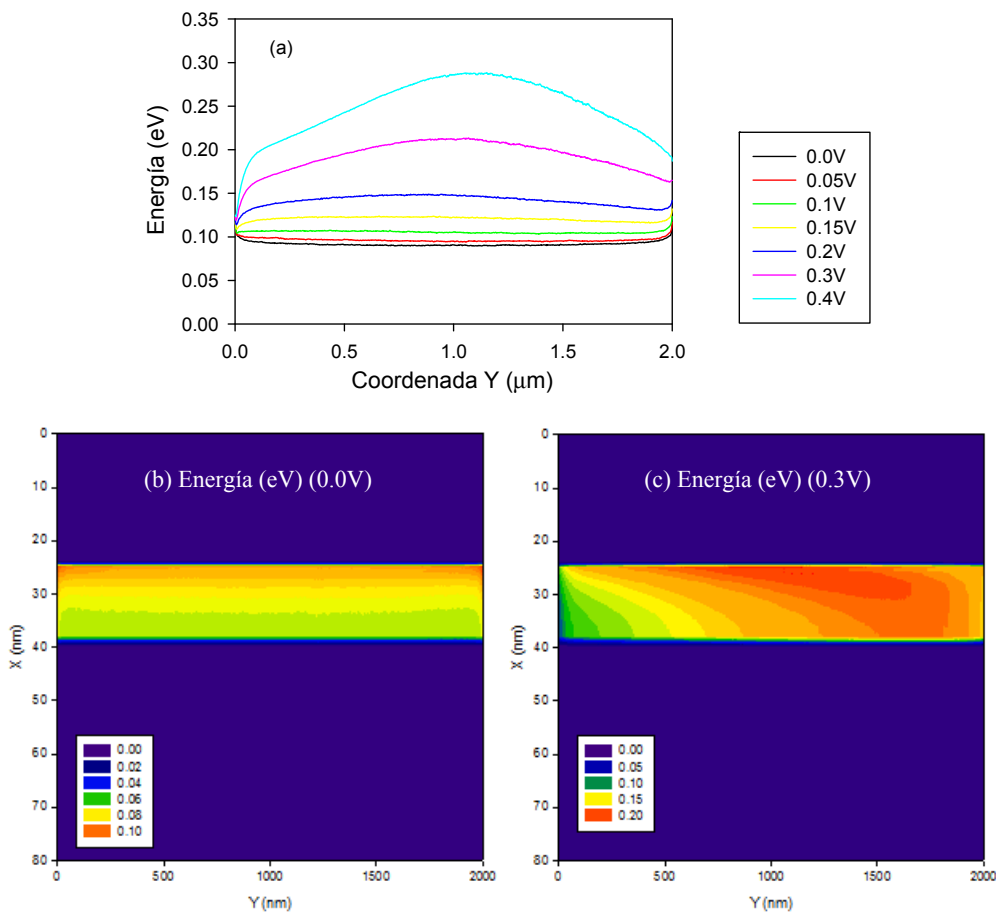
Recordemos que, según nuestra representación, al aplicar tensiones positivas al contacto de la derecha los electrones se desplazan en el sentido positivo del eje Y. En la figura III.7(c), se observa el potencial cuando se aplican 0.3 V.



**Figura III.8:** Perfiles horizontales de (a)  $n_s$  del canal y (b) concentración en la celda superior del canal (en  $x=25$  nm) para distintos valores de potencial aplicado entre terminales. Mapas de concentración (c) para equilibrio y (d) para 0.3 V aplicados.

Si nos fijamos en la figura III.8(a) vemos cómo el aumento del potencial aplicado disminuye la concentración de electrones en las proximidades del contacto situado en  $x=0$  (cátodo), mientras que aumenta cerca del ánodo ( $x=2 \mu\text{m}$ ). La concentración de

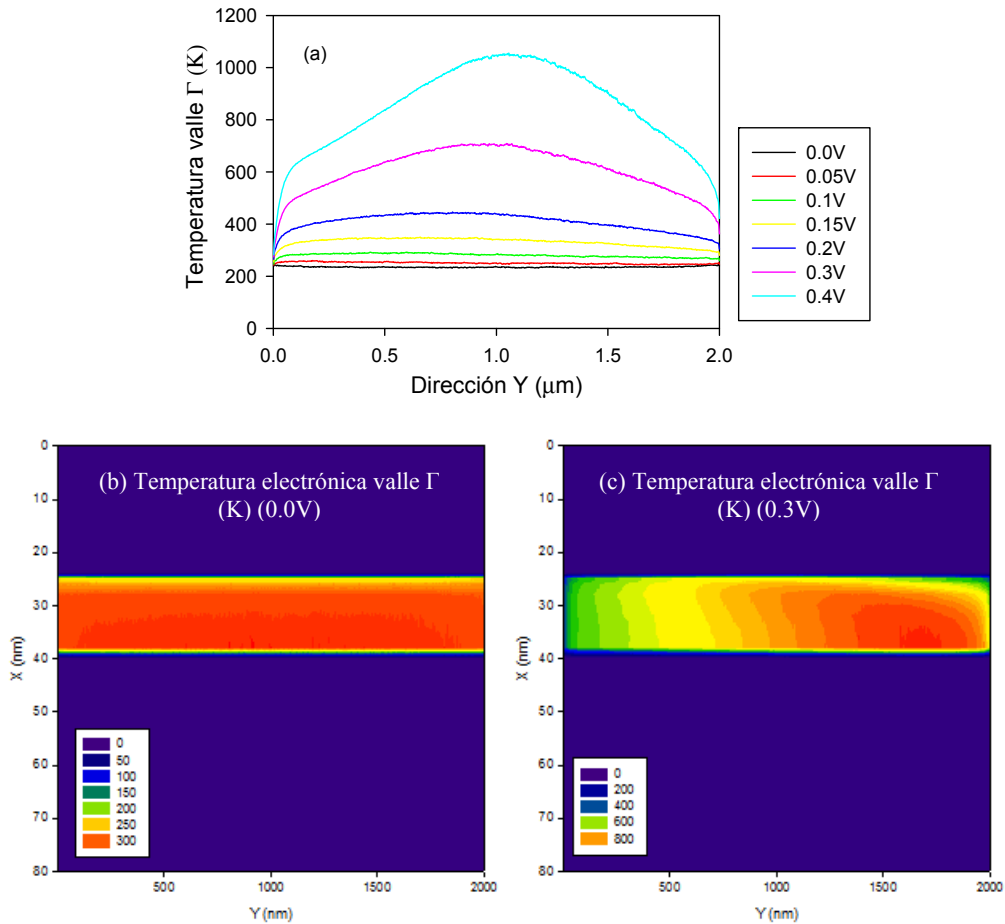
portadores libres a lo largo del canal permanece prácticamente constante (recordemos que todos los electrones permanecen confinados en el canal y por tanto  $n_{Scanal} = n_{Stotal}$ ), pero a medida que aumentamos el potencial aplicado los electrones se despegan de la barrera [Fig. III.8], disminuyendo la concentración en la primera celda del canal [Fig. III.8(b)]. Recordemos que en equilibrio los portadores permanecían pegados a la parte de arriba del canal debido a la atracción generada por la capa  $\delta$ .



**Figura III.9:** (a) Perfil horizontal de energía en la celda superior del canal (en  $x=25$  nm) para distintos valores de potencial aplicado entre terminales. Mapas de energía (b) para equilibrio y (c) para 0.3V aplicados.

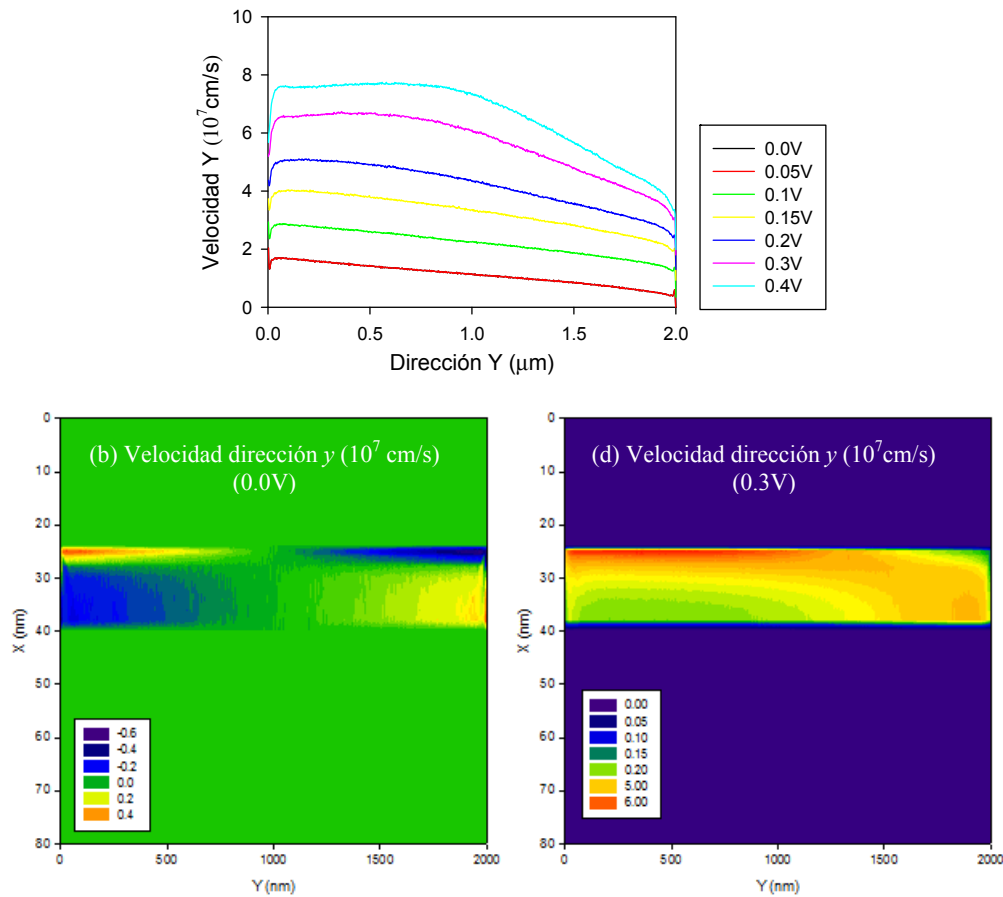
Como cabría esperar, la energía de los portadores aumenta con el potencial aplicado, como muestra la figura III.9. Este aumento en la energía hace que la temperatura electrónica del valle  $\Gamma$  también aumente significativamente [Fig. III.10], llegando a tomar valores de hasta 1000 K. Esa es la razón por la que anteriormente

decíamos que las pequeñas variaciones de temperatura electrónica dadas por la inexactitud del modelo para la degeneración no son muy importantes una vez polarizada la heterounión.



**Figura III.10:** (a) Perfil horizontal de la temperatura en el valle  $\Gamma$  en la celda superior del canal ( $x=25$  nm) para distintos valores de potencial aplicado entre terminales. Mapa de temperatura de los electrones en el valle  $\Gamma$  (b) para equilibrio y (c) para 0.3V aplicados.

En la figura III.11 se aprecia la elevada velocidad de los portadores en la dirección Y, siendo ésta mucho mayor que la que se observaba en las características velocidad-campo del InAs como material aislado [Fig. II.11(a)]. Observamos, pues, efectos cuasibalísticos a pesar de la elevada longitud de la heterounión, 2  $\mu\text{m}$ .

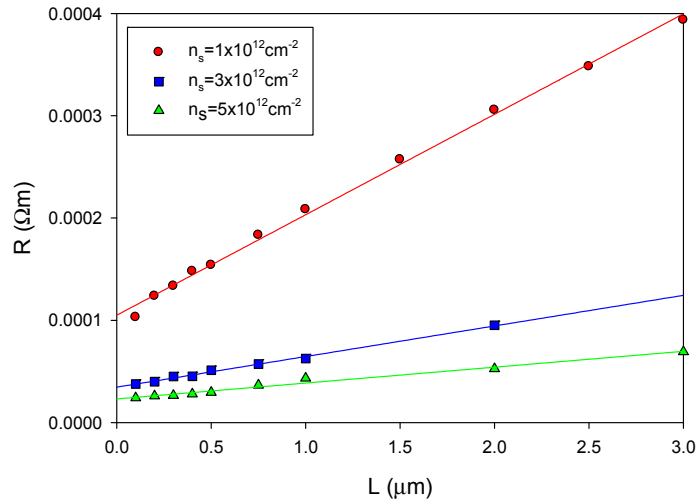


**Figura III.11:** (a) Perfil horizontal de la velocidad de los portadores en la dirección  $y$  en la celda superior del canal ( $x=25$  nm) para distintos valores de potencial aplicado entre terminales. Mapa de velocidad en la dirección  $Y$  para equilibrio y (c) para 0.3V aplicados.

Dado que en nuestras simulaciones no hemos considerado la ionización por impacto, estos resultados han de ser tomados como “aproximados”. Esto es especialmente aplicable a la energía y a la velocidad para  $V > 0.3$  V, que se verían seriamente afectadas si se considerara la ionización por impacto, como ya vimos en los resultados para el material aislado.

Una de las características más relevantes de una heteroestructura es la movilidad de los portadores en su interior. Calcularemos la movilidad de los electrones en el canal a través de la resistencia cuadrada [Ghandi 1994],  $R_{\square}$ , de la heterounión. La pendiente de la característica  $I$ - $V$  [Fig. III.6] en la parte lineal, es decir, para campos bajos, es el inverso de la resistencia,  $R$  [Fig. III.12]. La representación de esta

resistencia en función de la longitud de la heteroestructura,  $L$ , da como pendiente lo que se conoce como “resistencia cuadrada”,  $R_{\square}$ .



**Figura III.12:** Resistencia en función de la longitud de la heteroestructura para  $\sigma/e=0$ ,  $\sigma/e=-2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

Una vez obtenido el valor de la resistencia cuadrada, la movilidad viene dada por

$$\mu = \frac{1}{e n_s R_{\square}}, \quad (\text{III.1})$$

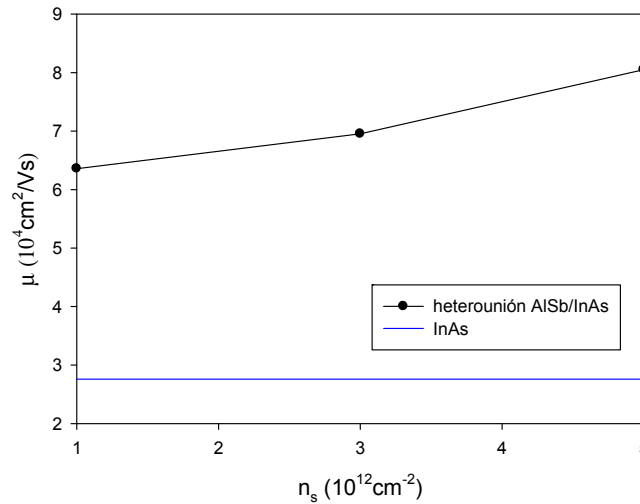
donde  $e$  es la carga del electrón y  $n_s$  la densidad superficial de electrones en la estructura.

De esta forma obtenemos los siguientes valores para la movilidad dependiendo de la carga superficial.

$\sigma/e$ ( $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ )	$n_s$ ( $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ )	$\mu$ ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )
0.0	5.0	80500
-2.0	3.0	69500
-4.0	1.0	63500

**Tabla III.1:** Movilidad de los electrones en la heteroestructura de AlSb/InAs para distintos valores de la carga superficial.

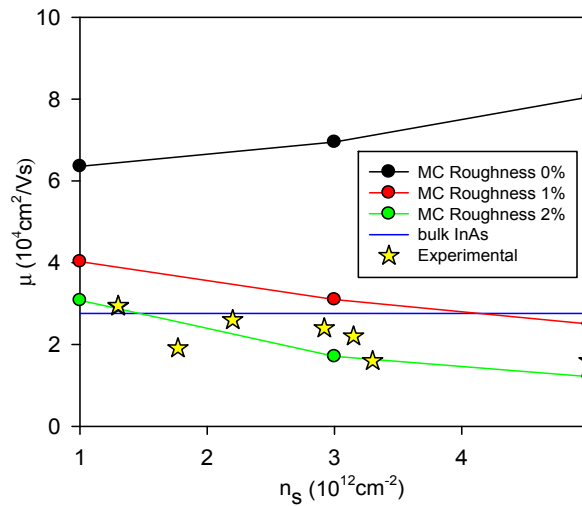
La movilidad que hemos encontrado para la heteroestructura es mucho mayor que la que encontrábamos para el InAs como consecuencia de la degeneración, y crece al aumentar  $n_s$  [Fig. III.11].



**Figura III.13:** Movilidad en función de  $n_s$ .

El completo confinamiento de los electrones en el canal nos permite llevar a cabo una comparación directa de nuestros resultados con las medidas Hall experimentales [Kruppa *et al.* 2007, Bergman *et al.* 2003, Tsai *et al.* 2003, Bennett *et al.* 2005, Bolognesi *et al.* 1992]. La movilidad encontrada experimentalmente para este tipo de estructuras es bastante menor que la que hemos obtenido con nuestras simulaciones MC, y además disminuye con el aumento de  $n_s$ , al contrario de lo que ocurría con nuestras simulaciones. Esa discrepancia se debe a que en nuestro modelo hasta el momento no hemos tenido en cuenta la rugosidad de la heterounión. Esto, unido a que no hemos tomado en consideración la distribución cuántica de los electrones en el canal, que hace que se separen de la heterounión (efecto que es más importante cuanto mayor es  $n_s$ ), hace que la dependencia de nuestra movilidad no se corresponda con la experimental. Para reproducir correctamente los resultados experimentales hemos introducido en nuestras simulaciones el efecto de la rugosidad en las interfaces de la heterounión. El modelo implementado en nuestro simulador para el *scattering* con rugosidad ya fue descrito en el capítulo I. Estudios previos en pozos cuánticos de AlSb/InAs sin  $\delta$ -doping indican una mayor importancia de la rugosidad de la heterounión inferior [Tuttle *et al.* 1990]. Por el contrario, en nuestro caso, el

$\delta$ -doping aumenta la concentración de portadores en la parte alta del canal, como ya se ha mostrado en este mismo capítulo, convirtiéndose en crítica la rugosidad en la heterounión superior. Por eso hemos considerado la rugosidad en las dos interfaces presentes en la doble heterounión simulada. Hemos simulado dos casos diferentes, 1% y 2% de interacciones difusivas con la superficie.



**Figura III.14:** Movilidad del canal en función de  $n_s$  comparado con la movilidad del InAs y con resultados experimentales de la heteroestructura [Kruppa 2007, Bergman 2003, Tsai 2003, Bennett 2005, Bolognesi 1992].

Como vemos en la figura III.14, considerar una rugosidad del 2% (aun con un modelo sencillo) nos permite reproducir adecuadamente los valores experimentales de movilidad [Kruppa *et al.* 2007, Bergman *et al.* 2003, Tsai *et al.* 2003, Bennett *et al.* 2005, Bolognesi *et al.* 1992], tanto en magnitud como en dependencia con  $n_s$ .

### III.3 HETEROESTRUCTURA $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}/\text{InSb}$

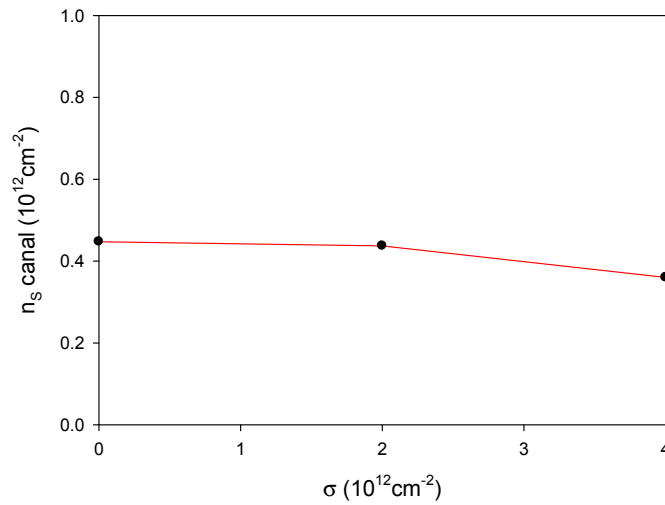
La altísima movilidad de los electrones en el InSb, cercana a  $70000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ , consecuencia de la pequeñísima masa efectiva de los electrones en el valle principal, invita a estudiar este material para su posterior utilización en el canal de un HEMT. Por otro lado, esta pequeña masa efectiva, junto con un gap muy estrecho (0.18 eV), hacen que la ionización por impacto sea muy importante para valores de campo muy pequeños [Orr *et al.* 2006(a)], limitando de esta forma la tensión que podemos aplicar en dispositivos basados en InSb.



Por no existir ningún semiconductor III-V con una constante de red similar a la del InSb [Fig. II.1], el material que se suele utilizar para formar la barrera es el AlInSb. Cuanto mayor sea la fracción molar de Al en el AlInSb, mejor será el confinamiento de los electrones en el canal, pero peor será la heterounión debido al aumento del *mismatch* entre los dos semiconductores, llegándose a un valor de compromiso para una fracción de Al de 0.15.

En el caso de la heterounión entre el InSb y el  $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}$ , el salto de la banda de conducción entre los materiales de la heterounión no es muy grande:  $\Delta E_c = 0.13$  eV. Esto hace que el confinamiento de los electrones en el canal no sea perfecto, ya que al ganar algo de energía la probabilidad de que salten la barrera es bastante alta. Por ello, la carga se redistribuye dentro del dispositivo a lo largo de la simulación y, por tanto, los resultados no vienen determinados por el perfil de inyección de forma tan crítica como en el caso del InAs. De esta forma la concentración de electrones en el material de la barrera no será nula y la inyección no estará restringida al canal. No es tampoco necesario acelerar el proceso de termalización de los electrones mediante los refinados sucesivos que explicamos para el caso del InAs, ya que la redistribución de carga entre el canal y la barrera permite su correcta termalización.

En la figura III.15 se representa la  $n_s$  del canal para los tres casos de densidad de carga superficial con los que hemos trabajado ( $\sigma/e=0$ ,  $\sigma/e=-2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ). Ahora la  $n_s$  del canal no coincide con  $\delta-\sigma$ , ya que aparece carga en el material de la barrera; de hecho la mayoría de la carga está en la barrera, cerca de la capa  $\delta$ .



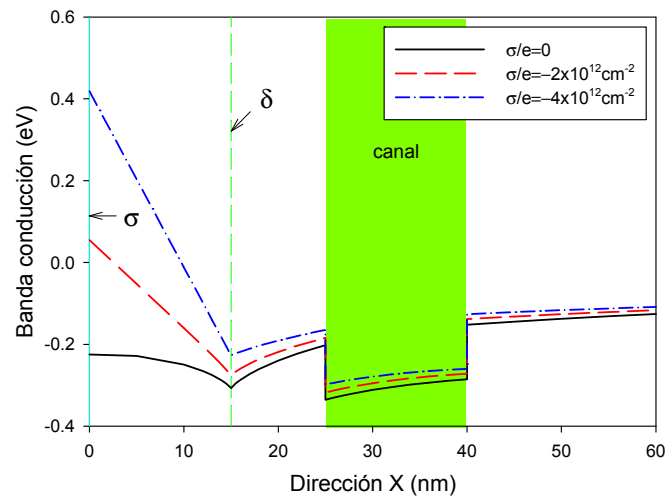
**Figura III.15:**  $n_s$  en el canal en función de  $\sigma$ .

Mientras que en el caso en el que  $\sigma/e = -4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  un 36% de los electrones se encuentra en el canal, para  $\sigma/e = 0$  y  $\sigma/e = -2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  sólo están el 9% y el 15% respectivamente.

### III.3.1. Resultados en equilibrio

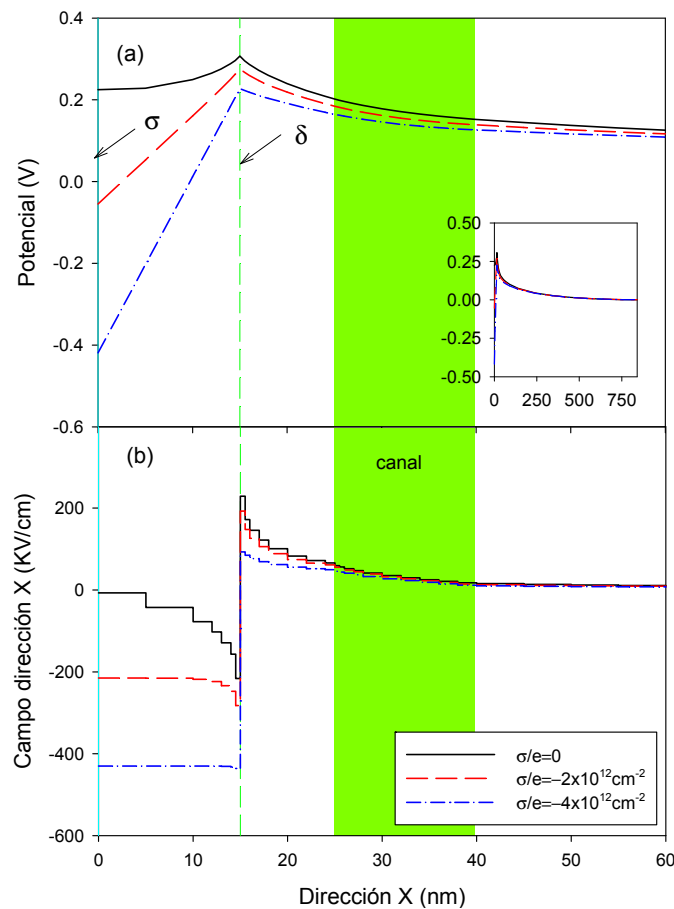
Con el fin de comparar esta heteroestructura formada por  $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}/\text{InSb}$  con la del apartado anterior de  $\text{AlSb}/\text{InAs}$ , vamos a observar los resultados que hemos obtenido con la simulación MC de la heteroestructura de la figura III.1 para densidades de carga superficiales de  $\sigma/e = 0$ ,  $\sigma/e = -2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $\sigma/e = -4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

En la figura III.16 se observa el perfil vertical de la banda de conducción. Al igual que sucedía en el caso de la heterounión  $\text{AlSb}/\text{InAs}$ , la capa  $\delta$  ejerce una fuerza de atracción de los portadores libres que en parte se compensa por el efecto de la densidad de carga superficial  $\sigma$ .



**Figura III.16:** Perfil vertical de la banda de conducción para tres valores de densidad de carga superficial  $\sigma/e=0$ ,  $\sigma/e = -2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $\sigma/e = -4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . La posición del canal se indica con el sombreado verde, la capa  $\delta$  con la línea verde discontinua, y la carga superficial con la línea continua de color azul.

En este caso los electrones no se encuentran totalmente confinados en el canal. Mientras en la heteroestructura AlSb/InAs la banda de conducción carecía de curvatura en las proximidades de la capa  $\delta$  [Fig. III.2], en este caso [Fig. III.16], la presencia de portadores en las inmediaciones del  $\delta$  genera dicha curvatura, que será mayor cuanto menor sea  $\sigma$ .

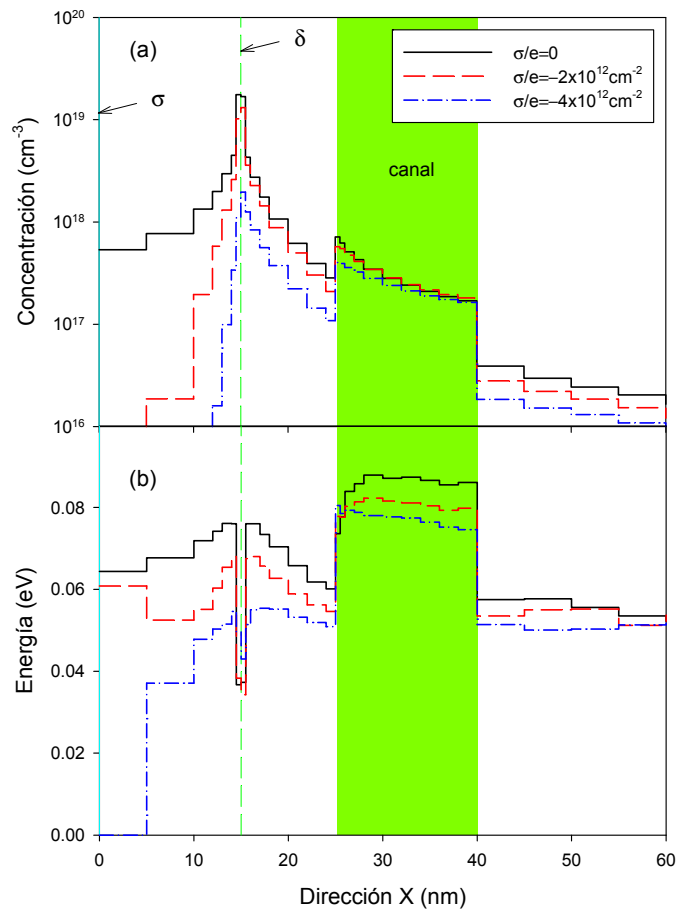


**Figura III.17:** Perfil vertical de (a) potencial (con inset en el que se muestra el potencial en la totalidad de la estructura simulada) y (b) campo eléctrico para las diferentes densidades de carga superficial.

Mientras en el canal la densidad de portadores permanece prácticamente constante, la concentración de portadores en el material de la barrera será menor cuanto mayor sea la carga superficial [Fig. III.18(a)], ya que la influencia del valor de  $\sigma$  en el canal está apantallada por la carga en torno a la capa  $\delta$ .

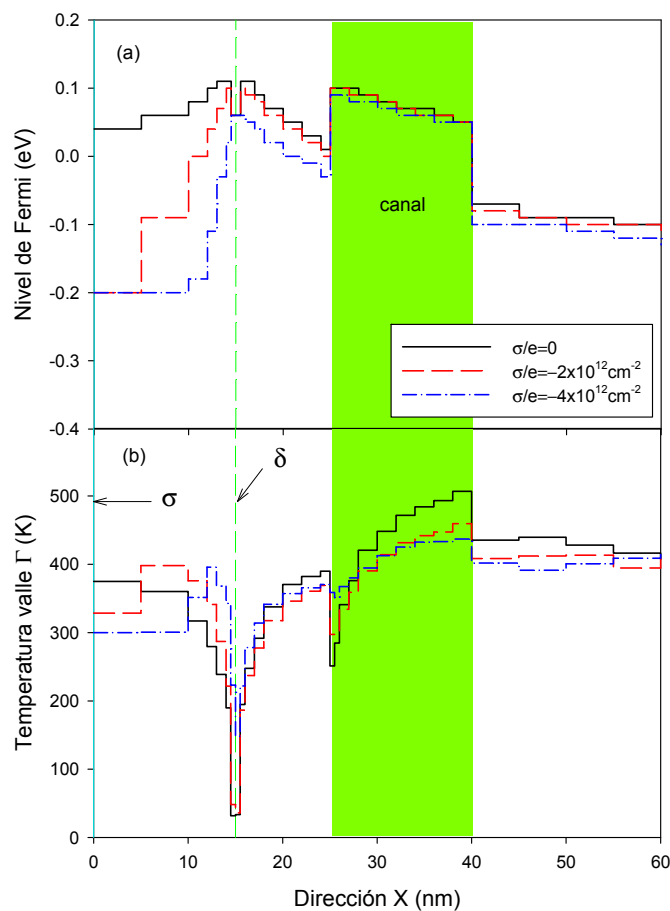
Igual que sucedía en la heterounión de AlSb/InAs, la energía de los electrones del canal disminuye a medida que aumenta la carga superficial [Fig. III.18(b)], al ser menor la degeneración.

En el caso del AlInSb la constante de no parabolicidad es muy grande, por lo que la aproximación  $\alpha E \ll 1$  que utilizábamos para la ecuación I.46 ya no es válida, y, por tanto, la expresión obtenida para el nivel de Fermi y la temperatura que explicamos en el capítulo I no es del todo correcta. Por eso encontramos energías y temperaturas tan bajas en las inmediaciones de la capa  $\delta$  [Fig. III.18(b) y Fig. III.19(b)].



**Figura III.18:** Perfil vertical de (a) concentración y (b) energía para las diferentes densidades de carga superficial.

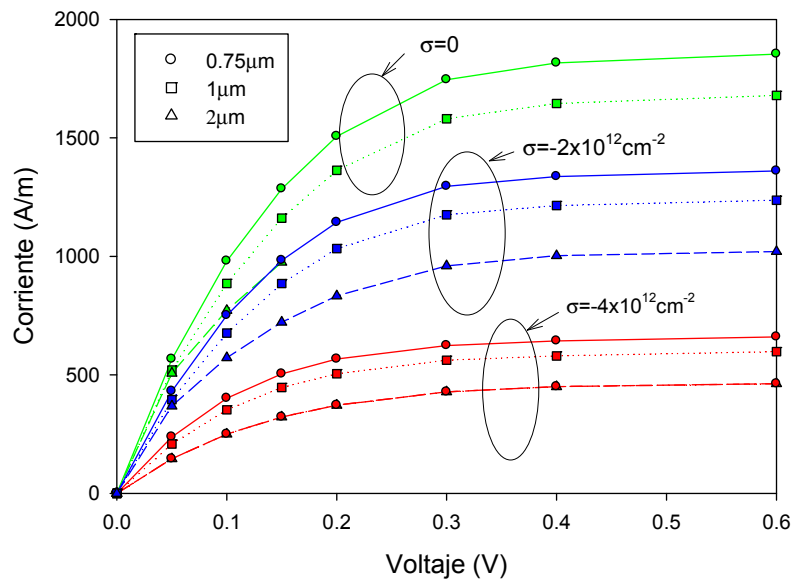
En cuanto a la temperatura dentro del canal, ésta toma un valor muy elevado debido a la degeneración, igual que ocurría en el caso del InAs [Fig. III.19(b)]. Este hecho es más relevante cuanto mayor sea la densidad de portadores, y por tanto, cuanto menor sea la densidad de carga superficial, dado que es en estos casos cuando la degeneración juega un papel más importante. Sin embargo, este efecto no es tan importante en el canal, ya que la población de electrones no es elevada (y es prácticamente constante con  $\sigma$ ).



**Figura III.19:** Perfil vertical de (a) nivel de Fermi y (b) temperatura de los electrones en el valle  $\Gamma$  para las diferentes densidades de carga superficial.

### III.3.2. Resultados fuera de equilibrio

Igual que hicimos en el caso de la heteroestructura AlSb/InAs, observemos el comportamiento de la heteroestructura de  $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}/\text{InSb}$  para diferentes tensiones aplicadas y varias longitudes entre terminales.



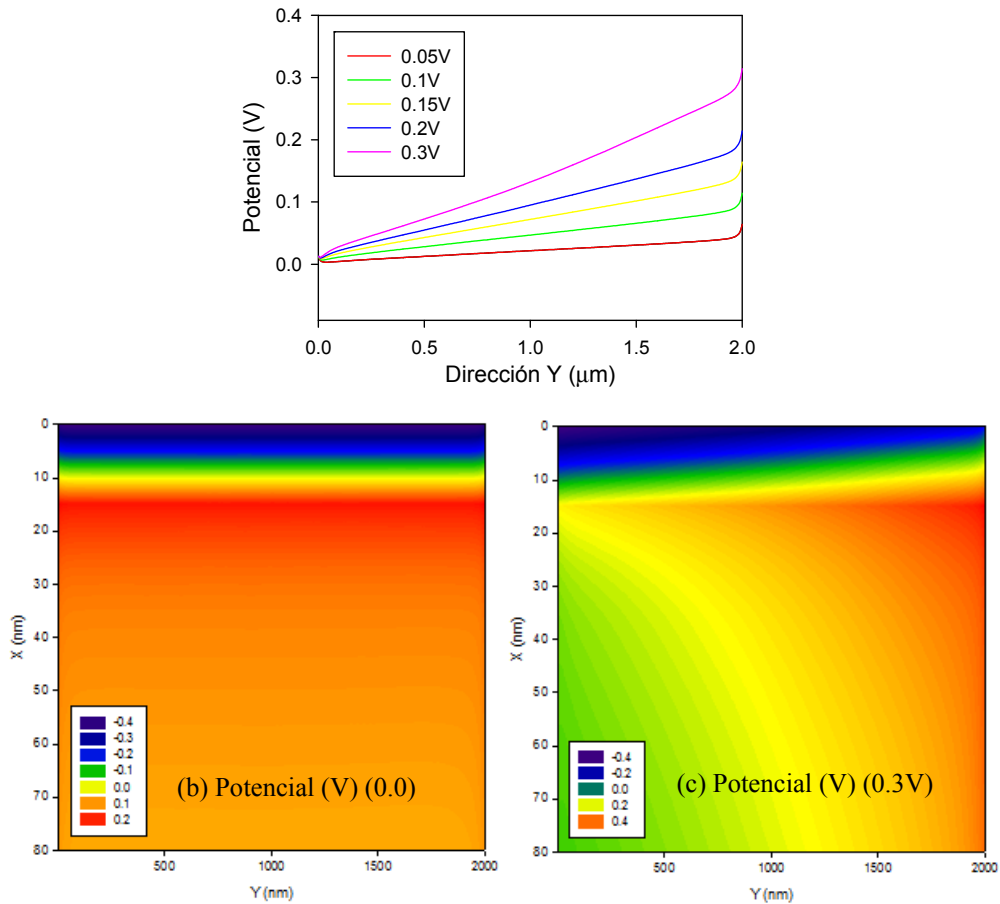
**Figura III.20:** Características I-V en función de la longitud de la heteroestructura para distintos valores de densidad de carga superficial,  $\sigma/e=0$ ,  $\sigma/e=-2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  y  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ .

En las características corriente-tensión [Fig. III.20], vemos cómo la disminución de portadores libres causada por el aumento de la carga superficial aumenta la resistencia, igual que ocurre con el aumento de la longitud entre terminales del dispositivo.

En comparación con la heteroestructura de AlSb/InAs [Fig. III.6], la corriente de la heteroestructura con canal de InSb es menor, a pesar de que la altísima movilidad del InSb. Eso se debe a que la totalidad de los electrones no se encuentra confinada en el canal, sino que gran parte de ellos se encuentra en el material que forma la barrera ( $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}$ ), que como vimos en el capítulo I se considera un material de “electrones lentos”. A diferencia de lo que ocurría en la heteroestructura basada en InAs, no encontramos oscilaciones Gunn para potenciales aplicados de hasta 0.6 V. Esto seguramente es debido a la pequeña densidad de portadores que tenemos ahora en el canal.

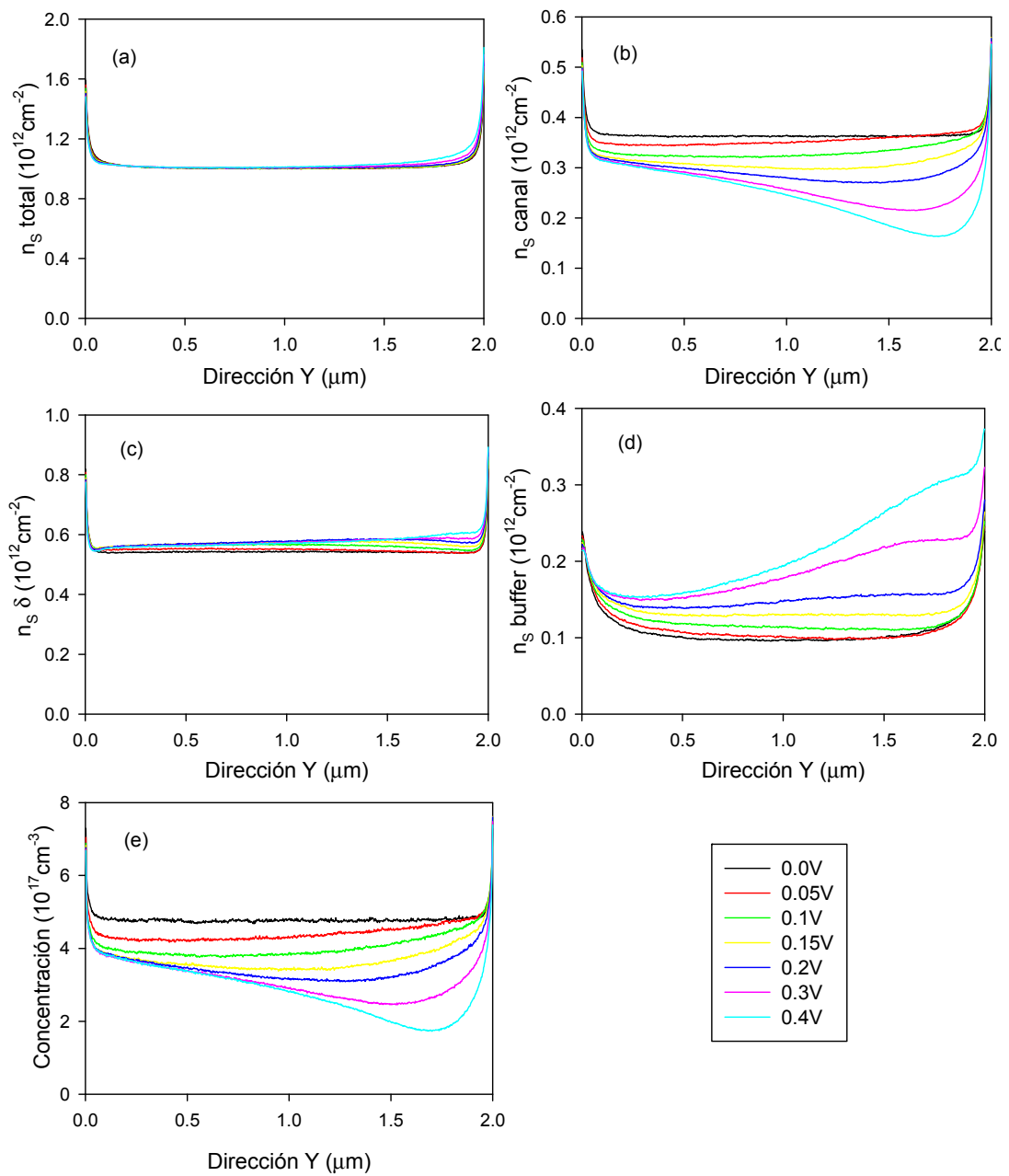
Dado el pequeño gap del InSb (0.18 eV), la ionización por impacto juega un papel muy importante ya para tensiones aplicadas bajas [Fig. II.8]. La no consideración de la ionización por impacto en nuestras simulaciones hace que los resultados fuera del equilibrio hayan de ser tomados con precaución para  $V > 0.2$  eV.

Igual que hicimos en el caso anterior, observaremos qué sucede con las magnitudes internas dentro del dispositivo en función del voltaje aplicado [Fig. III.21]. Consideremos el caso  $\sigma/e = -4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  con una longitud de  $2 \mu\text{m}$ .



**Figura III.21:** (a) Perfil horizontal de potencial en la celda superior del canal ( $x=25 \text{ nm}$ ), para diferentes valores de potencial aplicado entre terminales. Mapas de potencial (b) para equilibrio y (c) para 0.3 V aplicados.

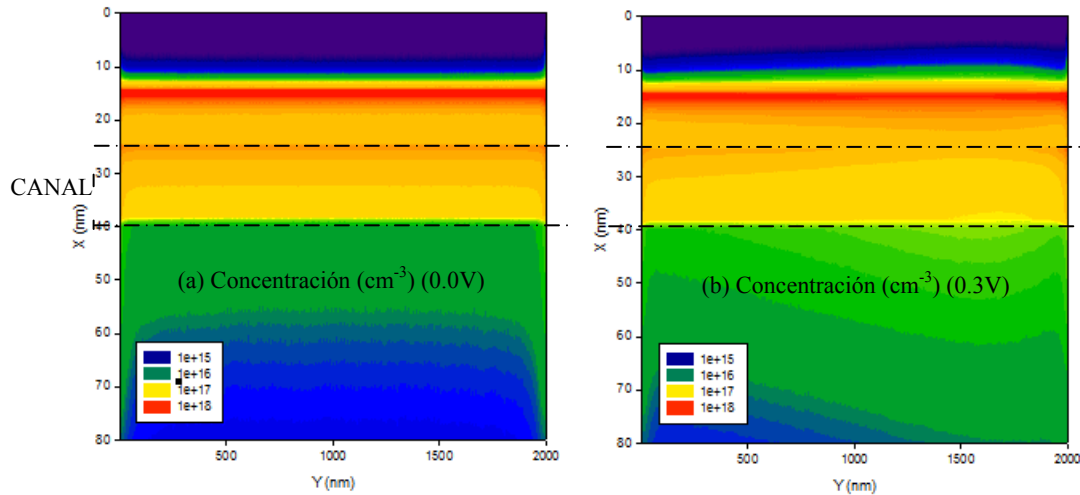




**Figura III.22:** (a)  $n_s$  total, (b)  $n_s$  del canal, (c)  $n_s$  de la capa  $\delta$ , (d)  $n_s$  del buffer y (e) concentración en la celda superior del canal (en  $x=25$  nm), todo ello a lo largo de la dirección Y, para distintos valores de potencial entre terminales, en el caso  $\sigma/e=-4 \times 10^{12}$  cm $^{-2}$  y una longitud de 2  $\mu$ m.

