

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

Departament d'Enginyeria Electrònica

**SIMULACIÓ MONTE CARLO DE
TRANSISTORES BIPOLARES DE
HETEROUNIÓ ABRUPTA (HBT)**

Autor: Pau Garcias Salvà
Director: Lluís Prat Viñas

6. Simulación MC de HBTs abruptos

En este capítulo se presenta la ampliación de los modelos y algoritmos del simulador Monte Carlo MCHBT para hacer posible el estudio de los transistores bipolares de heterounión abrupta (HBTs abruptos). El estudio se centra en los HBTs de InP/InGaAs, que presentan una estructura de bandas con discontinuidades abruptas en las bandas de valencia y de conducción, con la peculiaridad de que la discontinuidad en ésta última es en forma de pico (o *spike*) como la que se vio en el capítulo 2 (Figura 2.2). Esto hace que los electrones inyectados desde el emisor a la base vean no sólo una discontinuidad que podrá producir reflexión cuántica, sino también una barrera estrecha de potencial que podrán atravesar por efecto túnel. Como se vio en ese capítulo, el modelo de arrastre-difusión ampliado utiliza el modelo de emisión termiónica con inclusión del efecto túnel para modelar la corriente a través de la interfaz, $J_n(x_j)$. Para hallar el coeficiente de transmisión que aparece en la expresión de la corriente se hace uso de la aproximación WKB, que ignora la reflexión cuántica para aquellos electrones con energía superior a la de la barrera. Posteriormente se asume que la barrera de potencial es parabólica para poder llegar a la expresión de corriente dada por Grinberg [Grinberg,1984]. Además de estas limitaciones, existen otros aspectos importantes a considerar. Por una parte, los electrones inyectados en la base lo hacen con un incremento repentino de energía cinética; son portadores calientes que podrían atravesar

bases estrechas a gran velocidad y sin apenas sufrir colisiones (transporte cuasi balístico), por lo que no serían correctamente descritos por el modelo de transporte basado en los mecanismos de arrastre-difusión. Por otra parte, los fuertes gradientes de campo eléctrico y de concentración debido a las dimensiones reducidas de estos dispositivos para aplicaciones de alta velocidad pueden hacer que los fenómenos transitorios de velocidad tengan una repercusión importante sobre la respuesta del dispositivo.

Por todas estas razones hemos creído conveniente estudiar estos dispositivos por un método como el MC, de validez más general. En el primer apartado de este capítulo se explicará la adaptación del simulador MCHBT para incluir el tratamiento de las heterouniones en la dinámica Monte Carlo. El segundo apartado se describirá el dispositivo de test utilizado para llevar a cabo las simulaciones comparativas entre los dos modelos. En el apartado 6.3 se analizará el coeficiente de transmisión cuántica en la heterounión del HBT de test. El apartado siguiente se dedicará, sucesivamente, al análisis de la corriente en la interfaz de la heterounión, a la corriente a través de la base y a la corriente a través de la zona de carga espacial de la unión base-colector. Finalmente, se extraerán las conclusiones del capítulo.

6.1 Tratamiento Monte Carlo para los HBTs abruptos.

En este apartado veremos cómo se ha incluido el tratamiento de las heterouniones en el simulador MCHBT. El tratamiento de los huecos es el mismo que se vio en el capítulo tercero que, a su vez, es básicamente el mismo que utiliza HBTSIM: modelo de arrastre-difusión en las regiones graduales y emisión termoiónica en las regiones abruptas. También se trataron ya los temas relacionados con el cálculo del campo eléctrico en los nodos de discretización coincidentes con el cambio abrupto de material (léase, cambio en la constante dieléctrica) según el método *cloud-in cell*, CIC. Por tanto, nos centraremos ahora en el estudio de los electrones que caen dentro de la zona de influencia de la heterounión.

6.1.1 Transmisión de electrones a través de la heterounión.

La dinámica de los electrones dentro del HBT será en principio la misma que se vio para los electrones restringidos por los límites físicos del dispositivo. En ausencia de campos magnéticos, los electrones sufrirán aceleraciones debidas a la acción del campo electrostático que actúe sobre ellos siguiendo las leyes de la mecánica newtoniana. Los incrementos de energía cinética irán asociados a un decremento equivalente de energía potencial, que vendrá determinado a su vez por las posiciones inicial y final del electrón en su desplazamiento. Para poder aplicar correctamente este tratamiento clásico, se utilizará la masa efectiva correspondiente al valle de la banda de conducción que ocupen, como forma de tener en cuenta el efecto del potencial periódico de la red cristalina. Asimismo, las imperfecciones en el potencial de la red se continuarán tratando de forma cuántica según los diferentes mecanismos de dispersión, que seguirán siendo los responsables de la interrupción de los vuelos libres del electrón con la consiguiente modificación de su estado de momento y energía como consecuencia del choque. Los límites físicos del dispositivo impondrán unas condiciones de contorno que, como se vio, deben ser consistentes además con las condiciones de contorno aplicadas en la resolución de la ecuación de Poisson.

Así pues, la diferencia en el tratamiento MC de los electrones residirá tan solo en la simulación de los vuelos libres de los electrones que sean posibles candidatos a cruzar la heterounión. Fijándonos en la Figura 6.1, podemos distinguir cuatro casos posibles en los que un electrón podrá cruzar la interfaz. El primer caso correspondería al de un electrón del emisor con energía total E superior a la energía máxima de la barrera de potencial y que, por la duración suficientemente larga de su vuelo libre, cruzaría la interfaz hacia la base. El segundo caso correspondería al de un electrón del emisor con energía total E inferior a la energía máxima de la barrera de potencial y que durante su vuelo libre chocara con esta. Según las leyes de la mecánica newtoniana y por conservación de la energía, en el instante de choque con la barrera el electrón tendría energía cinética cero e invertiría el sentido de su movimiento impulsado por el campo eléctrico asociado a la pendiente del mínimo de la banda de conducción. El tercer caso sería el análogo del primero para un electrón de la base con energía total E superior a la energía máxima de la barrera de potencial y que en su vuelo libre cruzaría la interfaz

hacia el emisor. El cuarto caso sería el de un electrón de la base que chocara contra la barrera de potencial.

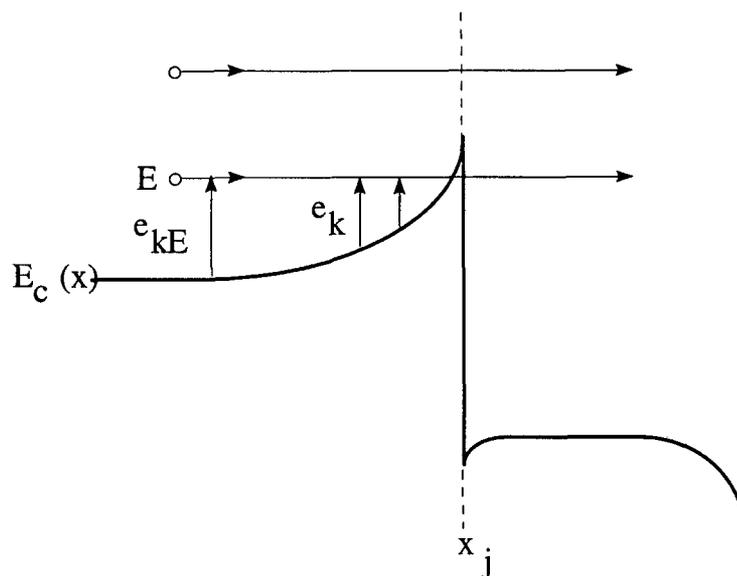


Figura 6. 1 Dinámica de un electrón cercano a la heterounión abrupta.

En los cuatro casos anteriores el procedimiento de simulación adoptado ha sido el siguiente:

- calcular el coeficiente de transmisión del electrón a través de la interfaz en función de su energía, $T_{eb}(E)$ (o $T_{be}(E)$, según corresponda).
- generar un número aleatorio r uniformemente distribuido en el intervalo $(0,1)$ y compararlo con el coeficiente de transmisión.
- decidir si el electrón se transmite a la región vecina (si $T_{eb}(E) \geq r$) o se refleja (si $T_{eb}(E) < r$).
- calcular el estado final del electrón: posición, momento y energía finales.

Con el planteamiento anterior, el coeficiente de transmisión del electrón visto como onda se interpreta como probabilidad de transmisión del electrón considerado como partícula, puesto que de hecho el electrón no deja de ser una partícula indivisible. Dado un valor $T_{eb}(E)$ del coeficiente de transmisión del paquete de onda, el electrón partícula será transmitido a la región anexa con probabilidad $T_{eb}(E)$ y reflejado hacia la región de origen con probabilidad $1-T_{eb}(E)$.