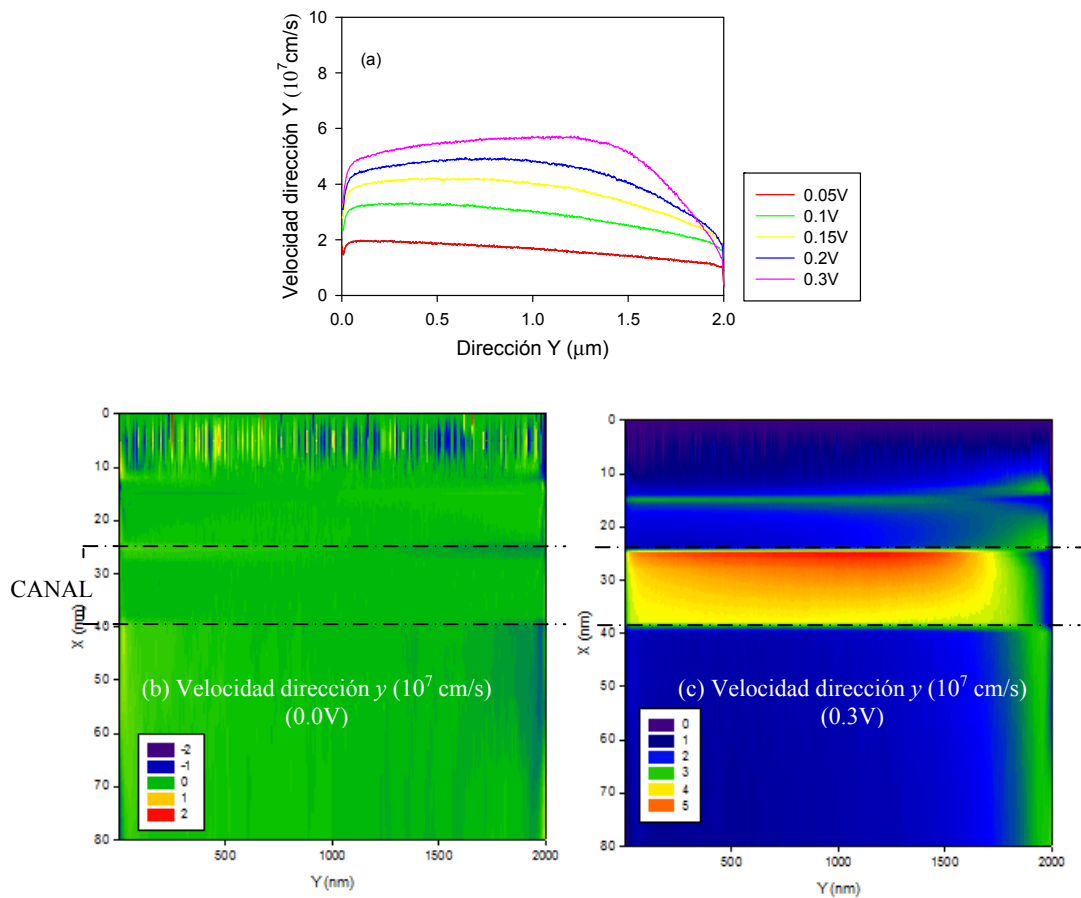
A medida que aumentamos el potencial aplicado [Fig. III.21], la concentración de portadores en el canal disminuye, aumentando tanto en la capa delta como en el *buffer*, y manteniéndose la  $n_s$  total del dispositivo prácticamente constante [Fig. III.22

y III.23]. Esto se debe a que la energía que ganan los electrones en la dirección transversal al movimiento es lo suficientemente grande como para poder saltar la barrera de energía de la heterounión.



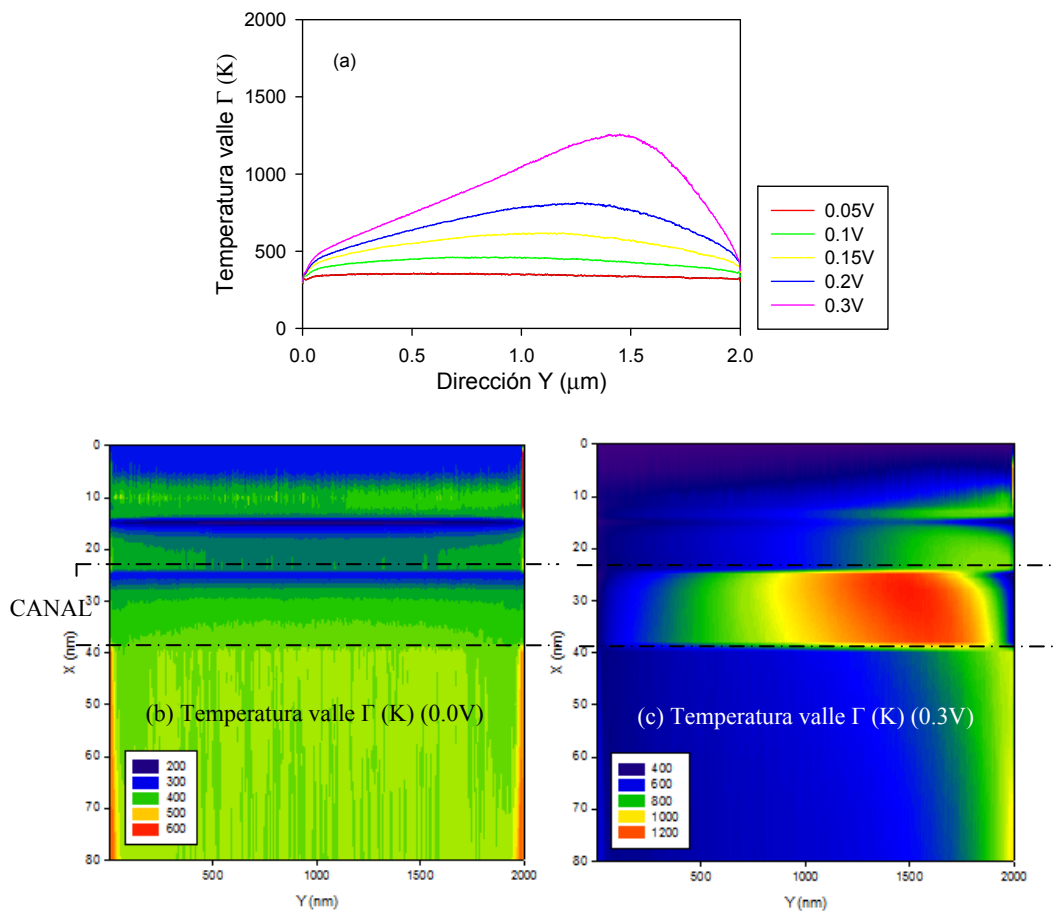
**Figura III.23:** Mapas de la concentración (a) en equilibrio y (b) con 0.3 V aplicados. Todo ello con  $\sigma/e = -4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y una longitud de 2  $\mu\text{m}$ .

En esta heteroestructura los electrones no están perfectamente confinados en el canal, sino que tenemos que considerar dos zonas de carga: el canal y las cercanías a la capa  $\delta$ . En el canal, sobre todo en la parte superior de éste, tanto la velocidad en dirección Y [Fig. III.24] como la energía [Fig. III.26] (y por tanto la temperatura electrónica del valle  $\Gamma$  [Fig. III.25]) toman valores muy elevados al aumentar la tensión aplicada. Los valores de energía y velocidad, aún siendo muy elevados, no llegan a ser tan altos como los encontrados para la heteroestructura estudiada de AlSb/InAs. La diferencia se debe a la altísima concentración de electrones y portadores que teníamos en el canal en la heteroestructura con canal de InAs.

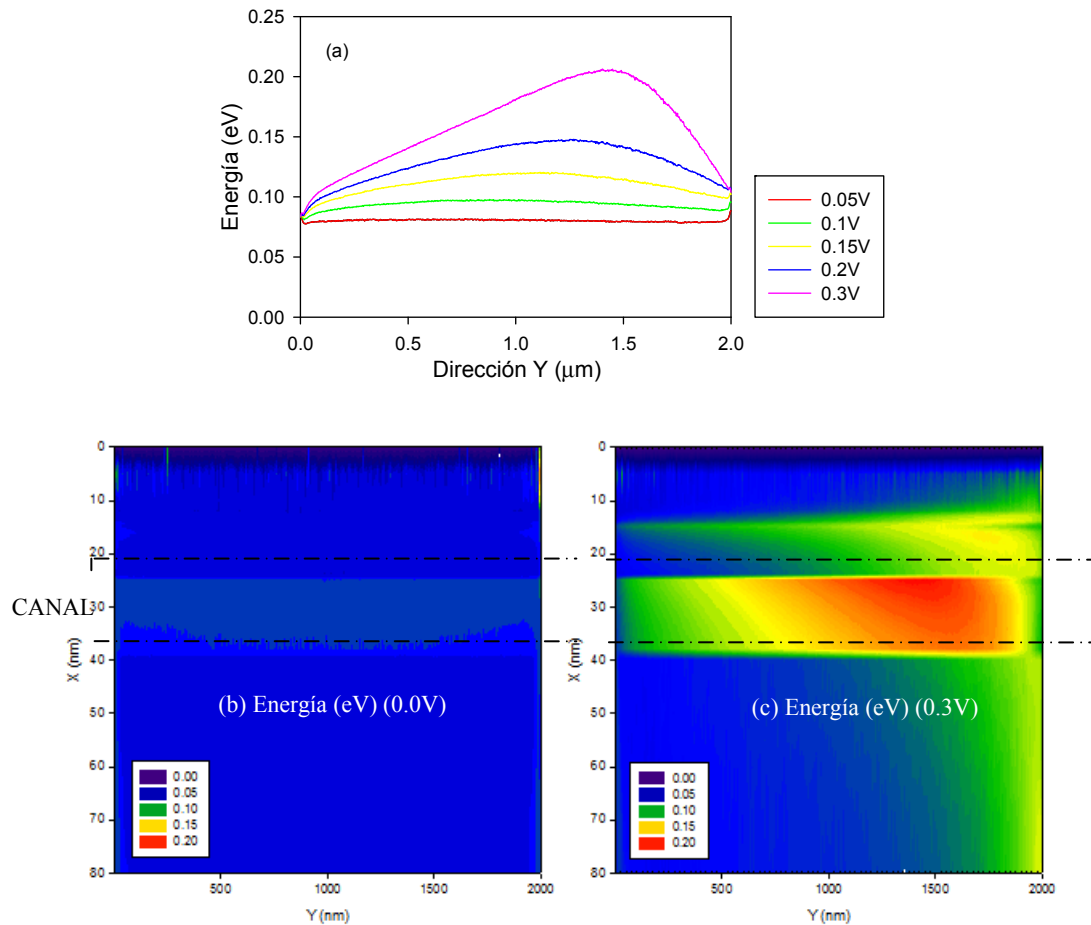


**Figura III.24:** Velocidad de los portadores en la dirección Y: (a) perfil horizontal en la celda superior del canal ( $x=25$  nm) para distintos valores de potencial aplicado entre terminales, (b) mapa para equilibrio y (c) para 0.3 V aplicados.

Por otro lado, los electrones presentes en el  $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}$ , semiconductor que en el capítulo anterior hemos clasificado dentro de lo que pondríamos denominar semiconductor de “electrones lentos”, no alcanzan grandes energías ni velocidades.

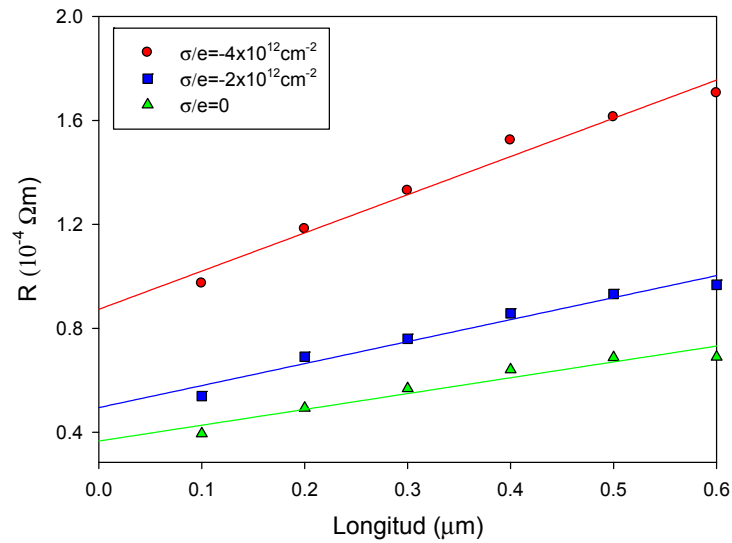


**Figura III.25:** Temperatura en el valle  $\Gamma$ : (a) perfil horizontal en la celda superior del canal ( $x=25$  nm) para distintos valores de potencial aplicado entre terminales, (b) mapa para equilibrio y (c) para 0.3 V aplicados.



**Figura III.26:** (a) Perfil horizontal de energía en la celda superior del canal (en  $x=25$  nm) para diferentes valores de potencial aplicado entre terminales. (b) Mapas de energía para equilibrio y (c) para 0.3 V aplicados.

Continuando con el esquema seguido para la estructura de InAs, calculamos ahora la movilidad de esta nueva estructura. En este caso, la alta movilidad de los electrones del canal se verá disminuida por la escasa movilidad de los electrones presentes en AlInSb. En la figura III.27 puede observarse la resistencia en función de la longitud para los tres valores de densidad superficial que estamos considerando. Ya hemos visto que la pendiente de cada una de estas rectas es lo que llamamos “resistencia cuadrada”,  $R_{\square}$ , y que es inversamente proporcional a la movilidad.



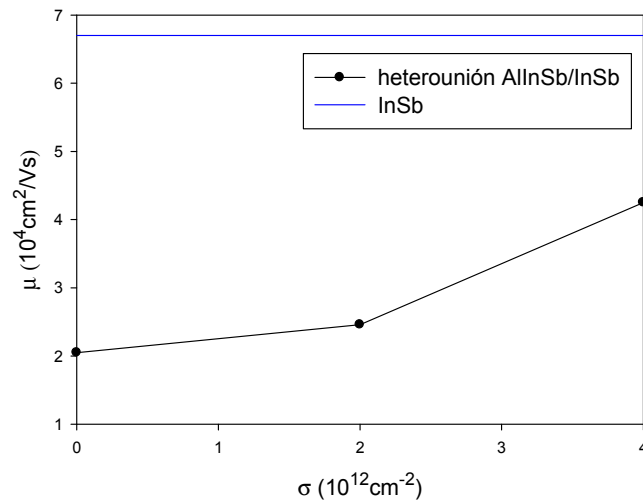
**Figura III.27:** Resistencia en función de la longitud entre terminales del dispositivo para  $\sigma/e=0$ ,  $\sigma/e=-2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

Con estos valores de resistencia en función del campo obtenemos los valores de la movilidad presentados en la tabla III.2.

$\sigma/e$ ( $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ )	$n_s$ canal ( $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ )	% del total	$\mu$ ( $\text{cm}^2 / \text{Vs}$ )
0	0.45	9%	20400
-2	0.44	15%	24500
-4	0.36	36%	42500

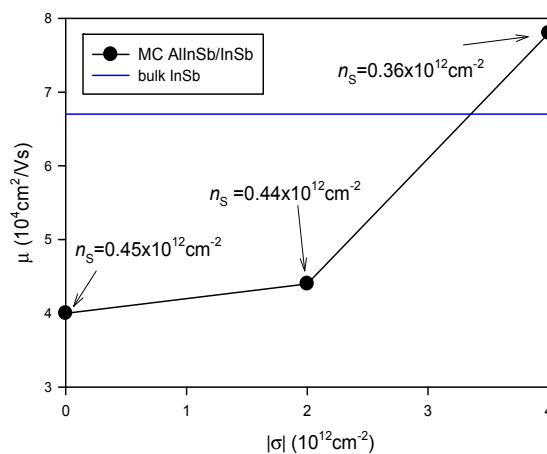
**Tabla III.2:** Movilidad del dispositivo presentado en la figura III.1 con canal de InSb para distintos valores de la carga superficial, y por tanto diferentes valores de la  $n_s$  del canal. En la tabla también se muestra el porcentaje de  $n_s$  total que se encuentra en el canal.

Como vemos en la tabla III.2 la movilidad aumenta al disminuir la  $n_s$  del canal. Esto se debe a que, mientras que para  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  el 64% de los portadores se encuentran en el material de la barrera (semiconductor de electrones lentos), al disminuir el valor de  $\sigma$  este porcentaje aumenta, reduciendo por tanto la movilidad total de la estructura.



**Figura III.28:** Movilidad en función de la densidad carga superficial.

Los valores obtenidos para la movilidad son bastante menores que los del material aislado debido a la gran cantidad de portadores que tenemos en las proximidades de la capa  $\delta$ . Como hemos mencionado, parte de los electrones se mueven por el material de la barrera y estos electrones lentos degradan el valor de la movilidad total de la estructura. Para una correcta comparación de nuestros resultados con medidas Hall experimentales, donde prácticamente sólo se considera la movilidad del canal, hemos calculado la movilidad del canal extrayendo de las simulaciones la corriente que circula por el mismo [Fig. III.29].



**Figura III.29:** Movilidad en el canal en función del valor absoluto de  $\sigma$  en la heteroestructura de  $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}/\text{InSb}$  comparado con la movilidad del InSb. El valor de  $n_s$  está también indicado.

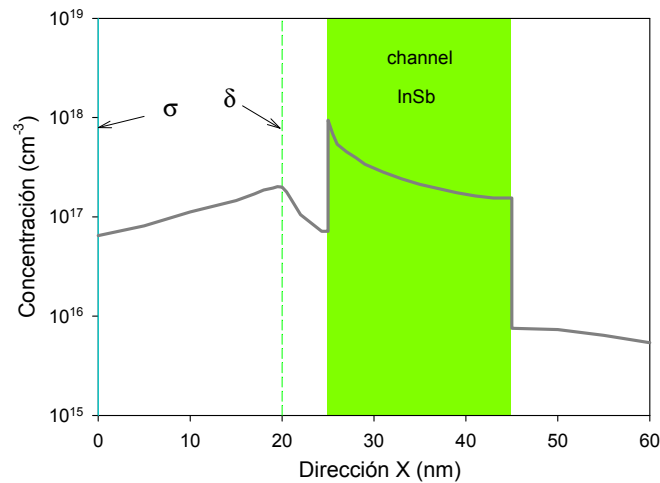
Como vemos [Fig. III.29], la movilidad del canal es menor cuanto mayor es su  $n_s$ . Obtenemos movilidades menores que las del InSb aislado en el caso de  $\sigma/e=0$  y  $-2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Atribuimos esta movilidad tan baja a que nuestro perfil de inyección no es del todo correcto, generando unos lazos de corriente en la cercanía de los contactos importantes sólo para  $L$  pequeñas. Cuando  $\sigma$  toma valores elevados, y, por tanto, tenemos pocos portadores en el canal, estas anomalías cercanas a los contactos son prácticamente inexistentes, dando unos valores para la movilidad cercanos a  $79000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  en el caso de  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , valor que, como era de esperar, supera la movilidad del InSb aislado. El problema de la existencia de estos lazos de corriente cercanos a los contactos en los casos en los que la concentración de electrones en la barrera es elevada carece de relevancia, dado que en la práctica esta heteroestructura ha de ser optimizada para disminuir en la medida de lo posible esta corriente a través la barrera.

### III.3.3. Optimización

En el apartado anterior hemos comparado los resultados de la heteroestructura de InSb con los de la de InAs. Para ello hemos simulado la misma estructura, la de la figura III.1. Para el correcto estudio de la heteroestructura basada en InSb, la estructura ha de ser optimizada minimizando la cantidad de electrones que circulan por el material de la barrera.

Para poder comparar nuestros resultados con alguno de los pocos resultados experimentales expuestos en la literatura sobre heteroestructuras formadas con InSb hemos simulado la de la referencia [Orr *et al.* 2006(b)]. Hemos disminuido la capa  $\delta$  a un valor de  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y la hemos acercado al canal, colocándola a una distancia de 5 nm del canal de 20 nm de InSb. En este caso el valor de la carga superficial que mejor reproduce la  $n_s$  experimental es  $\sigma/e=-0.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .





**Figura III.30:** Perfil de concentración de la heteroestructura de  $A_{10.15}In_{0.85}Sb/InSb$  optimizada obtenido a partir de simulaciones MC.

Si nos fijamos en la concentración de electrones en equilibrio [Fig. III.30], observamos cómo en este caso la mayoría de los electrones se encuentran confinados en el canal (el 63%). La movilidad que encontramos para el canal de esta heteroestructura es de  $76000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . Igual que ocurría en el caso de la heteroestructura de InAs, para reproducir correctamente la movilidad Hall experimental ( $\mu=23800 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ) hemos tenido que introducir el *scattering* asociado a la rugosidad de la heterounión, que en este caso es del 7%. Esto indica que a la hora de fabricar este tipo de heterouniones entre en AlInSb y el InSb la tecnología es aún menos madura que en las de AlSb con InAs.

\* \* \*

En este capítulo hemos observado cómo pese a la mayor movilidad del InSb, la heteroestructura formada por InAs parece una mejor opción a la hora de formar un HEMT debido al elevadísimo nivel de confinamiento de los portadores en el canal que proporciona la heterounión entre el InAs y el AlSb.



## CAPÍTULO IV

### Sb-HEMTs: FABRICACIÓN

La búsqueda de una mayor frecuencia de operación en transistores de electrones de alta movilidad (HEMTs) ha llevado a considerar la utilización de materiales de gap estrecho en el canal como una nueva generación de HEMTs, que denominaremos Sb-HEMTs [Bennett *et al.* 2005]. Una vez analizados los semiconductores y las heteroestructuras que los forman, estudiaremos este tipo de transistores de alta movilidad a partir de los resultados obtenidos mediante simulaciones MC y de los resultados de medidas de dispositivos fabricados.

Gracias al proyecto europeo MC2ACCESS de accesos a grandes instalaciones, pude participar directamente con Giuseppe Moschetti y Per-Åke Nilson en la fabricación de HEMTs de InAs en la sala blanca durante la estancia en la Chalmers University of Technology (Göteborg) con el grupo dirigido por el profesor Jan Grahn. La participación en la fabricación me ha permitido consolidar mis conocimientos del dispositivo así como comprender los problemas que se plantean en la fabricación proporcionándome una visión más amplia a la hora de simular y optimizar este tipo de HEMTs.

#### IV.1 ESTRUCTURA EPITAXIAL DEL Sb-HEMT

La estructura epitaxial utilizada para la fabricación de los Sb-HEMTs se ha crecido usando un *buffer* metamórfico sobre un sustrato de InP mediante *molecular beam epitaxy* en el Institut d'Electronique de Microélectronique et de

Nanotechnologie (I.E.M.N), en Lille. La estructura epitaxial se presenta en la Tabla IV.1.

Capa	Material	Grosor
Cap layer	InAs:Si	5nm/5x10 <sup>18</sup> cm <sup>-3</sup>
Capa de protección	In <sub>0.5</sub> Al <sub>0.5</sub> As	4nm
Capa Schottky	AlSb	10nm
Doping layer	InAs	2 mono-capas
δ-doping	Si	4.5x10 <sup>12</sup> cm <sup>-2</sup>
Doping layer	InAs	2 mono-capas
Spacer	AlSb	5nm
Canal	InAs	15nm
Buffer del HEMT r	AlSb	50nm
Buffer Metamórfico	Al <sub>0.8</sub> Ga <sub>0.2</sub> Sb	250nm
	AlSb	750nm
	In <sub>0.5</sub> Al <sub>0.5</sub> As	100nm
Substrato	InP semi-insulating	

**Tabla VI.1:** Estructura epitaxial.

La estructura a partir de la cual se fabricarán los HEMTs se ha crecido sobre un sustrato semi-aislante de InP. Sobre el sustrato se crecen inicialmente 750 nm de *buffer* metamórfico de AlSb seguidos de 250 nm que acomodan el *lattice mismatch* entre el sustrato de InP y la región activa. Esta capa de Al<sub>0.8</sub>Ga<sub>0.2</sub>Sb proporciona una mesa químicamente estable, protegiendo el AlSb de su rápida oxidación en contacto con el aire. La parte activa de la estructura epitaxial comienza con un *buffer* de AlSb de 50 nm tras el que se crece el canal de InAs de 15 nm de espesor. Tras 5 nm de *spacer* (espaciador) de AlSb se coloca la capa  $\delta$ , formada por un plano de Si en medio de cuatro capas monoatómicas de InAs. Esto es debido a que el Si colocado directamente sobre el AlSb actúa como impureza aceptadora [Bennett *et al.* 2005], lo que daría lugar a transistores de tipo p. A continuación tenemos 10 nm de capa Schottky de AlSb. Sobre esta capa Schottky se crece una capa de In<sub>0.5</sub>Al<sub>0.5</sub>As de

4 nm de grosor que servirá de protección [Borg *et al.* 2008, Lefevre *et al.* 2009]. Esta capa tiene dos finalidades: proteger el AlSb que forma la capa Schottky de la posible oxidación durante el grabado del *recess*, y servir de barrera para que los huecos procedentes de la ionización por impacto en el canal de InAs no puedan alcanzar la puerta, disminuyendo de este modo la corriente de puerta. Para terminar tenemos un *cap* de 5 nm de InAs con un dopaje de  $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  de silicio.

Con el fin de comprobar la calidad de la estructura epitaxial fabricada se tomaron medidas Hall de la muestra. Estas medidas Hall serán de vital importancia en las simulaciones del capítulo siguiente, dado que es la  $n_s$  Hall la que nos permite fijar la densidad de carga superficial que aparece encima del *cap*. Los valores medidos en el I.E.M.N. en muestras de 5 mm x 5 mm a 300 K dan como resultado una densidad Hall de electrones de  $2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y una movilidad Hall de  $21.600 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ .

## IV.2 FABRICACIÓN DEL DISPOSITIVO

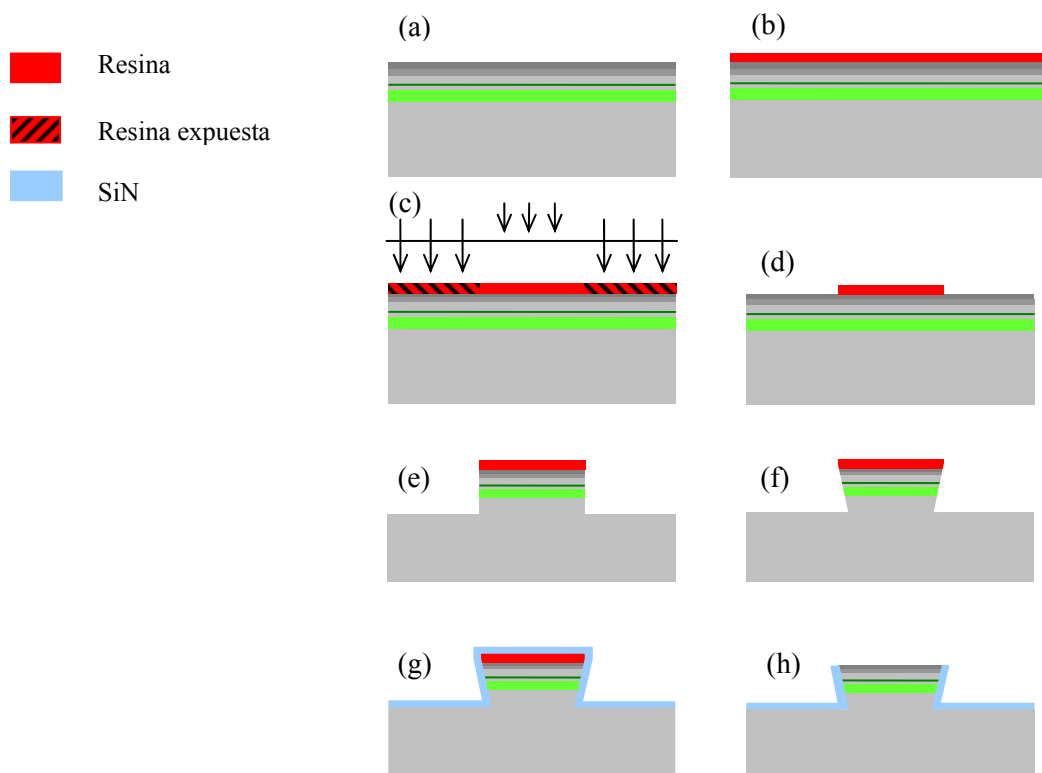
A continuación detallaremos el proceso de fabricación de los Sb-HEMTs realizado en Chalmers por el grupo dirigido por el profesor Jan Grahn [Borg *et al.* 2008, Lefevre *et al.* 2009, Malmkvis *et al.* 2008]. Las figuras se han realizado para clarificar el proceso, y por eso han de ser consideradas no como una imagen real, sino como un esquema. La mayoría de los dispositivos fabricados son *multi-finger*, es decir, están formados por varios dispositivos en paralelo (normalmente dos). Para simplificar, en nuestros dibujos esquemáticos consideraremos un solo dispositivo.

El proceso de fabricación se puede dividir en cuatro etapas: el aislamiento de la mesa, la fabricación de los contactos óhmicos, la definición y evaporación de la puerta y la fabricación de los *pads*.

- Aislamiento de la mesa:

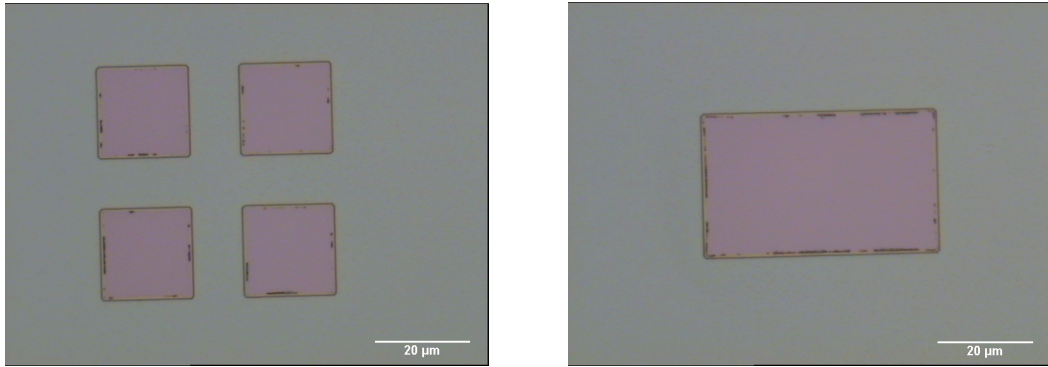
El primer paso es aislar las partes activas que darán lugar a los distintos dispositivos, quedando así los futuros transistores aislados los unos de los otros. Partimos del *wafer* con canal de InAs proporcionado por el I.E.M.N. ya comentado en el apartado anterior [Fig. IV.1(a)]. El aislamiento de la mesa se hace mediante fotolitografía. Primero se coloca una resina fotosensible sobre el *cap* [Fig. IV.1(b)] y se distribuye uniformemente colocando la muestra en el *spinner* (plato giratorio). A

continuación se alinea el *wafers* con la primera de las máscaras de fotolitografía que vamos a usar. Esta máscara permite exponer toda la resina menos las partes que darán lugar a la mesa [Fig. IV.1(c)]. Mediante un proceso de revelado se elimina la resina expuesta a la luz [Fig. IV.1(d)]. A continuación hacemos un grabado seco para eliminar la parte activa de la estructura de capas que se localiza fuera de la mesa [Fig. IV.1(e)]. El posterior grabado con una solución 1:1 de ácido cítrico y  $H_2O_2$  nos permite grabar la parte lateral de la mesa, evitando así el posible contacto posterior entre la puerta y el canal [Fig. IV.1(f)]. Una vez aislada la mesa, sólo falta la pasivación. Pasivamos toda la muestra [Fig. IV.1(g)] con SiN mediante la máquina de *sputtering*. Finalmente suprimimos el SiN de la parte superior del *cap* eliminando la resina que quedaba; para ello usamos ultrasonidos y a continuación acetona [Fig. IV.1(h)].



**Figura IV.1:** Proceso de aislamiento de la mesa.

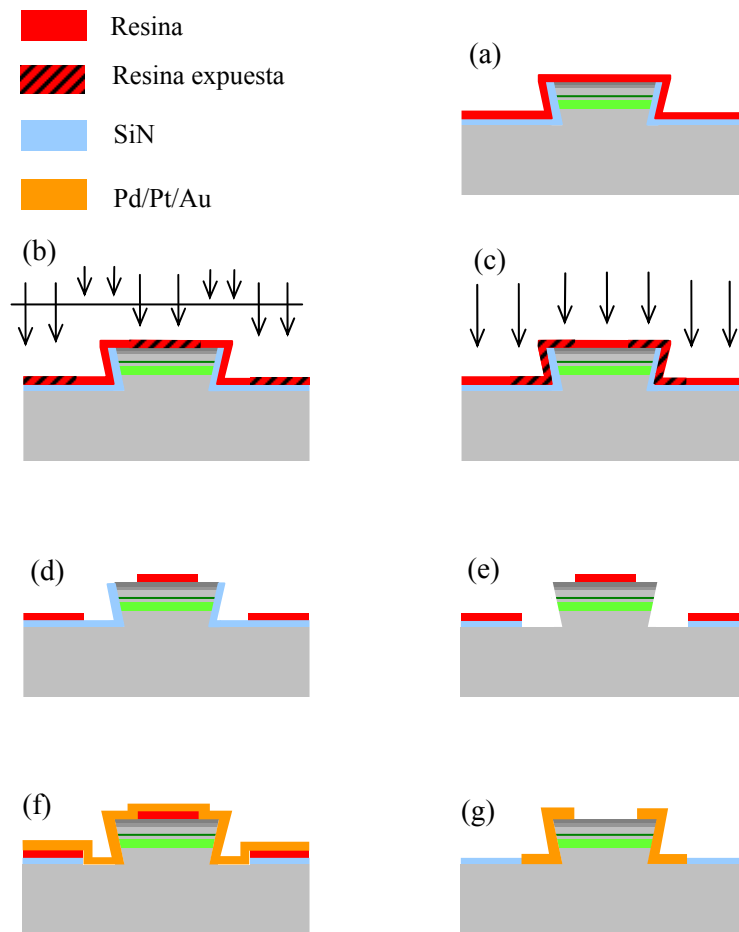
En la figura IV.2 se muestran unas imágenes tomadas durante el proceso de fabricación y una vez definidas las mesas de nuestro *wafers*.



**Figura VI.2:** Imágenes de la fabricación: la mesa una vez definida y aislada.

- Contactos óhmicos

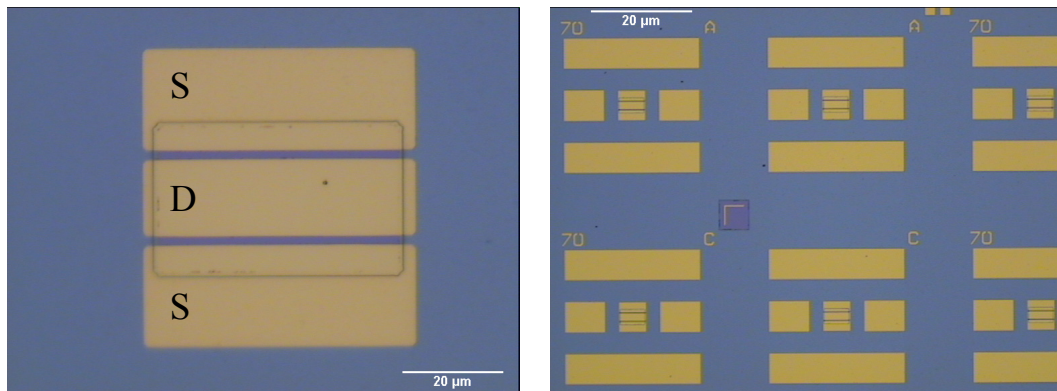
Una vez aislada la mesa, el paso siguiente consiste en establecer los contactos óhmicos. Por ello, en primer lugar colocamos una resina sobre toda la muestra [Fig. IV.3(a)] y la distribuimos homogéneamente con el *spinner*. Definiremos los contactos mediante fotolitografía inversa, es decir, alineamos la muestra y una máscara que nos permite exponer todo menos la futura localización de los contactos. Exponemos a la luz [Fig. IV.3(b)], calentamos y exponemos toda la muestra [Fig. IV.3(c)]. De esta forma invertimos la fotolitografía. Mediante una técnica de revelado eliminamos la resina de la zona que dará lugar a los contactos [Fig. IV.3(d)]. Hacemos un grabado seco para quitar el SiN que no se encuentra debajo de la resina [Fig. IV.3(e)]. A continuación procedemos a hacer una limpieza de la muestra con un grabado de O<sub>2</sub> y a eliminar el óxido que se haya podido formar en la superficie en la que estará la interfaz entre el metal de los contactos y la mesa. En el evaporador depositamos el metal de los contactos, Pd/Pt/Au (100 Å/200 Å /600 Å) [Fig. IV.3(f)]. Sumergimos la muestra en acetona para eliminar la resina no expuesta, con lo que se elimina el metal de las partes que no serán contactos óhmicos [Fig. IV.3(g)]. Por último sólo nos falta realizar el recocido de los contactos, es decir, calentar la muestra para hacer penetrar el metal en el interior de la heteroestructura y de esta forma acceder al canal.



**Figura IV.3:** Proceso de fabricación de los contactos óhmicos.

En la figura IV.4 se muestran dos imágenes. En la primera vemos un dispositivo con dos puertas. En él se puede apreciar tanto la mesa como los contactos óhmicos (las dos fuentes y el drenador de ambos HEMTs en el medio). En la segunda imagen se ven varios dispositivos de la muestra. En este caso también se puede apreciar el área donde posteriormente se depositarán los *pads* (accesos coplanares).

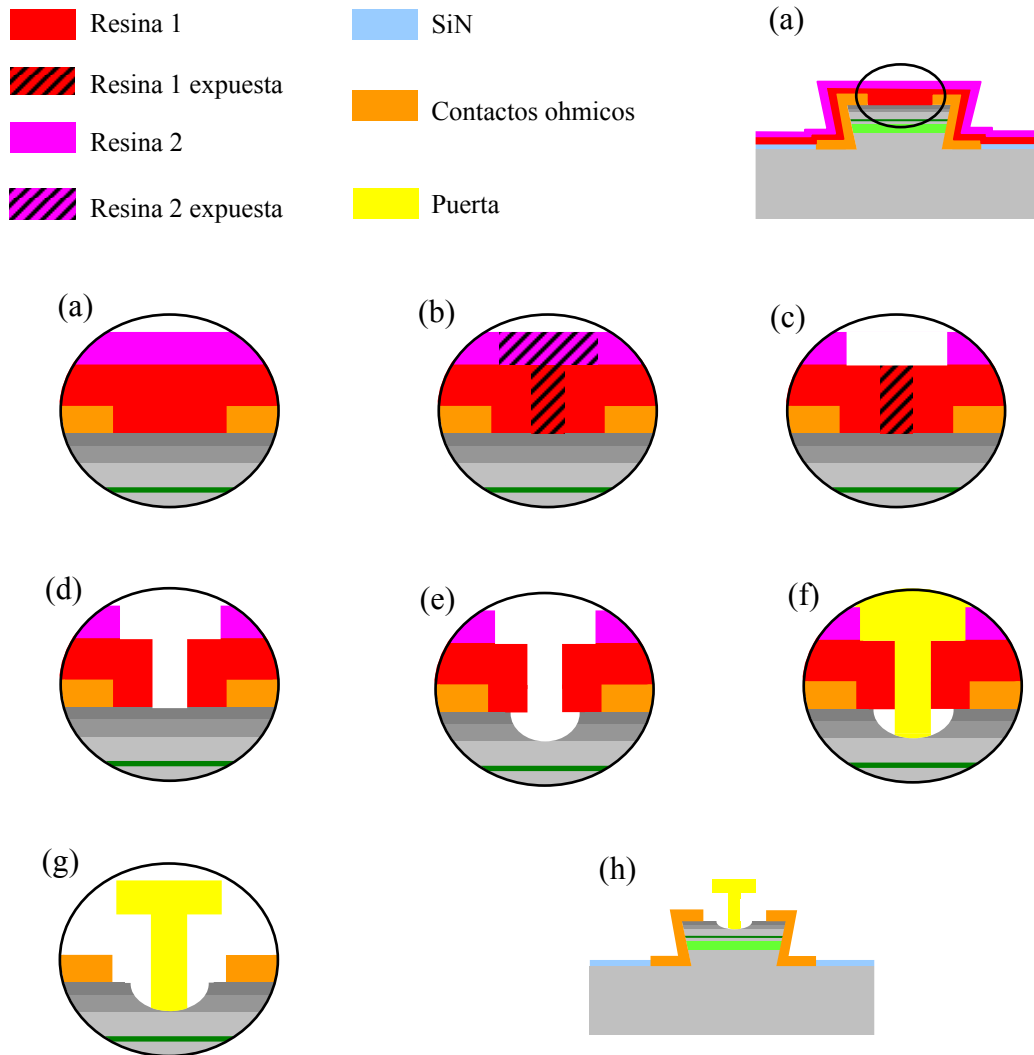




**Figura IV.4:** Imágenes de la fabricación una vez evaporados los contactos óhmicos.

○ Fabricación de la puerta:

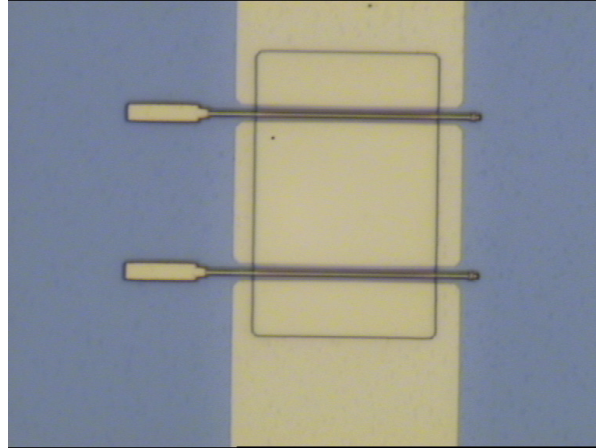
Una vez definidos y evaporados los contactos óhmicos, el siguiente paso es definir la puerta. La perfecta alineación de la puerta con los contactos óhmicos es decisiva para el correcto funcionamiento del transistor. La puerta se define mediante el uso de tres capas de resinas: dos de polimetilmetacrilato (PMMA) separadas por una de copolímero (en el dibujo, por simplicidad, hemos omitido la intermedia de copolímero) [Fig. IV.5(a)]. Una vez depositadas las diferentes resinas, se define la puerta mediante litografía de haz de electrones [Fig. IV.5(b)]. Mediante dos revelados diferentes, suprimimos primero la parte expuesta de la resina exterior [Fig. IV.5(c)] y después la de la interior [Fig. IV.5(d)]. Tras cada uno de los procesos de revelado hacemos una limpieza de la muestra con un grabador de plasma de  $O_2$ . Posteriormente, con una disolución de HCl eliminamos las posibles oxidaciones de la superficie. El grabado del *recess* se realiza con una disolución de ácido cítrico en agua, siendo éste un grabado isótropo que penetra lateralmente. Un elemento importante en la fabricación es que se ha prescindido de la eliminación de los posibles óxidos formados tras el grabado del *recess*, con el fin de favorecer la aparición de una capa de óxido nativo en la parte superior del AlSb. La importancia y consecuencias de la aparición de este óxido nativo serán estudiadas con detalle en el capítulo siguiente. Posteriormente, los metales de la puerta, Ti/Pt/Au (200 Å/ 60 Å /3200 Å), son evaporados [Fig. IV.5(e)]. Para finalizar nos queda eliminar las resinas no expuestas con acetona [Fig. IV.5(f)].



**Figura IV.5:** Esquema del proceso de fabricación de la puerta.

La tanda de dispositivos que se fabricó durante la estancia en Chalmers sufrió un inesperado proceso de oxidación, haciendo que se perdieran las puertas de todos los transistores al eliminar con acetona las resinas no expuestas (cuando lo que se pretendía teóricamente era eliminar sólo el metal depositado fuera de lo que sería la puerta). La oxidación de la muestra se atribuyó a posibles irregularidades en los tamaños de las capas en la estructura epitaxial, dado que los dispositivos fueron fabricados en un trozo de oblea que pertenecía al borde de la misma. En la figura IV.6 tenemos una imagen de uno de los dispositivos fabricados posteriormente sobre otro trozo de oblea diferente por Giuseppe Moschetti siguiendo la misma técnica de

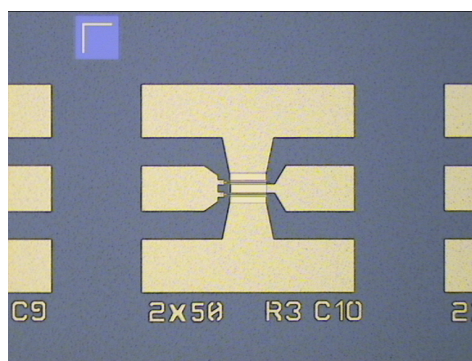
fabricación recogida en esta memoria. En la imagen se puede apreciar la mesa, los contactos óhmicos y las dos puertas, definidas correctamente en esta ocasión.