En los apartados que siguen se detallará el cálculo del coeficiente de transmisión y el cálculo del estado final en los cuatro casos que se han descrito arriba.

6.1.2 Cálculo del coeficiente de transmisión cuántica.

El cálculo del coeficiente de transmisión del electrón en la interfaz de la heterounión es un problema asociado a la naturaleza ondulatoria del electrón. Es un problema que debe ser tratado de forma cuántica resolviendo la ecuación de onda del electrón o *ecuación de Schrödinger para un solo electrón*. La aproximación habitual es considerar la ecuación de onda para la masa efectiva, también denominada *ecuación de Schrödinger* por muchos autores, sin hacer distinción explícita con la anterior. En esta ecuación la función que se resuelve ya no es estrictamente la función de onda del electrón sino la función envolvente del paquete de onda [Datta,1989]. El hecho de trabajar con la función envolvente genera cierta controversia a la hora de definir las condiciones de contorno que se deben aplicar, ya que no queda claro que sea razonable exigir continuidad de la función envolvente y de su derivada como se hacía con la función de onda [Datta,1989], [Morrow,1984], [Kroemer,1982].

La ecuación a resolver para barreras de potencial unidimensionales $E_c(x)$ de forma arbitraria y con variación espacial de la composición del material, es decir, con masa efectiva variable, $m^*(x)$, es la siguiente:

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{m^*(x)} \cdot \frac{d\Psi(x)}{dx} \right] + \frac{2}{\hbar^2} \cdot [E - E_{kt}(x) - E_c(x)] \cdot \Psi(x) = 0 \quad (6.1)$$

donde $\Psi(x)$ es la envolvente de la función de onda del electrón, E es su energía total y $E_{kt}(x)$ indica la energía cinética asociada a la componente transversal del vector de onda, k_t , que se ha expresado como una cantidad dependiente de x para poner de manifiesto la influencia que tiene en su valor la masa efectiva $m^*(x)$ cuando la composición del material es variable. Asumiendo bandas parabólicas esféricas:

$$E_{kt}(x) = \frac{\hbar^2 k_t^2}{2 \cdot m^*(x)} = \frac{\hbar^2 (k_y^2 + k_z^2)}{2 \cdot m^*(x)} = E - E_{kx}(x) \quad (6.2)$$

Aunque el problema sea unidimensional en el espacio real r , es importante tratarlo de forma tridimensional en el espacio de los momentos, k , tal como lo hemos venido haciendo en todo el planteamiento del simulador Monte Carlo. Podría parecer que, de acuerdo con (6.2), substituyendo $E - E_{kt}(x)$ por $E_{kx}(x)$ en la ecuación (6.1) el resultado para el coeficiente de transmisión dependiera sólo de $E_{kx}(x)$, cuando en realidad depende de las dos variables independientes, E y $E_{kt}(x)$, y no de su diferencia tal como expone Vassell en su trabajo sobre efecto túnel multibarrera en heteroestructuras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs}$ [Vassell,1983]. No obstante, especialmente en tratamientos analíticos que requieren simplificaciones importantes del problema, no se observa unanimidad en el planteamiento de la ecuación en estudios posteriores al de Vassell ([Das,1988], [Betser,1994], [Kumar,1995], [Searles,1996]) y, en general, se opta despreciar la dependencia del coeficiente de transmisión con la energía transversal.

Para el cálculo del coeficiente de transmisión en nuestro simulador hemos optado por aplicar un método numérico de resolución basado en el descrito por Vassell, como alternativa para obtener un resultado más exacto y no tener que presuponer ninguna dependencia espacial concreta para la barrera de potencial. El primer paso del procedimiento consiste en reescribir la ecuación (6.1) refiriendo las variaciones espaciales a los valores de las variables en un punto adecuado de referencia, que en nuestro caso será un punto de la región neutra del emisor. Allí consideraremos que la masa efectiva del electrón incidente toma el valor constante m_0^* , y donde el electrón se propaga como una onda plana con energía total E y energía cinética transversal E_{kt0} . Definiendo $\zeta(x) = m^*(x)/m_0^*$, la ecuación (6.1) se reescribe como:

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{\zeta^*(x)} \cdot \frac{d\Psi(x)}{dx} \right] + \frac{2 \cdot m_0^*}{\hbar^2} \cdot \left[E - \frac{E_{kt0}}{\zeta(x)} - E_c(x) \right] \cdot \Psi(x) = 0 \quad (6.3)$$