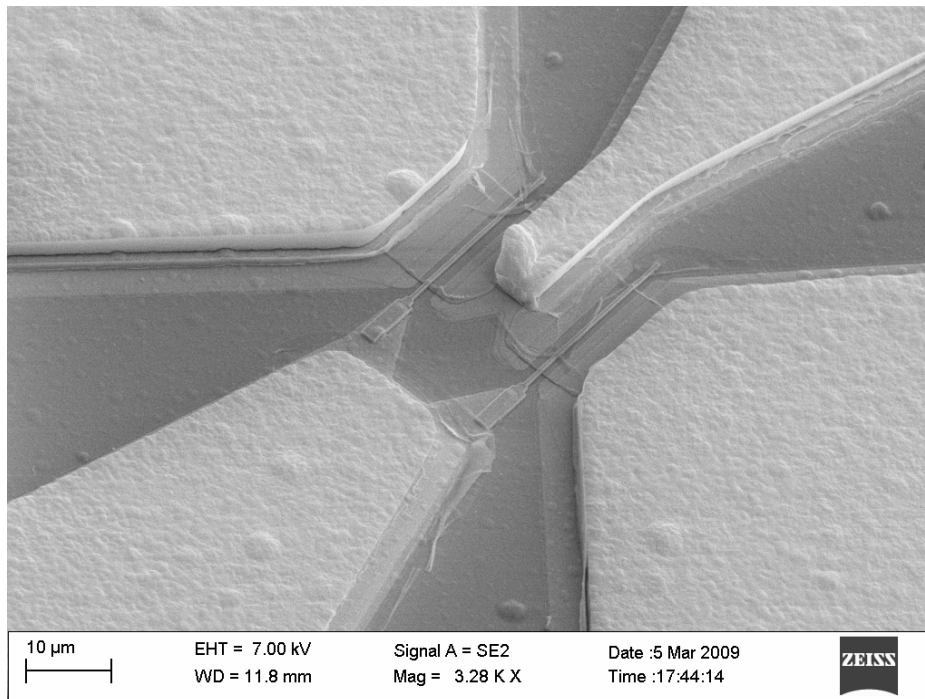
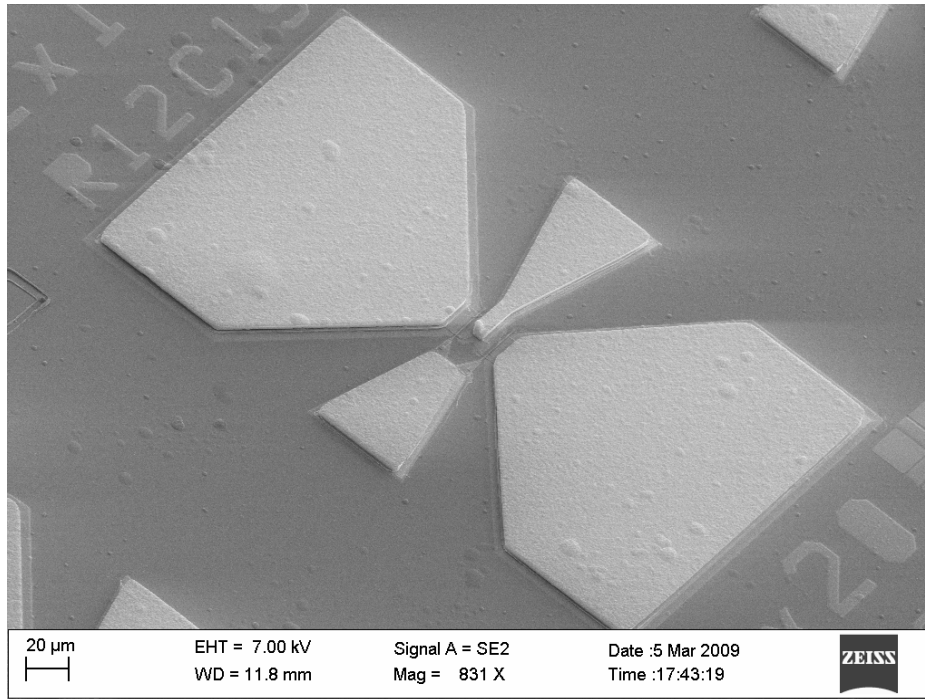
**Figura IV.6:** Imágenes del dispositivo una vez evaporadas las puertas.

○ Fabricación de los Pads:

Para terminar la fabricación de los dispositivos únicamente falta ya la definición mediante fotolitografía y la posterior metalización de los *pads* (contactos sobre los que se colocan las puntas a la hora de tomar medidas). Con el *sputtering* depositamos primero una fina capa de Ti (100 Å) que garantiza el buen contacto con los contactos óhmicos, y a continuación otra de Au, que será el metal fundamental de los *pads* (3000 Å). Una vez hecho esto, despegamos con acetona la resina sobrante, lo que permite eliminar el metal de donde no hay contacto. En las figuras IV.7 y IV.8 se muestran algunas imágenes de los dispositivos una vez terminado el proceso de fabricación.

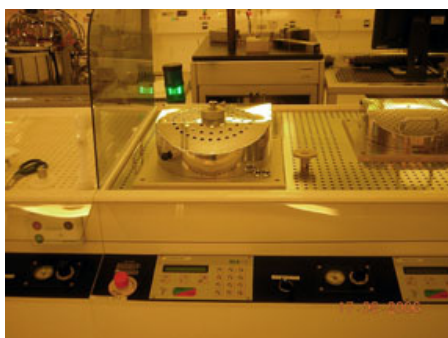


**Figura IV.7:** Imagen del dispositivo una vez depositado el metal de los *pads*.

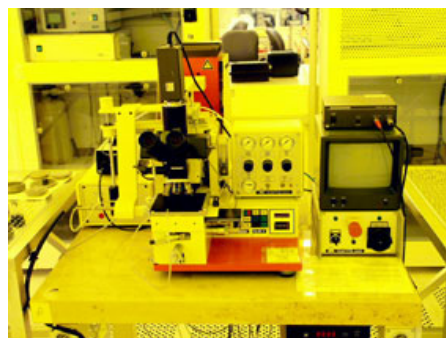


**Figura IV.8:** Imágenes del dispositivo una vez terminado el proceso de fabricación.

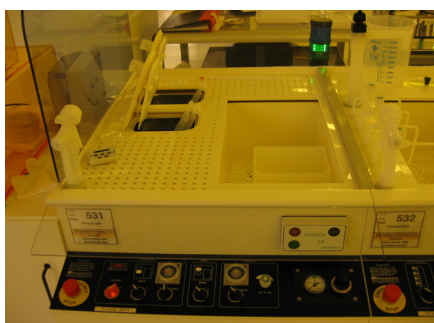
En la figura IV.9 mostramos algunos de los aparatos utilizados para la fabricación de los Sb-HEMTs.



*Spinner*



Alineador de máscaras



Banco de revelado



*Sputtering*



Grabador de plasma de O<sub>2</sub>



Grabador de plasma



Evaporador



Grabador de haz de electrones

**Figura IV.9:** Aparatos utilizados en el proceso de fabricación.



\* \* \*

En este capítulo se han recogido los puntos principales llevados a cabo en la Chalmers University of Thechnology por el grupo del Prf. Jan Grahn para la fabricación de los HEMTs basados en InAs/AlSb.

## CAPÍTULO V

### **Sb-HEMTs: SIMULACIÓN**

Hemos comenzado esta memoria estudiando el comportamiento de los portadores en el interior de los semiconductores aislados en cuyas heterouniones están basados los HEMTs con canal de gap estrecho. Posteriormente hemos explicado cómo se comportan los electrones al encontrarse inmersos en las heteroestructuras formadas con estos semiconductores como paso previo al estudio del comportamiento de los portadores en los HEMTs propiamente dichos. En este capítulo estudiaremos las características de los HEMTs con canal de InAs y barrera de AlSb (Sb-HEMTs) a través de los resultados obtenidos por medio de la simulación MC [Rodilla *et al.* 2010a, Rodilla *et al.* 2010b], validando nuestro modelo mediante la comparación con las medidas experimentales realizadas en la Chalmers University of Technology (Göteborg, Suecia). Los resultados experimentales con los que hemos establecido la comparación son los obtenidos por el grupo del Prof. Jan Grahn en HEMTs cuyas características y fabricación ya explicamos en detalle en el capítulo anterior.

#### **V.1 VALIDEZ DEL SIMULADOR: COMPARACIÓN CON RESULTADOS EXPERIMENTALES**

Lo primero que haremos será validar el correcto funcionamiento de nuestro simulador MC comparando los resultados obtenidos con los experimentales. Por ese motivo el dispositivo simulado será lo más similar posible al Sb-HEMT de puerta aislada fabricado, cuyo proceso de elaboración presentamos en el capítulo anterior [Malmkvist *et al.* 2008].

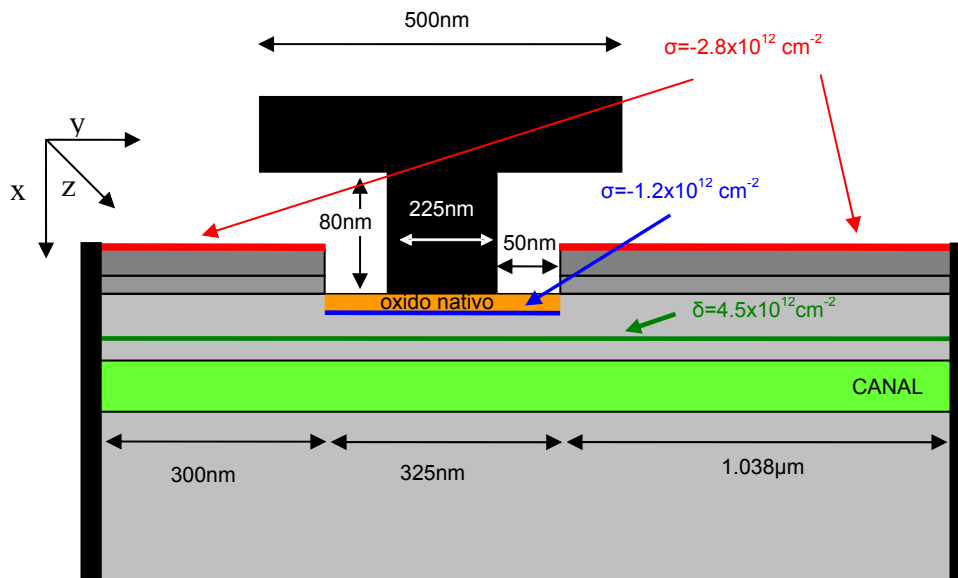
En la figura V.1 se presenta un esquema del dispositivo simulado. Se trata de un HEMT de 225 nm de longitud de puerta basado en la estructura epitaxial descrita en la tabla IV.1. Los parámetros de simulación, tanto del InAs como del AlSb, fueron enumerados en el capítulo II [Tablas II.1 y II.3 respectivamente]. Para el InAlAs (apéndice A) los parámetros se han obtenido a partir de la interpolación lineal de los del InAs y los del AlAs. El estudio previo de la heteroestructura formada por el InAs y el AlSb [Cap. III] nos ha llevado a considerar un 2% de interacciones difusivas con la superficie en las dos heterouniones formadas entre estos dos semiconductores. La distancia real fabricada entre fuente y drenador es de 2.4  $\mu\text{m}$ . En nuestro caso hemos reducido la distancia entre la fuente y el *recess* de aproximadamente 1.0  $\mu\text{m}$  a 300 nm con el fin de disminuir el número de partículas simuladas. Esta región óhmica de la fuente que hemos suprimido será posteriormente introducida como una resistencia extrínseca [Mateos *et al.* 2000a]. El *recess*, con una anchura de 50 nm a cada lado de la puerta, tiene una profundidad de 9 nm, llegando a la capa de AlSb.

Igual que hicimos en el capítulo III para la simulación de las heteroestructuras, fijamos la densidad de carga superficial negativa en la parte superior del *cap* de forma que sea la necesaria para alcanzar los valores de la  $n_s$  Hall de la estructura epitaxial medida experimentalmente. El valor para  $n_s$  medido en el IEMN para la estructura epitaxial con la que se fabricaron los transistores es de  $2.1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  [Malmkvist *et al.* 2008], con lo que  $\sigma/e$  toma un valor de valor de  $-2.8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  [Mateos *et al.* 2003]. En el caso de la región del *recess* la densidad superficial de carga no tiene el mismo valor que la que hemos fijado para el *cap*, sino que esta última se ve modificada tanto por la presencia de las cargas asociadas al óxido (recordemos que en nuestro dispositivo hay una capa de óxido nativo bajo la puerta), como por el proceso de fabricación del *recess*. Dado que desconocemos el valor de esta densidad de carga superficial del *recess* por no haber medidas Hall de la estructura con *recess*, por el momento tomaremos un valor de  $-1.2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  para la carga superficial en esta interfaz entre el semiconductor y el óxido en esta región.

Como vimos en el capítulo anterior, durante el proceso de fabricación se ha favorecido la aparición de un óxido nativo bajo la puerta. La oxidación del AlSb es un proceso complejo [Shibata *et al.* 1994], en el que no es fácil saber exactamente el tipo de óxido que se forma ni su grosor. Por el momento, en nuestras simulaciones



consideramos 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 (correspondiente al hidróxido de Al), dado que con estos valores obtenemos un acuerdo razonable con las medidas experimentales. Más adelante veremos la justificación de esta elección y sus consecuencias.

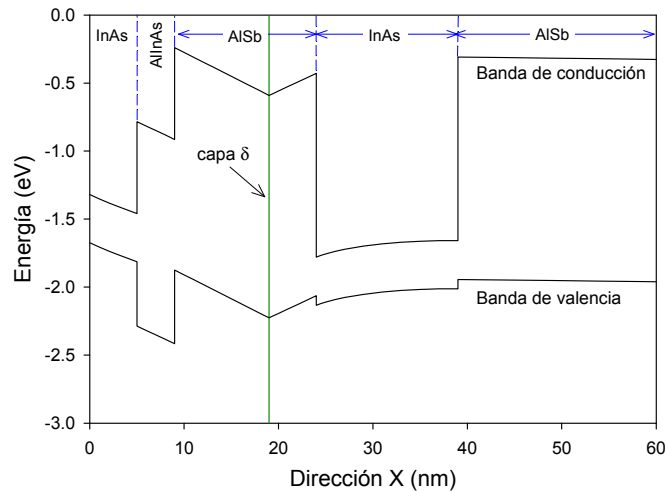


**Figura V.1:** Esquema del dispositivo simulado.

Dado que en nuestras simulaciones colocamos los contactos de forma vertical a los lados del dispositivo (Cap. I), lo primero que debemos hacer es calcular el que posteriormente será el perfil de inyección de los contactos laterales (capítulo I.3.4). El perfil de inyección se obtiene a partir de la simulación en equilibrio de la estructura epitaxial que dará lugar al dispositivo. Por tratarse de una heteroestructura basada en heterouniones AlSb/InAs, el perfil de inyección ha de ser calculado, como ya explicamos en detalle en el capítulo I, mediante una técnica de refinados sucesivos y excluyendo la inyección en el material de la barrera (AlSb). De esta forma agilizamos el proceso de termalización de los electrones.

A continuación analizaremos los resultados obtenidos para la simulación de la heteroestructura en equilibrio una vez realizado el sucesivo refinado de los perfiles. La estructura de bandas de esta heteroestructura [Fig. V.2] pone de manifiesto el gran salto en la banda de conducción entre el InAs y el AlSb, que favorece el

confinamiento de los electrones en el canal. No sucede lo mismo con los huecos, que, como vemos, no quedan confinados en el canal, sino que parte de ellos irá a parar a *buffer* y parte se desplazará en dirección a la puerta.

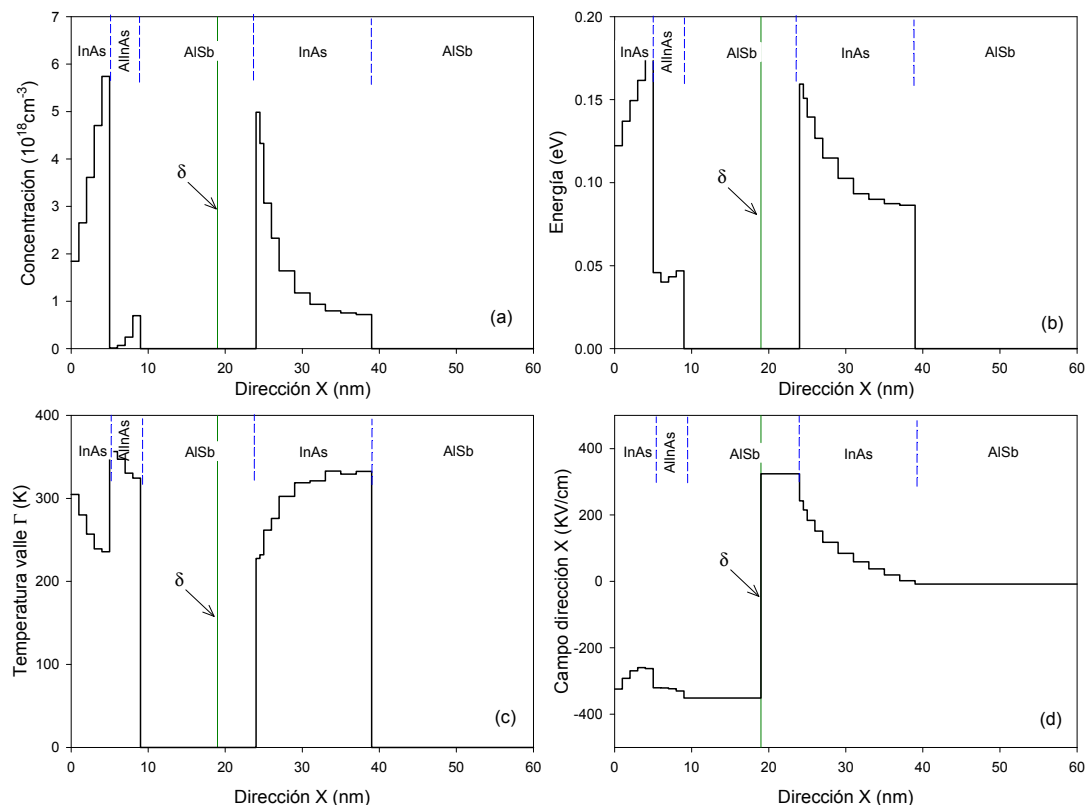


**Figura V.2:** Bandas de valencia y conducción de la estructura epitaxial en equilibrio.

El buen confinamiento de los electrones en el canal, debido al enorme salto en la banda de conducción (1.35 eV) de las heterouniones AlSb/InAs divide la concentración de electrones en equilibrio en dos regiones de carga: la del canal, donde los electrones permanecerán confinados hasta campos muy elevados, y la zona del *cap*, en la que algunos electrones adquieren la energía necesaria para pasar al AlInAs, Fig. V.3(a). En la figura V.3(d) observamos cómo la carga positiva de la capa  $\delta$  atrae tanto a los electrones del canal como a los que se encuentran en el *cap*, mientras que la carga superficial negativa repele a los electrones del *cap*. Esto genera altas concentraciones de electrones en la parte superior del canal y en la inferior del *cap*.

De la misma forma que sucedía en el capítulo III con los perfiles de energía en equilibrio en la heteroestructura de AlSb/InAs, y pese a los refinados sucesivos, los valores que obtenemos para la energía, tanto en el *cap* como en el canal, son mayores que el valor  $3/2K_B T$  que cabría esperar, Fig. V.3(b). Eso es debido, como ya hemos explicado, a la degeneración causada por el elevado nivel de concentración de electrones en estas dos zonas de carga.

La técnica de refinados sucesivos consigue que la temperatura en el equilibrio tome valores razonables, Fig. V.3(c), pero esa temperatura sigue siendo ligeramente superior a los 300 K, sobre todo en los lugares en los que la densidad de portadores es mayor. Dado que esos valores obtenidos para la temperatura son aceptables, y que este calentamiento de los electrones carecerá de importancia en cuanto apliquemos tensión entre terminales, seguiremos trabajando con una simulación semiclásica, usando la técnica de rechazo para tener en cuenta el principio de exclusión de Pauli (a pesar de que los resultados no son perfectamente exactos).



**Figura V.3:** Perfiles de (a) concentración, (b) energía, (c) temperatura electrónica del valle  $\Gamma$  y (d) campo eléctrico en la dirección X.

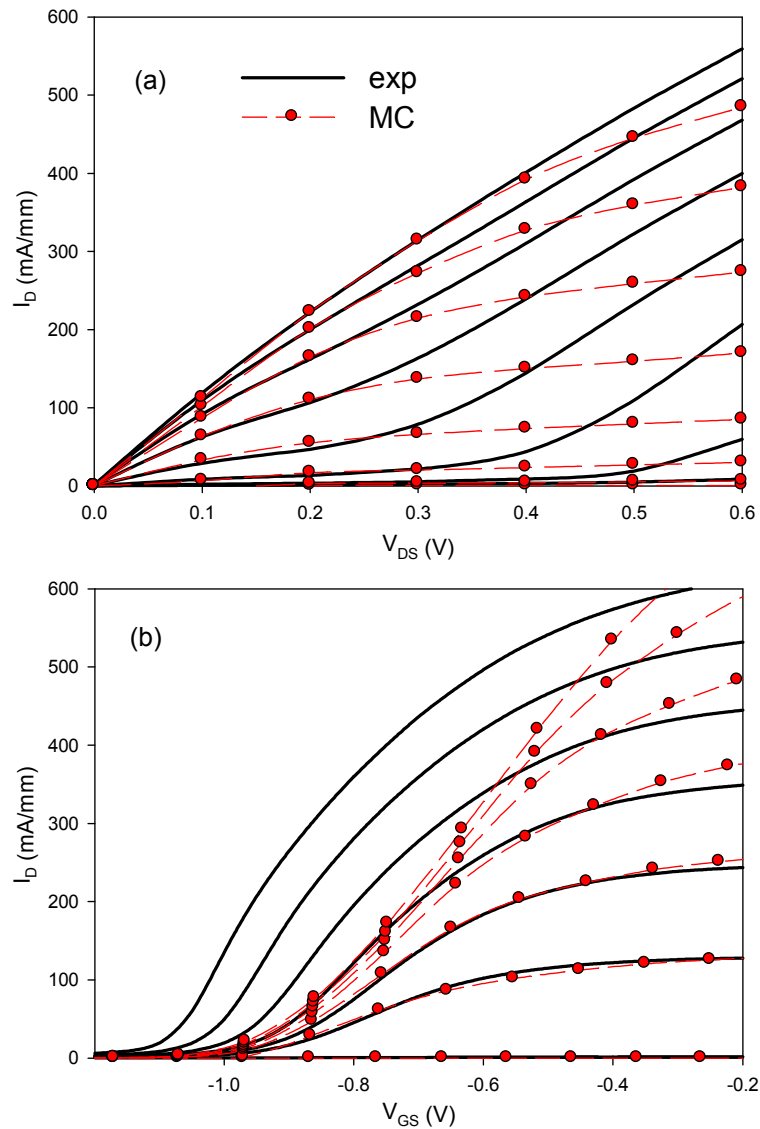
Una vez estudiado el comportamiento de la heteroestructura en equilibrio, o lo que es lo mismo, una vez obtenido el perfil de inyección del transistor, pasamos a estudiar el comportamiento del dispositivo bajo polarización.

### V.1.1. Características estáticas

El primer paso a la hora de estudiar el comportamiento de un dispositivo es la determinación de sus características estáticas, que nos darán una idea de su funcionamiento y de lo que sucede en su interior.

En la Fig. V.4 comparamos los resultados estáticos obtenidos mediante la simulación MC (símbolos) con los experimentales medidos en Chalmers (línea negra). Por el momento la ionización por impacto no ha sido considerada en nuestras simulaciones

Con el fin de comparar los resultados MC intrínsecos con los resultados extrínsecos de las simulaciones tenemos que hacer dos consideraciones. La *primera* es incluir los elementos parásitos que no se consideran en la simulación, o lo que es lo mismo, las resistencias de los contactos de fuente y drenador,  $R_S$  y  $R_D$ , que se han ajustado a los valores de  $0.13 \Omega \text{ mm}$  y  $0.38 \Omega \text{ mm}$  respectivamente. Estos valores de las resistencias de los contactos son del orden de los encontrados experimentalmente ( $R_S=0.22 \Omega \text{ mm}$  y  $R_D=0.39 \Omega \text{ mm}$ ) (recordemos que en nuestra simulación hemos disminuido la distancia entre fuente y *recess*, por lo que parte de esta  $R_S$  sería la asociada a la consideración de esta parte óhmica). La *segunda* es el desplazamiento en  $V_{GS}$ ,  $\Delta V_{GS}$ , que hay que introducir debido a la presencia de carga superficial en la parte superior del *recess* por la aparición de cargas asociadas al óxido. En el caso de HEMTs clásicos de puerta Schottky  $\Delta V_{GS}$  está asociado a la barrera metal-semiconductor. Por el momento hemos tomado un valor de  $-1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  para la densidad de carga superficial que colocamos en la interfaz entre el semiconductor y el óxido,  $\sigma_{recess}$ . Más adelante veremos que la variación de este valor únicamente introduce un desplazamiento en  $V_{GS}$ . Por esta razón, introducir el desplazamiento necesario en  $V_{GS}$  para reproducir los resultados experimentales es equivalente a modificar la carga con el fin de que se ajuste al valor experimental. En el caso simulado ese desplazamiento es  $\Delta V_{GS}=0.03 \text{ V}$ .



**Figura V.4:** (a)  $I_D$  en función de de  $V_{DS}$  para  $V_{GS}$  entre -0.45 v y -1.15 V en pasos de 0.1 V. (b)  $I_D$  en función de de  $V_{GS}$  para  $V_{DS}$  entre 0.1 v y 0.6 V en pasos de 0.1 V. Comparación entre los valores experimentales (líneas continuas negras) y los obtenidos de la simulación MC (líneas discontinuas y círculos rojos).

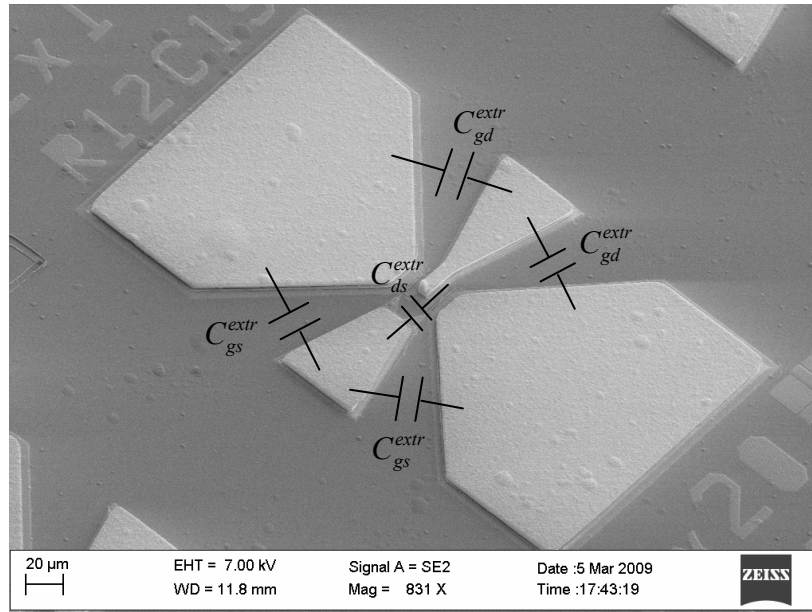
Una vez introducidas estas dos consideraciones, se observa que el ajuste con los resultados experimentales es muy bueno para valores de  $V_{DS}$  menores de 0.3 V [Fig. V.4], donde la ionización por impacto no es importante. Por el momento nos mantendremos en  $V_{DS}$  menores que 0.3 V por razones de simplicidad y para analizar el comportamiento dinámico, dado que las propiedades de bajo ruido y alta frecuencia mejoran para voltajes de drenador bajos. Para  $V_{DS}$  mayores de 0.3 V aparece un remarcado kink en los resultados experimentales, Fig. V.4(a), a

consecuencia de la ionización por impacto y los huecos que ésta genera. Este efecto será estudiado en el capítulo VI.

### **V.1.2. Características dinámicas**

Una vez reproducidas las características estáticas del dispositivo, el siguiente paso en el estudio del comportamiento de un transistor es el análisis de su respuesta dinámica a señales de pequeña amplitud variables en el tiempo. Como ya explicamos en el capítulo I, hemos realizado este análisis a partir de los parámetros admitancia obtenidos del estudio de la modificación de la corriente entre terminales al aplicar un salto en el voltaje de puerta y de drenador [Cap. I.3]. Una vez determinados los parámetros admitancia, y con el fin de eliminar la dependencia en frecuencia de los parámetros dinámicos, calculamos de forma directa a partir de ellos los parámetros del circuito equivalente (en principio independientes de la frecuencia). Para este estudio hicimos uso del circuito equivalente comúnmente utilizado en este tipo de transistores [Fig. V.5]. En las simulaciones solamente hemos tenido en cuenta el comportamiento intrínseco del dispositivo, por lo que nos quedaremos con la parte intrínseca del circuito equivalente (interior del rectángulo azul).



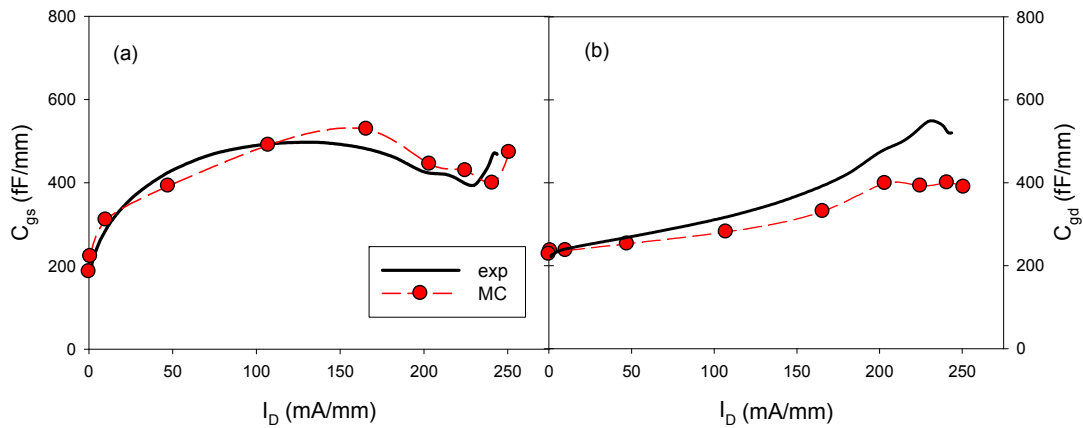


**Figura V.6:** Dibujo de las capacidades geométricas  $C^{extr}$  sobre una imagen del dispositivo fabricado.

Los valores de estas capacidades, que se han obtenido ajustando los resultados experimentales y los MC a corriente cero, situación en la que influye solamente la parte geométrica de las capacidades, son  $C_{ds}^{ext} = 122$  fF/mm,  $C_{gd}^{ext} = 123$  fF/mm,  $C_{gs}^{ext} = 7.8$  fF/mm. Para el cálculo de todos los circuitos equivalentes de este capítulo fijaremos a partir de este momento  $V_{DS} = 0.2$  V, voltaje donde presumiblemente el comportamiento dinámico de este dispositivo es óptimo [Malmkvist *et al.* 2008] y donde además podemos ignorar la ionización por impacto, lo que simplifica mucho el proceso de obtención del circuito equivalente [Vasallo *et al.* 2005].

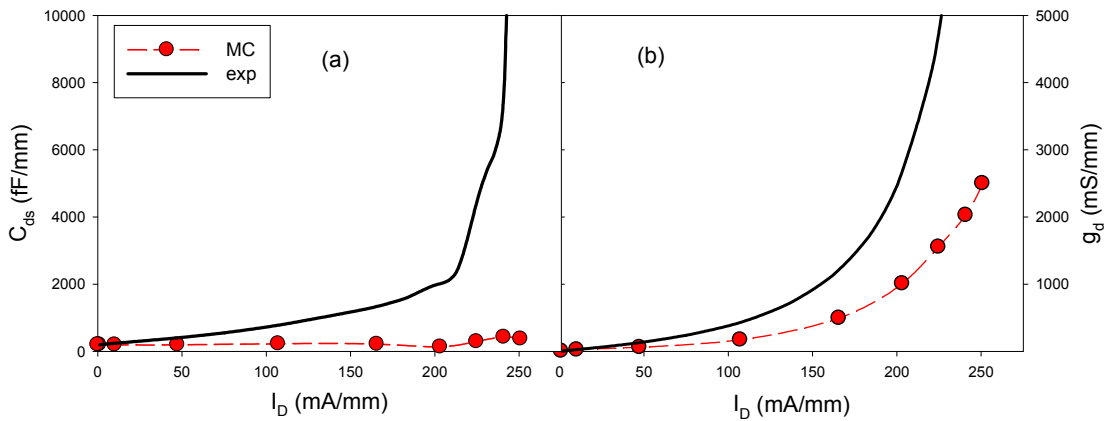
En la figura V.7 observamos un acuerdo razonable entre los resultados experimentales y MC, tanto para  $C_{gs}$  como para  $C_{gd}$ .



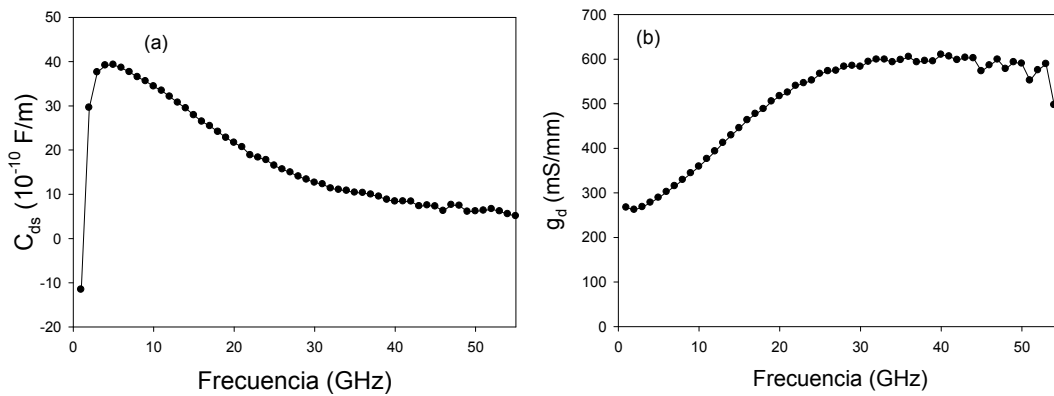


**Figura V.7:** Comparación de los resultados experimentales (línea continua negra) y MC (línea roja discontinua con círculos) de (a)  $C_{gs}$  y (b)  $C_{gd}$  en función de  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2$  V.

En el caso de  $C_{ds}$  y  $g_d$  encontramos una gran discrepancia entre los resultados obtenidos a partir de las simulaciones y los resultados experimentales [Fig. V.8]. Esta discordancia la asociamos a la dispersión en frecuencia observada en los resultados experimentales. En las figuras V.9(a) y (b) mostramos la dependencia con la frecuencia de  $C_{ds}$  y  $g_d$  experimentales que se encuentra típicamente en la extracción del circuito equivalente en este tipo de dispositivos. La dependencia en frecuencia de estas dos magnitudes la achacamos a la aparición de huecos en el *buffer* debida a la ionización por impacto. Pese a que para 0.2 V la ionización por impacto debería tener una influencia mínima, es probable que ya para este voltaje de drenador tan pequeño aparezcan algunos huecos. Como veremos en el capítulo VI, estos huecos se acumulan en el *buffer* y podrían ser los responsables de la dependencia con la frecuencia encontrada experimentalmente para  $C_{ds}$  y  $g_d$ , ya que ambos parámetros están principalmente relacionados con el acoplamiento drenador-fuente a través del *buffer*.



**Figura V.8:** Comparación de los resultados obtenidos de la simulación (línea discontinua roja con círculos) y los experimentales (línea continua negra): (a)  $C_{ds}$  y (b)  $g_d$  en función de  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2$  V.

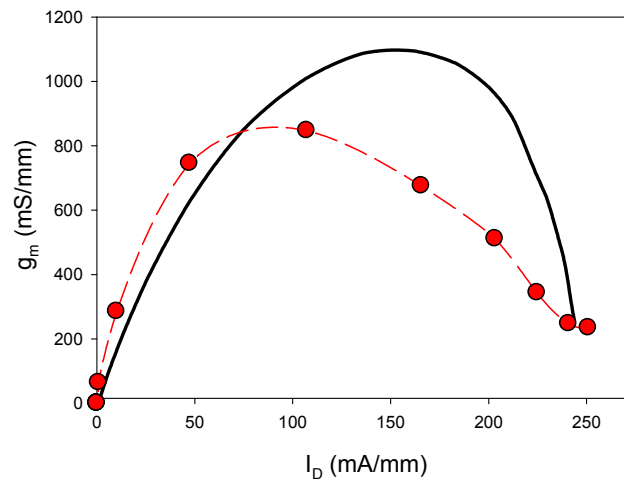


**Figura V.9:** Dependencia experimental con la frecuencia de (a)  $C_{ds}$  y (b)  $g_d$  para  $V_{DS}=0.3$  V y  $V_{GS}=-0.8$  V.

Pese al buen ajuste encontrado para la transconductancia extrínseca estática, que se puede estimar por el buen acuerdo de las características I-V [Fig. V.4], en el caso de la intrínseca, calculada a partir del circuito equivalente, encontramos un valor máximo menor que el encontrado experimentalmente y desplazado hacia menores valores de corriente de drenador [Fig. V.10]. La explicación la encontramos en la fórmula que relaciona la  $g_m$  extrínseca y la intrínseca,

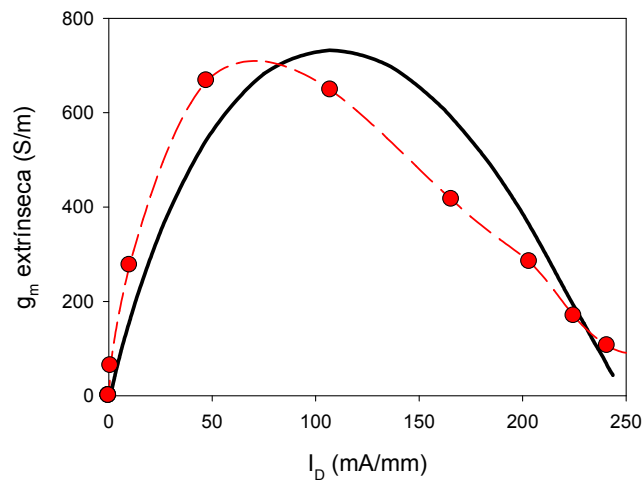
$$g_m^{extr} = \frac{g_m^{intr}}{(1 + g_m^{intr} R_S)[1 + g_d^{intr} (R_S + R_d)]}. \quad (V.1)$$

Las discrepancias encontradas en  $g_d$  hacen que los resultados de la simulación no se ajusten a los experimentales en el caso intrínseco, pese al buen ajuste que habíamos encontrado extrínsecamente.



**Figura V.10:** Comparación de los resultados obtenidos de la simulación (línea discontinua roja con círculos) y los experimentales (línea continua negra) para  $g_m$  en función de  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2$  V.

En la figura V.11 comparamos las transconductancias extrínsecas experimental y MC, calculadas a partir de las correspondientes  $g_m$  y  $g_d$  intrínsecas, utilizando la ecuación V.1. Como vemos, el menor valor del máximo de la  $g_m$  intrínseca encontrada en los resultados MC en comparación a los experimentales viene marcado por las discrepancias encontradas en  $g_d$ , ya que los valores extrínsecos muestran un buen acuerdo en cuanto al valor del máximo. El desplazamiento del máximo hacia corrientes de drenador menores que en el caso experimental lo seguimos viendo también en el caso intrínseco. Hablaremos de la posible causa de este desplazamiento más adelante en esta memoria.



**Figura V.11:**  $g_m$  extrínseca calculada a partir de la  $g_m$  intrínseca y la  $g_d$  intrínseca con la ec. V.1 en función de  $I_D$ . Comparación de los resultados obtenidos de la simulación (línea discontinua roja con círculos) y los experimentales (línea continua negra) para  $V_{DS}=0.2$  V.

## V.2 Sb-HEMTs DE PUERTA AISLADA FRENTE A Sb-HEMTs DE PUERTA SCHOTTKY.

Hasta el momento hemos considerado un transistor de puerta aislada (PA) en el que se ha hecho penetrar el *recess* hasta el AISb con el fin de favorecer la aparición del óxido bajo la puerta de forma que se minimice la corriente de puerta. Una vez justificada la utilización de nuestro simulador para analizar de forma correcta este tipo de transistores al haber encontrado un buen ajuste con los resultados experimentales para voltajes de drenador menores de 0.3 V, estudiaremos las consecuencias que implica el aislamiento de la puerta frente a los HEMTs convencionales de puerta Schottky (PS). Para sistematizar este estudio hemos simulado y comparado intrínsecamente diferentes tipos de transistores con el fin de examinar cómo se ven modificadas las características tanto estáticas como dinámicas del dispositivo por los distintos parámetros que diferencian un HEMT de PS de uno de PA:

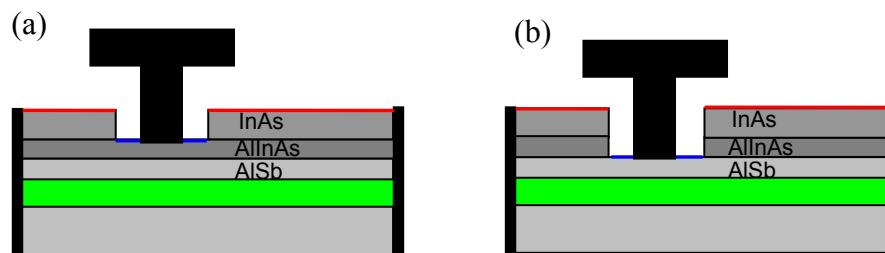
- 1) la profundidad de grabado del *recess* hasta el AISb,
- 2) la presencia del óxido nativo, así como su grosor y la constante dieléctrica del mismo y

- 3) el valor considerado en la simulación para la carga superficial en el fondo del *recess* (asociado tanto al proceso de fabricación del dispositivo como a la aparición de cargas en el óxido).

### V.2.1. Influencia de la profundidad del *recess*

Típicamente, en los Sb-HEMTs de PS el *recess* llega hasta la capa de AlInAs, sirviendo ésta tanto de protección para el AlSb frente a la oxidación como de barrera para los huecos con el fin de minimizar la corriente de puerta. En el caso de los HEMTs de PA la profundidad del *recess* se ha incrementado hasta llegar al AlSb (9 nm en total). En este apartado veremos cómo influye ese aumento en la profundidad del *recess*, sin considerar aún la existencia del óxido.

Consideraremos y compararemos dos casos dentro de los HEMTs de PS: el primero con un *recess* de 5 nm de profundidad, Fig. V.12(a), y el segundo con un *recess* de 9 nm, Fig. V.12(b). Las dimensiones simuladas, así como las características de la estructura epitaxial y las cargas superficiales del *cap* y del *recess* seguirán siendo las indicadas en la figura V.1.

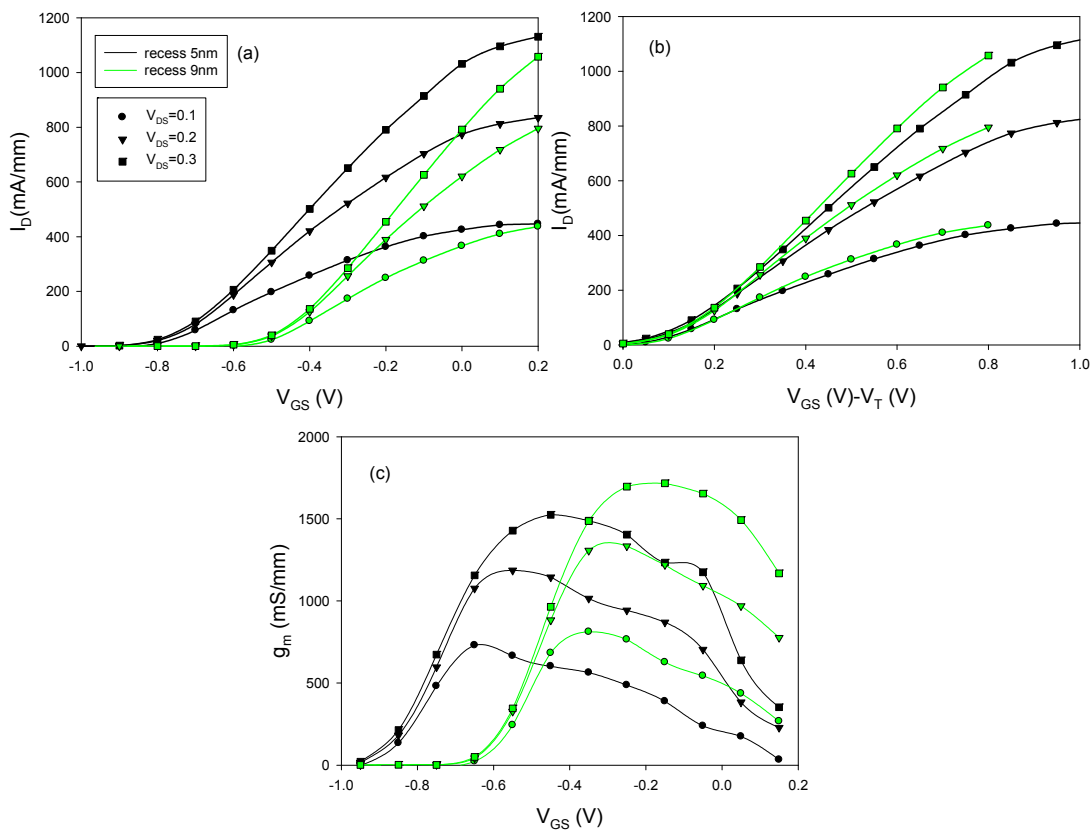


**Figura V.12:** Esquemas los HEMTs de puerta Schottky simulados, donde se pueden apreciar las dos profundidades de *recess* consideradas: (a) 5 nm y (b) 9 nm.