A continuación, se discretiza la barrera de potencial según una discretización en escalera. De hecho, se aprovecha la misma discretización del dispositivo utilizada para

la resolución de la ecuación de Poisson. El resultado sería similar al que se esquematiza en la Figura 6.2:

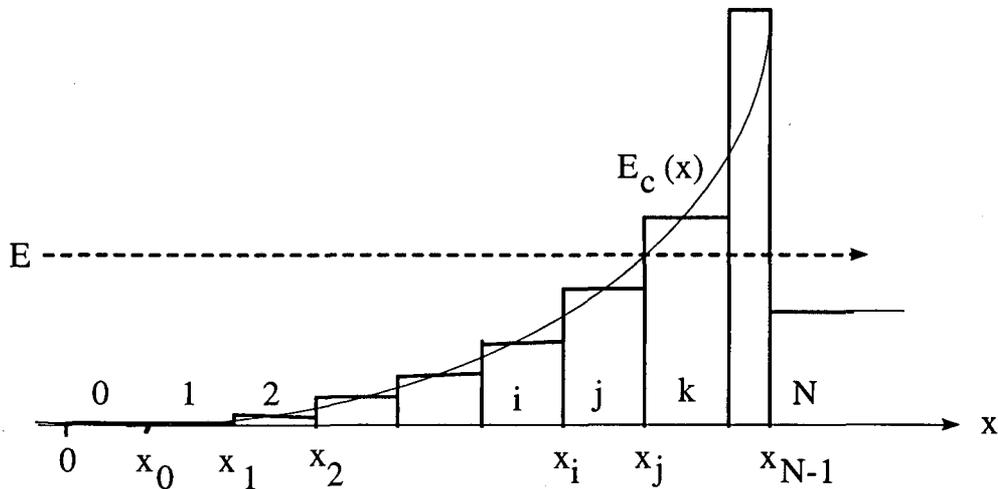


Figura 6.2 Discretización en escalera de la barrera de potencial.

La solución $\Psi(x)$ a la ecuación (6.3) puede resolverse por tramos, planteando la solución dentro de cada celda j como la superposición de una onda progresiva y una onda regresiva del tipo:

$$\Psi_j(x) = B_j^+ \cdot f_j^+(x) + B_j^- \cdot f_j^-(x) \quad (6.4)$$

e imponiendo las condiciones de continuidad para la función $\Psi(x)$ y para su derivada "normalizada" $\Psi'(x)/\zeta(x)$ en cada interfaz con las celdas adyacentes:

$$\begin{bmatrix} \Psi_i(x_i) \\ \Psi_i'(x_i)/\zeta_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Psi_j(x_i) \\ \Psi_j'(x_i)/\zeta_j \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

donde se supone que ni la masa ni el potencial varían dentro de una misma celda. Por otra parte, la relación entre el valor de la función (y su derivada) en los extremos de una misma celda se pueden expresar en forma matricial definiendo una matriz S_j de parámetros S de dimensiones 2×2 dentro de cada celda j de la discretización:

$$\begin{bmatrix} \Psi_j(x_j) \\ \Psi_j'(x_j)/\zeta_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{11j} & s_{12j} \\ s_{21j} & s_{22j} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Psi_j(x_i) \\ \Psi_j'(x_i)/\zeta_j \end{bmatrix} \quad (6.6)$$

Para un electrón con energía $E - E_{kt0}/\zeta_j$ mayor que la energía potencial de la celda, E_{cj} , la onda se propagará dentro de la celda como una onda con vector de onda β_j :

$$\Psi_j(x) = B_j^+ \cdot e^{+j\beta_j \cdot x} + B_j^- \cdot e^{-j\beta_j \cdot x} \quad (6.7)$$

donde

$$\beta_j = \sqrt{\zeta_j \cdot \frac{2m_0^*}{\hbar^2} \cdot (E - E_{kt0}/\zeta_j - E_{cj})} \quad (6.8)$$

con lo que la matriz de parámetros S se puede expresar como:

$$S_j = \begin{bmatrix} \cos(\beta_j \cdot \Delta x_j) & \frac{\zeta_j}{\beta_j} \sin(\beta_j \cdot \Delta x_j) \\ -\frac{\beta_j}{\zeta_j} \sin(\beta_j \cdot \Delta x_j) & \cos(\beta_j \cdot \Delta x_j) \end{bmatrix} \quad (6.9)$$

siendo Δx_j la longitud de la celda que debe atravesar la onda del electrón.