En esta comparación intrínseca no hemos considerado el  $\Delta V_{GS}$  que habría que aplicar a las simulaciones por la barrera Schottky. En caso de querer comparar estos resultados con resultados experimentales, estudio que no se podrá hacerse en esta memoria por carecer de estos últimos, esta barrera Schottky debería ser tenida en

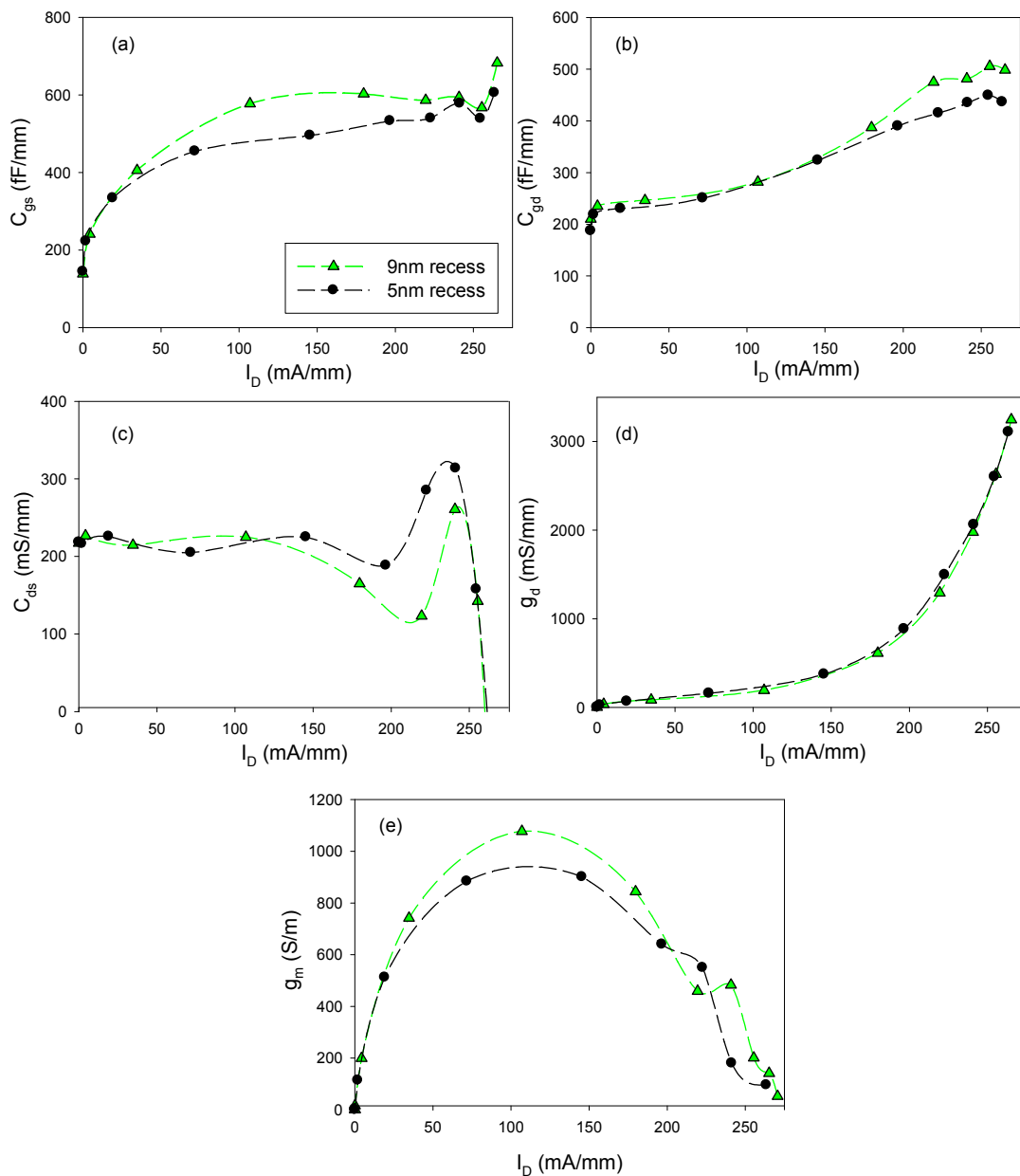
cuenta advirtiéndose que sería diferente en uno y otro caso debido a que en el primer caso la puerta reposa sobre AlInAs y en el segundo sobre AlSb.

Comparando los resultados estáticos intrínsecos obtenidos de la simulación de estos dos casos observamos, como es lógico, cómo a consecuencia del aumento de la profundidad del *recess* el vaciamiento del canal se produce para tensiones de puerta menos negativas, Fig. V.13(a). En este caso el desplazamiento que se produce en la tensión umbral,  $V_T$ , es de 0.25 V. Si representamos los resultados obtenidos en forma  $V_{GS}-V_T$  con el fin de poder comparar estos resultados de forma cómoda, observamos que el aumento de la profundidad del *recess* aumenta la corriente de drenador, Fig. V.13(b), y por tanto  $g_m$ , Fig. V.13(c).



**Figura V.13:** Comparación de los resultados MC intrínsecos de Sb-HEMTs de puerta Schottky con *recess* de 5 nm de profundidad (líneas y símbolos negros) y de 9 nm (líneas y símbolos verdes) para  $V_D=0.1$  V (círculos), 0.2 V (triángulos) y 0.3 V (cuadrados). (a)  $I_D$  frente a  $V_{GS}$  (b)  $I_D$  frente a  $V_{GS}-V_T$  y (c)  $g_m$  en función de  $V_{GS}$ .

Tras el estudio del comportamiento estático, mostraremos qué consecuencias tiene el aumento de la profundidad del *recess* en el circuito equivalente. El aumento de la profundidad del *recess* trae consigo un pequeño aumento, lógico debido a un mayor acercamiento de la puerta al canal, en las capacidades  $C_{gs}$  y  $C_{gd}$ , así como el apreciable aumento en  $g_m$  que ya vimos en estática. Por otro lado, como cabría esperar, el valor de  $g_d$  prácticamente no se ve afectado por la profundidad del *recess*.



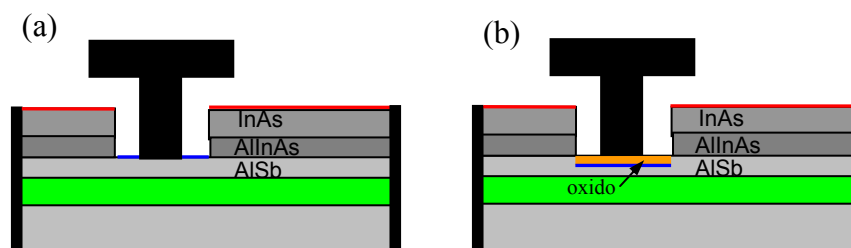
**Figura V.14:** Comparación de los resultados MC de (a)  $C_{gs}$ , (b)  $C_{gd}$ , (c)  $C_{ds}$ , (d)  $g_d$  y (e)  $g_m$  en función de  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2$  V para dos Sb-HEMTs de PS con dos profundidades de *recess*: 5 nm (líneas y círculos negros) y 9 nm (líneas y triángulos verdes).

### V.2.2. Influencia de la presencia del óxido

Un aspecto interesante a la hora de hacer un estudio completo de este tipo de dispositivos es ver cómo afecta la presencia del óxido nativo bajo la puerta que surge por la oxidación del AlSb en contacto con el aire durante el proceso de fabricación. La presencia de este óxido bajo la puerta modifica enormemente la corriente de puerta; recordemos que ese era el motivo por el que se ha favorecido la aparición de este óxido. Nosotros no podemos calcular la corriente de puerta con nuestro simulador dado que no consideramos efecto túnel, por lo que nos centraremos en estudiar las modificaciones que trae consigo la presencia de este óxido tanto en la corriente de drenador como en los parámetros del circuito equivalente.

Como ya hemos mencionado, la oxidación del AlSb es un proceso complejo donde no es fácil determinar ni el tipo de óxido que se forma, ni su grosor, ni la dirección de avance del mismo [Shibata *et al.* 1994].

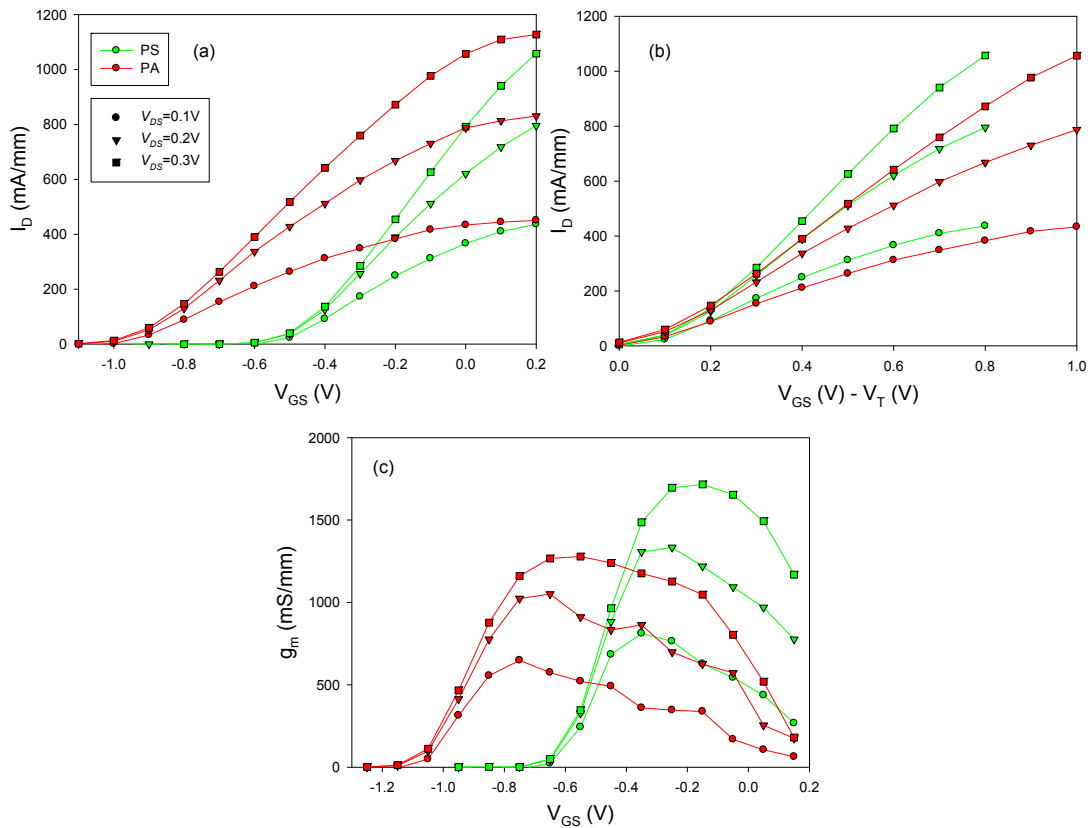
Comenzamos este apartado viendo las consecuencias que tiene la aparición del óxido bajo la puerta en las características intrínsecas del dispositivo. Para ello hemos considerado dos estructuras, ambas con un *recess* de 9 nm de profundidad: la primera, que ya hemos visto en el apartado anterior con puerta Schottky (PS), y la segunda con la puerta aislada (PA) por un óxido que por el momento consideraremos de 2 nm de grosor hacia el interior del AlSb y constante dieléctrica de 2.2 [Fig. V.15] (mismo caso que el considerado en el apartado V.1 de este mismo capítulo para realizar la comparación con los resultados experimentales). Más adelante en este mismo apartado justificaremos la elección de este tipo de óxido, así como su grosor y la dirección de avance de la oxidación.



**Figura V.15:** Esquemas de los dos casos considerados (a) de puerta Schottky y (b) de puerta aislada por 2 nm de óxido nativo de constante dieléctrica 2.2.



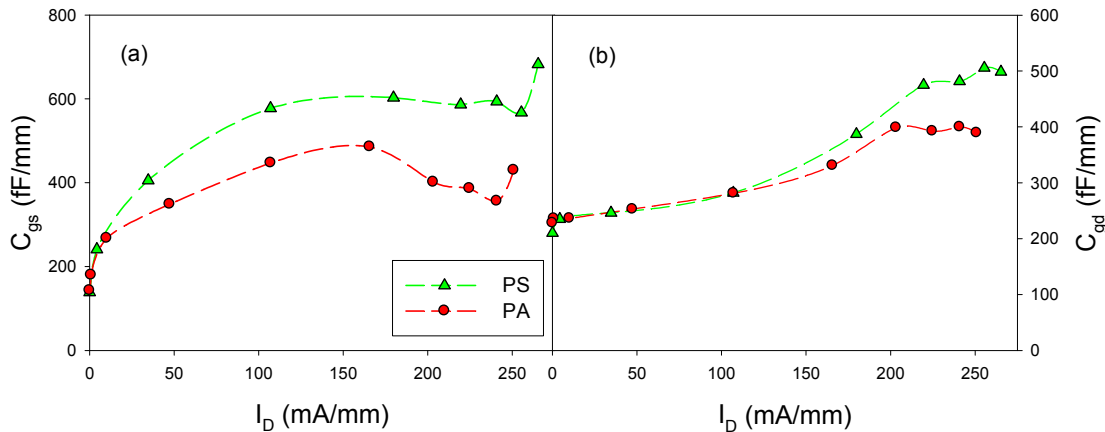
Cómo vemos en la figura V.16, la presencia del óxido produce un desplazamiento en la tensión umbral de 0.4 V, dado que el óxido actúa como dieléctrico de baja permitividad entre el metal de la puerta y el semiconductor. Estos resultados son totalmente intrínsecos, y no hemos tenido en cuenta ni la barrera Schottky en el caso del transistor de puerta Schottky, ni el efecto de la carga superficial en el fondo del *recess*. Más adelante en este mismo capítulo veremos cómo afectan estas posibles variaciones en las cargas bajo el *recess*. Observamos cómo la presencia del óxido disminuye el control de la puerta sobre en canal, disminuyendo  $g_m$  de forma considerable, Fig. V.16(c).



**Figura V.16:** Comparación de resultados MC intrínsecos con *recess* de 9 nm, sin óxido (verde) y con óxido (rojo) para  $V_D=0.1$  V (círculos), 0.2 V (triángulos) y 0.3 V (cuadrados). (a)  $I_D$  frente a  $V_{GS}$  (b)  $I_D$  en función de a  $V_{GS}-V_T$  y (c)  $g_m$  en función de  $V_{GS}$ .

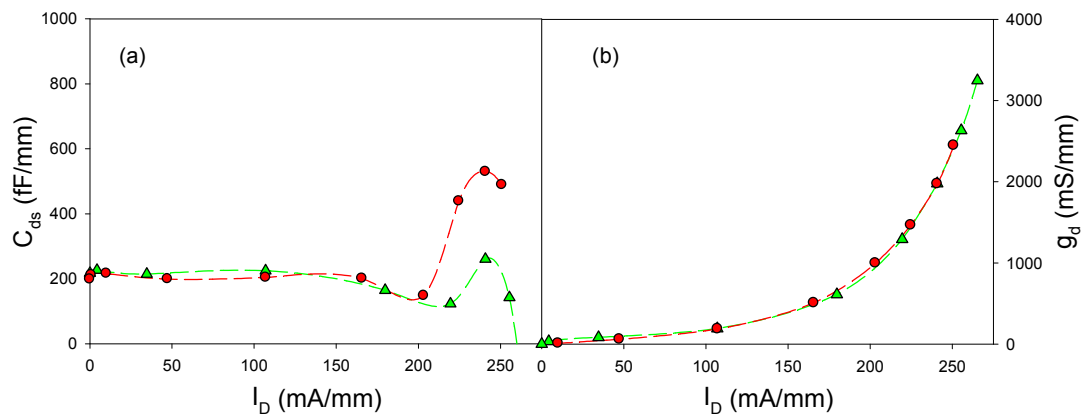
Una vez estudiadas las consecuencias que supone la aparición del óxido en las características estáticas, veamos qué sucede con los parámetros del circuito

equivalente. En la figura V.17 se observa la disminución tanto de  $C_{gs}$  como de  $C_{gd}$ , en especial de la primera, a consecuencia de la presencia del óxido nativo bajo la puerta. Esto ocurre ya que aunque la distancia entre la puerta y el canal se mantiene, el óxido ha disminuido la constante dieléctrica del material que los separa (2.2 del óxido frente a 12 del semiconductor).



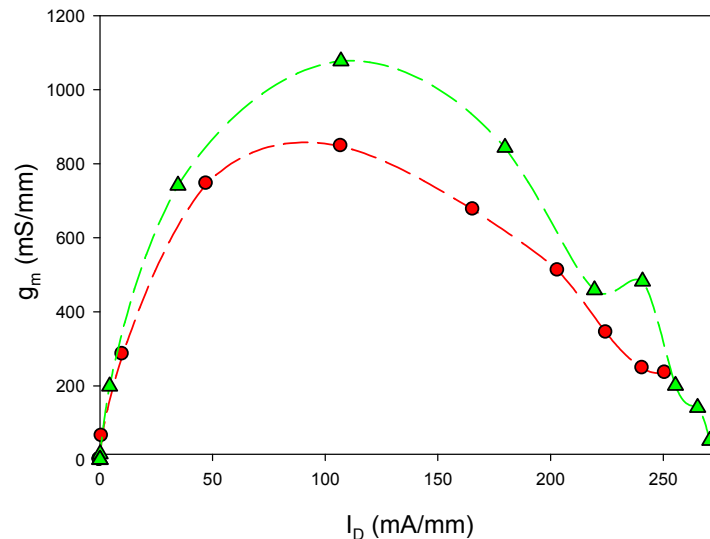
**Figura V.17:** Comparación de los resultados intrínsecos de la simulación de Sb-HEMTs con PS (línea verde con triángulos) y PA (línea roja con círculos): (a)  $C_{gs}$  y (b)  $C_{gd}$  en función de  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2$  V.

En  $C_{ds}$  no encontramos apenas diferencias entre los casos con óxido y sin él [Fig. V.18(a)], salvo para corrientes de drenador elevadas. En  $g_d$  las diferencias entre un caso y otro no son apreciables [Fig. V.18(a)].



**Figura V.18:** Comparación de los resultados intrínsecos de la simulación de Sb-HEMTs con PS (línea verde con triángulos) y PA (línea roja con círculos): (a)  $C_{ds}$  y (b)  $g_d$  en función de  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2$  V.

Una diferencia importante en la comparación entre HEMTs de puerta aislada y de puerta Schottky es la disminución de la transconductancia [Fig. V.19]. El óxido actúa apantallando la tensión de puerta y por tanto disminuyendo el control de la puerta. Este es el precio que hay que pagar para reducir la corriente de portadores por la puerta.



**Figura V.19:**  $g_m$  en función de  $I_D$  para Sb-HEMT con PS (línea verde con triángulos) y PA (línea roja con círculos) para  $V_{DS}=0.2$  V.

Hasta el momento hemos considerado que en el proceso de fabricación se favorece la oxidación del AlSb, penetrando esta oxidación 2 nm hacia el interior del AlSb y produciendo un óxido de constante dieléctrica de 2.2 (por ser este caso el que mejor se ajusta a los resultados experimentales). A continuación veremos cómo influye cada uno de estos parámetros relativos a la oxidación del AlSb en las características del dispositivo, justificando la elección de los mismos. Con el fin de exponer de forma clara los resultados, hemos dividido este estudio en dos apartados. En el primero de ellos estudiamos la influencia del grosor y tipo de óxido, y en el segundo la dirección de oxidación del AlSb.

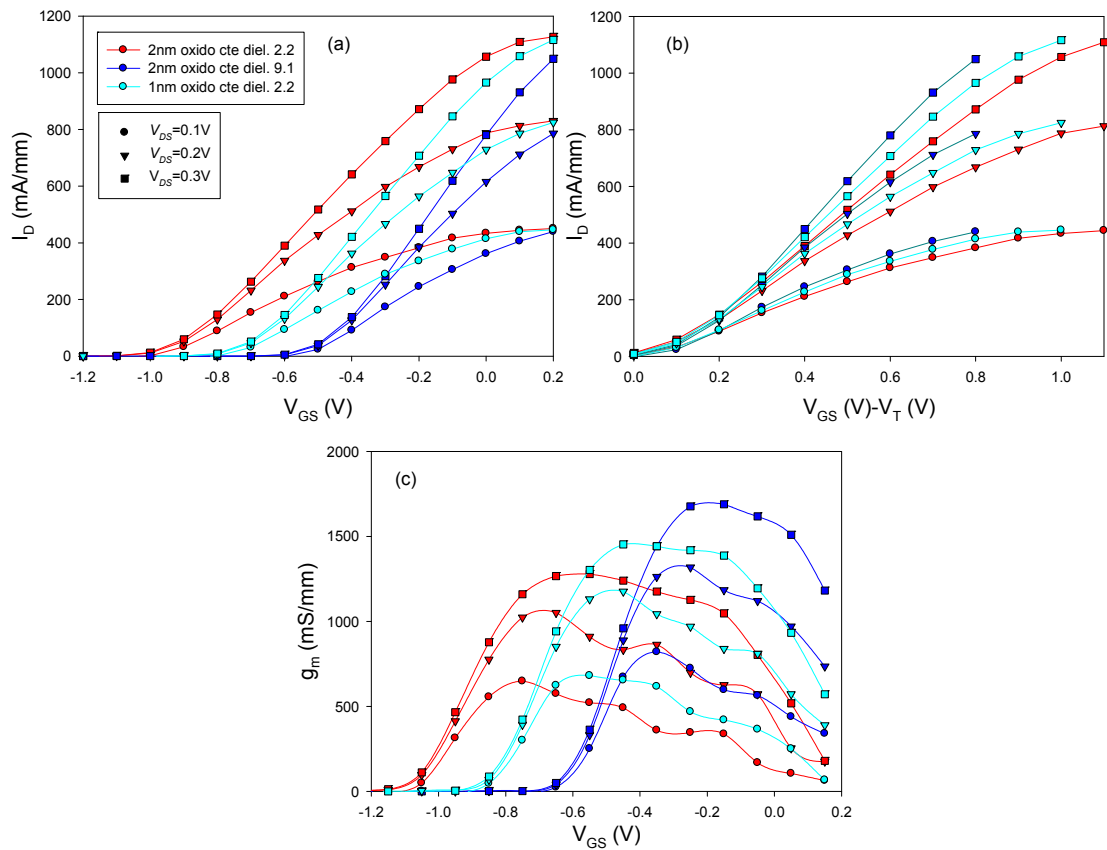
### Grosor y tipo de óxido

Estudiamos el grosor y el tipo de óxido en un mismo apartado, dado que, como veremos en los resultados, al ser el óxido un dieléctrico entre puerta y semiconductor las consecuencias serán las mismas si aumentamos el grosor del óxido que si

consideramos un óxido de constante dieléctrica menor. En este apartado hemos comparado tres transistores de puerta aislada, considerando en todos ellos que la oxidación penetra hacia el interior de la capa de AlSb:

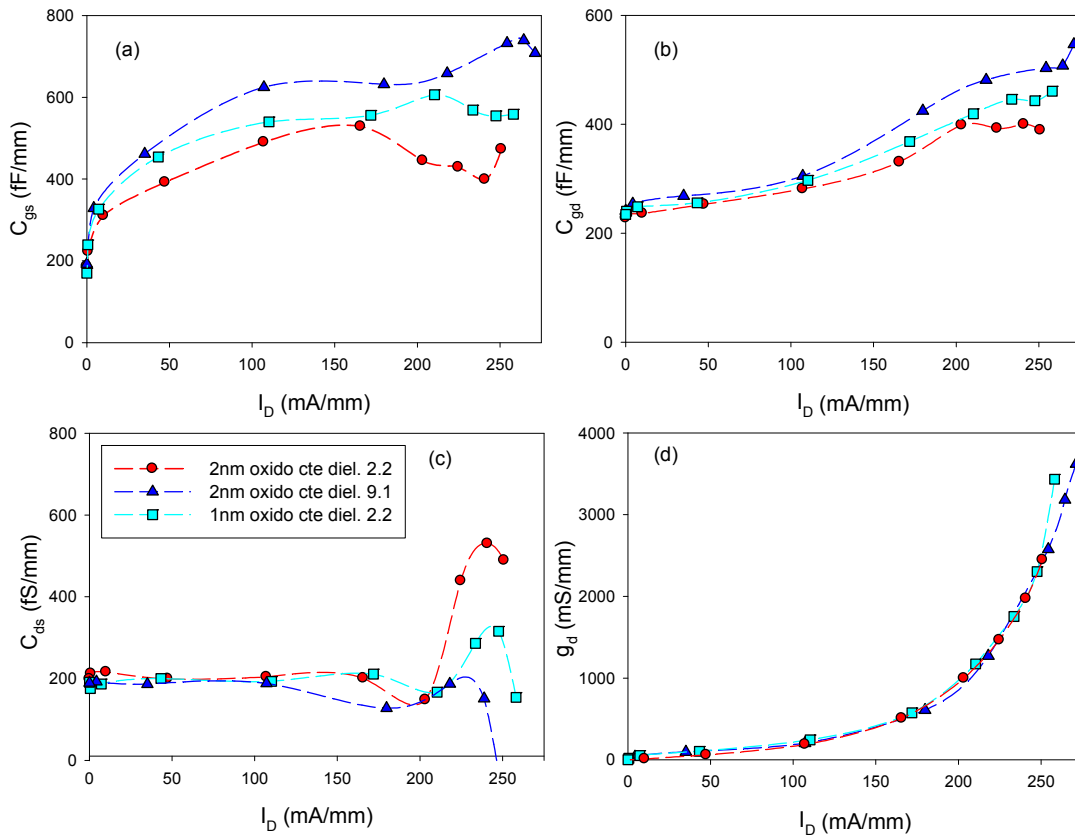
1. el primero, que es el que hemos mostrado hasta el momento y comparado con los resultados experimentales, tiene 2 nm de óxido de constante dieléctrica de 2.2 (correspondiente al hidróxido de Al),
2. el segundo, con 1 nm de óxido también de constante dieléctrica de 2.2, con el fin de estudiar la influencia que tiene el grosor del óxido, y
3. el tercero, de 2 nm de óxido de constante dieléctrica de 9.1 (correspondiente al óxido de Al), para estudiar cómo afecta la constante dieléctrica.

En los resultados estáticos se observa que cuanto mayor grosor tenga el óxido que consideramos (o cuanto menor sea su constante dieléctrica) la tensión aplicada a la puerta se irá apantallando en mayor medida y por tanto más desplazamiento introducirá en  $V_T$  y más disminuirán tanto la corriente como  $g_m$  [Fig. V.20]. Hemos encontrado un buen acuerdo con los resultados experimentales para el caso de un grosor de 2 nm de constante dieléctrica de 2.2 (correspondiente al hidróxido de aluminio). Recuérdese además que esta elección sería equivalente a, por ejemplo, aumentar la constante dieléctrica y el grosor de forma adecuada. La comparación de este caso con los resultados experimentales ya la vimos en el apartado V.1.



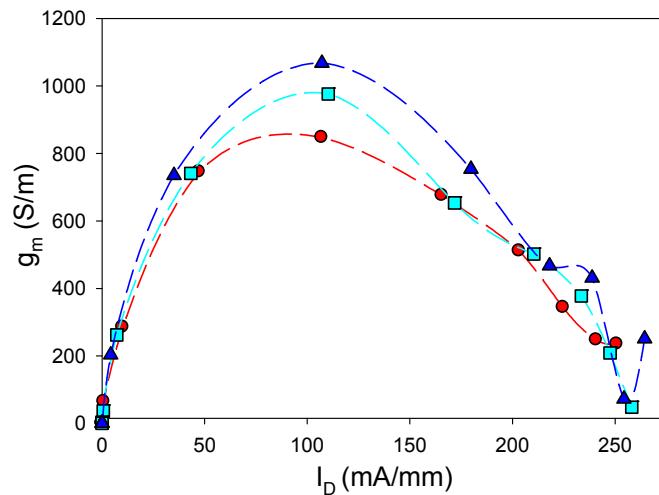
**Figura V.20:** Comparación de resultados MC intrínsecos de Sb-HEMTs de puerta aislada por: 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 (rojo), 1 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 (azul claro), y 2 nm, de óxido de constante dieléctrica 9.1 (azul oscuro), para  $V_D=0.1$  V (círculos), 0.2 V (triángulos) y 0.3 V (cuadrados). (a)  $I_D$  frente a  $V_{GS}$  (b)  $I_D$  frente a  $V_{GS}-V_T$  (c)  $g_m$  en función de  $V_{GS}$ .

En cuanto a los resultados del resto de elementos del circuito equivalente, en la figura V.21 observamos que cuanto mayor es el grosor de óxido, o lo que sería equivalente, cuanto menor es la constante dieléctrica, menores son  $C_{gs}$  y  $C_{gd}$ , como cabría esperar de la relación  $C=\epsilon/d$ . Por otro lado, en  $g_d$  y  $C_{ds}$  no se observan prácticamente diferencias.



**Figura V.21:** Comparación de resultados MC intrínsecos de Sb-HEMTs de puerta aislada por: 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 (círculos y líneas rojas), 1 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 (cuadrados y líneas azul claro), y 2 nm de óxido de constante dieléctrica 9.1 (triángulos y líneas azul oscuro). (a)  $C_{gs}$ , (b)  $C_{gd}$ , (c)  $C_{ds}$  y (d)  $g_d$  en función de  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2$  V.

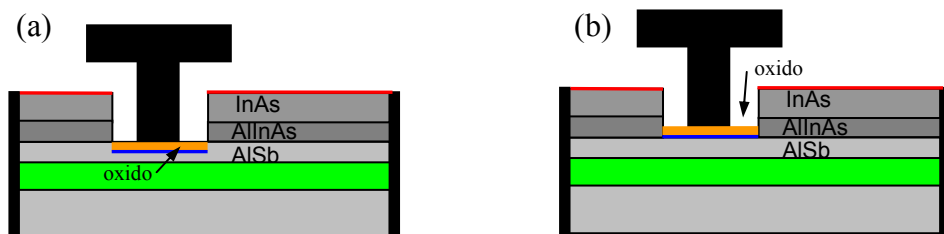
Al igual que sucedía con las capacidades  $C_{gs}$  y  $C_{gd}$ , la transconductancia,  $g_m$ , disminuye cuanto mayor sea la anchura del óxido o cuanto menor sea su constante dieléctrica [Fig. V.22].



**Figura V.22:**  $g_m$  en función de  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2$  V. Comparación de resultados MC intrínsecos de Sb-HEMTs de puerta aislada por: 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 (círculos y líneas rojos), 1 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 (líneas y cuadrados azules claros), y 2 nm de óxido de constante dieléctrica 9.1 (triángulos y líneas azules oscuros).

### Posición del óxido

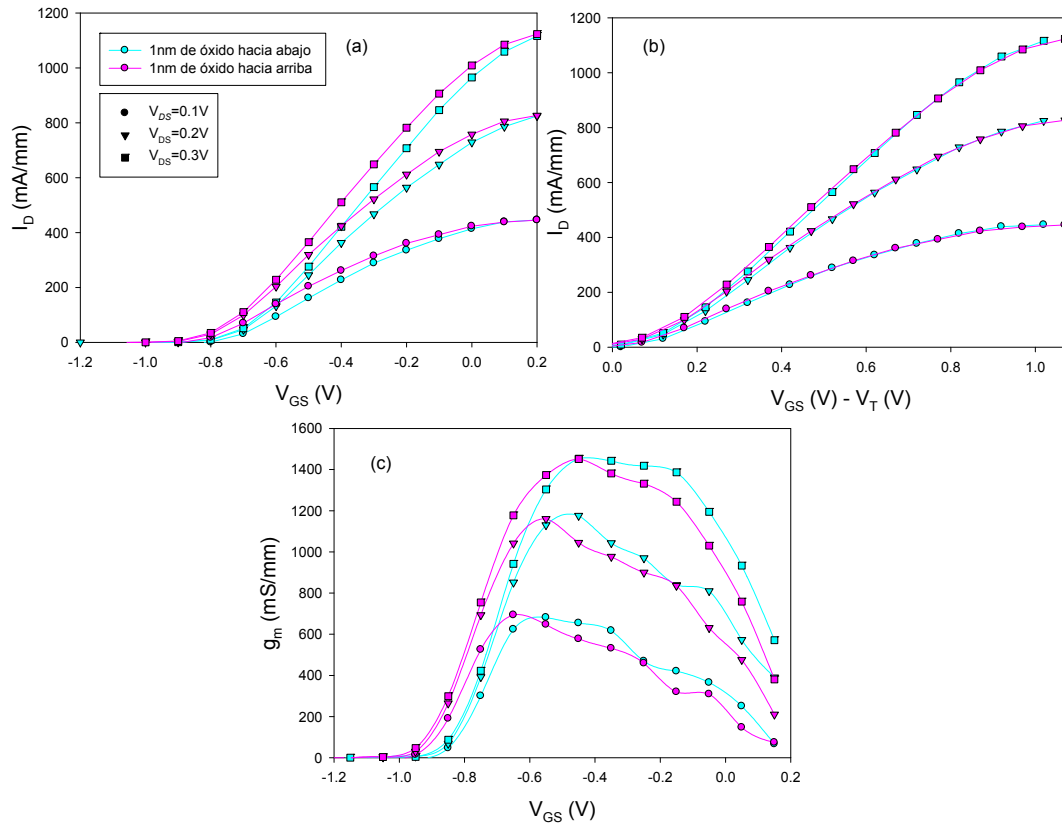
Como hemos mencionado anteriormente, no conocemos la dirección de crecimiento del óxido, es decir, ignoramos si la oxidación crece hacia el exterior, como parece probable, o si por el contrario va penetrando hacia el interior del AlSb. Para ver cómo afectaría la dirección de oxidación, hemos comparado dos casos con 1 nm de óxido de constante dieléctrica de 2.2. En el primero consideramos que el óxido penetra hacia el interior del AlSb, Fig. 23(a), y en el segundo hemos considerado que estos 2 nm de óxido crecen hacia arriba, Fig. 23(b).



**Figura V.23:** Esquemas de los dos casos considerados con 1nm de óxido de constante dieléctrica 2.2.

(a) El óxido penetra hacia el interior del AlSb (b) el óxido crece hacia arriba.

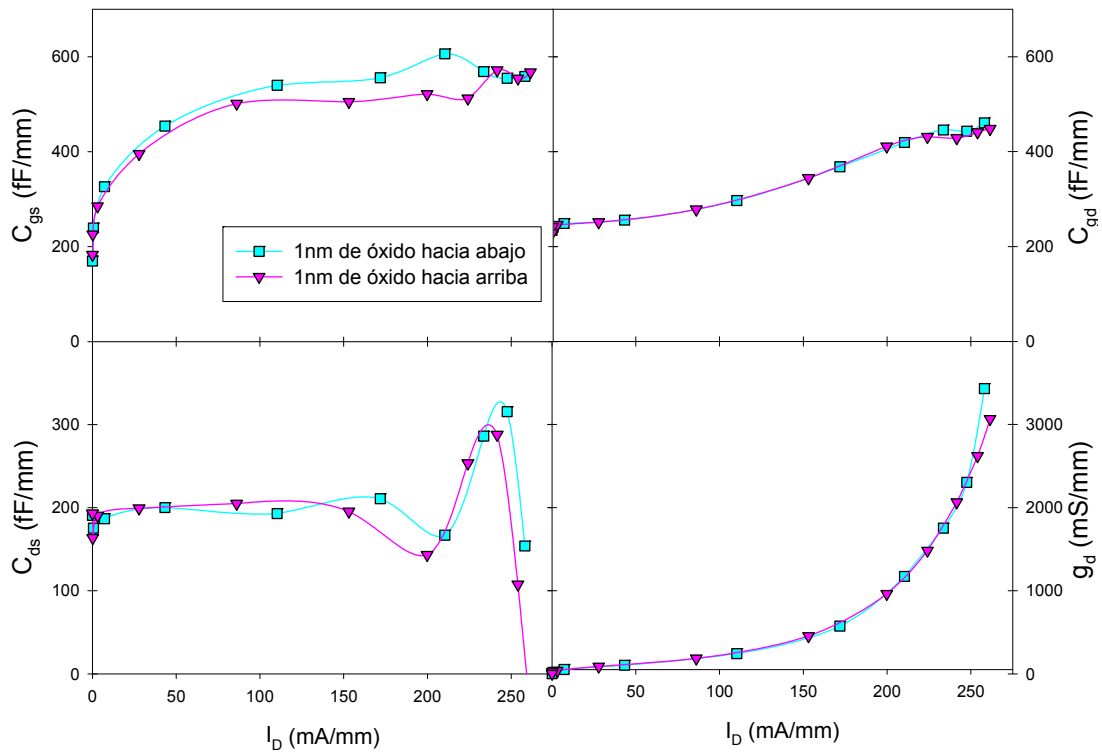
Como vemos en la figura. V.24, la única diferencia encontrada en estática entre estos dos casos sería un pequeño desplazamiento en  $V_T$  hacia tensiones de puerta más negativas en el caso de considerar que el óxido avanza hacia arriba.



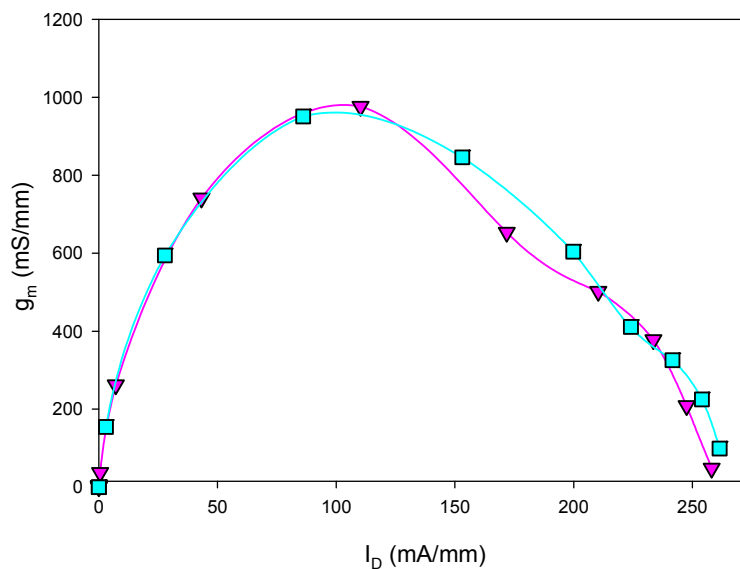
**Figura V.24:** Comparación de resultados MC intrínsecos con 1 nm de óxido: penetrando hacia el interior del AlSb (líneas azules), y que crece hacia arriba (líneas rosas). Para  $V_D=0.1$  V (círculos), 0.2 V (triángulos) y 0.3 V (cuadrados). (a)  $I_D$  frente a  $V_{GS}$  (b)  $I_D$  frente a  $V_{GS}-V_T$  y (c)  $g_m$  en función de  $V_{GS}$ .

En los parámetros del circuito equivalente no encontramos diferencias apreciables dependiendo de la dirección de crecimiento del óxido, salvo en  $C_{gs}$ , en la que se aprecia una pequeña disminución al considerar que el óxido penetra hacia el interior del semiconductor [Fig. V.25 y V.26].





**Figura V.25:** Comparación de resultados MC intrínsecos con 1 nm de óxido: penetrando hacia el interior del AISb (líneas azules con cuadrados), y que crece hacia la superficie (líneas rosas con triángulos). (a)  $C_{gs}$ , (b)  $C_{gd}$ , (c)  $C_{ds}$ , y (d)  $g_d$  en función de  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2$  V.



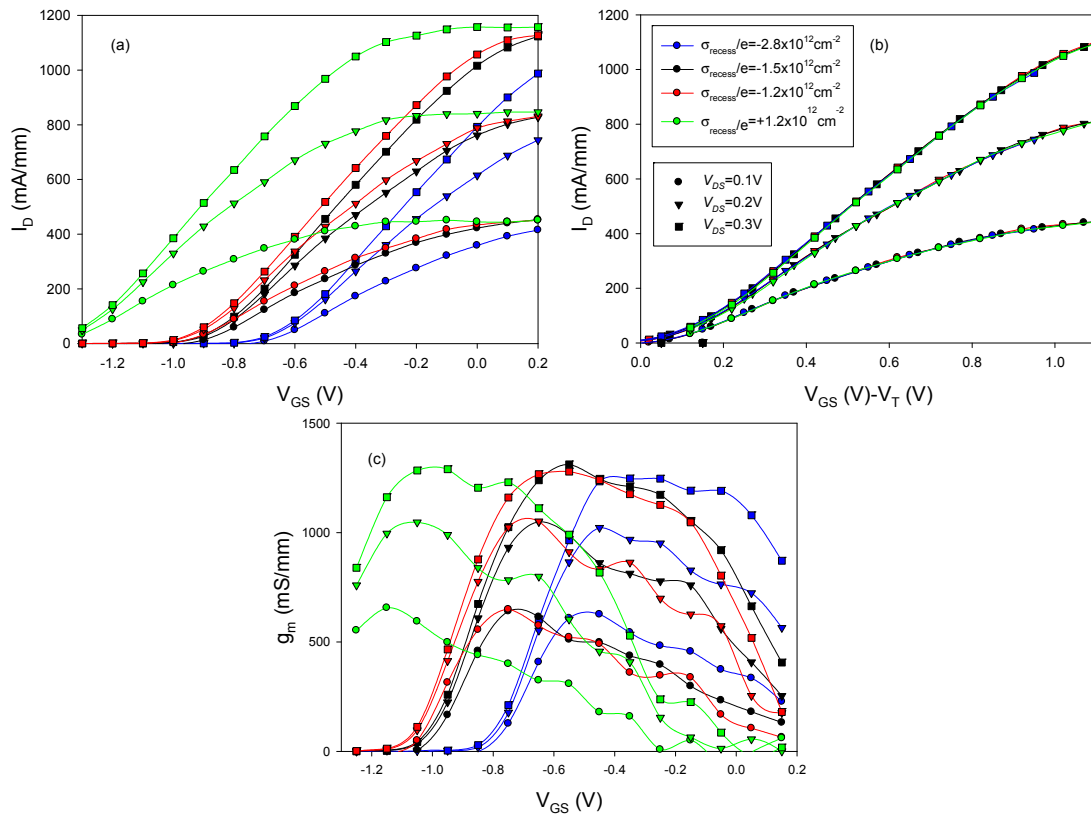
**Figura V.26:** Comparación intrínseca de  $g_m$  en función de  $I_D$  obtenida de la simulación MC de dos Sb-HEMTs de puerta aislada por 1 nm de óxido en el primer caso penetrando hacia el interior del AISb (líneas azules con cuadrados), y en el segundo que crece hacia la superficie (líneas rosas con triángulos). Ambos para  $V_{DS}=0.2$  V.

Teniendo en cuenta estos resultados, hemos considerado como caso de referencia que los 2 nm de óxido han penetrado en el AlSb, es decir, un óxido de constante dieléctrica de 2.2 debajo de la puerta que va de  $x=9$  nm a  $x=11$  nm.

### V.2.3. Influencia de la carga superficial en el fondo del *recess*

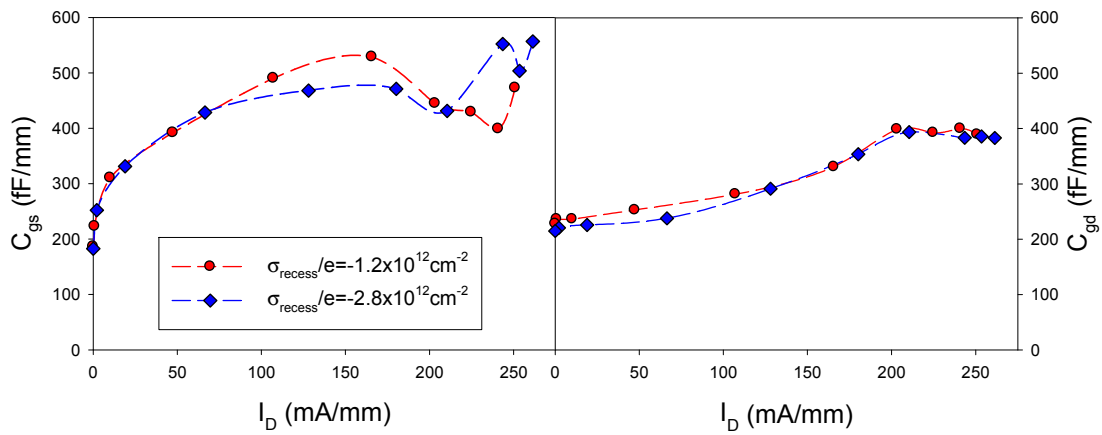
Como hemos visto en el desarrollo de este capítulo, no hay referencia experimental para determinar la carga negativa que colocamos en el fondo del *recess*. Ésta no tiene por qué ser la misma que situamos en la parte superior del *cap*, dado que puede verse alterada tanto por el proceso de fabricación (durante el grabado del *recess*) como por la carga volúmica que puede aparecer en el interior del óxido (por tratarse de un transistor de puerta aislada). Por tanto, para la correcta simulación de este tipo de dispositivos es importante estudiar las consecuencias que tiene la variación de esta carga superficial en las características del transistor. Hemos simulado y comparado intrínsecamente el mismo dispositivo (óxido de constante dieléctrica 2.2 que penetra 2 nm en el AlSb) con cuatro densidades de carga superficiales diferentes en la parte superior del *recess* ( $\sigma_{recess}/e=-1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\sigma_{recess}/e=-1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\sigma_{recess}/e=-2.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $\sigma_{recess}/e=+1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ).

Como se observa en estática, la carga superficial en el fondo del *recess* solamente produce un desplazamiento en la tensión umbral  $V_T$  [Fig. V.27] hacia tensiones menos negativas cuanto más negativa es la carga superficial de esta zona.



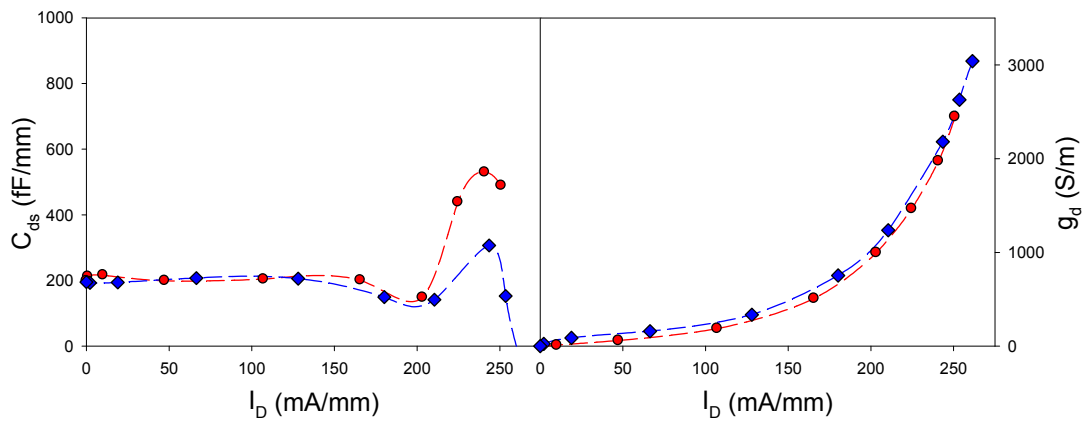
**Figura V.27:** Comparación de resultados MC intrínsecos en transistores de puerta aislada con densidades de carga superficial en el *recess* de  $+1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (verde),  $-1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (rojo),  $-1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (negro), y  $-2.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (azul). (a)  $I_D$  en función de  $V_{GS}$ , (b)  $I_D$  en función de  $V_{GS} - V_T$  y (c)  $g_m$  en función de  $V_{GS}$ .

Comparando los resultados de las simulaciones, vemos cómo la variación en la carga en la región del *recess* prácticamente no influye en las características estáticas del dispositivo salvo por el desplazamiento que introduce en  $V_T$ . Para simplificar el estudio del el circuito equivalente solamente hemos considerado dos casos: el de  $\sigma_{\text{recess}}/e = -1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  que hemos tomado siempre como referencia a lo largo de este capítulo, y el que considera la misma densidad de carga superficial en la parte superior del *cap* y en el *recess* ( $\sigma_{\text{recess}}/e = -2.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ).

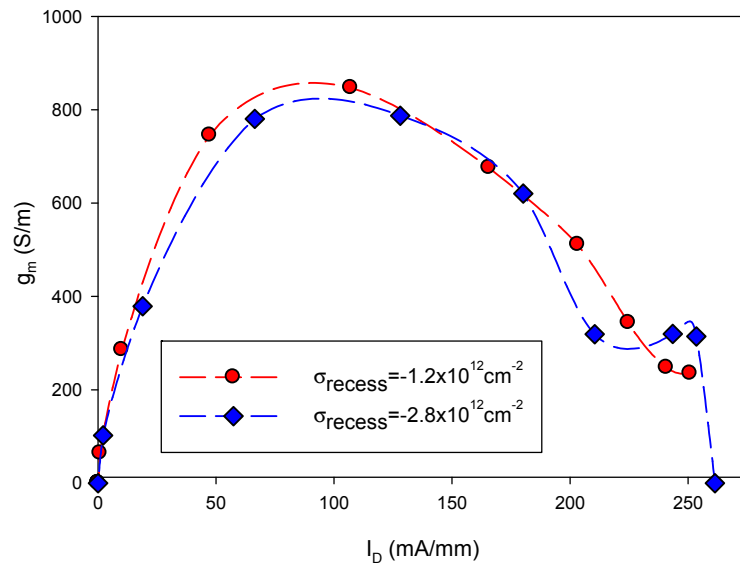


**Figura V.28:** Comparación de los resultados MC intrínsecos de Sb-HEMT con puerta aislada y  $\sigma_{recess}/e=-1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (línea roja con círculos) y  $\sigma_{recess}/e=-2.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (línea azul con rombos) (a)  $C_{gs}$  y (b)  $C_{gd}$  frente a  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2 \text{ V}$ .

En todos parámetros del circuito equivalente los resultados son muy similares y las pequeñas diferencias que se observan no van más allá del error estadístico del método de MC [Fig V.28-V.30].



**Figura V.29:** Comparación de los resultados MC intrínsecos de Sb-HEMT con puerta aislada y  $\sigma_{recess}/e=-1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (línea roja con círculos) y  $\sigma_{recess}/e=-2.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (línea azul con rombos) (a)  $C_{ds}$  y (b)  $g_d$  frente a  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2 \text{ V}$ .

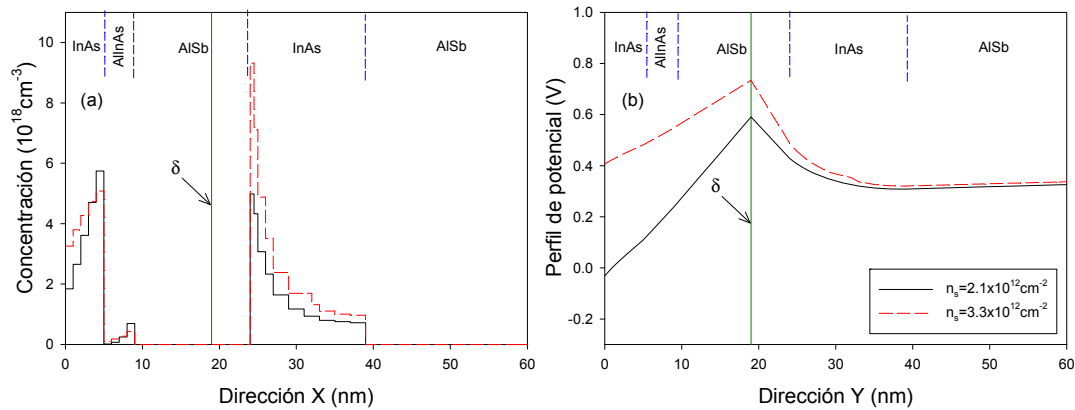


**Figura V.30:**  $g_m$  en función de  $I_D$  para  $V_{DS}=0.2$  V. Comparación de los resultados obtenidos para dos transistores con puerta aislada, uno con  $\sigma_{recess}/e=-1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (línea roja con círculos) y el otro con  $\sigma_{recess}/e=-2.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (línea azul con rombos).

### V.3 INFLUENCIA DE LAS VARIACIONES EN $n_s$ .

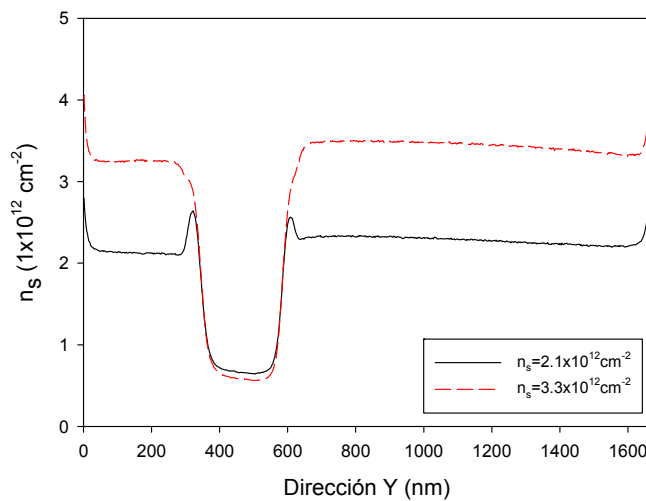
La  $n_s$  experimental que hemos reproducido con nuestras simulaciones es la  $n_s$  Hall medida en la estructura epitaxial antes de fabricar los dispositivos. Por tanto, no es descabellado pensar que el proceso de fabricación podría haber alterado el valor de esa concentración de electrones en el canal. Para estudiar cómo influiría en las características del transistor una posible variación en la densidad de portadores en el canal hemos comparado el caso de referencia (2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2) con los resultados de simular el mismo dispositivo pero con una  $n_s$  de  $3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . En este nuevo caso, con el fin de obtener esta concentración de portadores en equilibrio en el canal, debemos considerar una densidad de carga superficial en la interfaz semiconductor-aire (parte superior del *cap*) de  $-1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . En la parte superior del *recess* tomaremos, al igual que en el caso con la  $n_s$  menor, una densidad de carga negativa de  $-1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (recordemos que, como hemos visto en el apartado anterior, la elección de esa densidad de carga superficial del *recess* únicamente desplaza la tensión umbral). Lo primero que tenemos que hacer es calcular el nuevo perfil de inyección. En la figura V.31 comparamos los perfiles de inyección obtenidos para esta estructura de

$n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  con los del apartado V.2 ( $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ), ambos obtenidos a partir de la simulación de la heteroestructura sin *recess* y en equilibrio una vez realizado el sucesivo refinado de los perfiles. En esta figura observamos cómo la disminución de la carga negativa en la interfaz entre el *cap* y el aire nos proporciona una  $n_s$  mayor en el canal.



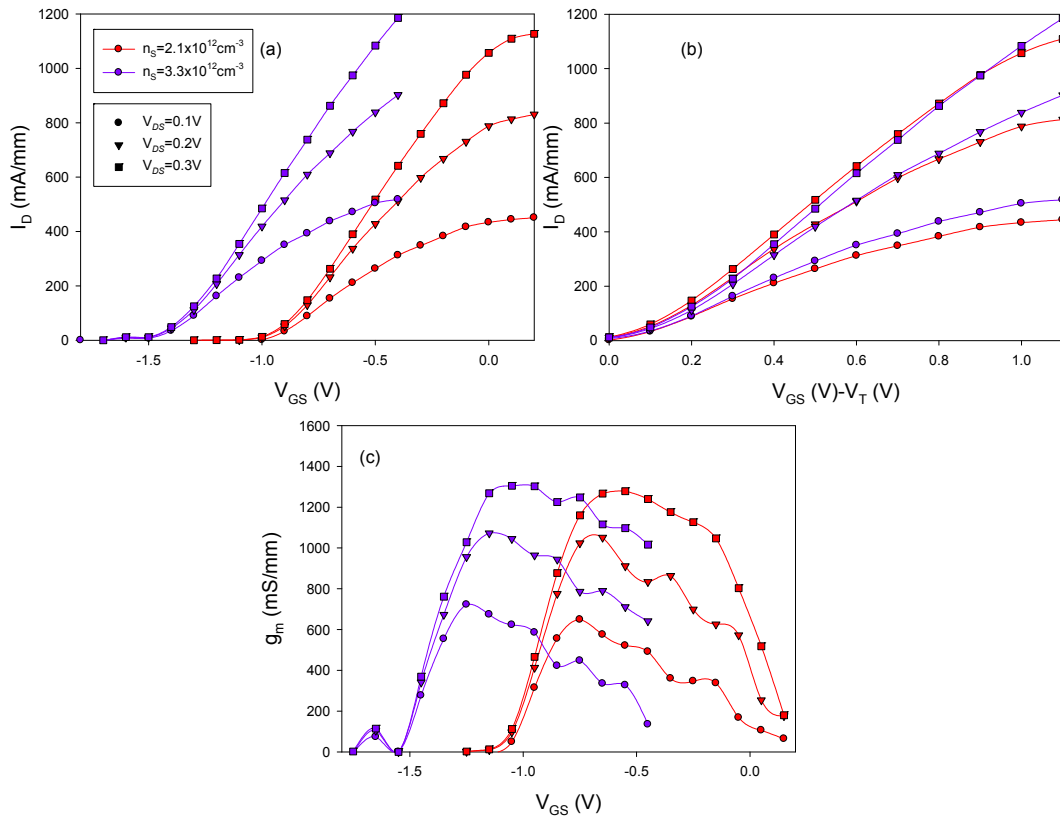
**Figura V.31:** Perfiles de (a) concentración, (b) energía, (c) temperatura electrónica del valle  $\Gamma$  y (d) campo eléctrico en la dirección X.

Debido al aumento de  $n_s$  las resistencias de fuente y de drenador disminuyen, incluso aunque la densidad de electrones en el canal es muy similar en las regiones bajo la puerta y el *recess* [Fig. V.32].



**Figura V.32:** Perfil de la  $n_s$  del canal a lo largo de la dirección X para los dos valores de  $n_s$ :  $2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (línea continua negra) y  $3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (línea discontinua roja). Ambas para  $V_{DS}=0.2 \text{ V}$  y  $V_{GS}-V_T=0.5 \text{ V}$

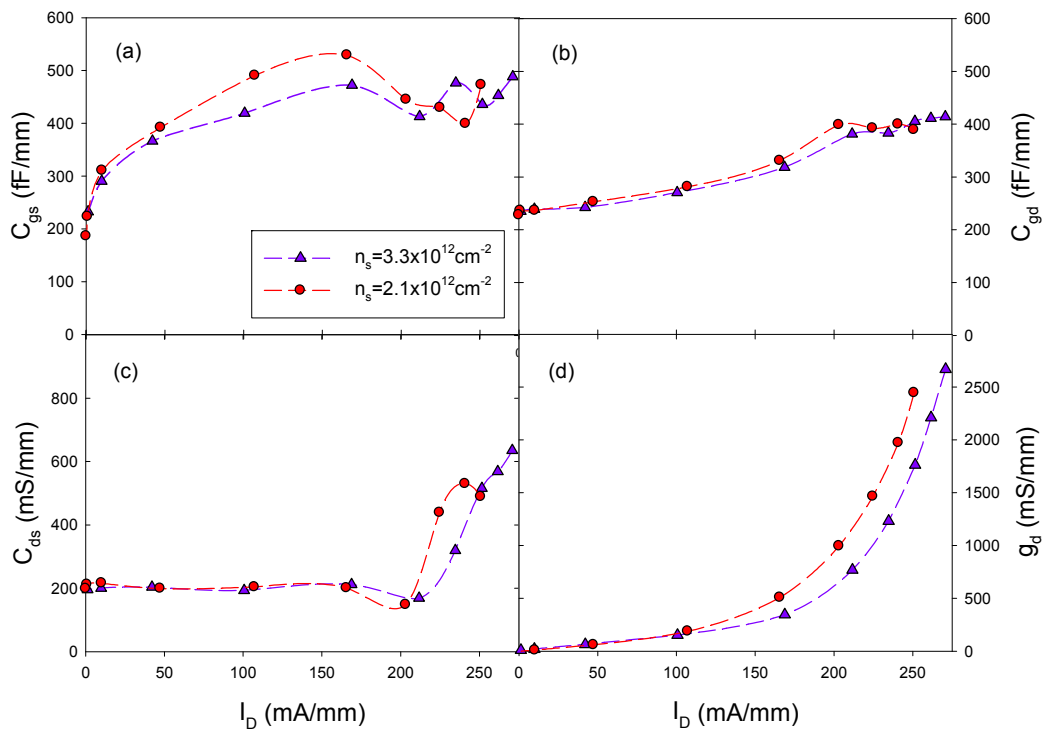
En la comparación intrínseca estática de los dos casos se observa, como era previsible, que el aumento en la  $n_s$  del canal provoca un desplazamiento en  $V_T$  de 0.5 V hacia polarizaciones más negativas. Es decir, al tener más portadores en el canal necesitamos una tensión de puerta más negativa para vaciarlo.



**Figura V.33:** Comparación de resultados MC intrínsecos de dos transistores de PA por 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2, uno con  $n_s = 2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (símbolos y líneas rojos) y el otro con  $n_s = 3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (símbolos y líneas azules). (a)  $I_D$  en función de  $V_{GS}$ , (b)  $I_D$  en función de  $V_{GS} - V_T$ , y (c)  $g_m$  en función de  $V_{GS}$ .

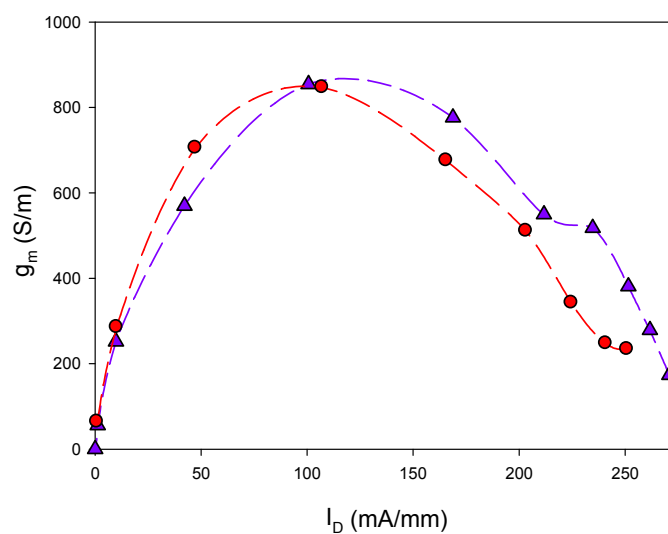
En la figura V.33 vemos cómo tenemos una corriente y una transconductancia ligeramente mayores en el caso con mayor  $n_s$ .

Comparando los parámetros dinámicos de ambos casos, se observa que tanto  $C_{gs}$  como  $C_{gd}$  y  $g_d$  disminuyen al aumentar la densidad de portadores en el canal [Fig. V.34].



**Figura V.34:** (a)  $C_{gs}$ , (b)  $C_{gd}$ , (c)  $C_{ds}$ , y (d)  $g_d$  en función de  $I_D$  para dos transistores de PA por 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2, uno con  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (círculos y líneas rojos) y el otro con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (triángulos y líneas morados) para  $V_{DS}=0.2 \text{ V}$ .

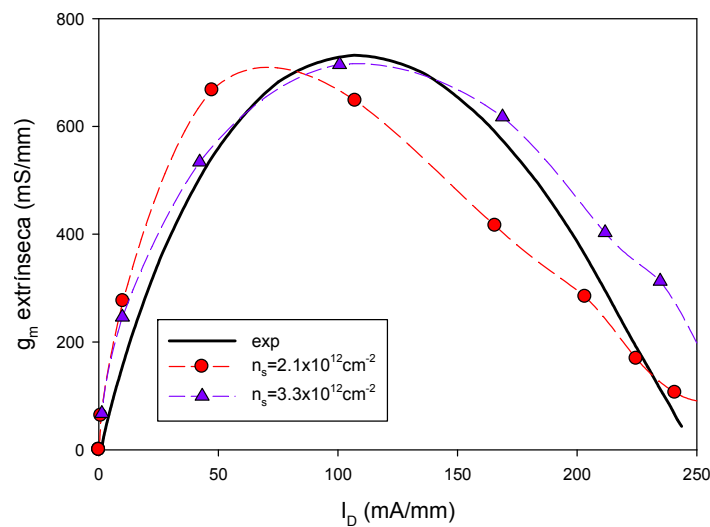
Por otro lado, hay que resaltar el desplazamiento del máximo de la transconductancia hacia valores más elevados de  $I_D$ , manteniendo su valor [Fig. V.35].



**Figura V.35:** Representación de  $g_m$  en función de  $I_D$  para dos transistores de PA por 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2, uno con  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (círculos y líneas rojos) y el otro con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (triángulos y líneas morados). Todo ello para  $V_{DS}=0.2 \text{ V}$ .



Es este punto es preciso retomar la justificación de las discrepancias que hemos encontrado a la hora de reproducir la  $g_m$  experimental [apartado V.1.2] a partir de los resultados MC. Como ya vimos, la  $g_m$  intrínseca simulada tiene un máximo menor que la experimental y además está desplazada hacia  $I_D$  menores. Al comparar las transconductancias extrínsecas experimental y MC calculadas a partir de la ecuación (V.1) [Fig.V.11], hemos visto que los menores valores encontrados en la simulación respecto al los experimentales son debidos a la discrepancia encontrada en  $g_d$  entre los resultados de simulación y los experimentales. Si ahora hacemos la misma comparación en el caso de  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , vemos cómo el desplazamiento en la  $g_m$  extrínseca respecto del caso con  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  hace que el resultado se ajuste de forma más adecuada al experimental. Esto nos hace pensar en la posibilidad de que la  $n_{s,\text{real}}$  del dispositivo sea mayor que estimada inicialmente.



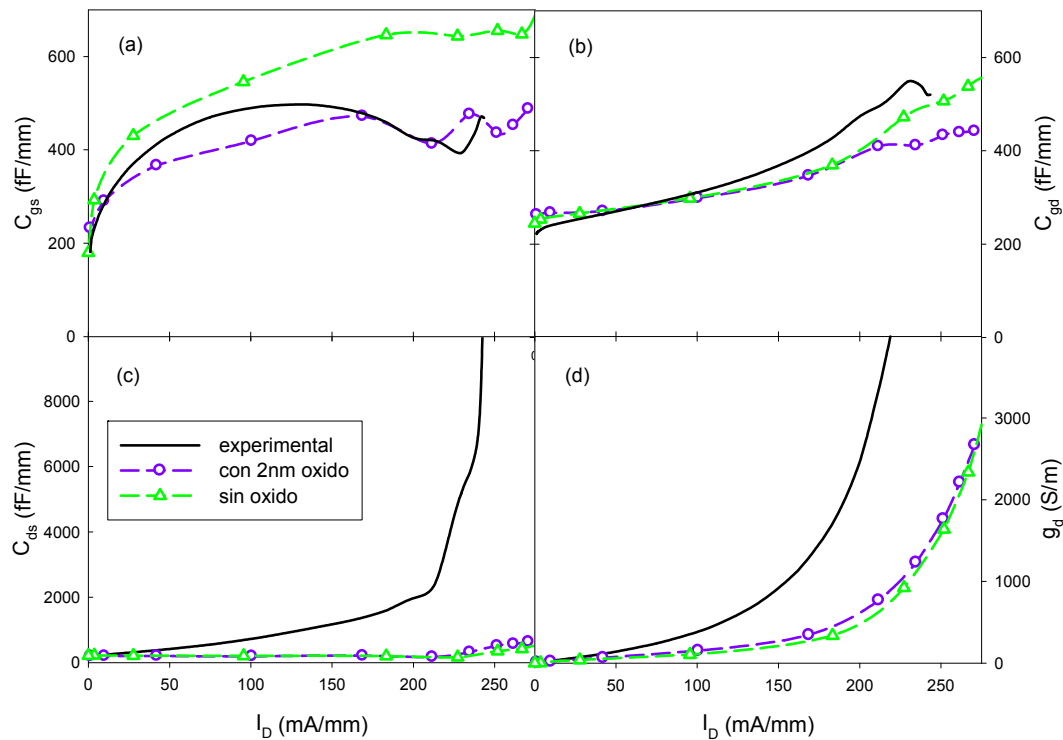
**Figura V.36:**  $g_m$  extrínseca calculada a partir de la ec. V.1 representada en función de  $I_D$ . Resultado experimental (línea negra), en comparación con resultados MC para  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (círculos rojos) y  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (triángulos morados).

Una vez comparados los parámetros del circuito equivalente para dos  $n_s$  diferentes, vemos cómo afecta la presencia del óxido bajo la puerta en el transistor con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

Hemos comparado los resultados experimentales con dos casos simulados con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (lo que en la simulación se traduce en una  $\sigma/e=-1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  en la parte superior del *cap*):

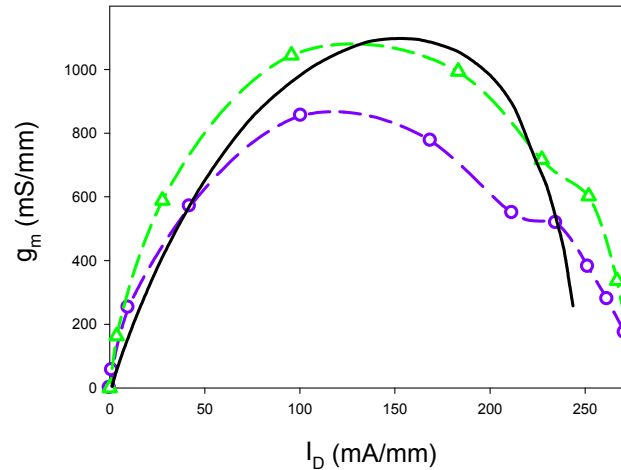
1. sin óxido, con *recess* de 9 nm de profundidad, y densidad de carga superficial en el *recess*  $\sigma_{recess}/e=-1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , y
2. con 2 nm de óxido de constante dieléctrica de 2.2 y densidad de carga superficial en el *recess*  $\sigma_{recess}/e=-1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

Podemos observar que las diferencias obtenidas entre estos resultados son muy similares a las encontradas en la simulación de estos mismos dos casos con  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  [Fig. V.17-V.19]: la presencia del óxido disminuye tanto  $C_{gs}$  como  $C_{gd}$  y  $g_m$  [Fig. V.37-V.38].



**Figura V.37:** Comparación de transistor de PS (triángulos hacia abajo y líneas verdes) con uno de PA por 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 y  $\sigma_{recess}=-1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (triángulos hacia arriba y líneas moradas). Todos ellos con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . (a)  $C_{gs}$ , (b)  $C_{gd}$ , (c)  $C_{ds}$ , y (d)  $g_d$  en función de  $I_D$ . Todo para  $V_{DS}=0.2 \text{ V}$ .

En la comparación con los resultados experimentales [Fig. V.37], vemos que el aumento en  $n_s$  pese a mejorar la posición de máximo de la transconductancia extrínseca [Fig. V.36], no podemos decir que reproduzca mejor los resultados experimentales dado que por ejemplo  $C_{gs}$  tiene un mayor desacuerdo con el caso experimental que el que teníamos con  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .



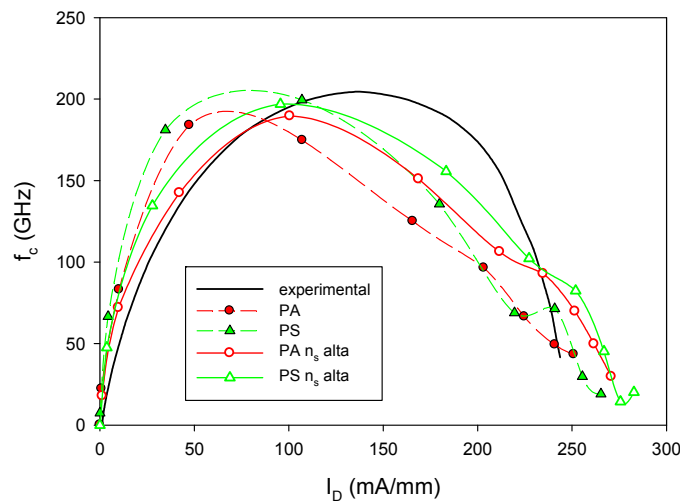
**Figura V.38:** Comparación de  $g_m$  intrínseca en función de  $I_D$  en un transistor de PS (triángulos y líneas verdes) y en uno de PA por 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 y  $\sigma_{recess}/e=-1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (círculos y líneas moradas). Todos ellos con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $V_{DS}=0.2 \text{ V}$ .

#### V.4 ESTIMACIÓN DE $f_c$ y $f_t$

Una vez estudiadas las características estáticas y dinámicas de los Sb-HEMTs de puerta aislada, compararemos el valor de la frecuencia de corte experimental,  $f_c$ , calculada a partir de la relación  $f_c=g_m/2\pi(C_{gs}+C_{gd})$  con cuatro casos simulados:

1. con  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , sin óxido y con 9 nm de profundidad de *recess*, lo llamaremos PS1,
2. con  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 (caso que hemos tomado como referencia en apartados anteriores), lo llamaremos PA1,
3. con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , sin óxido y con 9 nm de profundidad de *recess*, lo llamaremos PS2,
4. con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 (caso que hemos tomado como referencia en apartados anteriores), lo llamaremos PA2.

Como vemos en la figura V.39 para ambas densidades de portadores en el canal, la presencia del óxido bajo la puerta reduce un poco la frecuencia de corte, aunque esta reducción no es muy pronunciada. Esta reducción en  $f_c$  está asociada a la disminución que provoca el óxido en  $g_m$ , y está suavizada por la disminución también de  $C_{gs}$  y  $C_{gd}$ . Observamos también que aunque el comportamiento es similar para los dos valores de  $n_s$ , en el caso de la  $n_s$  mayor, el máximo de  $f_c$  se desplaza hacia valores mayores de corriente, tomando una mayor similitud con los resultados experimentales.

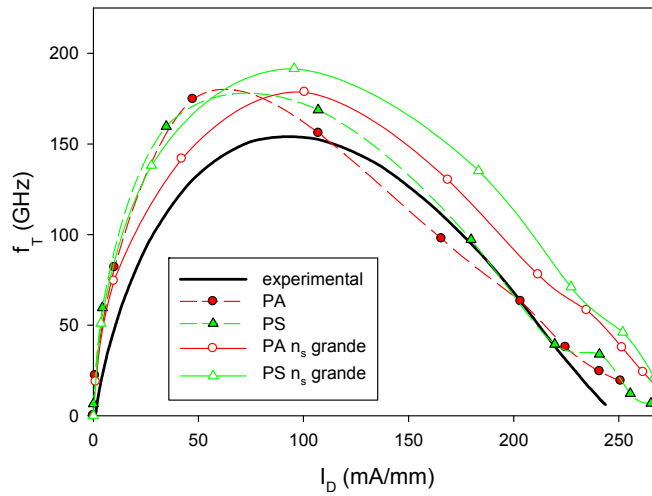


**Figura V.39:**  $f_c$  en función de  $I_D$  para transistores de PS con  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (triángulos y línea discontinua verdes) y con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (triángulos y línea continua verdes) y con PA por 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 con  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (círculos y línea discontinua rojas) y con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (círculos y línea continua rojas). Todos ello para  $V_{DS}=0.2 \text{ V}$ .

Si hacemos ahora una estimación de  $f_t$  a partir de la ecuación [Tasker and Hughes 1989]

$$f_t = \frac{g_m^{\text{intr}} / 2\pi}{(C_{gs} + C_{gd})[1 + g_d^{\text{intr}}(R_s + R_d)] + C_{gd} g_m^{\text{intr}}(R_s + R_d)}, \quad (\text{V.2})$$

observamos también en este caso el desplazamiento en  $I_D$  del máximo al aumentar  $n_s$ , al igual que sucedía con la frecuencia de corte.



**Figura V.40:**  $f_T$  estimada a partir de la ec. V.2 en función de  $I_D$  para transistores de PS con  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (triángulos y línea discontinua verdes) y con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (triángulos y líneas continua verdes) y con PA por 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2 con  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (círculos y línea discontinua rojos) y con  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (círculos y línea continua rojos). Todos ello para  $V_{DS}=0.2 \text{ V}$ .

\* \* \*

En este capítulo hemos visto cómo el método MC nos ha permitido reproducir los resultados experimentales estáticos, así como  $C_{gs}$ ,  $C_{gd}$  y  $g_m$ , encontrando problemas en  $C_{ds}$  y  $g_d$  debidas a la dispersión en frecuencia encontrada en las medidas experimentales, que hemos asociado a la presencia de huecos en el *buffer*. Queda por tanto demostrada la adecuación de este simulador para una posible optimización de este tipo de transistores.



## CAPÍTULO VI

### **Sb-HEMTs: IONIZACIÓN POR IMPACTO**

Hasta el momento, en la simulación de los Sb-HEMTs hemos centrado nuestra atención en la zona de tensiones de drenador bajas, donde la ionización por impacto no es relevante y donde se suponen óptimas las características dinámicas del dispositivo. Por tanto, hasta ahora no hemos tenido en cuenta la ionización por impacto en las simulaciones realizadas del HEMT de InAs/AlSb. Sin embargo, debido al pequeñísimo gap del material del canal (0.35 eV), no podíamos terminar esta memoria sin hacer un breve estudio de las consecuencias que acarrea en las características estáticas de este tipo de dispositivos, basados en semiconductores de gap estrecho, la ionización por impacto, que recordemos es la que restringe el uso de estos transistores a tensiones bajas. Con este fin y con la ayuda de la Dr. Beatriz García Vasallo, experta en el estudio de la ionización por impacto y efecto kink en HEMTs de InGaAs, se han introducido en nuestro simulador MC adaptado a la simulación de semiconductores de gap estrecho las modificaciones oportunas para poder considerar no sólo la ionización por impacto, sino también el movimiento de los huecos en el interior del dispositivo [Vasallo *et al.* 2003, Vasallo *et al.* 2010].

#### **VI.1 DESCRIPCIÓN DEL MODELO FÍSICO**

El método MC es de gran ayuda a la hora de estudiar la ionización por impacto y dar una interpretación física del efecto kink (aumento anómalo de la corriente de drenador que aparece al aumentar  $V_{DS}$  y que lleva a una reducción de la ganancia así como a un aumento del ruido, limitando la utilización del dispositivo a aplicaciones a

baja potencia), puesto que nos permite analizar lo que sucede en el interior del dispositivo desde un punto de vista microscópico.

Como ya explicamos en el capítulo I, en nuestro modelo consideramos que la probabilidad de que un electrón en el valle  $\Gamma$  sufra ionización por impacto viene dada por la aproximación de Keldysh,

$$P(E) = S \left( \frac{E - E_{th}}{E_{th}} \right)^2 \quad \text{si } E > E_{th} \quad (\text{VI. 1})$$

$$P(E) = 0 \quad \text{si } E \leq E_{th},$$

donde  $S$  es un parámetro que mide la eficiencia de la ionización por impacto, y  $E_{th}$  es la energía umbral de ionización. La ionización por impacto es tratada como un mecanismo de *scattering* más. Cuando el proceso de selección del mecanismo de *scattering* elige una ionización por impacto, en la simulación se genera un par electrón-hueco. Tanto el electrón que sufre la ionización por impacto como el generado tras el proceso de ionización se encuentran en el valle  $\Gamma$ , mientras que el hueco generado se encuentra en la banda de huecos pesados.

El movimiento de los huecos se realiza de la misma forma que el de los electrones, pero con algunas salvedades ya expuestas en el capítulo I. Un proceso importante a tener en cuenta a la hora de reproducir de forma apropiada el efecto kink es la recombinación de los huecos [Vasallo 2003]. Para ello, en nuestro simulador consideramos un modelo simple en el que asumimos que los huecos se recombinan caracterizados por un tiempo de vida media  $\tau_{rec}$ , teniendo por tanto una probabilidad de recombinación  $1/\tau_{rec}$  (para más detalle ver Cap.I.3.6).

## VI.2 CARACTERÍSTICAS ESTÁTICAS

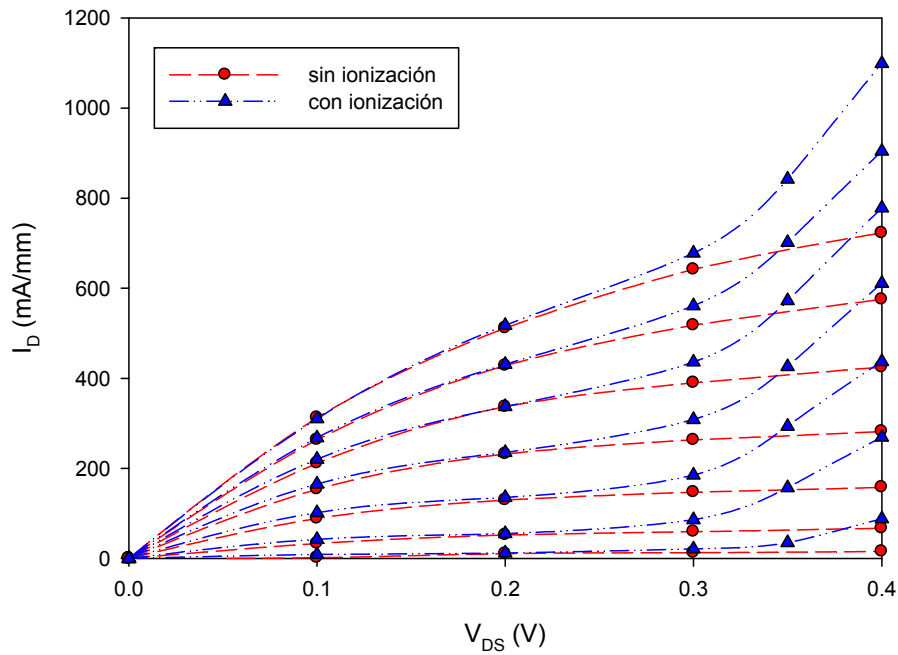
Con el fin de estudiar el efecto que tiene la ionización por impacto sobre las características estáticas del dispositivo bajo estudio, hemos simulado el mismo HEMT de puerta aislada (2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2) que tomábamos como patrón en el capítulo anterior [Cap. V.1], pero considerado ahora tanto la ionización por impacto como el movimiento de los huecos en su interior.



Para el movimiento de los huecos en el interior de los distintos semiconductores del dispositivo se han utilizado los parámetros relativos a los huecos del InAs y del AlSb mostrados en el capítulo II [tablas II.1 y II.3]. En cuanto a los del  $\text{Al}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{As}$ , se encuentran recogidos en el apéndice A.

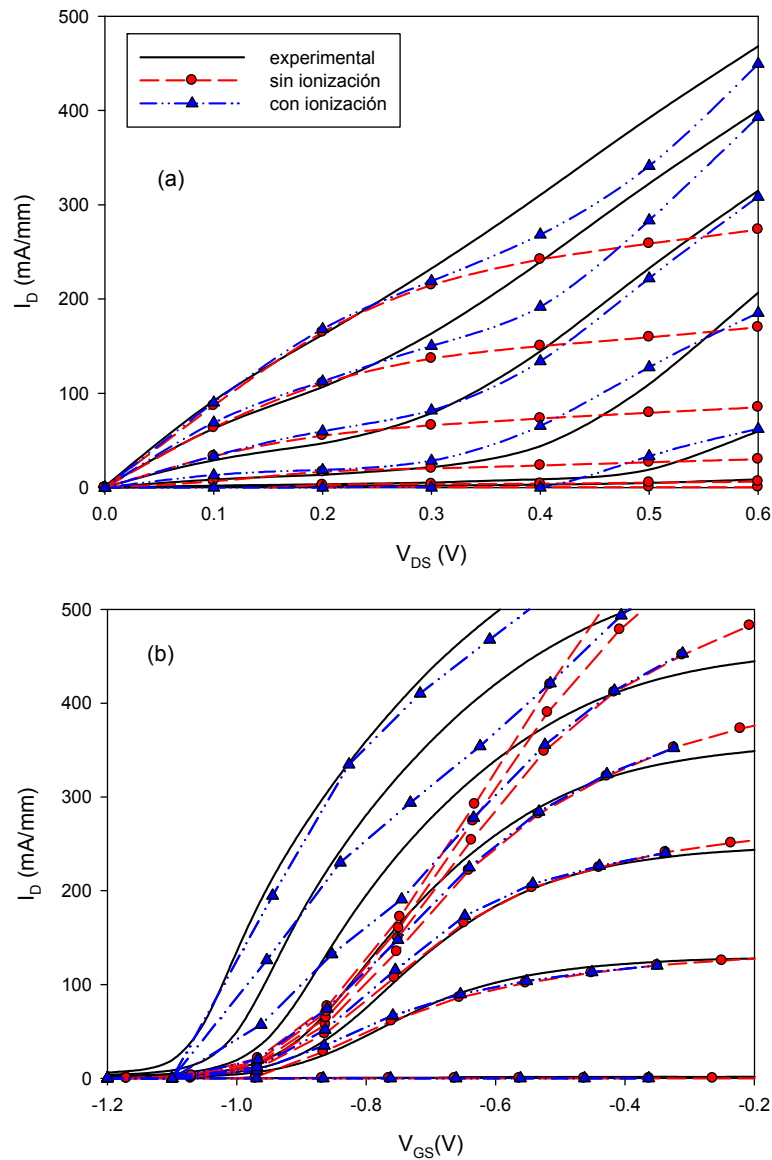
En el caso del HEMT que nos ocupa, y para las tensiones consideradas, sólo aparece ionización por impacto en el InAs (en el *cap* y en el canal), puesto que el gap del AlSb y del AlInAs son mucho mayores (1.6 eV y 1.5 eV respectivamente frente a los 0.35 eV del InAs). Para el InAs, y con el fin de reproducir correctamente las características de salida medidas en los transistores, se ha fijado  $S=10^{12}\text{ s}^{-1}$ ,  $E_{th}=0.41\text{ eV}$ , y  $\tau_{rec}=0.5\text{ ns}$ . Como se puede observar, la  $E_{th}$  que reproduce los resultados experimentales es ligeramente mayor que la que utilizábamos para reproducir la ionización por impacto en el InAs considerado como semiconductor aislado (Tabla II.1).

Como observamos en la figura VI.1, hasta voltajes de drenador alrededor de 0.3 V no empieza a aparecer la ionización por impacto, justificando la no consideración de la misma en el capítulo anterior, dado que para 0.2 V (voltaje de drenador en el que calculábamos el circuito equivalente) es despreciable. La consideración de ionización por impacto en el capítulo anterior habría aumentado muchísimo el tiempo de cálculo, complicando en gran medida la obtención del circuito equivalente.



**Figura VI.1:** Comparación de los resultados obtenidos de la simulación MC para  $I_D$  en función de  $V_{DS}$  sin ionización (círculos rojos) y con ella (triángulos azules) con  $V_{GS}$  entre  $-0.4$  V y  $-1.0$  V

Para comparar con los resultados experimentales extrínsecos, al igual que hicimos en el capítulo anterior, hemos introducido las resistencias extrínsecas de fuente  $R_S$  y drenador  $R_D$  ( $0.13 \Omega\text{mm}$  y  $0.38 \Omega\text{mm}$  respectivamente) y una barrera de  $0.03$  V que ya justificamos en su momento. Como se puede observar en la figura VI.2, la implementación de la ionización por impacto en nuestro modelo ha permitido reproducir la tendencia de los resultados experimentales para voltajes mayores de  $0.3$  V. A partir de este voltaje, la ionización por impacto y el movimiento de los huecos generados juegan un papel decisivo a la hora de estudiar el comportamiento de este tipo de dispositivos, apareciendo un kink muy pronunciado, caracterizado por un aumento de la conductancia de drenador y de la tensión umbral para  $V_{DS}$  altas.

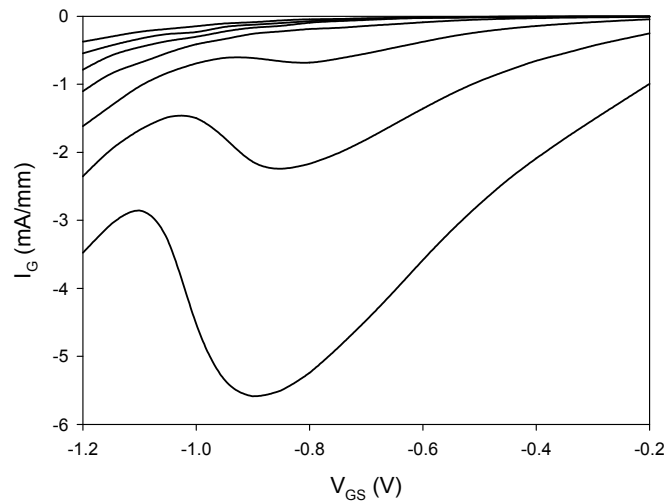


**Figura VI.2:** Comparación de los resultados experimentales (línea negra continua) y simulaciones MC sin ionización (círculos rojos) y con ella (triángulos azules). (a)  $I_D$  en función de  $V_{DS}$  para valores de  $V_{GS}$  entre  $-0.65$  V y  $-1.15$  V con intervalos de  $-0.1$  V y (b)  $I_D$  en función de  $V_{GS}$  para  $V_{DS}$  entre  $0.1$  y  $0.6$  V en intervalos de  $0.1$  V.

Mientras que en el caso de HEMTs de InGaAs/InAlAs [Vasallo *et al.* 2003] el aumento de la corriente de drenador asociado a la ionización por impacto y a la presencia de huecos era mayor cuanto más negativa era la polarización de puerta, y por tanto, cuanto más cerrado estaba el canal, en el caso que nos ocupa esto no es tan claro. En el caso del InAs, el pequeñísimo gap del canal hace que los electrones no necesiten un potencial de puerta más negativo para alcanzar una energía suficiente

que les permita generar ionizaciones por impacto. Por esta misma razón, la ionización no está restringida a los lugares del canal donde la energía de los electrones es máxima, debajo de la puerta, sino que como veremos más adelante se produce también en la región entre el canal y el drenador.

Recordemos que la finalidad de aislar la puerta del HEMT con el óxido nativo era reducir la corriente de puerta. Nuestro simulador no nos permite hacer una estimación de la corriente de puerta dado que no consideramos los huecos que salen por la misma ni los electrones que son inyectados desde el metal a consecuencia de efecto túnel. En los resultados experimentales, al aislar la puerta, la corriente en este terminal disminuye de forma importante, pero la que se mide sigue teniendo la forma de campana característica asociada a la existencia de corriente de huecos que salen por la puerta [Malmkvist *et al.* 2008] [Fig. VI.3], cuyo valor máximo aparece para tensiones  $V_{GS}$  intermedias, suficientemente altas para atraer a los huecos pero no tanto como para cortar el canal.

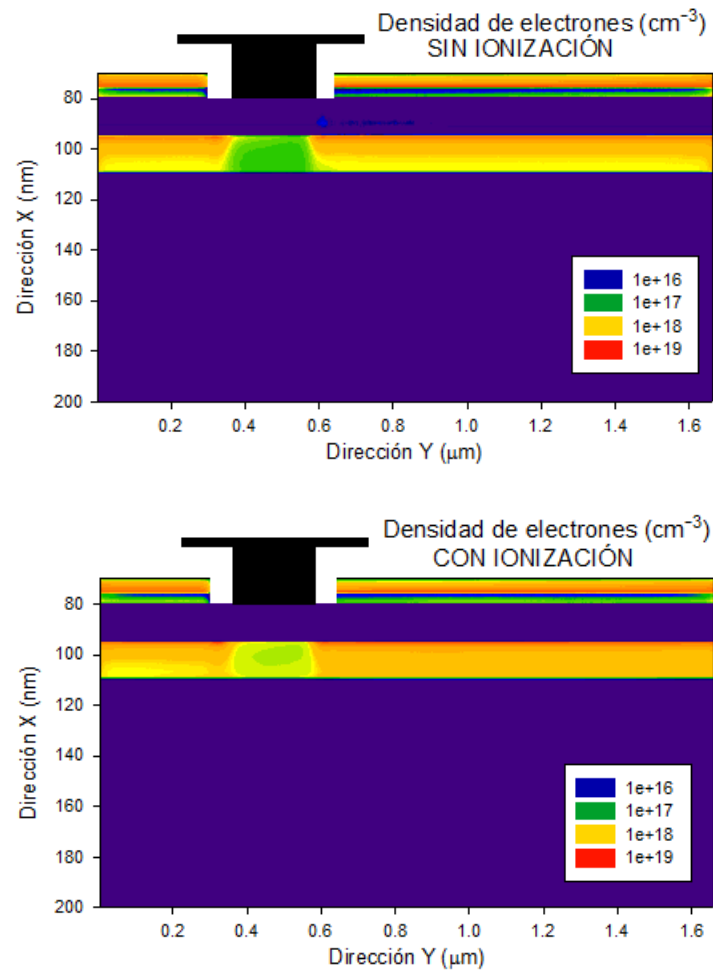


**Figura VI.3:**  $I_G$  experimental en función de  $V_{GS}$  para voltajes de drenador entre  $V_{DS}=0.0$  V y 0.6 V.

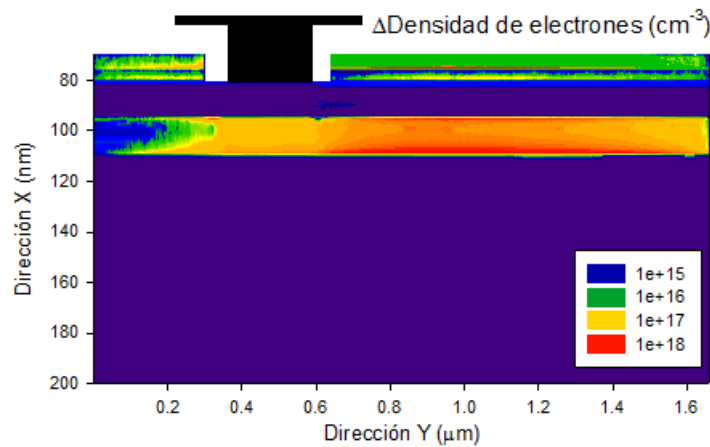
### VI.3 ORIGEN MICROSCÓPICO DEL EFECTO KINK

Para estudiar con más detalle lo que sucede en el interior del dispositivo y averiguar el origen microscópico del efecto kink, nos centramos en un voltaje intrínseco de drenador de 0.4 V. A partir de este momento nos referiremos siempre a voltajes intrínsecos.