Si por el contrario, la energía del electrón $E - E_{kt0}/\zeta_j$ es menor que la energía potencial de la celda, E_{cj} , la onda se atenuará dentro de la celda como una onda con vector de onda α_j :

$$\Psi_j(x) = B_j^+ \cdot e^{+\alpha_j \cdot x} + B_j^- \cdot e^{-\alpha_j \cdot x} \quad (6.10)$$

donde

$$\alpha_j = \sqrt{\zeta_j \cdot \frac{2m_0^*}{\hbar^2} \cdot (E_{cj} - (E - E_{kt0}/\zeta_j))} \quad (6.11)$$

con lo que en este caso la matriz de parámetros S tomará la forma:

$$S_j = \begin{bmatrix} Ch(\alpha_j \cdot \Delta x_j) & \frac{\zeta_j}{\alpha_j} Sh(\alpha_j \cdot \Delta x_j) \\ \frac{\alpha_j}{\zeta_j} Sh(\alpha_j \cdot \Delta x_j) & Ch(\alpha_j \cdot \Delta x_j) \end{bmatrix} \quad (6.12)$$

Las ecuaciones anteriores se pueden aplicar sucesivamente para determinar el avance a través de la barrera de potencial y la discontinuidad de un electrón que incide desde la región del emisor como una onda plana sin perturbar $\Psi_0(x)$ con vector de onda k_{x0} dados por:

$$\Psi_0(x) = A_0^+ \cdot e^{+j \cdot k_{x0} \cdot x} + A_0^- \cdot e^{-j \cdot k_{x0} \cdot x} \quad (6.13)$$

$$k_{x0} = \sqrt{\frac{2m_0^*}{\hbar^2} \cdot (E - E_{kt0} - E_{c0})} \quad (6.14)$$

Aplicando sucesivamente a partir de esta onda inicial las condiciones de contorno de la ecuación (6. 5) en cada interfaz y la progresión de la onda dentro de cada nueva celda según (6. 6), utilizando para ello las expresiones (6. 7)–(6. 9) o (6. 10)–(6. 12) según corresponda en cada caso, se llega a la expresión:

$$\begin{bmatrix} \Psi_N(x_{N-1}) \\ \Psi'_N(x_{N-1})/\zeta_N \end{bmatrix} = S_T \cdot \begin{bmatrix} \Psi_0(x_0) \\ \Psi'_0(x_0)/\zeta_0 \end{bmatrix} \quad (6.15)$$

donde la matriz S_T se obtiene del producto de las matrices parciales S_j :

$$S_T = S_{N-1} \cdot S_{N-2} \cdots S_2 \cdot S_1 \cdot S_0 \quad (6.16)$$

y donde $\Psi_N(x)$ es la función de onda del electrón justo después de haber superado la heterounión:

$$\Psi_N(x) = A_N^+ \cdot e^{+j \cdot k_{xN} \cdot (x - x_{N-1})} + A_N^- \cdot e^{-j \cdot k_{xN} \cdot (x - x_{N-1})} \quad (6.17)$$

con amplitudes A_N^+ y A_N^- desconocidas cuyo vector de onda viene dado por:

$$k_{xN} = \sqrt{\zeta_N \cdot \frac{2m_0^*}{\hbar^2} \cdot (E - E_{kt0}/\zeta_N - E_{cN})} \quad (6.18)$$

Tomando la ecuación (6.15) y haciendo uso de las ecuaciones (6.13) y (6.17) podemos relacionar las amplitudes de la onda a cada lado de la barrera de potencial:

$$\begin{bmatrix} A_N^+ \\ A_N^- \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1 & -j \frac{1}{k_{xN}/\zeta_N} \\ 1 & +j \frac{1}{k_{xN}/\zeta_N} \end{bmatrix} \cdot S_T \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ jk_{x0}/\zeta_0 & -jk_{x0}/\zeta_0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_0^+ \\ A_0^- \end{bmatrix} \quad (6.19)$$

que puede expresarse de forma simplificada introduciendo la matriz M resultante del producto de las tres matrices del segundo miembro:

$$\begin{bmatrix} A_N^+ \\ A_N^- \end{bmatrix} = M \cdot \begin{bmatrix} A_0^+ \\ A_0^- \end{bmatrix} \quad (6.20)$$