Como ya hemos mencionado, en este transistor, y para voltajes de drenador superiores a 0.3 V, los procesos de ionización por impacto aparecen únicamente en las capas de InAs. Por tanto, sólo se producen pares electrón-hueco en el canal y el *cap*. Una vez generados los pares electrón-hueco, los electrones generados en el *cap* se distribuyen entre el *cap* y el AlInAs, mientras que los generados en el canal quedan confinados en él (como cabe esperar dada la enorme barrera de la banda de conducción entre el InAs y el AlSb [Fig. V.2]). Esto podemos verlo al observar la distribución del aumento del número de electrones en interior del dispositivo que ha provocado la ionización por impacto [Fig. VI.5].

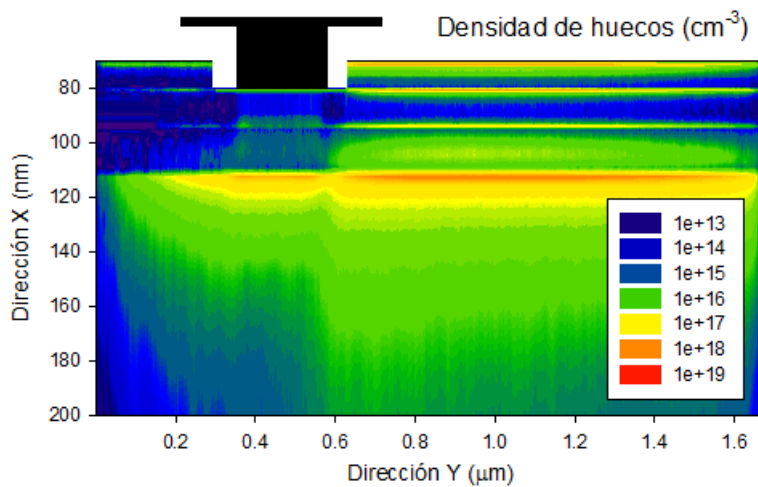


**Figura VI.4:** Densidad de electrones: (a) sin considerar la ionización por impacto y (b) considerándola. Todo para  $V_{DS}=0.4$  V y  $V_{GS}=-0.6$  V.



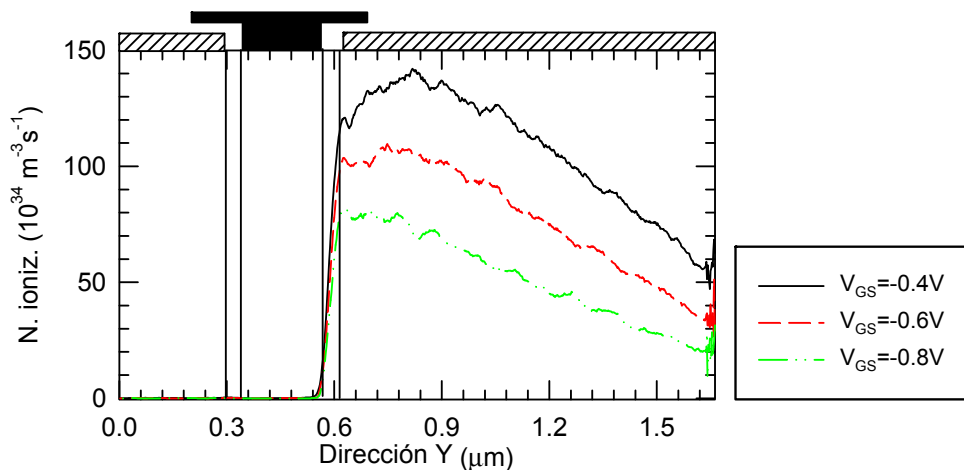
**Figura VI.5:** Diferencia entre la densidad de electrones considerando ionización por impacto y sin considerarla, para  $V_{DS}=0.4$  V y  $V_{GS}=-0.6$  V.

En el caso de los huecos, los generados en el canal, al no haber barrera que los confine (sino que permite que salgan del canal), en cuanto se generan se trasladan al *spacer* y sobre todo al *buffer* [Fig. VI.6]. Una vez que están en el *buffer* y sufren algún mecanismo de *scattering* que reduce su energía, no pueden volver al canal y se quedan confinados en él pese al potencial atractivo de la fuente, sobre todo en la zona cercana la drenador. De hecho, como veremos, prácticamente ningún hueco sale por la fuente, por lo que el aumento de  $I_D$  está totalmente asociado al aumento de la corriente de electrones. Los huecos generados en el *cap* quedan confinados en el mismo debido a la gran barrera que forma en la banda de valencia con el AlInAs.



**Figura VI.6:** Densidad de huecos en el interior del dispositivo para  $V_{DS}=0.4$  V y  $V_{GS}=-0.6$  V.

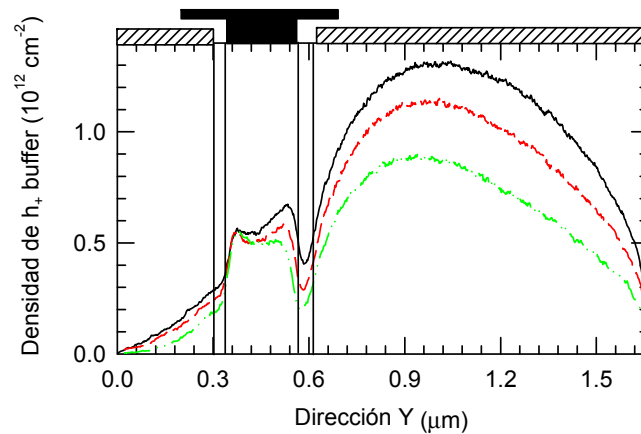
Como ya hemos mencionado, la ionización por impacto se produce solamente en el *cap* y en el canal. Centremos ahora la atención en el canal. En la figura VI.7 se observa que para este potencial de drenador la gran mayoría de mecanismos de ionización por impacto se producen del lado del drenador, y en mayor medida en la parte cercana al *recess*, donde el campo es mayor, y por tanto también la energía de los electrones. Para este voltaje de drenador se observa que cuanto más abierto está el canal, más ionizaciones por impacto tenemos [Fig. VI.7]. Esto ocurre porque, como mencionamos con anterioridad, el gap del InAs es muy pequeño, y por tanto los electrones no necesitan aumentar su energía a partir del potencial de puerta para poder ionizar, les basta con que haya suficiente  $V_{DS}$  aplicada. Por eso habrá más ionizaciones cuantos más electrones haya en el canal, es decir, cuanto más abierto esté ( $V_{GS}$  menos negativa).



**Figura VI.7:** Perfil del número de ionizaciones por impacto por unidad de volumen y de tiempo acaecidas en el canal para  $V_{DS}=0.4$  V y tres valores de  $V_{GS}$ : -0.4 V (línea continua negra), -0.6 V (línea discontinua roja) y -0.8 V (línea-punto verde).

Como hemos visto, la mayoría de huecos que se generan en el canal van a parar al *buffer* [Fig. VI.6] donde se acumulan fundamentalmente en la región de drenador y en el canal [Fig. VI.8]. Estos portadores son tan lentos que pocos son capaces de alcanzar la fuente, en su mayoría se recombinan antes, dando lugar a una aportación casi nula de los huecos a la corriente de drenador  $I_D$ . Esta acumulación de carga

positiva en el *buffer* contrarresta en parte el voltaje negativo de la puerta y es la causante del aumento en  $I_D$  que caracteriza el efecto kink. Aquí hay una interesante diferencia respecto a lo que ocurre en HEMTs de InGaAs, donde la acumulación de huecos tiene lugar fundamentalmente bajo la puerta. En el caso de los Sb-HEMTs, los huecos se generan principalmente en la zona de drenador, dando lugar a un aumento considerable de la conductancia de drenador, ya que la puerta no apantalla el efecto de la tensión  $V_{DS}$ . Se suman así dos efectos: i) el aumento de la tensión umbral debido a los huecos que se acumulan bajo la puerta, y ii) la disminución de la resistencia de drenador por los huecos que se sitúan en la región puerta-drenador.

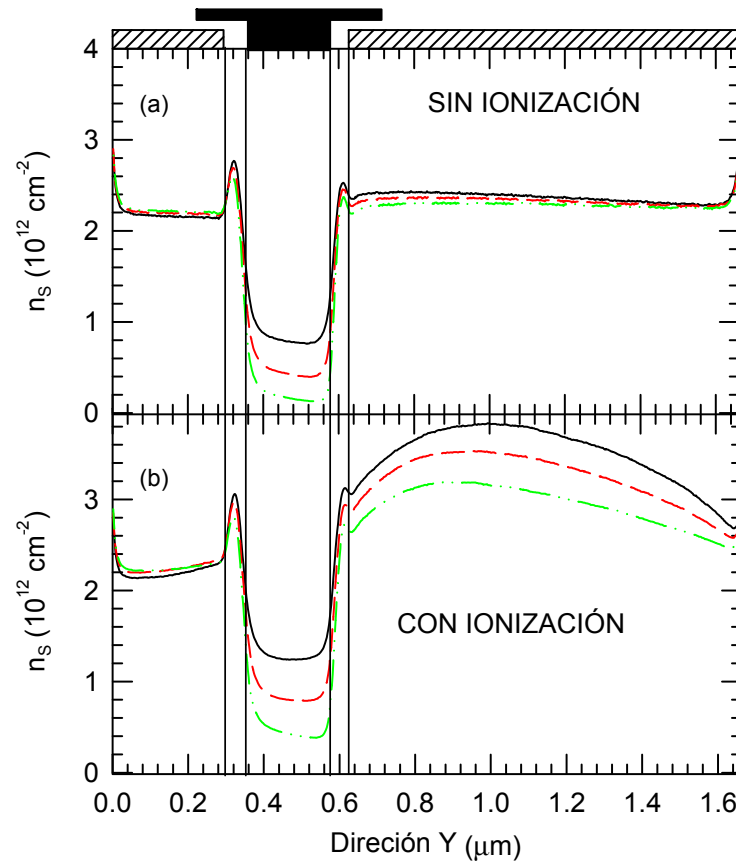


**Figura VI.8:** Perfil de densidad de huecos en el *buffer* para  $V_{DS}=0.4$  V y tres valores de  $V_{GS}$ : -0.4 V (línea continua negra), -0.6 V (línea discontinua roja) y -0.8 V (línea-punto verde).

En cuanto a los electrones generados por la ionización por impacto en el interior del canal, como mencionamos anteriormente, no son capaces de abandonarlo y quedan confinados en él. En la figura VI.9 mostramos los perfiles de concentración de electrones en el canal sin ionización por impacto y con ella para las tres polarizaciones de puerta ( $V_{GS}=-0.4$ , -0.6 y -0.8 V) y  $V_{DS}=0.4$  V. Observamos cómo, debido a la ionización por impacto, el canal se cierra menos para un mismo voltaje de puerta, Fig. VI.9(a) y (b), dando lugar a un aumento de la tensión umbral (ya observado en las características I-V, figura VI.2). Esto es debido al aumento de carga positiva en el *buffer* que contrarresta el potencial aplicado en la puerta y hace que en el caso con ionización el canal permanezca más abierto. Mientras que en la región

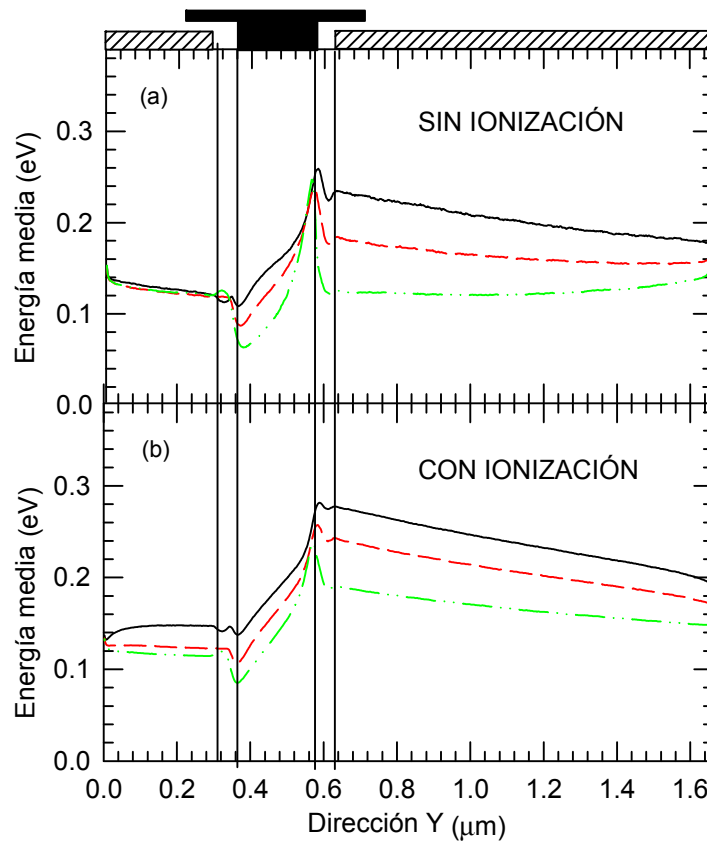


cercana a la fuente la ionización prácticamente no juega ningún papel, en la zona del *recess* la concentración de electrones aumenta considerablemente al aumentar el efecto de la ionización por impacto (o lo que es lo mismo, al tomar  $V_{GS}$  valores menos negativos) debido al aumento de la concentración de huecos en esa zona del *buffer* [Fig. VI.8].



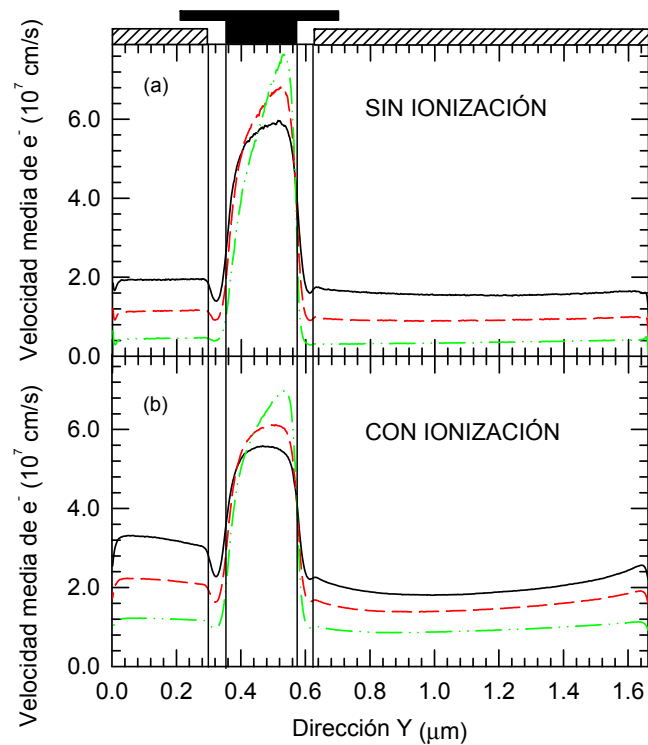
**Figura VI.9:** Perfiles de densidad de electrones en el canal para  $V_{DS}=0.4$  V y tres valores de  $V_{GS}$ : -0.4 V (línea continua negra), -0.6 V (línea discontinua roja) y -0.8 V (línea-punto verde). (a) Sin considerar la ionización por impacto y (b) con ella.

En la figura VI.10 llevamos a cabo una comparación de la energía cinética media de los electrones con y sin considerar la ionización por impacto. Como es lógico, la energía de los electrones es mayor en la parte del drenador cercana a la puerta y, por tanto, como ya hemos visto, es ahí donde se producen mayor número de ionizaciones por impacto.



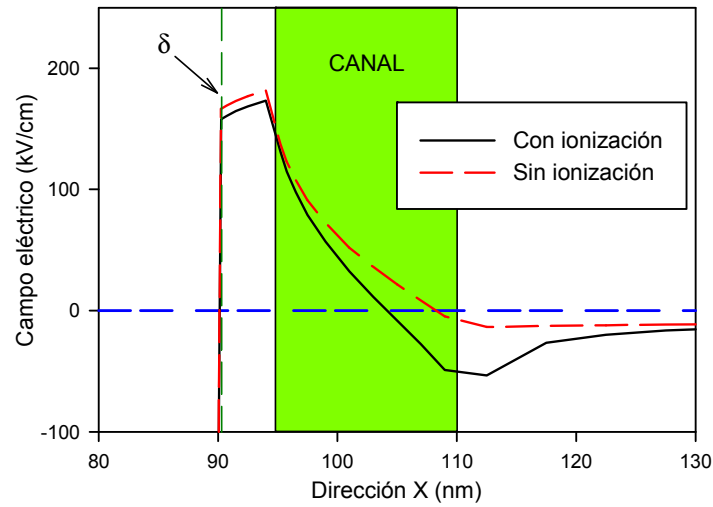
**Figura VI.10:** Perfiles de energía media de los electrones en el canal para  $V_{DS}=0.4$  V y tres valores de  $V_{GS}$ : -0.4 V (línea continua negra), -0.6 V (línea discontinua roja) y -0.8 V (línea-punto verde). (a) sin considerar la ionización por impacto y (b) con ella.

En cuanto a la velocidad media de los electrones en el canal [Fig. VI.11], observamos que aumenta en la zona de la fuente a consecuencia de la ionización por impacto. Esto se debe a que en esta región la densidad de portadores no se ve prácticamente modificada pese al aumento de la corriente de drenador, siendo precisa una mayor velocidad de los portadores para mantener la continuidad de la corriente, la cual se alcanza por el ligero incremento del campo eléctrico en esa zona (no mostrado). En el resto del dispositivo, el aumento de la densidad de electrones [Fig. VI.9] hace que el incremento de velocidad sea menor, e incluso que en algunos lugares, como debajo de la puerta, disminuya ligeramente.



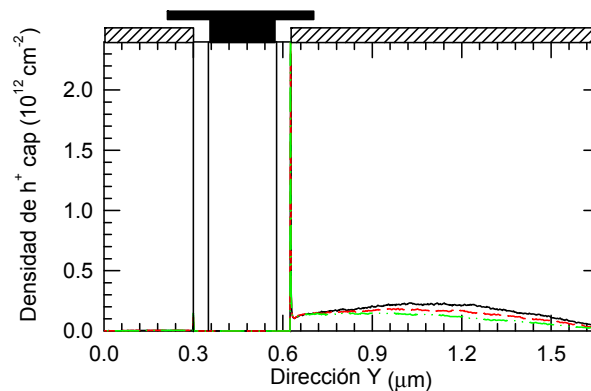
**Figura VI.11:** Perfiles de velocidad media de los electrones en el canal para  $V_{DS}=0.4$  V y tres valores de  $V_{GS}$ :  $-0.4$  V (línea continua negra),  $-0.6$  V (línea discontinua roja) y  $-0.8$  V (línea-punto verde). (a) sin considerar la ionización por impacto y (b) con ella.

En la figura VI.12 mostramos el campo eléctrico en la región del *recess* cercana a la fuente a lo largo de la dirección X (perpendicular al transporte). Podemos ver que cuando no hay acumulación de huecos en el *buffer* (caso sin ionización), el campo eléctrico en el canal toma valores positivos, por lo que los electrones tienden a moverse por la parte superior del canal. En el caso de considerar ionización por impacto, la presencia de un campo vertical negativo en las proximidades del *buffer* a consecuencia de la acumulación de huecos, promueve la entrada de electrones en la parte activa del dispositivo, muchos de ellos por la parte inferior del canal. Esto se ve también reflejado en la figura VI.5, donde observamos el aumento de portadores en la parte inferior del canal que aparece como consecuencia de la ionización por impacto.



**Figura VI.12:** Comparación de los perfiles de campo eléctrico a lo largo de la dirección X bajo la parte del *recess* cercana a la fuente, sin ionización por impacto (línea roja discontinua) y con ionización por impacto (línea negra continua) para  $V_{DS}=0.4$  V y  $V_{GS}:-0.6$  V

Si centramos la atención en lo que sucede en el *cap* [Fig. VI.13], los huecos que se generan en él no pueden bajar al AlInAs debido a la barrera en la banda de valencia, por lo que se acumulan en la parte lo más cercana posible a la puerta, lugar en el cual van desapareciendo por recombinación. Estos huecos contribuyen también al aumento de la concentración de electrones en la región puerta-drenador del canal.



**Figura VI.13:** Perfil de densidad de huecos en el *cap* para  $V_{DS}=0.4$  V y tres valores de  $V_{GS}$ : -0.4 V (línea continua negra), -0.6 V (línea discontinua roja) y -0.4 V (línea-punto verde).

---

En este capítulo hemos estudiado la ionización por impacto a través de la simulación MC, permitiéndonos ratificar la falta de influencia que tiene para voltajes de drenador menores de 0.3 V (región en la que fue calculado el circuito equivalente), así como explicar el efecto kink en términos de la acumulación de huecos en el *buffer*. Debido a la estructura de bandas de este dispositivo, los huecos generados por la ionización por impacto en el canal se acumulan en el *buffer*, apantallando la tensión de puerta por lo que se abre más el canal. Esta mayor apertura del canal provoca el aumento de  $I_D$  característico del efecto kink.



## CONCLUSIONES

En este trabajo se recoge un estudio detallado de HEMTs basados en semiconductores de gap estrecho a partir de los resultados obtenidos de simulaciones MC. Con el fin de realizar un análisis sólido de estos transistores, se han caracterizado y estudiado los semiconductores involucrados, así como las heteroestructuras que forman y en las que están basados estos HEMTs. Se ha expuesto el proceso de fabricación del dispositivo y, tras validar nuestro simulador mediante la comparación con medidas experimentales, hemos estudiado las características tanto estáticas como dinámicas del mismo. Para finalizar hemos estudiado los efectos de la ionización por impacto en las características estáticas del transistor, prestando especial interés a la interpretación física del efecto kink.

Ha continuación se recogen las principales conclusiones obtenidas de cada apartado de esta memoria.

### Semiconductores:

De la caracterización y posterior estudio de los materiales involucrados en los HEMTs basados en semiconductores de gap estrecho se han obtenido las siguientes conclusiones.

- Tras un laborioso trabajo bibliográfico y de simulación hemos obtenido los parámetros que nos permiten reproducir los escasos resultados experimentales disponibles, tanto de los materiales de gap estrecho que formarán el canal (InAs e InSb), como de los que darán lugar a la barrera que confina los portadores en el canal (AlSb y AlInSb).

- Debido al pequeño gap tanto del InAs como del InSb, la ionización por impacto tiene importancia ya para campos aplicados relativamente pequeños, aumentando la velocidad media de los electrones por el incremento de concentración de portadores en el valle  $\Gamma$ .
- Pese a la pequeñísima masa efectiva del primer valle del InSb (menor que la del InAs), el máximo de la curva velocidad-campo es menor para el InSb que para el InAs, debido a su elevado coeficiente de no parabolicidad junto con una menor distancia al segundo valle.
- El aumento de la fracción molar de In en el  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  supone un incremento de la movilidad de  $1.1 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  a  $2.7 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  al pasar de  $x=0.53$  (material comúnmente utilizado en el canal de HEMTs “tradicionales” de InGaAs/AlGaAs) a  $x=1$ . La distancia energética al segundo valle también aumenta a medida que crece la fracción molar de In. Por tanto se ha comprobado que el comportamiento del canal de un HEMT fabricado con InGaAs mejora apreciablemente al aumentar su fracción molar de In.

#### Heterouniones AlSb/InAs y AlInSb/InSb:

De la comparación de los resultados de la simulación de las heteroestructuras AlSb/InAs y AlInSb/InSb hemos obtenido las siguientes conclusiones:

- Al igual que en cualquier otra heteroestructura, la densidad de carga superficial  $\sigma$  contrarresta la fuerza de atracción ejercida por la capa  $\delta$ , que hace que los electrones se localicen en la parte superior del canal.
- Hemos observado un total confinamiento de los electrones en el canal en la heteroestructura de AlSb/InAs debido al elevado salto en la banda de conducción entre estos dos semiconductores (1.35 eV). Por el contrario, en la heteroestructura formada por AlInSb/InSb este salto de la banda de conducción es muy pequeño, disminuyendo el confinamiento de los electrones en el canal y degradándose así la movilidad de la estructura por la conducción a través del material que forma la barrera.
- Se ha disminuido el valor de la carga en la capa  $\delta$  y se ha acercado al canal con el fin minimizar el número de electrones que circulan por la barrera en la heteroestructura de InSb.



- Se ha puesto de manifiesto la necesidad de tener en cuenta la rugosidad de la interfaz de la heterounión a la hora de reproducir los resultados experimentales de estas dos heteroestructuras. En el caso de AlSb/InAs es necesario considerar como difusivas un 2% de las interacciones con las heterouniones AlSb/InAs, mientras que en el caso del AlInSb/InSb este porcentaje se ve incrementado hasta el 7% debido a imperfecciones en el proceso de crecimiento de las heteroestructuras basadas en InSb.

#### HEMTs:

Con el fin de validar nuestro simulador, hemos comparado los resultados experimentales de un HEMT de puerta aislada basado en InAs con los resultados obtenidos de la simulación.

- Se ha conseguido un buen ajuste de las características estáticas obtenidas de la simulación y las experimentales para voltajes de drenador menores de 0.3 V sin necesidad de introducir en la simulación la ionización por impacto.
- El buen ajuste encontrado con los resultados experimentales tanto para  $C_{gs}$  como para  $C_{gd}$  no se ha podido conseguir ni para  $g_d$  ni para  $C_{gs}$  debido probablemente a la dispersión en frecuencia que aparece en las medidas experimentales (que atribuimos a la presencia de huecos en el *buffer*).
- Pese al buen acuerdo encontrado con los resultados experimentales de la transconductancia extrínseca, los problemas que hemos encontrado a la hora de reproducir  $g_d$  se ven reflejados en la transconductancia intrínseca, debido a la relación existente entre ellas.

Una vez validado nuestro modelo de simulación, la comparación de las simulaciones de HEMTs con distintas topologías nos ha llevado a obtener las siguientes conclusiones:

- La presencia de óxido nativo bajo la puerta (introducido con el fin de disminuir la corriente de este terminal) reduce el control de puerta, disminuyendo  $g_m$  así como  $C_{gs}$ ,  $C_{gd}$  y  $f_c$ . Pero la estimación de  $f_t$  revela que el funcionamiento extrínseco a alta frecuencia no se ve excesivamente degradado.

- El valor de la densidad de carga que en la simulación situamos en la interfaz óxido-semiconductor con el fin de dar cuenta de la carga superficial en esta interfaz, así como de la carga volúmica que pueda aparecer en el óxido, solamente introduce un desplazamiento de la tensión umbral, por lo que podemos considerarla como un parámetro a ajustar a partir de los resultados experimentales.
- Al considerar óxidos de diferentes espesores y constantes dieléctricas se encuentran comportamientos equivalentes al aumentar (disminuir) el grosor del óxido y al disminuir (aumentar) su constante dieléctrica. A falta de información sobre las características exactas del óxido nativo que se forma se ha encontrado un buen acuerdo con los resultados experimentales considerando 2 nm de óxido de constante dieléctrica 2.2.
- La densidad de electrones en el canal (correspondiente a la  $n_s$  Hall medida experimentalmente en la estructura epitaxial sin *recess*), podría verse modificada durante el proceso de fabricación, por lo que hemos estudiado los posibles efectos que conlleva su variación. Hemos observado que un aumento de  $n_s$  desplaza el máximo de  $g_m$  (y por tanto también de  $f_c$  y  $f_t$ ) hacia  $I_D$  mayores, encontrándose un mejor acuerdo con los resultados experimentales.

Debido al pequeñísimo gap del InAs, se ha estudiado cómo afecta la ionización por impacto a las características estáticas del HEMT basado en InAs/AlSb, prestando especial atención a la interpretación física del efecto kink.

- Sólo aparecen procesos de ionización por impacto en las capas de InAs (el *cap* y el canal) y sólo son generados por electrones, no por huecos.
- A diferencia de los HEMTs con canal de InGaAs, en los basados en InAs la ionización por impacto no aumenta para tensiones de puerta más negativas, dado que, a consecuencia del pequeño gap del InAs, los electrones no necesitan un potencial de puerta negativo para generar ionizaciones. De hecho, el número de procesos de ionización por impacto aumenta a medida que hay más portadores (tensión de puerta menos negativa).

- La ionización por impacto en el canal no se produce solamente bajo la puerta, sino principalmente en la región entre el *recess* y el drenador.
- Los huecos generados por ionización por impacto en el canal, debido a la estructura de bandas de estos materiales, se dirigen en su mayoría al *buffer*, donde se acumulan. Esta acumulación de carga positiva en el *buffer* contrarresta en parte la tensión de puerta, aumentando la apertura del canal y por tanto la densidad de electrones en la parte activa del dispositivo, produciéndose con ello el incremento de la tensión umbral y de  $I_D$  característicos del efecto kink.
- La mayor parte de los huecos acumulados en el *buffer* se recombinan antes de llegar a la puerta, por lo que prácticamente no contribuyen al aumento de  $I_D$ , que está sólo asociado a que el canal está más abierto.
- La presencia de los huecos modifica la distribución del campo eléctrico aumentando la concentración de electrones en la parte inferior del canal.
- Los huecos generados en el *cap* se acumulan en la parte del *cap* cercana a la puerta, donde se van recombinando.

En esta tesis no sólo se han sentado las bases para la correcta simulación de HEMTs de gap estrecho, sino que también se ha obtenido la información necesaria para la posterior optimización de este tipo de dispositivos.



Esta Tesis Doctoral se ha realizado con la ayuda de una beca de **Formación de Personal Investigador (FPI)**, 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.
- European GDR Project - Semiconductor sources and detectors of THz frequencies. CNRS, Francia y la Russian Fundation for Basic Research.
- Modelización y desarrollo de HEMTs basados en semiconductores III-V de gap estrecho (InAs) y gap ancho (GaN) (SA019A08). Consejería de Educación y Cultura de la Junta de Castilla y León
- Synchronization of plasma waves for terahertz applications in nanotransistors (HF-2007-0014). Ministerio de Educacion y Ciencia, Acciones Integradas.
- Dispositivos semiconductores para aplicaciones en el rango de los THz: nuevos materiales y arquitecturas, Junta de Castilla y León.
- Fabricación y optimization of Sb-HEMTs for high frequency and low Noise applications (NARROWHEMT) (MC2ACCESS, contrato nº 026029). Comisión Europea
- Semiconductor nanodevices for room temperature THz emission and detection (ICT-2009-243845). Financiado por la Comisión Europea.

Parte de los resultados que se han presentado en esta Memoria se encuentran publicados en los siguientes **artículos de revistas**:

- H. Rodilla, T. González, D. Pardo and J. Mateos, «High-mobility heterostructures based on InAs and InSb: A Monte Carlo study», en *Journal of Applied Physics*, vol. 105 (2009) pp. 113705-1 a 113705-6.
- I. Iñiguez-de-la-torre, H. Rodilla, J. Mateos, D. Pardo, A. M. Song and T. González, «Terahertz tuneable detection in Self-Switching Diodes based on high mobility Semiconductors: InGaAs, InAs and InSb», en *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 193 (2009), pp. 012082.
- G. Sabatini, M. Marinchio, C. Palermo, L. Varani, T. Daoud, R. H. Rodilla, T. González and J. Mateos, «Monte Carlo simulation of ballistic transport in high-mobility channels», *Journal of Physics: Conference Series*, vol 193 (2009), pp. 01203
- B. G. Vasallo, H. Rodilla, T. González, E. Lefebvre, G. Moschetti, J. Grahn and J. Mateos, «Monte Carlo analysis of impact ionization in Isolated-Gate InAs/AlSb High Electron Mobility Transistors», enviado a *Journal of Applied Physics*.
- H. Rodilla., T. González , G. Moschetti, J. Grahn and J. Mateos, «Dynamic Monte Carlo study of isolated-gate InAs/AlSb HEMTs», enviado a *Semicond. Sci. Technol.*

Igualmente, parte de los resultados se han presentado en comunicaciones de **congresos**:

- H. Rodilla, T. González, D. Pardo and J. Mateos, «Monte Carlo Simulation of Sb-based Heterostructures», Spanish Conference on Electron Devices (CDE 2009). Publicado en *IEEE Catalog CFP09589*, pp 152-155.
- H. Rodilla, J. Mateos, T. González, M. Malmkvist, E. Lefebvre and J. Grahn. «Monte Carlo Simulation of Sb-based Heterostructures», 33th Workshop on Compound Semiconductor Devices and Integrated Circuits (WOCSDICE 2009).

- 
- I. Iñiguez-de-la-Torre, H. Rodilla, J. Mateos, D. Pardo, A. M. Song and T. González, «Noise enhanced THz rectification tuned by geometry in planar asymmetric nanodiodes», 20th International Conference on Noise and Fluctuations (ICNF 2009). Publicado en *AIP Conference Proceedings* 1129, 229-232, (2009).
  - G. Sabatini, M. Marinchio, L. Varani, C. Palermo, J. F. Millithaler, L. Reggiani, H. Rodilla, T. González, S. Pérez and J. Mateos, «Monte Carlo análisis of Boise spectra in InAs channels from diffusive to ballistic regime», 20th International Conference on Noise and Fluctuations (ICNF 2009). Publicado en *AIP Conference Proceedings* 1129, 345-348, (2009).
  - H. Rodilla, D. Pardo, T. González, S. Pérez, B. G. Vasallo, A. Iñiguez de la Torre, G. Moschetti, M. Malmkvist, E. Lefebvre, P.-Å. Nilsson, J. Grahn and Javier Mateos «Fabrication and Optimization of Sb-HEMTs for High Frequency and low noise applications», MC2ACCESS Workshop, Göteborg, Marzo 2010.
  - H. Rodilla, T. González, M. Malmkvist, E. Lefebvre, G. Moschetti, J. Grahn and J. Mateos, «Isolated-gate InAs/AlSn HEMTs: A Monte Carlo study» 22<sup>nd</sup> IEEE International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (IPRM 2010). En prensa.
  - G. Moschetti, P.-Å. Nilsson, L. Desplanque, X. Wallart, H. Rodilla, J. Mateos and J. Grahn, «DC and RF cryogenic behaviour of InAs/AlSb HEMTs» 22<sup>nd</sup> IEEE International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (IPRM 2010). En prensa.
  - B. G. Vasallo, H. Rodilla, T. González, E. Lefebvre, G. Moschetti, J. Grahn, and J. Mateos, «Monte Carlo analysis of impact ionization in Isolated-Gate InAs/AlSb High Electron Mobility Transistors», 14<sup>th</sup> International Symposium on Ultrafast Phenomena in Semiconductors (UFPS 2010). Enviado al *Acta Physica Polonica (A)*.





## APÉNDICE

Densidad (Kg/m <sup>3</sup> )	4713		
Velocidad del sonido (m/s)	4991		
Permitividad relativa estática	10.22		
Permitividad relativa óptica	12.62		
GAP (eV)	1.502		
Gap split-off (eV)	0.15		
Constante de red (Å)	5.8598		
Energía fonón óptico (eV)	0.04		
	Γ	L	X
Masa efectiva (m <sup>*</sup> /m <sub>0</sub> )	0.0865	0.250	0.450
Coef. no parabolicidad (eV <sup>-1</sup> )	1.39	0.54	0.90
Energía desde el valle Γ (eV)	0.0	0.5	0.6
Pot. def. acústico (eV)	5.93	7.23	9.02
Pot. def. óptico (eV)	0.0	2.29	0.0
Pot. def. intervale (10 <sup>10</sup> eV/m)			
desde Γ	0.0	5.25	3.82
desde L	5.25	6.55	8.06
desde X	3.82	8.60	5.72
Energía fonón intervale (eV)			
desde Γ	0.0	0.0293	0.0293
desde L	0.0293	0.0303	0.0322
desde X	0.0293	0.0322	0.03268
	HH	LH	SO
Masa efectiva (m <sup>*</sup> /m <sub>0</sub> )	0.7012	0.2002	0.2072
Coef. no parabolicidad (eV <sup>-1</sup> )	1.05	1.00	0.68
Energ umbral ioniz. por imp.(eV)	0.38232		
Pot. def. óptico huecos (eV/m)	2.6		
Pot. def. acústico huecos (eV)	4.95		
Parámetro ioniz. por imp. S (10 <sup>12</sup> s <sup>-1</sup> )	ajustable entre 0-1		

**Tabla A.1:** Parámetros de los electrones del Al<sub>0.5</sub>In<sub>0.5</sub>As obtenidos mediante interpolación lineal de los del InAs y los del AlAs.



## BIBLIOGRAFÍA

- Aymerich-Humet X., Serra-Mestres F. and Millán J. “An analytical approximation for the Fermi-Dirac integral  $F_{3/2}(\eta)$ ”, *Solid-State Electronics*, **24**, 981 (1981).
- Beneking H., *High speed semiconductor devices*, (Chapman & Hall, London, 1994)
- Bennett B. R., Magno R., Boos J. B., Kruppa W. and Ancona M. G., “Antimonide-based compound semiconductors for electronic devices: A review”, *Solid-State Electron.*, **49**, 1875 (2005).
- Bergman J., Nagy G., Sullivan G., Brar B., Kadow C., Lin H.-K., Gossard A., and Rodwell M., “InAs/AlSb HFETs with  $f_t$  and  $f_{max}$  above 150 GHz for low power MMICs”, Proceedings of the International Conference on Indium Phosphide and Related Materials, Santa Barbara, CA, 2003.
- Blakemore J. S., “Approximations for Fermi-Dirac integrals, especially the function  $f_{1/2}(\eta)$  used to describe electron density in a semiconductor”, *Solid-State Electron.*, **25**, 1067 (1982).
- Boardman A.D., “Computer simulation of hot electron behaviour in semiconductors using Monte Carlo methods”, in *Physics Programs*, edited by A. D. Boardman (Wiley, New York, 1980)
- Bocchi C., Bosacchi A., Ferrari C., Franchi S., Franzosi P., Magnanini R. and Nasi L., “Determination of lattice parameters in the epitaxial AlSb/GaSb system by high resolution X-ray diffraction”, *J. Crystal Growth*, **165**, 8 (1996).

- Bolognesi C. R., Kroemer H., and English J. H., "Interface roughness scattering in InAs/AlSb quantum wells", *Appl. Phys. Lett.* **61**, 213 (1992).
- Bolognesi C. R., Dvorak M. W., and Chow D. H., "Impact ionization suppression by quantum confinement: Effects on the DC and Microwave Performance of narrow-gap channel InAs/AlSb HFETs", *IEEE Trans. Electron Devices*, **46**, 826 (1999).
- Boos J. B., Kruppa W., Bennett B. R., Park D., Kirchoefer S. W., Bass R. and Dietrich H. B., "AlSb/InAs HEMT's for low-voltage, high-speed applications", *IEEE Trans. Electron Devices*, **45**, 1869 (1998).
- Borg M., Lefevre E., Malmkvist M., Desplanque L., Wallart X., Roelens Y., Dambrine G., Cappy A., Bollaert S., and Grahn J. "Effect of gate length in InAs/AlSb HEMTs biased for low power or high gain", *Solid-State Electronics*, **52**, 775 (2008).
- Bosi S. and Jacoboni C., "Monte Carlo high-field transport in degenerate GaAs", *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **9**, 315, (1976).
- Brennan K. and Hess K., "High-field transport in GaAs, InP, and InAs," *Solid-State Electron.*, **27**, 347, (1984).
- Brudevoll T., Fjeldly T.A., Baek J. and Shur M.S., "Scattering rates for holes near the valenceband edge in semiconductors", *J. Appl. Phys.* **67**, 7373 (1990).
- Chang C.-Y., Hsu H.-T, Chang E. Y. Kuo C.-I., Datta S, Radosavljevic M., Miyamoto Y. and Huang G.-W., "Investigation of impact ionization in InAs-channel HEMT for high-speed and low-power applications", *IEEE Electron Device Lett.*, **28**, 856 (2007).
- Chou Y. C., Lange M. D., Bennett B. R., Boos J. B., Yang J. M., Papanicolaou N. A., Lin C. H., Lee L. J., Nam P. S., Gutierrez A. L., Farkas D. S., Tsai R. S., Wojtowicz M., Chin T.P. and Oki A.K., "0.1  $\mu\text{m}$  In<sub>0.2</sub>Al<sub>0.8</sub>Sb-InAsHEMT low-noise amplifiers for ultralow-power applications", *Electron Devices Meeting, 2007 (IEDM 2007). IEEE international.*
- Cobweb, <http://cobweb.ecn.purdue.edu/~mslhub/MaterialsDBase/frames.html>

- Dambrine G., Cappy A., Heliodore F. and Playez E., “A new method for determining the FET small-signal equivalent circuit”, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, **32**, 1151 (1988).
- Damocles, [http://www.research.ibm.com/DAMOCLES/html\\_files/numerics.html](http://www.research.ibm.com/DAMOCLES/html_files/numerics.html)
- Dobrovolskiy Z., Grigoras K., and Krotkus A., “Measurements of the hot-electron conductivity in semiconductors using ultrafast electric pulses,” *Appl. Phys. A*, **48**, 245, (1989).
- Fawcett W., Hilsum C. and Rees H. D., “Optimum semiconductor for microwave devices”, *Electron. Lett.* **5**, 313 (1969).
- Ferry D. K. and Grondin R. O., *Physics of Submicron Devices*, (Plenum Press, New York, 1991).
- Fischetti 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).
- Fischetti M. V., “Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures –part I: homogeneous transport”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **38**, 634 (1991).
- Ghandhi S. K., *VLSI fabrication principles, silicon and gallium arsenide*, (John Wiley & sons, New York, 1994).
- Glaser E. R., Bennett, B. R., Shanabrook B. V. and Magno R., “Photoluminescence studies of self-assembled InSb, GaSb, and AlSb quantum dot heterostructures”, *Appl. Phys. Lett.*, **68**, 3614 (1996).
- Gold A., “Electronic transport properties of a two-dimensional electron gas in a silicon quantum-well structure at low temperature”, *Phys. Rev. B*, **35**, 723 (1987).
- González T., Pardo D., Varani L., and Reggiani L., “Spatial analysis of electronic noise in submicron semiconductor structures”, *Appl. Phys. Lett.*, **63**, 84 (1993a).
- González T., Pardo D., Varani L., and Reggiani L., “Monte Carlo analysis of noise spectra in Schottky-barrier diodes”, *Appl. Phys. Lett.*, **63**, 3040 (1993b).

- González T., “Análisis de Ruido Electrónico en Materiales y Dispositivos Semiconductores Unipolares mediante el Método de Monte Carlo.”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 1994).
- González T. and Pardo D., “Monte Carlo determination of the intrinsic small-signal equivalent circuit of MESFETs”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **42**, 605 (1995).
- González T. and Pardo D., “Physical models of ohmic contact for Monte Carlo device simulation”, *Solid-State Electron.* **39**, 555 (1996).
- Herbert D.C., Childs P. A., Abram R. A., Crow G.C. and Walmsley M., “Monte Carlo simulations of high-speed InSb-InAlSb FETs”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **52**, 1072 (2005).
- Hess K., editor, *Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond* (Kluwer Academic, Norwell, 1991).
- Hori Y., Miyamoto Y., Ando Y. and Supino O., “First principles band structure calculation and electron transport for strained InAs”, *10<sup>th</sup> Intern. Conf on Indium Phosphide and Related Materials 11-15 May 1998 Tsukuba, Japan.*
- Iñiguez de la Torre. I. “Análisis de efectos de carga superficial en nanodispositivos semiconductores modelizados mediante simulaciones Monte Carlo”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 2008).
- Ioffe, <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/>
- Jacoboni 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).
- Jacoboni C. and Lugli P., *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*, (Springer-Verlag, Wien, New York, 1989).
- Kim D.-H. and del Alamo J. A., “30-nm InAs pseudomorphic HEMTs on an InP substrate with a current-gain cutoff frequency of 628 GHz” *IEEE Electron Devices Lett.*, **29**, 830 (2008).

- Kalna K. and Asenov A., “Gate tunnelling and impact ionisation in sub 100 nm PHEMTs”, *IEICE Trans. Electron. (Special issue on the IEEE International Conference on SISPAD'02)* **E86-C**, 330 (2003).
- Kalna K., Yang L. and Asenov A., “Monte Carlo simulations of sub-100nm InGaAs MOSFETs for digital applications”, *Proceedings of ESSDERC, Grenoble, France*, (2005).
- Kroemer H., “The 6.1 Å family (InAs, GaSb, AlSb) and its heterostructures: a selective review”, *Phys. E*, **20**, 196 (2004).
- Kruppa W., Boos J. B., Benett B. R., Papanicolaou N. A., Park D. and Bass R., “Low-frequency noise in AlSb/InAs and related HEMNTs”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **54**, 1193, (2007) .
- Lai R., Mei X. B., Deal W. R., Yoshida W., Kim Y. M., Liu P. H., Lee J. Uyeda J., Radisic V., Lange M., Gaier T., Samoska L., and Fung A., “Sub 50 nm InP HEMT Device with Fmax Greater than 1 THz”, *Proceedings of IEDM 2007*, 609 (2007).
- Laux S. E., “Techniques for small-signal analysis of semiconductor devices”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **32**, 2028 (1985).
- Lefevre E., Malmkvist M., Borg M., Desplanque L., Wallart X., Dambrine G., Bollaert S., and Grahn J. “Gate-recess technology for InAs/AlSb HEMTs”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **56**, 1904 (2009).
- Lugli 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).
- Madelung O. *Semiconductors: Data handbook* (Springer, Berlin, 2004)
- Malmkvist M., Lefebvre E., Borg M., Desplanque L., Wallart X., Dambrine G., Bollaert S., and Jan Grahn J., “Electrical characterization and small-signal modeling of InAs/AlSb HEMTs for low-noise and high-frequency applications”, *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, **56**, 2685 (2008)

- Martín M. J., “Análisis del Transporte de Carga y de los Fenómenos de Ruido Electrónico en Estructuras Si/Si<sub>1-x</sub>Gex Bipolares”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 1996).
- Mateos J., “Modelización Microscópica del Ruido Electrónico en Estructuras MESFET y HEMT Submicrométricas. Análisis Numérico y Experimental.”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 1997a).
- Mateos J., González T., Pardo D., Tadyszak P., Danneville F., and Cappy A., “Noise and transit time in ungated FET structures“, *IEEE Trans. Electron Devices*, **44**, 2128 (1997b).
- Mateos J., González T., Pardo D., Hoel V., and Cappy A., “Effect of the T-gate on the performance of recessed HEMTs. A Monte Carlo analysis“, *Semicond. Sci. Technol.*, **14**, 864 (1999).
- Mateos J., González T., Pardo D., Hoel V., Happy H., and Cappy A., “Improved Monte Carlo algorithm for the Simulation of  $\delta$ -Doped AlInAs/GaInAs HEMT’s”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **47**, 250 (2000a).
- Mateos J., González T., Pardo D., Höel V., and Cappy A., “Monte Carlo Simulator for the Design Optimization of Low-Noise HEMT’s”, *IEEE Trans. Electron Devices* **47**, 1950 (2000b).
- Mateos J., Vasallo B. G., Pardo D., González T., Galloo J. S., Bollaert S., and Cappy A., “Ballistic nanodevices for THz data processing: Monte Carlo simulations”, *Nanotechnology*, **14**, 117 (2003).
- Matz D., “Effect of nonparabolicity on non-ohmic transport in InSb and InAs,” *Phys. Rev.*, **168**, 843, (1968).
- Miranda J. M. and Sebastian J. L., “Monte Carlo simulation of electron velocity in degenerate GaAs”, *IEEE electron Device Lett.*, **18**, 258 (1997).
- Moglestue C., *Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices* (Chapman & Hall, London, 1993).
- Nag B. R., *Electron Transport in Compound Semiconductors*, (Springer-Verlag, Berlin, 1980).



- Orr J. M. S., Buckle P. D., Fearn M., Giavaras G., Wilding P. J., Bartlett C. J., Emeny M.T., Buckle L., Jefferson J. H. and Asheley T., “Low temperature impact ionization in indium antimonide high performance quantum well field effect transistors”, *J. Appl. Phys.*, **99**, 083703 (1990).
- Orr J. M. S., Buckle P. D., Fearn M., Giavaras G., Wilding P. J., Bartlett C. J., Emeny M. T., Buckle L., Jefferson J. H., and Ashley T., “Low temperature impact ionization in indium antimonide high performance quantum well field effect transistors“, *J. Appl. Phys.*, **99**, 083703, (2006a).
- Orr J. M. S., Buckle P. D., Fearn M., Wilding P. J., Bartlett C. J., Emeny M. T., Buckle L. and Asheley T., “Schottky barrier transport in InSb/AlInSb quantum well field effect transistor structures”, *Semicond. Sci. Technol.*, **21**, 1408 (2006b).
- Özbaşı Ö. and Akarsu M., “Monte Carlo simulation of electron transport in InSb”, *Turk J. Phys.*, **26**, 283 (2002).
- Pascual E., “Modelado de estructuras Schottky y de transistores MOSFET con contactos de fuente y drenador metálicos para aplicaciones de alta frecuencia”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 2010).
- Press 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).
- Rees, H. D., “Calculation of steady state distribution function by exploiting stability”, *Phys. Lett.*, **26A**, 416 (1968).
- Rengel R., “Análisis de los Fenómenos de Transporte y Ruido Electrónico en Transistores MOSFET y SOI Sumicrométricos”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 2002).
- Rodilla H., González T., Pardo D. and Mateos J., “Monte Carlo Simulation of Sb-based Heterostructures”, Spanish Conference on Electron Devices, *IEEE Catalog CFP09589*, 152 (2009a).

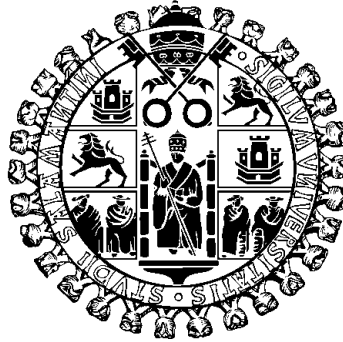
- Rodilla H., González T., Pardo D., and Mateos J., “High-mobility heterostructures based on InAs and InSb: A Monte Carlo study”, *J. Appl. Phys.* **105**, 113705 (2009b).
- Rodilla H., González T., Malmkvist M., Lefevbre E., Moschetti G., Grahn J., and Mateos J., “Isolated-gate InAs/AlSn HEMTs: A Monte Carlo study”, 22<sup>nd</sup> International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (IPRM), *Conference proceedings* (2010a).
- Rodilla H., González T., Moschetti G., Grahn J., and Mateos J., “Dynamic Monte Carlo study of isolated-gate InAs/AlSb HEMTs”, enviado al *Semicond. Sci. Technol.* (2010b).
- Schwierz F. and Liou J.J., “Modern Microwave Transistors: Theory, Design, and Performance”, (John Wiley and Sons, New York, 2003).
- Shibata T., Nakata J., Nanishi Y., and Fujimoto M., “A Rutherford backscattering spectroscopic study of the aluminum antimonide oxidation process in air”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **33**, 1767 (1994).
- Sijerčić E., Mueller B. and Perjčinović B., “Simulation of InSb devices using drift-diffusion equations”, *Solid-State Electronics*, **49**, 1414 (2005).
- Shur M., *GaAs devices and circuits*, (Plenium Press, New York, 1987).
- Tasker P. J. and Hughes B., “Importance of source and drain resistance to the maximum ft of millimeter-wave MODFETs”, *IEEE Electron evice Lett.*, **10**,291 (1989).
- Theodorou G. and Tsegas G., “Theory of electronic and optical properties of bulck AlSb and InAs and InAs/AlSb superlattices”, *Phys. Rev. B*, **61**, 10 782 (2000).
- Tomizawa K., *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices* (Artech House, Boston, 1993).
- Tsai R., Barsky M., Boos J. B., Bennett B. R., Lee J., Papanicolaou N. A., Magno R., Namba C., Lui P. H., Park D., Grundbacher R. and Gutierrez A. , “Metamorphic AlSb/InAs HEMT for low-power, high-speed electronics”,

*Gallium Arsenide Integrated Circuit (GaAs IC) Symposium, 2003, 25<sup>th</sup> Annual Technical Digest 2003. IEEE.*

- Tuttle G., Kroemer H., and English J. H., “Effects of interface layer sequencing on the transport properties of InAs/AlSb quantum wells: Evidence for antisite donors at the InAs/AlSb interface“, *J. Appl Phys.*, **67**, 3032 (1990).
- Vasallo B. G., Mateos J., Pardo D. and González T., “Monte Carlo study of kink effect in shortchannel InAlAs/InGaAs high electron mobility transistors”, *J. Appl. Phys.* **94**, 4096 (2003).
- Vasallo B. G., Mateos J., Pardo D., and T. González, “Kink-effect related noise in short-channel InAlAs/InGaAs high electron mobility transistors”, *J. Appl. Phys.*, **95**, 8271 (2004).
- Vasallo B. G. “Transporte electrónico en estructuras de heterounión InAlAs/InGaAs: HEMTs y dispositivos balísticos de dimensiones nanométricas”, Tesis Doctoral (Universidad de Salamanca, 2005a).
- Vasallo B. G., Mateos J., Pardo D., and González T. “Influence of the kink effect on the dynamic performance of short-channel InAlAs/InGaAs high electron mobility transistors”, *Semicond. Sci Technol.*, **20**, 956, (2005b)
- Vasallo B. G., Rodilla H., González T., Moschetti G., Grahn J. and Mateos J., “Monte Carlo study of kink effect in isolated-gate InAs/AlSb electron Mobility Transistors”, Enviado al *J. Appl. Phys* (2010).
- Vurgaftman I., Meyer J.R. and Ram-Mohan L. R., “Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys”, *J. Appl. Phys.*, **89**, 5815 (2001).
- Yamada Y., “Modelling degeneracy for Monte-Carlo simulation of electron transport in GaAs”, *Electronics Lett.* **27**, 679 (1991).
- Yamashita Y., Endoh A., Shinohara K., Hikosaka K., Matsui T., Hiyamizu S., and Mimura T., “Pseudomorphic In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As/In<sub>0.7</sub>Ga<sub>0.3</sub>As HEMTs with an ultrahigh ft of 562 GHz”, *IEEE Electron Device Lett*, **23**, 573 (2002).



UNIVERSITY OF SALAMANCA  
SCIENCE FACULTY



Applied physics department

**Narrow bandgap HEMTs.**  
**From the semiconductors to the device.**

**SUMMARY OF THE DOCTORAL THESIS**

Helena Rodilla Sánchez-Cuadrado

Salamanca, 2010



## SUMMARY

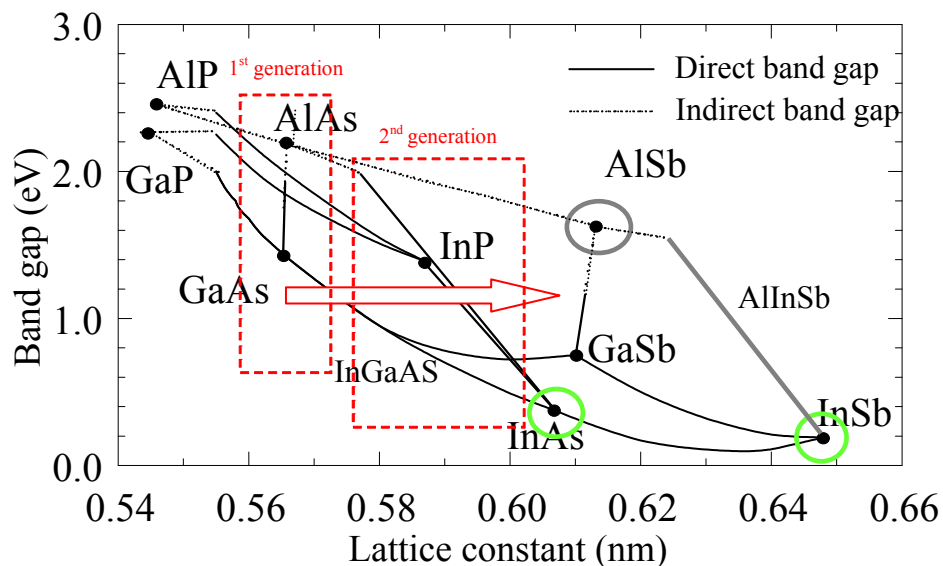
Nowadays, high frequency devices for fast bit-processing and transmission are needed in our communication systems. Commonly, when high frequency is required as in radio-astronomy receivers, satellite-satellite communications, etc not only fast devices are required, but also low noise is a must. In this context InAs/InGaAs HEMTs provide the highest cut-off frequencies together with the best low noise behaviour of all kind of transistors [Lai *et al.* 2007].

A high electron mobility transistor (HEMT) is a field-effect transistor based on a heterostructure that confines the electrons in a high mobility channel [Schwierz and Liou 2003]. The mobility of the channel is such high because ionized impurity scattering is minimized by using undoped semiconductors (free carriers are introduced by means of a thin  $\delta$ -doping layer located at a certain distance from the channel). The heterostructure is formed by putting together a high mobility narrow bandgap semiconductor and another one with a larger bandgap (with a similar lattice constant to avoid defects) that imposes an energy barrier and confines electrons in the channel. The first generations of HEMTs were based on a single heterojunction, where a two dimensional electron gas (2DEG) was formed. Later, HEMTs based on double heterojunctions were introduced due to the better confinement of carriers in the high mobility channel.

Regarding the semiconductor used, the first generation of HEMTs was based on the GaAs/AlGaAs heterojunction [Fig. 1]. Looking for new heterostructures able to increase both the electron concentration and the mobility of electrons in the channel ( $n_s$ , and  $\mu$ , respectively), and consequently the  $n_s \times \mu$  factor (key figure of merit for achieving good high-frequency performances of HEMTs), a second generation of HEMTs arrived. It was based on  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  channels and using InP as substrate (instead of GaAs). As

semiconductor choice for the barrier, since the lattice constant of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  decreases with the increase of the In proportion, both AlGaAs and AlInAs were considered (depending on  $x$ ). Moreover, as the mobility of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  improves with high In content, pseudomorphic InGaAs/AlInAs HEMTs have provided the best performances of these InP-based HEMTs.

As for the rest of field effect transistors, the downscaling of HEMTs has been used in order to improve their dynamic behaviour. Excellent results have been achieved with high In content InGaAs HEMTs and gate lengths under 100 nm, reaching cutoff frequencies higher than 500 GHz [Yamashita *et al.* 2002]. However, when reducing the gate size to lengths below 30 nm, the influence of parasitic elements together with short channel effects bring about the need for a new way to improve the device performances. One possibility is the use of new semiconductors in the channel able to increase the mobility and velocity of the electrons in the channel. The study of HEMTs based on these high mobility semiconductors (and therefore with narrow bandgap) will be the objective of this thesis.



**Figure 1:** Band gap as a function of the lattice constant for III-V semiconductors.

When looking for a higher mobility in III-V semiconductors, a smaller bandgap goes along. It comes up to a new generation of HEMTs using narrow band gap semiconductors (mainly InAs and InSb) in the channel of the transistors, with the aim of



improving their high frequency and low noise performance. However, due to the small band gap of InAs and InSb, impact ionization appears for very low bias, thus limiting the use of those devices to low power applications [Chang *et al.* 2007].

Due to the high cost of the fabrication of the transistors, the use of numerical models to simulate the devices is of great help when optimizing the design of the devices. Moreover, in the particular case of narrow band gap HEMTs, due to the extremely high mobility of the electrons in the channel, transport can easily become ballistic, or at least quasiballistic, when the gate length is reduced to submicron length. Under these conditions, the classic drift-diffusion or hydrodynamic models, traditionally used for device simulation and design, are not valid anymore. Therefore, the Monte Carlo (MC) method becomes the most adequate simulation technique, able to account for ballistic transport and provide not only static results but also the dynamic and noise behavior of the devices. Indeed, MC simulations are an exceptionally useful tool for the optimization of the transistors from a physical point of view, taking as a basis the knowledge of the internal microscopic processes.

The aim of this work is the study of HEMTs based on narrow band gap semiconductors (InAs, InSb), usually called Sb-HEMTs. The static and dynamic results obtained with MC simulations correctly reproduce the experimental measurements obtained by the group of the Professor Jan Grahn in the Chalmers University of Technology (Göteborg, Sweden) [Malmkvist *et al.* 2008], thus confirming the validity of our model.

The first step in order to correctly simulate any kind of devices is the adequate simulation of the bulk semiconductors involved in the device. In our case, not only narrow band gap semiconductors, InAs and InSb, have to be studied, but also their corresponding barrier materials, AlSb and AlInSb. For this sake a single particle MC simulator [González *et al.* 1993a, González *et al.* 1993b] correctly adapted to be used with those narrow band gap semiconductors [Rodilla 2009b] has been used. For example, impact ionization mechanisms have been implemented in the model by means of the Keldysh approach [Fischetti 1991, Vasallo *et al.* 2003], since they play a very important role in this kind of semiconductors. Indeed, impact ionization appears for electron energies lower than those necessary for intervalley transfer, thus practically avoiding the saturation of the I-V curves of devices fabricated with narrow bandgap

semiconductors [Kruppa *et al.* 2007, Bolognesi *et al.* 1999]. In spite of increasing efforts being dedicated to the improvement of the fabrication of Sb-based HEMTs, few studies based on detailed microscopic simulations have been published, and the numerous parameters needed for the MC simulations are not well established at all. Therefore, not only a thorough bibliographic search has been necessary, but also a process of fine adjustment of the individual parameters has been done in order to verify their influence and obtain satisfactory values for them. Our simulation parameters used for InAs, InSb and AlSb can be found in the thesis (Tables II.1, II.2, and II.3). For AlInSb a linear interpolation between parameters of AlSb and InSb has been made.

Once the simulation parameters have been obtained, the transport properties of electrons and holes inside the two narrow band gap semiconductors (InAs and InSb) have been studied as a base for the later analysis of how can they improve the performances of HEMTs when used in the channel [Rodilla *et al.* 2009a, Rodilla *et al.* 2009b]. InSb has the smallest band gap of all III-V semiconductors (0.18 eV), and InAs has a band gap of 0.35 eV. Both semiconductors have direct band gap and a very small effective mass of  $\Gamma$  valley (0.014 for InSb and 0.023 for InAs), thus reaching very high mobilities (between  $2 \times 10^4$  and  $3.3 \times 10^4$  cm<sup>2</sup>/Vs at 300 K for InAs and around  $7 \times 10^4$  cm<sup>2</sup>/Vs for InSb) [Madelung 2004]. In both semiconductors the energy distance between first and second valley is large as compared with the band gap (1.1 eV from  $\Gamma$  to L in InAs, and 0.45 eV from  $\Gamma$  to X in InSb) so that impact ionization processes appear before intervalley, as mentioned before.

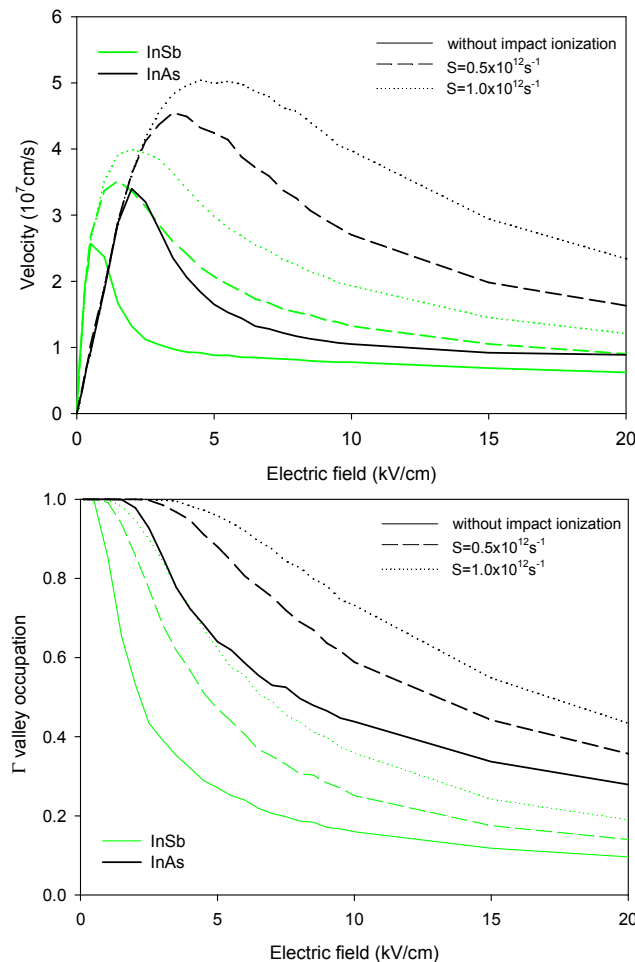
Our model for impact ionization follows the Keldysh approach:

$$P(E) = S \left( \frac{E - E_{th}}{E_{th}} \right)^2 \quad \text{if } E > E_{th} \quad (1)$$

$$P(E) = 0 \quad \text{if } E \leq E_{th}, \quad (2)$$

where  $E_{th}$  is the threshold energy (that we have set to 0.19 eV for InSb and 0.38 eV for InAs) and  $S$  is a measure of the softness or hardness of the threshold.  $S$  is a fitting parameter which must be obtained from the adjustment of the experimental velocity-field curves and impact ionization coefficient. The problem is that no complete experimental data of velocity-field characteristics exist for these materials, so that the

correct value for  $S$  cannot be exactly estimated. Fig. 2 shows the electron velocity and  $\Gamma$ -valley occupation for InAs and InSb without and with impact ionization (and two different values of  $S$ ,  $0.5 \times 10^{12}$  and  $1.0 \times 10^{12} \text{s}^{-1}$ ).



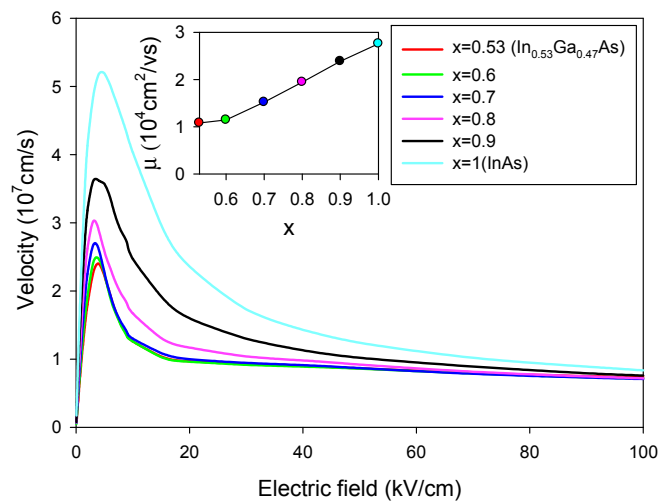
**Figure 2:** (a) Electron velocity and (b)  $\Gamma$  valley occupation vs. electric field in InSb (green) and InAs (black) calculated with different parameters of impact ionization probability.

As observed, InAs and InSb offer not only remarkably high mobilities, but also very large peak velocities. However, while the values of mobility do not depend on the amount of impact ionization processes, the values of the peak velocity do so. The maximum velocity increases with higher  $S$  since  $\Gamma$  valley population is raised by the more frequent impact ionization events. Also, as a consequence of a higher impact ionization probability, the maximum electron velocity is shifted to higher electric fields. Due to the small band gap of these semiconductors, holes generated by impact ionization appear for not so high voltages. The mobility of holes in InAs and InSb is very low compared with that of electrons ( $760 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  for InSb and  $350 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  for

InAs). More details about transport properties electrons and holes of InAs and InSb holes are collected in the thesis memory (Chapter II).

As HEMTs are based on heterostructures, not only the high mobility semiconductor used for the channel must be studied, but also the barrier material to confine the electrons. We have simulated two semiconductors to form the barrier. In the case of InAs, because of the similar lattice constant and the large bandgap, AlSb is the perfect choice for fabricating a good heterojunction for the HEMTs. For InSb the election is no so clear because of the absence of any III-V semiconductor with a similar lattice constant. Therefore, AlInSb is commonly used for this purpose. The higher the Al content the larger the conduction band offset between AlInSb and InSb, thus improving the electron confinement in the channel, but with the drawback that the lattice constants of both semiconductors are more dissimilar. Therefore, a trade off value for the Al content must be chosen. We will consider  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$  with  $x=0.15$ , the most usual value in the literature [Orr *et al.* 2006a]. While the electron mobility of AlSb is really small,  $\mu=525 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ , that of  $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}$  is still significantly high,  $\mu=9400 \text{ cm}^2/\text{V s}$  (even if much smaller than in InSb).

Once the transport properties of InAs, InSb, AlSb and AlInSb have been studied, we focus on  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  in order to show how the increase of In content (until it becomes InAs for  $x=1$ ) can improve the transport properties of this material and the performances of HEMTs fabricated with it.

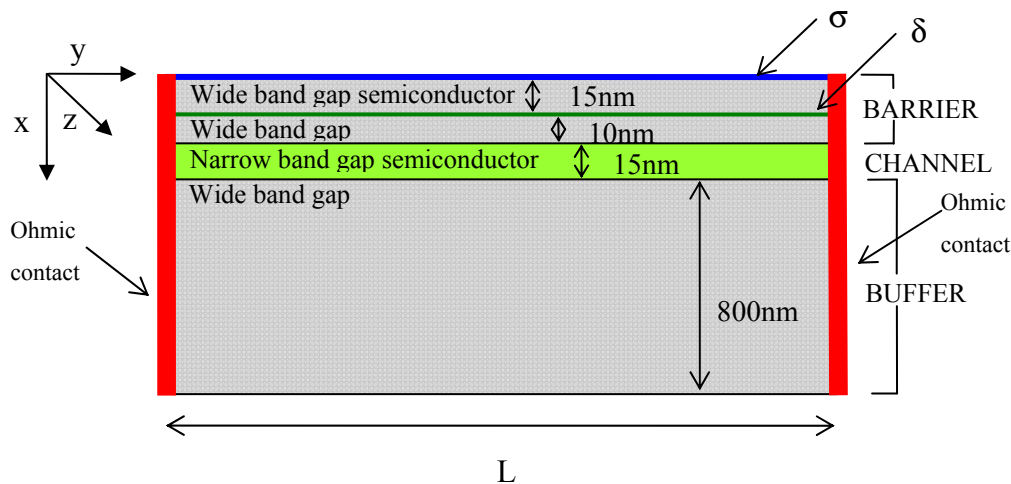


**Figure 3:** Electron velocity vs. electric field in  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  for  $x$  from 0.53 (semiconductor used to form the channel of lattice-matched InP HEMTs) to  $x=1$  (InAs). The inset shows the electron mobility as a function of  $x$ .

As shown in Fig. 3, an increase in the mobility from  $1.1 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  to  $2.7 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  is achieved when increasing In content from  $x=0.53$  (semiconductor commonly used in HEMTs with InAlAs in the barrier) to  $x=1$  (used in Sb-HEMTs).

After bulk semiconductors have been studied, the next step is the analysis of the behaviour of the heterostructures formed with them. Two heterostructures have been studied: AlSb/InAs and  $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{As}/\text{InSb}$ . The main characteristics of both heterostructures have been compared by using a MC simulator self-consistently coupled with a 2D Poisson solver [Mateos *et al.* 1999, Matos *et al.* 2000b] adequately modified to correctly model such narrow band gap heterostructures [Rodilla *et al.* 2009b]. For example, a correct injection at the contacts, where the channel transport can easily become ballistic (or at least quasiballistic), is essential for an accurate simulation. In order to adequately inject (and extract) electrons into the channel, the simulated electrodes are placed vertically extending across the heterolayer. Usually, the profiles of electric potential assigned to these electrodes and concentration to be injected correspond to those that would appear along the heterostructure if real top electrodes were used, previously calculated from an initial simulation at equilibrium with contacts at the top [Mateos *et al.* 1997b]. However, the very large conduction band offset at the AlSb/InAs heterostructure makes difficult obtaining the correct injection profile, since the carrier interchange between the  $\delta$ -doping region and the channel is blocked. In such a situation, the injection conditions fix the electron distribution within the device and top contact simulation becomes useless to obtain correct injection profiles. In order to correctly set the injection conditions, we have initially performed a self-consistent Schrödinger–Poisson simulation, which indicates a complete electron confinement in the channel. This result allows restricting the injection to the channel. Once this is known, to achieve consistent injection conditions, the initial top-contact simulation used for calculating the injection profiles has been modified by using lateral contacts whose injection conditions are iteratively updated with the values obtained at the center of the sample until reaching convergence. The update is made every 5 ps (50 000 iterations of 0.1 fs). After around ten iterations the profiles converge, thus providing the correct injection conditions. In the case of the  $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}/\text{InSb}$  heterostructure, the conduction band offset is smaller, allowing carrier interchange between the barrier and the channel, and thus being possible to obtain the correct injection profiles with the standard top-contact simulation.

To perform a proper comparison of both heterostructures, we have used the same geometry (one of the most commonly used for AlSb/InAs quantum wells): a *buffer* of 800 nm of barrier material followed by 15 nm of narrow band gap channel and 25 nm of barrier material with wide band gap. Undoped semiconductors have been considered. 10 nm far from the channel there is a  $\delta$ -doping of  $5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  which introduces the electrons in the channel. The negative charge that appears in the semiconductor-air interface because of the breakdown of the periodic potential is accounted for in the simulations by means of a fixed surface charge density  $\sigma$ . As the value of this negative charge depends on fabrication, in our simulations we have used three values:  $\sigma/e=0$ ,  $\sigma/e=-2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  and  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  ( $e$  being the fundamental electron charge). A scheme of the simulated heterostructure is shown in Fig. 4.

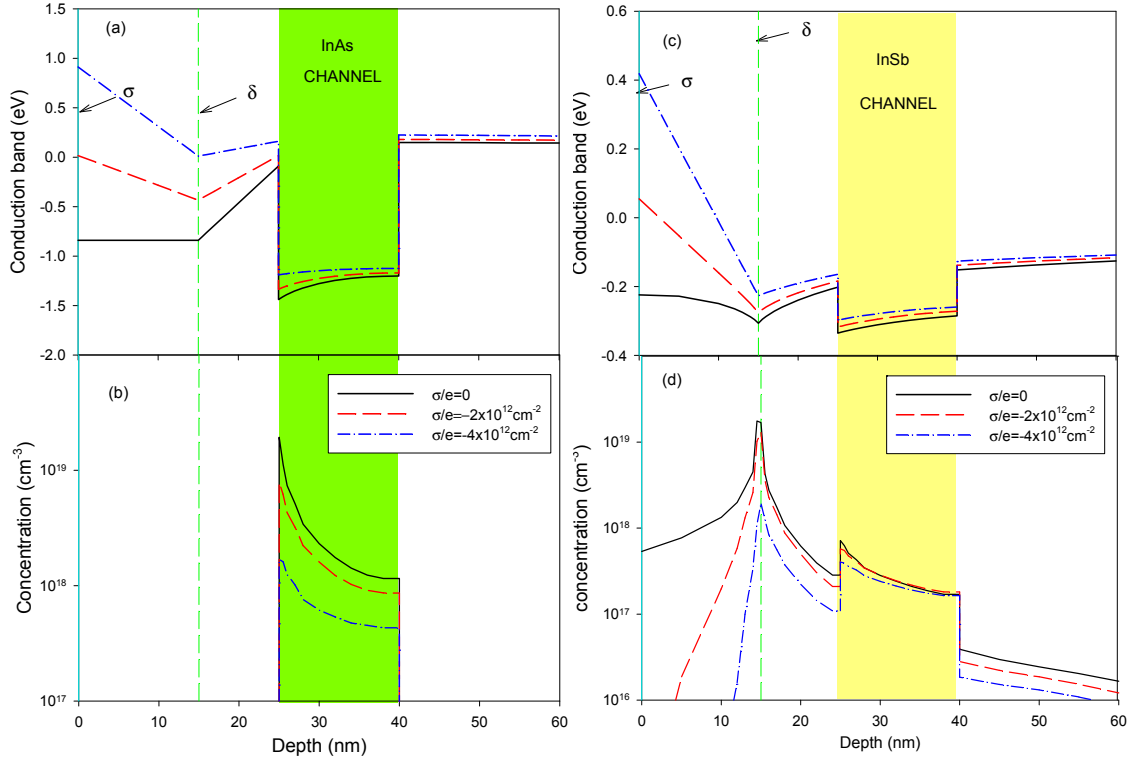


**Figure 4:** Scheme of the simulated heterostructures.

The conduction band and concentration profiles for both heterojunctions, calculated for the three values of surface charge considered, are shown in Fig.5.

As observed in Fig. 5, in the AlSb/InAs heterostructure electrons are completely confined in the channel due to the very large conduction band offset. The attractive force of the  $\delta$ -doping layer increases the electron concentration near the upper heterojunction. This attractive force is counteracted in part by the top negative surface charge  $\sigma$ . As all electrons are confined, the sheet electron density in the channel,  $n_s$ , decreases as  $\sigma$  becomes more negative, following the charge neutrality condition  $n_s = \delta + \sigma$ . In the  $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.85}\text{Sb}/\text{InSb}$  heterostructure, most electrons are in the barrier material. Both the concentration of electrons in the channel,  $n_s$ , and electrons in the

barrier,  $n_{Sb}$ , decreases when  $\sigma$  is more negative, but  $n_{Sb}$  is reduced to a higher extent, so that the percentage of electrons in the channel increases for higher  $\sigma$ .

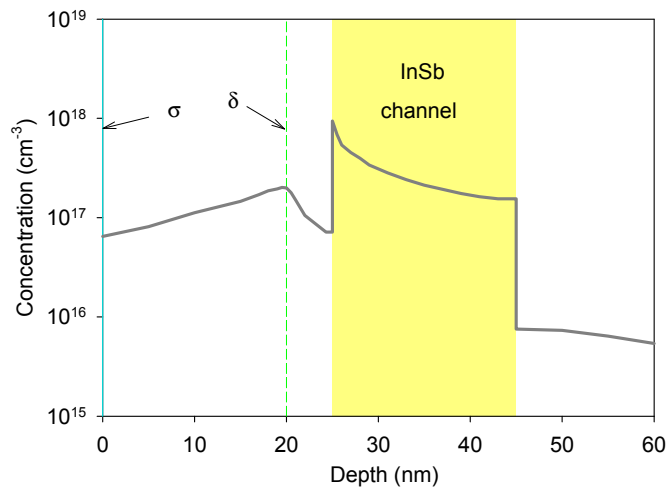


**Figure 5:** Profiles of conduction band and concentration of electrons for the AISb/InAs heterostructure (a) and (b) respectively, and AlInSb/InSb heterostructure, (c) and (d). Three different values of  $\sigma$  have been considered:  $\sigma/e=0$  (solid black lines),  $\sigma/e=-2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (dashed red lines) and  $\sigma/e=-4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (dashed-dot blue lines).

The global mobility of AISb/InAs and AlInSb/InSb heterojunctions have been obtained from the values of the simulated square resistance [Ghandhi 1994],  $R_{\square}$ .  $R_{\square}$  is just the slope of the resistance versus length and has been extracted from MC simulations. Then, the value of the mobility is obtained from the formula  $R_{\square} = 1/qn_{Stot}\mu$ , where  $n_{Stot}$  is the total sheet electron density. For a proper reproduction of the experimental values of heterojunction mobilities, the effect of roughness scattering has been introduced in our 2D simulator. As a first approximation we have implemented a simple global model in which a given fraction of electron reflections at the heterojunction is treated as diffusive (instead of specular). Despite previous works on AISb/InAs quantum wells without  $\delta$ -doping indicate that the strongest relevance of roughness lies on the bottom heterojunction [Tuttle *et al.* 1990], we have considered

surface roughness in both heterojunctions because in our case the  $\delta$ -doped layer increases carrier concentration near the top heterojunction, thus the surface roughness scattering in this interface becoming critical. In the case of AlSb/InAs heterostructure, a good agreement with experimental results has been achieved when considering the 2% of electrons reflections as specular.

In case of the AlInSb/InSb heterostructure, the large number of electrons in the barrier suggests the optimization of the heterostructure. Charge density of the  $\delta$ -doping plane has been decreased to  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  and has been moved closer (5 nm far) to a 20 nm thick channel. The electron concentration distribution of this optimized heterostructure when  $\sigma/e = -0.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (value that provides the best agreement with the experimental  $n_s$  [Orr *et al.* 2006b]) is shown in Fig. 6.



**Figure 6:** Profiles of the electron concentration of the optimized AlInSb/InSb heterostructure.

In this case, 63% of electrons are confined in the channel, where the mobility without considering roughness is around  $\mu = 76000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . To correctly reproduce the experimental results of Hall mobility  $\mu_H = 23800 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ , the 7% of scatterings with the heterojunctions must be considered as diffusive. The very strong effect of roughness in this heterostructure indicates that the technological process used to fabricate the AlInSb/InAs samples is still not very mature.

After studying bulk semiconductors and narrow band gap heterostructures we focus on the complete HEMT. Although two heterostructures have been investigated (AlSb/InAs and AlInSb/InSb), the lack of experimental results for InSb/AlInSb HEMTs together with the professional closeness with the group of the Professor Jan Grahn in



The Chalmers University of Technology (Göteborg, Sweden) where InAs HEMTs are fabricated, has lead us to focus this work on AlSb/InAs HEMTs.

This is the most important part of the work presented in this thesis, where three chapters deal about InAs/AlSb HEMTs (Sb-HEMTs). The first one is about fabrication of the device. The stay with the group of Professor Jan Grahn in the Chalmers University of Technology and the participation on the fabrication of the AlSb/InAs HEMTs has given us the chance to have a more comprehensive and clear vision of the real devices together with the knowledge of the principal problems found in fabrication: the very fast oxidation of AlSb and the very large gate leakage current. With the purpose of minimizing both problems, a native oxide under the gate is favoured during the fabrication process [Lefevre *et al.* 2009]. From now we will call this kind of devices Isolated-Gate (IG) Sb-HEMTs. The epitaxial layer structure used for the device fabrication was grown in the Institut d'Electronique de Microélectronique et de Nanotechnologie (I.E.M.N), in Lille, and it is presented on Table 1.

Layer	Material	thickness
Cap layer	InAs:Si	5nm/5x10 <sup>18</sup> cm <sup>-3</sup>
Protection layer	In <sub>0.5</sub> Al <sub>0.5</sub> As	4nm
Schottky layer	AlSb	10nm
Doping layer	InAs	2 mono-layers
δ-doping	Si	4.5x10 <sup>12</sup> cm <sup>-2</sup>
Doping layer	InAs	2 mono-layers
Spacer	AlSb	5nm
Channel	InAs	15nm
HEMT buffer	AlSb	50nm
Metamorphic Buffer	Al <sub>0.8</sub> Ga <sub>0.2</sub> Sb	250nm
Metamorphic Buffer	AlSb	750nm
Smoothing layer	In <sub>0.5</sub> Al <sub>0.5</sub> As	100nm
Substrate	InP semi-insulating	

**Table 1:** Epitaxial layer structure.

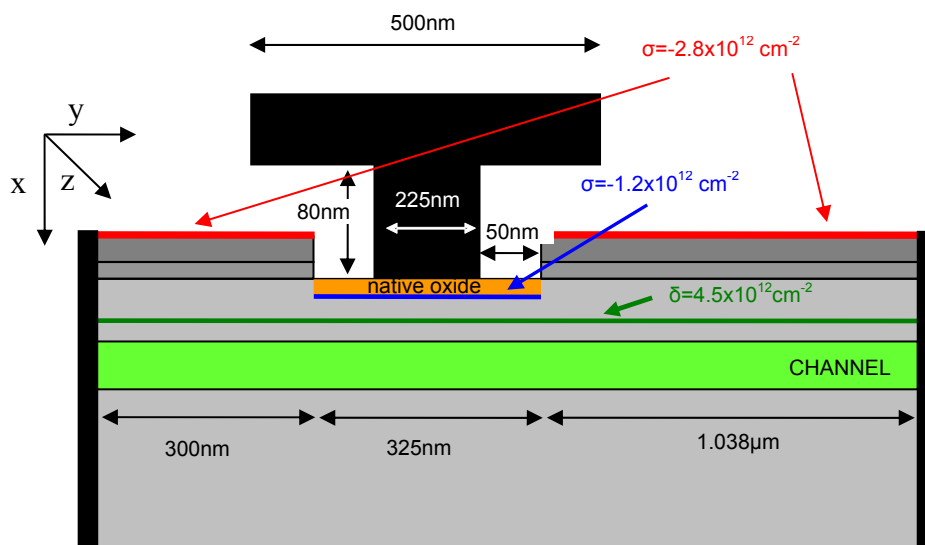
The epitaxial structure has been grown on a semi-insulating InP substrate. A smoothing layer of 100 nm of  $\text{In}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$  followed a metamorphic buffer of 750 nm of AlSb and 250 nm of  $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Sb}$  were grown. The  $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Sb}$  provides a chemically stable mesa floor protecting AlSb from oxidation. The active layers begin with a buffer of AlSb 50 nm thick followed by an InAs channel of 15 nm. 5 nm of AlSb separate the channel from the Si  $\delta$ -doping plane. The Si plane is sandwiched between four InAs mono-layers. That is because Si, when placed directly in AlSb, acts like an acceptor impurity, thus generating holes [Bennett *et al.* 2005]. Then, a 10 nm AlSb Schottky layer followed by 4 nm of  $\text{In}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$  protection layer [Lefevre *et al.* 2009, Borg *et al.* 2008] is grown. The  $\text{In}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$  layer has two purposes: to protect AlSb from oxidation during the recess etch process, and to act as a barrier for the holes generated by impact ionization in the InAs channel. Finally, a 5 nm thick InAs Si-doped ( $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) cap layer is grown. Room temperature Hall measurements of the epitaxial structure reveal an electron mobility of  $21600 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  and a sheet carrier concentration  $n_s = 2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

225 nm-gate Sb-HEMTs ( $2 \times 50 \mu\text{m}$  wide) were fabricated in Chalmers by the group of Prof. Jan Grahn [Malmkvist *et al.* 2008, Lefevre *et al.* 2009, Borg *et al.* 2008]. Mesa isolation was performed by a chlorine-based dry etching method, then Pd/Pt/Au ohmic contacts were evaporated and annealed. The T-shaped gate was formed by a tri-layer resist stack defined with electron beam lithography. The recess etching stops 9 nm far from the surface (the top of the AlSb Schottky layer), and was performed by citric acid. The typical oxide removal step after the recess etch has been suppressed for these devices, thus favouring the appearance of a native oxide under the gate that decreases the large leakage current.

After explaining the epitaxial structure and device fabrication, a second chapter about Sb-HEMTs deals with the static and dynamic behaviour of Sb-HEMTs [Rodilla *et al.* 2010a, Rodilla *et al.* 2010b]. They have been studied from a physical point of view by means of MC simulations and compared with the experimental data provided by Chalmers. Simulations have been carried out with the 2D simulator previously described when analyzing heterostructures. In spite of the small band gap of the channel semiconductor (InAs), in this chapter impact ionization has not been considered since we focus our study on low values of  $V_{DS}$  (below 0.3 V), where the dynamic behaviour of the devices is expected to be optimal. The study of impact ionization processes and the

consequent kink effect is performed in a separate chapter of this thesis, dealing only with the static behaviour of the transistor.

The simulated 225 nm gate Sb-HEMTs have the same topology and layer structure as the fabricated one. In order to decrease the number of simulated particles, the source-recess access region has been shortened from about 1.0  $\mu\text{m}$  to 300 nm. The omitted part can be introduced later as a contribution to the external source resistance [Mateos *et al.* 2000a]. A scheme of the simulated HEMT is shown in Fig.7.



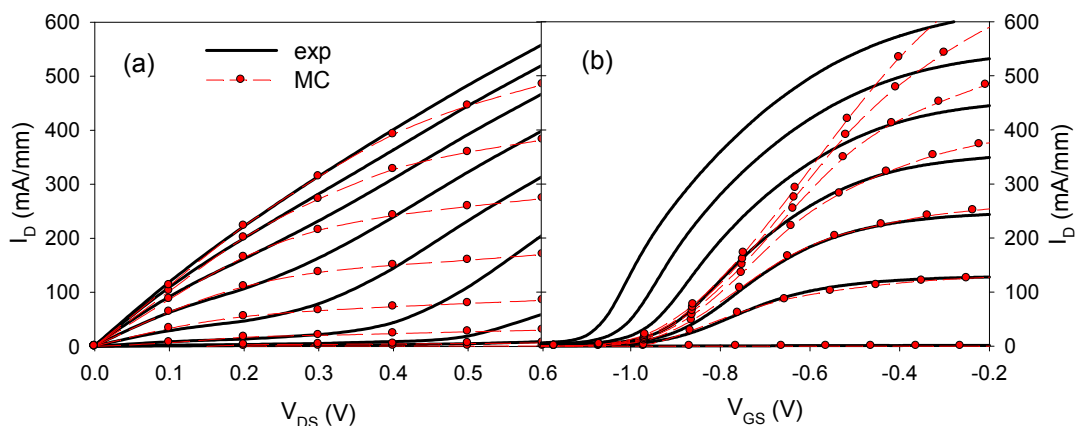
**Figure 7:** Scheme of the simulated Sb-HEMT

To reproduce the surface charges that appear in the semiconductor-air interface we have included a surface charge density of  $\sigma_{cap} = -2.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (value which reproduces the experimental Hall sheet electron density in the channel [Mateos *et al.* 2003],  $n_s = 2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ). The negative surface charge at the recess floor,  $\sigma_{recess}$ , can be slightly different [Mateos *et al.* 2000a] from the one in the top of the cap layer, since it depends on the etching process. Moreover, the value assigned to this parameter also accounts for the possible presence of charges within the native oxide. Different values of this parameter have been considered, showing only a shift in the threshold voltage, so  $\sigma_{recess}$  will be taken as adjustable, within reasonable values.

As we have explained, during the fabrication process the existence of a native oxide under the gate has been favoured in order to reduce gate leakage. AlSb oxidation is a

complex process [Shibata *et al.* 1994], being difficult to know which is the composition of the oxide and its thickness. The static and dynamic behaviour of the devices has been simulated, analyzing the influence of the dielectric constant and oxide thickness. We have observed that increasing the dielectric constant is equivalent to decreasing the oxide thickness, obtaining a reasonable agreement with experimental data considering a 2 nm thick oxide with a dielectric constant of 2.2 (corresponding to Al hydroxide).

In order to compare the intrinsic MC results with the extrinsic experimental ones we have to introduce the effect of the parasitic elements which are not present in our simulations:  $R_s=0.13 \Omega \text{ mm}$  and  $R_d=0.38 \Omega \text{ mm}$  (in good agreement with the experimental values of the contact access resistances). Other post-processing step to be done with the intrinsic MC results in order to compare with experimental data is an  $V_{GS}$  shift attributed to the addition of the surface charges at the semiconductor-oxide interface and the volume charges within the oxide, which are not known (the best fit is obtained with  $\Delta V_{GS}=0.03 \text{ V}$ ).