con elementos m_{ij} :

$$m_{11} = m_{22}^* = \frac{1}{2} \cdot \left[\left(s_{11} + \frac{k_{x0}/\zeta_0}{k_{xN}/\zeta_N} s_{22} \right) + j \left(\frac{k_{x0}}{\zeta_0} s_{12} - \frac{1}{k_{xN}/\zeta_N} s_{21} \right) \right] \quad (6.21)$$

$$m_{12} = m_{21}^* = \frac{1}{2} \cdot \left[\left(s_{11} - \frac{k_{x0}/\zeta_0}{k_{xN}/\zeta_N} s_{22} \right) - j \left(\frac{k_{x0}}{\zeta_0} s_{12} + \frac{1}{k_{xN}/\zeta_N} s_{21} \right) \right] \quad (6.22)$$

y determinante:

$$\det M = \frac{k_{x0}/\zeta_0}{k_{xN}/\zeta_N} \quad (6.23)$$

donde los elementos s_{ij} son los de la matriz S_T .

Con estos datos se puede hallar fácilmente el coeficiente de transmisión para una onda incidente que viaje en el sentido positivo de las x , que denominaremos T_F :

$$T_F = \frac{k_{xN}/\zeta_N}{k_{x0}/\zeta_0} \cdot \left(\frac{A_N^+}{A_0^+} \right)^2 \Bigg|_{A_N^- = 0} = \frac{\det M}{m_{22}^2} \quad (6.24)$$

$$T_F = \frac{4 \cdot \frac{k_{x0}/\zeta_0}{k_{xN}/\zeta_N}}{\left[\left(s_{11} + \frac{k_{x0}/\zeta_0}{k_{xN}/\zeta_N} s_{22} \right)^2 + \left(\frac{k_{x0}}{\zeta_0} s_{12} - \frac{1}{k_{xN}/\zeta_N} s_{21} \right)^2 \right]} \quad (6.25)$$

Si la onda viaja en sentido contrario, el coeficiente de transmisión T_R se calcula como:

$$T_R = \frac{k_{x0}/\zeta_0}{k_{xN}/\zeta_N} \cdot \left(\frac{A_0^-}{A_N^-} \right)^2 \Bigg|_{A_N^+ = 0} \quad (6.26)$$

que, operando, resulta ser el mismo que el visto por la onda progresiva:

$$T_F \equiv T_R = \frac{\det M}{m_{22}^2} \quad (6.27)$$

Por tanto, dado un electrón con una cierta energía, la probabilidad que éste cruce la heterounión es la misma tanto si el electrón incide desde el emisor como si incide desde la base, puesto que la barrera actúa de forma simétrica. El flujo neto de electrones a través de la interfaz no estará pues afectado por la barrera sino que estará determinado por el número de electrones que incidan desde cada región; que, en un HBT *n-p-n*, obviamente será mucho mayor desde el lado del emisor.

Analizando la expresión del coeficiente de transmisión de la ecuación (6.25), y teniendo en cuenta las ecuaciones (6.8), (6.11) y (6.18) para los vectores de onda, se observa el resultado de Vassell comentado anteriormente: si la masa efectiva del electrón cambia a lo largo del dispositivo el coeficiente de transmisión depende de la energía total E y de la energía transversal del electrón incidente $E_{k_{t0}}$ como dos variables independientes; sólo cuando la masa efectiva permanece constante el resultado puede expresarse en función de su diferencia $E - E_{k_{t0}}$.

En nuestro simulador MCHBT hemos añadido otra variable: el valle de la banda de conducción que ocupa el electrón. Los motivos son dos. El primero es que, dados dos materiales formando una heterounión, la relación de masas efectivas para un valle determinado es por lo general distinta de la relación de masas para otro valle. Esta consideración presupone que cuando un electrón cruza la interfaz no cambia de valle al pasar al nuevo material, consideración que a su vez presupone que la estructura cristalográfica y de bandas de los dos materiales que forman la heterounión son similares. En caso contrario, con más motivo se debería introducir una variable asociada al valle, puesto que podría ser necesario calcular un coeficiente de transmisión para cada posible combinación de valles inicial y final. El segundo motivo es que la discontinuidad en la banda de conducción depende también del valle considerado.