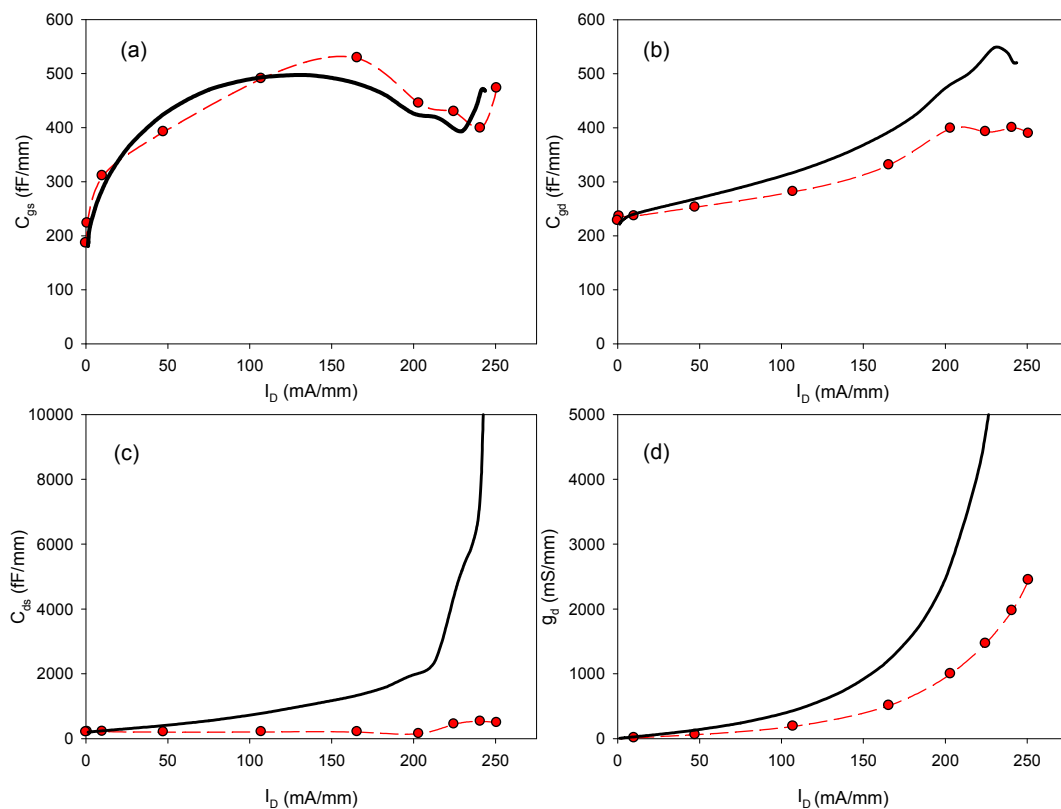


**Figure 8:** Comparison of the experimental (black solid lines) and MC (circles, red dashed lines) results. (a)  $I_D$ - $V_{DS}$  from  $V_{GS}=-1.15 \text{ V}$  to  $-0.45 \text{ V}$ , step  $0.1 \text{ V}$  and (b)  $I_D$ - $V_{GS}$  from  $V_{DS}=0.1 \text{ V}$  to  $0.6 \text{ V}$ , step  $0.1 \text{ V}$ .

Fig. 8 shows the good agreement obtained between simulations and experimental results for low  $V_{DS}$  (up to 0.2-0.3 V), when impact ionization mechanisms are not frequent. For higher  $V_{DS}$  a strong kink appears in the experimental output I-V curves, Fig. 8(a), with a subsequent threshold voltage shift in the transfer characteristics, Fig. 8(b), not reproduced by the simulations. MC calculations including impact ionization processes and holes transport allow to correctly reproduce the kink effect and will be

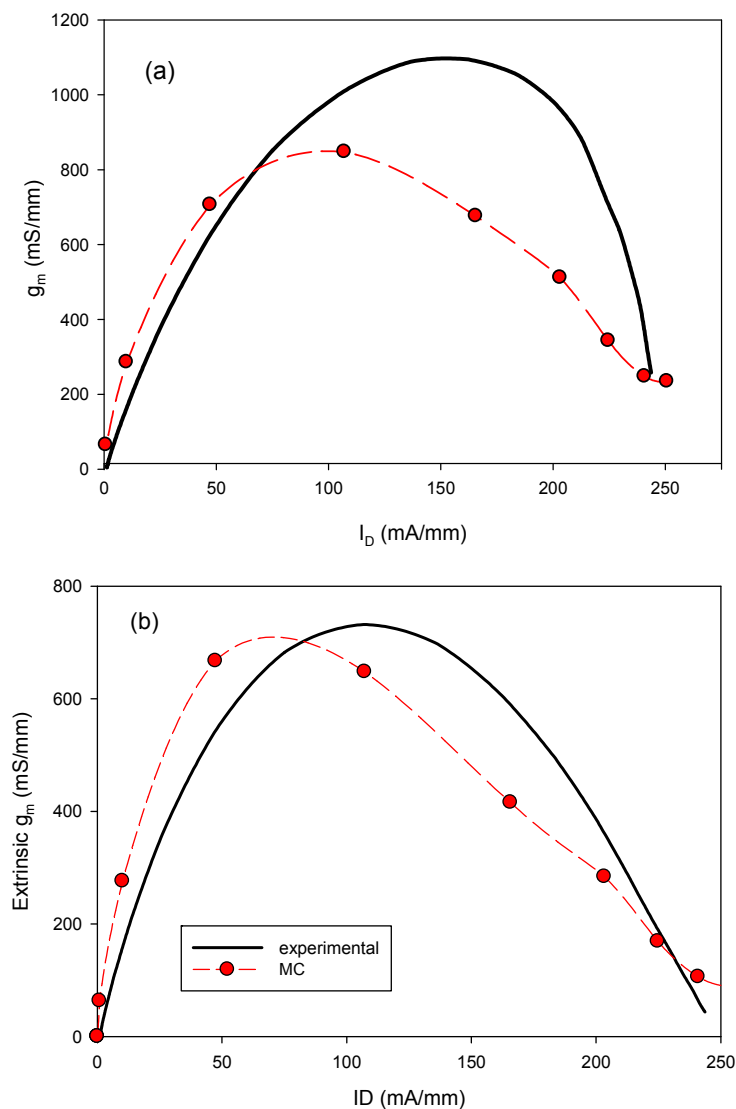
presented latter.

Then, the small signal equivalent circuit has been extracted and compared with experimental results. MC results have been obtained from the admittance parameters extracted by Fourier analysis of the response of the transistor currents to voltage steps applied at the gate and drain contacts [Mateos *et al.* 2000b]. In order to perform a correct comparison between the “intrinsic” experimental and simulated equivalent circuits we have to consider that even when deembedding the extrinsic parameters from the experimental results, there are still some effects the MC is not accounting for (i.e., fringing and cross talk capacitances in the layout). Indeed, three “extrinsic” (from the point of view of MC simulations) capacitances,  $C^{extr}$ , have been added to the MC results to reproduce the effects associated with the topology of the devices (see ref. Mateos *et al.* 2000b for a more detailed explanation). The values of these capacitances have been obtained by fitting the experimental data at zero current, where it remains only the effect of the geometric capacitances, which are independent of the biasing.



**Figure 9:** Comparison of the experimental (black solid lines) and MC (circles, red dashed lines) results. (a)  $C_{gs}$ , (b)  $C_{gd}$ , (c)  $C_{ds}$  and (d)  $g_d$  vs  $I_D$  for  $V_{DS}=0.2$  V.

Simulated and experimental results for the intrinsic small signal equivalent circuit parameters are compared in Fig. 9 for  $V_{DS}=0.2$  V, where impact ionization is negligible and also the optimum noise conditions are experimentally reached [Malmkvist *et al.* 2008]. A good agreement with experimental results has been obtained for  $C_{gs}$  and  $C_{gd}$ . The existence of frequency dispersion in the experimental results of  $C_{ds}$  and  $g_d$  causes the considerable disagreement between the experimental and MC results observed in Fig. 9(c) and (d). This frequency dispersion maybe due to the existence of holes in the buffer, even if the kink effect is still not visible in the I-V curves.

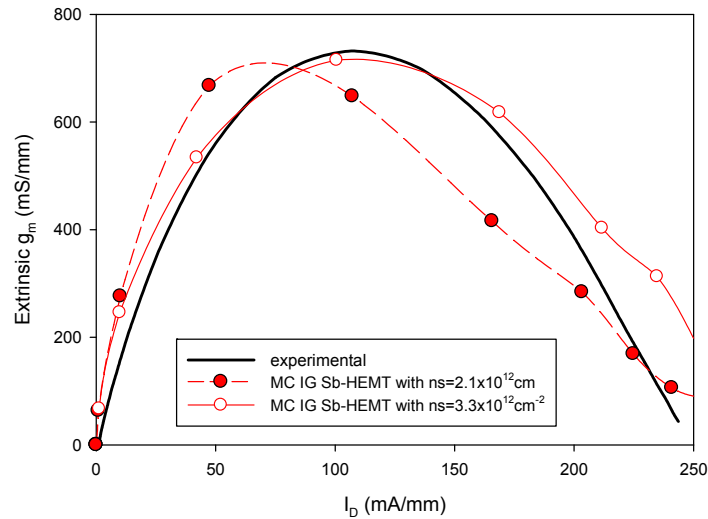


**Figure 10:** Comparison of the experimental (black solid lines) and MC (circles, red dashed lines) results of (a) intrinsic  $g_m$ , and (b) extrinsic  $g_m$  obtained from equation (3) vs.  $I_D$ . Both for  $V_{DS}=0.2$  V.

The slight disagreement found between the measured and simulated intrinsic  $g_m$  [both the maximum value and the drain current for which it is found are lower in the MC simulations, as shown in Fig. 10(a)] was unforeseen, mainly because a much better agreement exists when the extrinsic  $g_m$  is extracted from the static I-V curves (shown in Fig 8). This inconsistency can be explained by the mentioned discrepancy in the drain conductance [Fig. 9(d)], since they are coupled by the relation:

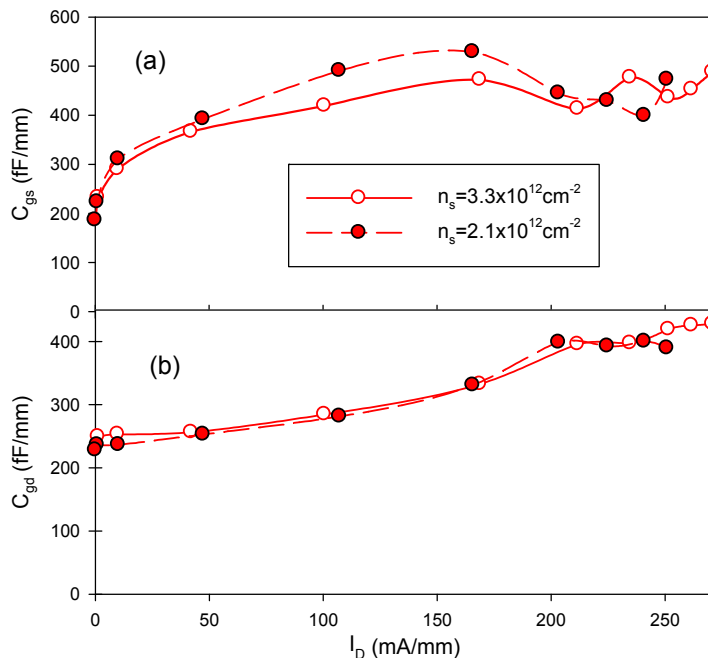
$$g_m^{extr} = \frac{g_m^{intr}}{(1 + g_m^{intr} R_S)[1 + g_d^{intr} (R_S + R_d)]}. \quad (3)$$

In fact, the extrinsic  $g_m$  obtained using eq. (3), plotted in Fig. 10(b), shows that the maximum value of the MC and experimental extrinsic  $g_m$  are similar even if the shape of the curve is not really the same (the peak is found at lower currents in the simulations). In order to better reproduce the experimental results we have considered another possible source of discrepancies between the experimental and simulated results, which is the variation of the value of the sheet electron density in the channel. In fact, Hall measurements are performed in the epitaxial structure before processing the devices, during which the value of  $n_s$  may be affected. A higher sheet electron density has been achieved in our simulations by means of the consideration of a lower value for  $\sigma_{cap} = -1.5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . Thus the source and drain access resistances decrease due to the higher  $n_s$  of  $3.3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  (even if the electron density is similar under the recess and the gate).



**Figure 11:** Comparison of the experimental (black solid lines) and MC results for the extrinsic  $g_m$  calculated from eq. (3) with  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  (red circles, dashed red lines) and with  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  (red circles, dashed red lines). Both for  $V_{DS}=0.2 \text{ V}$ .

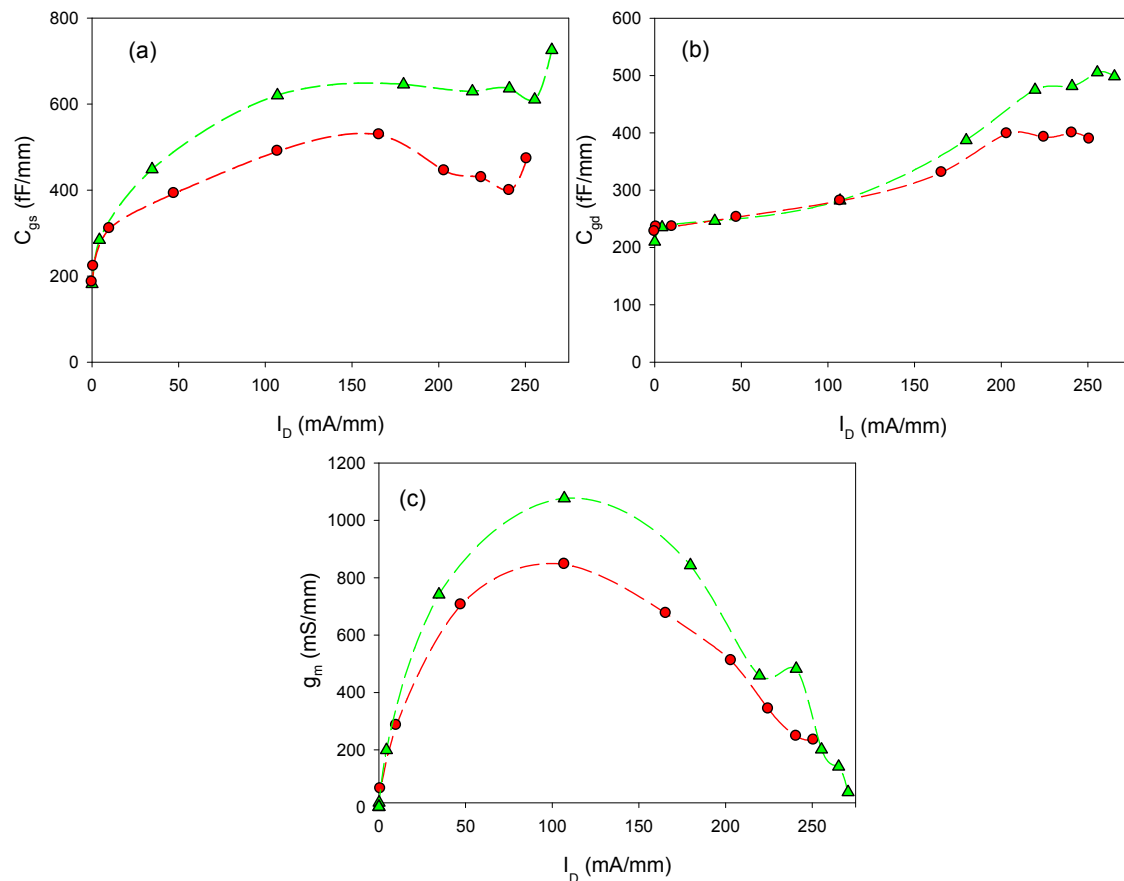
Fig 11 shows that the peak  $g_m$  is shifted to higher  $I_D$  when  $n_s$  is higher, thus providing a much better agreement with the experimental values. The decrease of the source and drain access resistances due to the higher  $n_s$  also leads to a reduction in the value of  $C_{gs}$ , while that of  $C_{gd}$  remains similar, as shown in Fig. 12.



**Fig. 12.** Comparison between the intrinsic values of the (a) gate-source,  $C_{gs}$ , and (b), gate-drain,  $C_{gd}$ , capacitances obtained by MC simulations of the IG device for the two values of  $n_s$  considered:  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  (colored red circles dashed lines), and  $n_s=3.3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  (white circles red solid lines) as a function of  $I_D$  for  $V_{DS}=0.2 \text{ V}$ .



In order to identify how the presence of the oxide under the gate can affect the behaviour of HEMTs, the results obtained in the intrinsic isolated gate (IG) studied so far have been compared with those calculated in a Schottky gate (SG) HEMT, with the same geometry but without the oxide under the gate (considering  $n_s=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  in both devices).



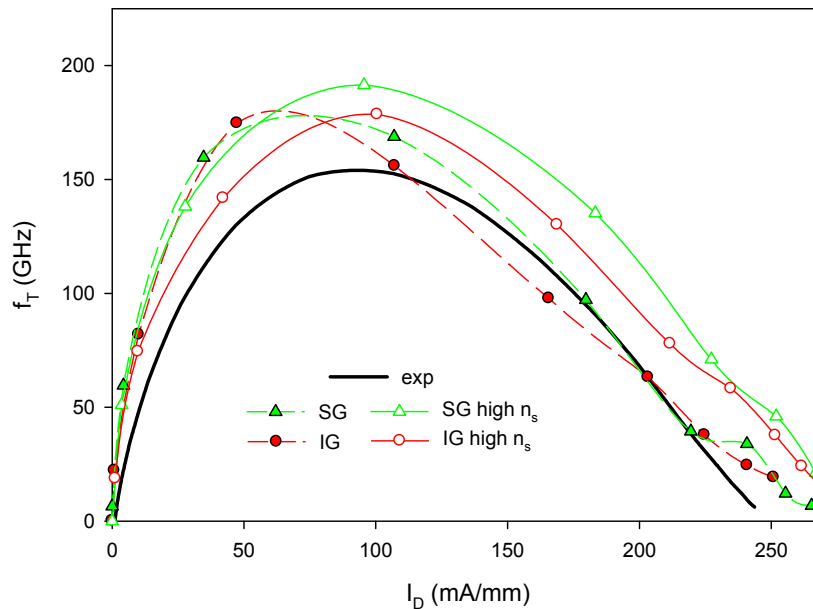
**Figure 13:** Comparison between the values of the (a) gate-source,  $C_{gs}$ , (b), gate-drain,  $C_{gd}$ , and (c) transconductance,  $g_m$ , obtained by MC simulations for the SG (green triangles) and IG (red circles) devices as a function of  $I_D$  for  $V_{DS}=0.2\text{V}$ .

As shown in Fig. 13,  $C_{gs}$  and  $C_{gd}$  increase with the absence of the oxide. This is consistent with the increased gate-channel capacitance in the absence of the gate oxide. The presence of the gate oxide produces also a decrease of  $g_m$  in the IG with respect to the SG cases, as expected from the worse charge control, Fig. 13 (c). No other relevant differences in the rest of small signal parameters have been observed when comparing IG and SG results.

In order to discern the importance of the oxide under the gate on the extrinsic high frequency performance of the devices, the extrinsic current gain cut off frequency,  $f_t$ , estimated as [Tasker and Hughes 1989]

$$f_t = \frac{g_m^{\text{intr}} / 2\pi}{(C_{gs} + C_{gd})[1 + g_d^{\text{intr}}(R_s + R_d)] + C_{gd}g_m^{\text{intr}}(R_s + R_d)}, \quad (4)$$

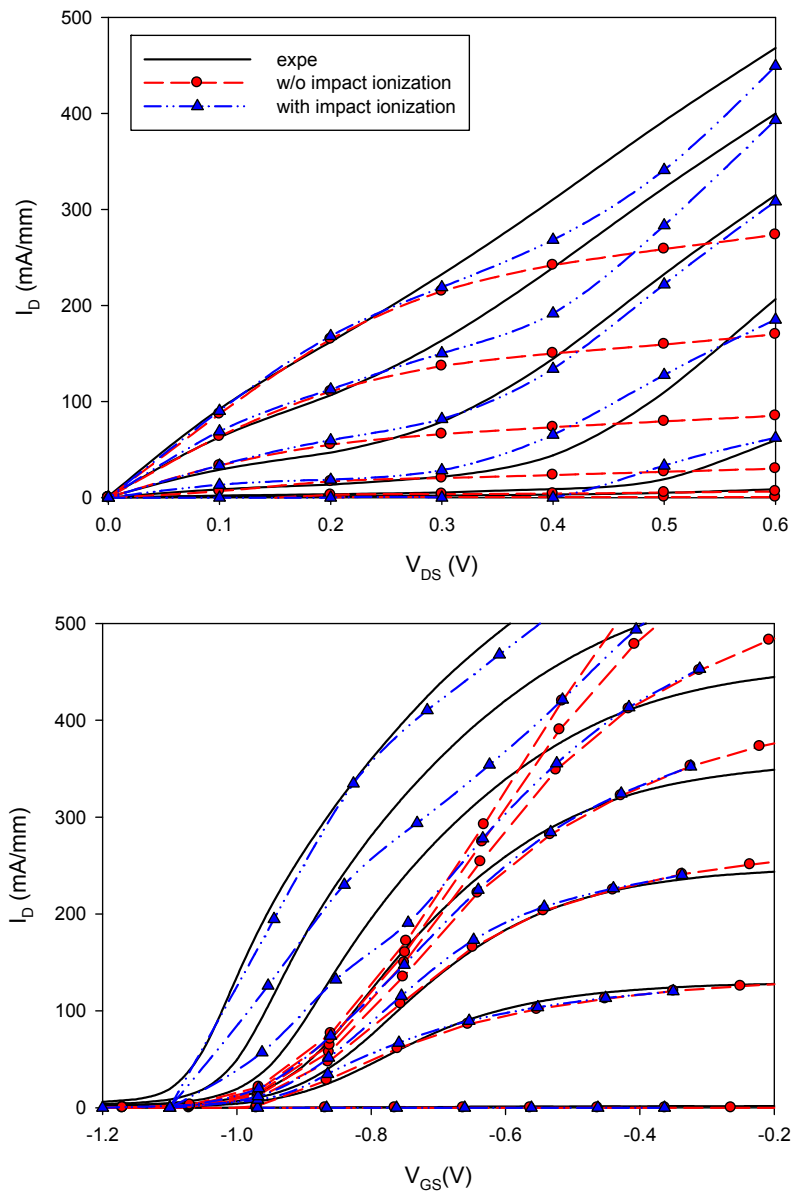
is shown in Fig. 14. Not many differences are found between the  $f_t$  values obtained for the IG and SG cases, thus showing that a thin gate oxide benefits the reduction of the gate leakage current without much degrading the high frequency performance of the HEMTs. On the other hand, an increased value of  $n_s$  makes the peak  $f_t$  to be shifted to higher  $I_D$  (and slightly increase its value) in a similar way as happens with  $g_m$ , providing a reasonable agreement with the experimental results. The lower experimental value of  $f_t$  with respect to the MC value is mainly due to the discrepancy in the  $g_d$  values.



**Fig. 14.**  $f_t$  estimated through eq. (4) as a function of  $I_D$  for  $V_{DS}=0.2$  V in the fabricated HEMT, compared with the SG and IG MC results with two different values of  $n_s$ .

---

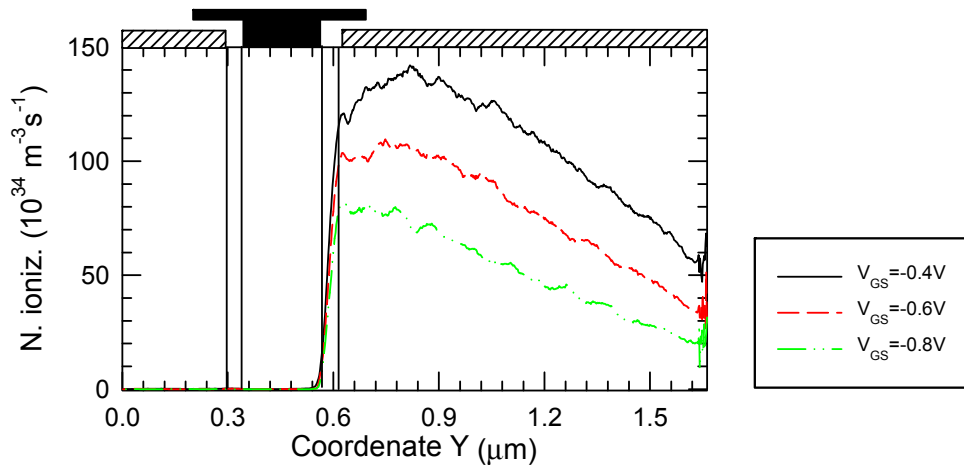
We can not conclude this work without studying the role played by impact ionization on the static behaviour of InAs based HEMTs, since this is the process that restricts the use of these devices for low power applications. The last chapter of this thesis is then devoted to the study of the effects related to impact ionization mechanisms and the presence of the holes thus generated. MC simulations provide an insight into the microscopic processes taking place inside the devices, in terms of which the kink effect can be explained. For this purpose and with the help of Dra. Beatriz García Vasallo, with large experience on the MC simulation of impact ionization and kink effect on InGaAs HEMTs, some improvements have been introduced in our simulator [Vasallo *et al.* 2010]. Impact ionization has been introduced in the same way as in the single particle simulator used to characterise the semiconductors (using the Keldysh approach). Within the MC device simulator, the Poisson equation must be solved not only consequently with the distribution of electrons, but also with that of holes. Hole recombination is another important process that is necessary to include for a proper analysis of kink effect [Vasallo *et al.* 2003]. To this end we use a simple model in which hole recombination is considered to take place with a characteristic time  $\tau_{rec}$  (i.e., with a probability  $1/\tau_{rec}$ ). We will perform simulations with  $\tau_{rec}=0.5$  ns (even if in bulk materials it is usually assumed to be of the order of 1 ns), since with this value of  $\tau_{rec}$  (jointly with those of  $E_{th}$  and  $S$ ) the experimental static  $I$ - $V$  characteristics are adequately reproduced.



**Figure 15:** Extrinsic output characteristics for the IG HEMT in presence (blue triangles, dashed-dot lines) and absence (red circles, dashed lines) of impact ionization, being  $E_{th}=0.41$  eV,  $S=10^{12}$  s $^{-1}$  and  $\tau_{rec}=0.5$  ns, compared with experimental results (solid black lines). (a)  $I_D$  as function of  $V_{DS}$  for  $V_{GS}$  from  $-0.65$  V to  $-1.15$  V, step  $-0.1$  V, and (b)  $I_D$  as function of  $V_{GS}$  for  $V_{DS}$  from  $0.1$  V to  $0.6$  V, step  $0.1$  V.

As observed in Fig. 15 the consideration of impact ionization solves the problems that we had when comparing the output characteristics with experimental data for  $V_{DS}$  higher than  $0.3$  V [Fig. 8]. Indeed, a remarkable agreement between experimental and simulated results is reached when considering impact ionization in the simulations.

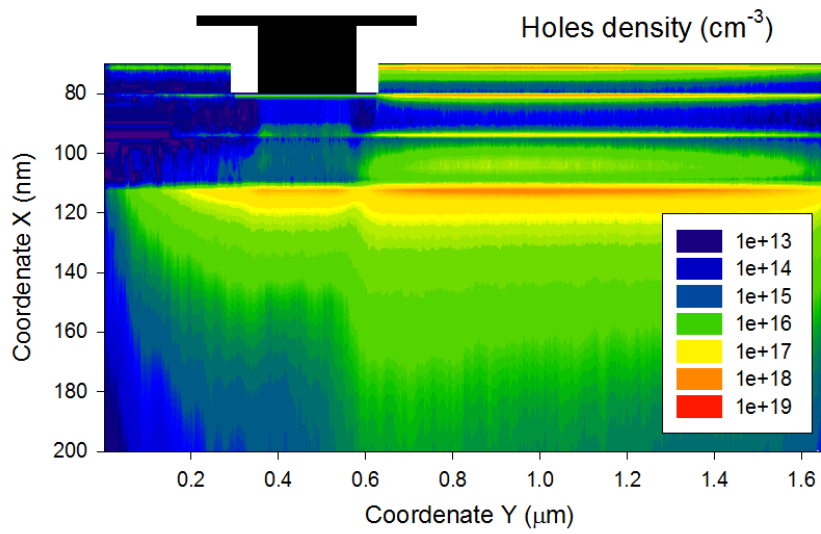
Impact ionization takes place in the InAs layers (cap layer and channel) because of the narrow bandgap of this semiconductor. As shown in Fig 16, impact ionization events occur at the drain side in the channel, mainly close to the drain edge of the recess, where the electric field, and, consequently, the electron energy, are higher.



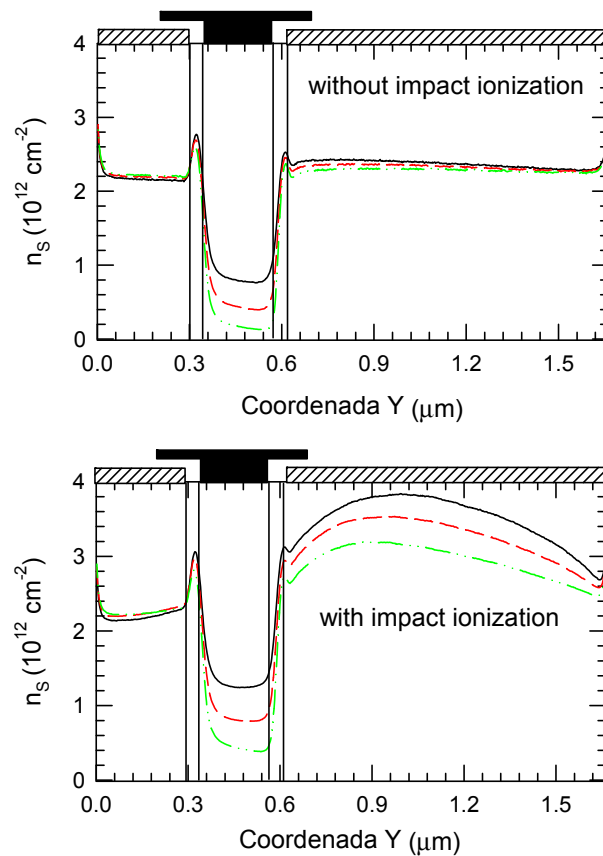
**Figure 16:** Profiles of impact ionization events per unit time in the channel for three different values of  $V_{GS}$  (-0.4, -0.6, -0.8 V), for  $V_{DS}=0.4$  V,  $E_{th}=0.41$  eV,  $S=10^{12}$  s $^{-1}$  and  $\tau_{rec}=0.5$  ns. The positions of the gate and the recess are also indicated.

Holes generated by impact ionization in the channel mostly move down the energy step present in the valence band at the heterojunction between the InAs channel and the AlSb buffer. They tend to pile up in the buffer at the drain side and under the gate [Fig. 17], and they recombine before reaching the source; so few holes reach the source contact.

The increase of  $I_D$  can be mostly explained as a consequence of this pile up of positive charge, which lowers the potential barrier that controls the current through the channel, so that the channel is further opened, with the consequent increase in the electron density [Fig. 18].



**Figure 17:** Map of hole density for  $V_{DS}=0.4$  V,  $V_{GS}=-0.6$  V,  $E_{th}=0.41$  eV,  $S=10^{12}$  s $^{-1}$  and  $\tau_{rec}=0.5$  ns.



**Figure 18:** Profiles of sheet electron density along the channel (a) without impact ionization, and (b) with impact ionization, for three different values of  $V_{GS}$  (-0.4, -0.6, -0.8 V),  $V_{DS}=0.4$  V,  $E_{th}=0.41$  eV,  $S=10^{12}$  s $^{-1}$  and  $\tau_{rec}=0.5$  ns. The position of the gate and the recess is also indicated.

The native oxide under the gate allows reducing the gate leakage current, but it still shows the typical bell-shape due to the outflow of holes [Lefevre *et al.* 2009], signature of impact ionization in standard SG FETs.  $I_G$  is null in the ideal simulated structures, since gate current due to holes tunneling is not considered in our model. The implementation of such processes in the MC simulator is one of the most important tasks to be done in the future.





## CONCLUSIONS

In this Thesis we present a study of HEMTs based on narrow bandgap semiconductors using Monte Carlo simulations as main tool. In order to perform a proper investigation of these transistors, the involved bulk semiconductors and heterostructures have firstly been studied. The fabrication process of InAs/AlSb HEMTs has also been described in the PhD report, whose main focus is the study of the static and dynamic behaviour of InAs/AlSb HEMTs, as well as the consequences of impact ionization process on its static behaviour.

### Semiconductors:

From the simulation of the bulk semiconductors involved in narrow band gap HEMTs these are the main conclusions we have extracted:

- After an extensive bibliographic and simulation work, the parameters of the models for the bulk semiconductors involved in the transistors have been obtained. The scarce available experimental data have been correctly reproduced for both the narrow bandgap semiconductors which will form the channel of HEMTs (InAs and InSb) and those that will be used as barrier materials (AlSb and AlInSb).
- Due to the very small bandgap of both InAs and InSb, impact ionization is highly relevant even for low values of the electric fields. As a result the mean electron velocity increases because of an enhanced  $\Gamma$ -valley population.
- Despite the very small effective mass of the  $\Gamma$ -valley electrons in InSb, smaller than that in InAs, the maximum of the velocity-field characteristic is smaller in InSb than in InAs due to the high non parabolicity coefficient

of InSb together with a smaller energy separation between the first and the upper valleys in the conduction band.

- An increase in the mobility from  $1.1 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  to  $2.7 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  has been observed when increasing the molar fraction of In in  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  from  $x=0.53$  (semiconductor commonly used in the channel of “traditional” HEMTs based on the InGaAs/AlGaAs heterojunction) to  $x=1$ . Also, the energy distance between the  $\Gamma$ -valley and the upper valley increases with the In content. Therefore, the improvement of the characteristics of In-rich InGaAs for being used as channel of HEMTs has been confirmed.

#### Heterojunctions: AlSb/InAs and AlInSb/InSb:

From the comparison of the results of the simulations of the two heterojunctions commonly used for narrow bandgap semiconductors (AlSb/InAs and AlInSb/InSb) we have obtained the following conclusions:

- As in any other heterostructure, the attractive force of the  $\delta$ -doped layer, increases the electron concentration at the upper side of the channel, but this is in part counteracted by the surface charge density.
- A total confinement of electrons in the channel has been observed in the AlSb/InAs heterostructure due to the high conduction band offset between these materials (1.35 eV). On the other hand, in the AlInSb/InSb heterostructure this offset is smaller, thus decreasing the electron confinement in the channel and degrading the heterostructure mobility because of the conduction through the barrier material.
- For the optimization of the InSb heterostructure, the  $\delta$ -doped layer has been moved closer to the channel and its doping level has been reduced in order to minimize the amount of electrons in the barrier material.
- The implementation in the simulator of the surface roughness scattering has been necessary in order to reproduce the experimental results of both heterostructures. In the case of AlSb/InAs, the 2% of the scatterings with the heterojunctions must be considered as diffusive, while for AlInSb/InSb it must be increased to the 7% due to the not very mature fabrication process of the heterostructures based on InSb.

### HEMTs:

Afterwards, in order to validate our simulator, the experimental results of isolated InAs/AlSb HEMTs provided by the Group of Prof. Jan Grahn have been compared with our simulation results. These are the main conclusions that we have obtained:

- A good agreement between experimental data and simulation results is found without taking into account impact ionization processes for drain voltages lower than 0.3 V.
- The good agreement found with the experimental results for  $C_{gs}$  and  $C_{gd}$  has not been achieved neither for  $g_d$  nor for  $C_{gs}$ , probably due to the frequency dispersion observed in the experimental measurements (that we attribute to the presence of holes in the buffer).
- In spite of the good agreement found with the experimental measurements for the extrinsic transconductance, the problems found to correctly reproduce the values of  $g_d$  are transferred to the intrinsic transconductance (which is underestimated by the simulations) due to the relationship between both quantities.

Once our simulation model has been validated, the comparison of simulations of HEMTs with different topologies has led us to extract some interesting conclusions:

- The presence of the native oxide under the gate (which is used to decrease the gate leakage current) reduces the gate control, thus decreasing the values of  $g_m$ ,  $C_{gs}$ ,  $C_{gd}$  and  $f_c$ . However, the estimated  $f_t$  reveals that the extrinsic behaviour at high frequency is not severely degraded because of the presence of a thin gate oxide.
- The value of the charge located at the gate oxide-semiconductor interface used in the simulations to account for the surface charge in the heterojunction and the supplementary volumic charge that may be present within the oxide, only introduces a threshold voltage shift. Therefore, this value can be considered as an adjustable parameter in the MC simulations.

- Because of the lack of information about the exact characteristics of the gate oxide, different values for the oxide thickness and dielectric constant have been considered in the simulations, showing equivalent behaviours when increasing (decreasing) the thickness of the oxide and when decreasing (increasing) its dielectric constant. A good agreement with experimental results has been achieved for a 2 nm thick oxide with a relative dielectric constant of 2.2.
- The electron density in the channel (provided by the experimental Hall measurements of the epitaxial structure without recess) may become modified during the HEMT fabrication process. As a consequence, we have studied the effects associated with its variation. A shift to higher  $I_D$  in the maximum  $g_m$  (and therefore also in  $f_c$  and  $f_i$ ) has been observed when increasing  $n_s$ , thus achieving a better agreement with the experimental data.

Due to the very small band gap of InAs, the important effect of impact ionization on the static behaviour of InAs/AlSb HEMTs is a key issue. The results from Monte Carlo simulations, focused on the physical explanation of the kink effect, have allowed us to extract the following conclusions:

- Impact ionization processes only appear in the InAs layers (cap layer and channel) and are generated just by electrons, not by holes.
- Unlike HEMTs with InGaAs in the channel, the importance of impact ionization does not increase for more negative gate voltages in InAs based HEMTs. In this case, because of the very small band gap of InAs, electrons do not need a negative gate biasing to reach the threshold to produce electron-hole pairs. As a consequence, the number of impact ionization mechanisms increases with the electron concentration in the channel, that is, for less negative gate bias.
- Impact ionization processes in the channel do not only appear in the region under the gate, but mainly in the recess-drain region.
- Holes generated in the channel move to the buffer due to the inverse energy barrier imposed by the heterojunction. The pile-up of positive charge in the buffer counteracts part of the gate bias, thus further opening

---

the channel and leading to the threshold voltage shift and increase of  $I_D$  typical of kink effect.

- Most of the holes in the buffer recombine before reaching the source, so that the hole current is not responsible for the increase of  $I_D$ , which is only associated with an enhanced channel opening.
- The presence of holes in the buffer modifies the electric field distribution within the device and increases the electron concentration at the bottom of the channel.
- Holes generated in the cap layer (at the drain side) move towards the recess wall, where they progressively recombine.

Finally, we want to stress that the MC simulators have been modified in order to correctly model narrow bandgap based HEMTs and not only study their static and dynamic characteristics, but also to provide useful information for the subsequent optimization of this kind of devices.



## BIBLIOGRAPHY

- Bennett B. R., Magno R., Boos J. B., Kruppa W. and Ancona M. G., “Antimonide-based compound semiconductors for electronic devices: A review”, *Solid-State Electron.*, **49**, 1875 (2005).
- Bolognesi C. R., Dvorak M. W., and Chow D. H., “Impact ionization suppression by quantum confinement: Effects on the DC and Microwave Performance of narrow-gap channel InAs/AlSb HFETs”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **46**, 826 (1999).
- Borg M., Lefevre E., Malmkvist M., Desplanque L., Wallart X., Roelens Y., Dambrine G., Cappy A., Bollaert S., and Grahn J. “Effect of gate length in InAs/AlSb HEMTs biased for low power or high gain”, *Solid-State Electronics*, **52**, 775 (2008).
- Chang C.-Y., Hsu H.-T, Chang E. Y. Kuo C.-I., Datta S, Radosavljevic M., Miyamoto Y. and Huang G.-W., “Investigation of impact ionization in InAs-channel HEMT for high-speed and low-power applications”, *IEEE Electron Device Lett.*, **28**, 856 (2007).
- Fischetti M. V., “Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures –part I: homogeneous transport”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **38**, 634 (1991).
- Ghandhi S. K., *VLSI fabrication principles, silicon and gallium arsenide*, (John Wiley & sons, New York, 1994).

- González T., Pardo D., Varani L., and Reggiani L., “Spatial analysis of electronic noise in submicron semiconductor structures“, *Appl. Phys. Lett.*, **63**, 84 (1993a).
- González T., Pardo D., Varani L., and Reggiani L., “Monte Carlo analysis of noise spectra in Schottky-barrier diodes“, *Appl. Phys. Lett.*, **63**, 3040 (1993b).
- Kruppa W., Boos J. B., Benett B. R., Papanicolaou N. A., Park D. and Bass R., “Low-frequency noise in AlSb/InAs and related HEMNTs”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **54**, 1193, (2007) .
- Lai R., Mei X. B., Deal W. R., Yoshida W., Kim Y. M., Liu P. H., Lee J. Uyeda J., Radisic V., Lange M., Gaier T., Samoska L., and Fung A., “Sub 50 nm InP HEMT Device with Fmax Greater than 1 THz, “ *Proceedings of IEDM 2007*, 609 (2007).
- Lefevre E., Malmkvist M., Borg M., Desplanque L., Wallart X., Dambrine G., Bollaert S., and Grahn J. “Gate-recess technology for InAs/AlSb HEMTs”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **56**, 1904 (2009).
- Madelung O. *Semiconductors: Data handbook* (Springer, Berlin, 2004)
- Malmkvist M., Lefebvre E., Borg M., Desplanque L., Wallart X., Dambrine G., Bollaert S., and Jan Grahn J., “Electrical characterization and small-signal modeling of InAs/AlSb HEMTs for low-noise and high-frequency applications”, *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, **56**, 2685 (2008)
- Mateos J., González T., Pardo D., Tadyszak P., Danneville F., and Cappy A., “Noise and transit time in ungated FET structures“, *IEEE Trans. Electron Devices*, **44**, 2128 (1997b).
- Mateos J., González T., Pardo D., Hoel V., and Cappy A., “Effect of the T-gate on the performance of recessed HEMTs. A Monte Carlo analysis“, *Semicond. Sci. Technol.*, **14**, 864 (1999).
- Mateos J., González T., Pardo D., Hoel V., Happy H., and Cappy A., “Improved Monte Carlo algorithm for the Simulation of  $\delta$ -Doped AlInAs/GaInAs HEMT’s”, *IEEE Trans. Electron Devices*, **47**, 250 (2000a).



- Mateos J., González T., Pardo D., Höel V., and Cappy A., “Monte Carlo Simulator for the Design Optimization of Low-Noise HEMT’s”, *IEEE Trans. Electron Devices* **47**, 1950 (2000b).
- Mateos J., Vasallo B. G., Pardo D., González T., Galloo J. S., Bollaert S., and Cappy A., “Ballistic nanodevices for THz data processing: Monte Carlo simulations”, *Nanotechnology*, **14**, 117 (2003).
- Orr J. M. S., Buckle P. D., Fearn M., Giavaras G., Wilding P. J., Bartlett C. J., Emeny M. T., Buckle L., Jefferson J. H., and Ashley T., “Low temperature impact ionization in indium antimonide high performance quantum well field effect transistors“, *J. Appl. Phys.*, **99**, 083703, (2006a).
- Orr J. M. S., Buckle P. D., Fearn M., Wilding P. J., Bartlett C. J., Emeny M. T., Buckle L. and Asheley T., “Schottky barrier transport in InSb/AlInSb quantum well field effect transistor structures”, *Semicond. Sci. Technol.*, **21**, 1408 (2006b).
- Rodilla H., González T., Pardo D. and Mateos J., “Monte Carlo Simulation of Sb-based Heterostructures”, Spanish Conference on Electron Devices, *IEEE Catalog CFP09589*, 152 (2009a).
- Rodilla H., González T., Pardo D., and Mateos J., “High-mobility heterostructures based on InAs and InSb: A Monte Carlo study”, *J. Appl. Phys.* **105**, 113705 (2009b).
- Rodilla H., González T., Malmkvist M., Lefevbre E., Moschetti G., Grahn J., and Mateos J., “Isolated-gate InAs/AlSn HEMTs: A Monte Carlo study”, 22<sup>nd</sup> International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (IPRM), *Conference proceedings* (2010a).
- Rodilla H., González T., Moschetti G., Grahn J., and Mateos J., “Dynamic Monte Carlo study of isolated-gate InAs/AlSb HEMTs”, enviado al *Semicond. Sci. Technol.* (2010b).
- Schwierz F. and Liou J.J., “Modern Microwave Transistors: Theory, Design, and Performance”, (John Wiley and Sons, New York, 2003).

- 
- Shibata T., Nakata J., Nanishi Y., and Fujimoto M., “A Rutherford backscattering spectroscopic study of the aluminum antimonide oxidation process in air”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **33**, 1767 (1994).
- Tasker P. J. and Hughes B., “Importance of source and drain resistance to the maximum ft of millimeter-wave MODFETs”, *IEEE Electron Device Lett.*, **10**, 291 (1989).
- Tuttle G., Kroemer H., and English J. H., “Effects of interface layer sequencing on the transport properties of InAs/AlSb quantum wells: Evidence for antisite donors at the InAs/AlSb interface”, *J. Appl Phys.*, **67**, 3032 (1990).
- Vasallo B. G., Mateos J., Pardo D. and González T., “Monte Carlo study of kink effect in shortchannel InAlAs/InGaAs high electron mobility transistors”, *J. Appl. Phys.* **94**, 4096 (2003).
- Vasallo B. G., Rodilla H., González T., Moschetti G., Grahn J. and Mateos J., “Monte Carlo study of kink effect in isolated-gate InAs/AlSb electron Mobility Transistors”, Enviado al *J. Appl. Phys* (2010).
- Yamashita Y., Endoh A., Shinohara K., Hikosaka K., Matsui T., Hiyamizu S., and Mimura T., “Pseudomorphic In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As/In<sub>0.7</sub>Ga<sub>0.3</sub>As HEMTs with an ultrahigh ft of 562 GHz”, *IEEE Electron Device Lett.*, **23**, 573 (2002).