Por otra parte, todo el estudio anterior para deducir la fórmula del coeficiente de transmisión se ha realizado para bandas parabólicas, tal como se considera en las referencias [Vassell,1983], [Das,1988], [Betser,1994], [Kumar,1995] y [Searles,1996]. Para ser más coherentes con la formulación utilizada para la dinámica del electrón en el simulador MCHBT hemos creído conveniente calcular el coeficiente de transmisión teniendo en cuenta la no parabolicidad de las bandas. El diferente grado de no parabolicidad de las bandas en los dos materiales que forman la heterounión podría ser un factor tan importante como la relación de masas efectivas, puesto que también influye en el cálculo de cada parámetro α_j , β_j , k_{x0} y k_{xN} . Además, en HBTs abruptos como los de InP/InGaAs en los que la barrera actúa como rampa de lanzamiento, los electrones se inyectan en la base con una energía cinética elevada, por lo que es de esperar que el efecto de la no parabolicidad sobre el cálculo de k_{xN} sea significativo.

Estrictamente, la influencia de la no parabolicidad de las bandas debería calcularse planteando una nueva ecuación de masa efectiva que incluyera este efecto puesto que la ecuación (6. 1) ya presupone bandas parabólicas [Datta,1989]. A partir de esta nueva ecuación habría que repetir el proceso anterior hasta llegar a una expresión del coeficiente de transmisión. Nuestro planteamiento, no obstante, ha sido paralelo al que se sigue para tratar la no parabolicidad en la dinámica Monte Carlo, introduciendo el parámetro de no parabolicidad α en la relación $E(k)$ tal como se vio en el capítulo 3:

$$E_k(1 + \alpha \cdot E_k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \gamma(k) \quad (6.28)$$

Esta relación es aplicable tanto al módulo total k del vector de onda como a cada una de sus componentes k_x , k_y o k_z (como caso particular en que el vector de onda coincide con la dirección de uno de los ejes). Por tanto, se concluye un resultado a primera vista sorprendente desde la perspectiva *más conocida* de la Mecánica clásica: la energía cinética total no se puede calcular como suma de las energías cinéticas asociadas a cada grado de libertad del movimiento de la partícula. En efecto, dado que las componentes k_x , k_y , k_z del vector de onda k son ortogonales se cumple que:

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad (6.29)$$

por lo que se puede afirmar que:

$$\gamma(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} = \gamma(k_x) + \gamma(k_y) + \gamma(k_z) \quad (6.30)$$

y, de acuerdo con la ecuación (6.28):

$$E_k = E_{k_x} \cdot \frac{(1 + \alpha \cdot E_{k_x})}{(1 + \alpha \cdot E_k)} + E_{k_y} \cdot \frac{(1 + \alpha \cdot E_{k_y})}{(1 + \alpha \cdot E_k)} + E_{k_z} \cdot \frac{(1 + \alpha \cdot E_{k_z})}{(1 + \alpha \cdot E_k)} \quad (6.31)$$

Por tanto, con bandas no parabólicas se concluye que:

$$E_k \neq E_{k_x} + E_{k_y} + E_{k_z} \quad (6.32)$$

La igualdad sólo será cierta cuando el parámetro α en la ecuación (6.31) sea nulo, es decir, cuando las bandas sean parabólicas.

Así pues, cuando en la ecuación (6.1) usábamos $E - E_{kt}(x)$ como equivalente de $E_{kx}(x)$ para comparar la energía del electrón con la de la barrera de potencial $E_c(x)$ ahora deberemos calcular el valor de $E_{kx}(x)$ de forma correcta teniendo en cuenta las nuevas

relaciones de energía en bandas no parabólicas. Esto afectará directamente al cálculo de los parámetros α_j , β_j , k_{x0} y k_{xN} y, por tanto, al cálculo del coeficiente de transmisión.

Para el caso particular de HBTs abruptos, objeto de estudio en este trabajo, los puntos del dispositivo en los que se calculan los parámetros α_j , β_j y k_{x0} poseen las mismas características de material, por lo que las fórmulas correspondientes a bandas no parabólicas se pueden expresar, de acuerdo con (6. 28) por:

$$\beta_j = \sqrt{\frac{2m_0^*}{\hbar^2} \cdot (E_{c0} + E_{kx0} - E_{cj}) \cdot (1 + \alpha \cdot (E_{c0} + E_{kx0} - E_{cj}))} \quad (6. 33)$$

$$\alpha_j = \sqrt{\frac{2m_0^*}{\hbar^2} \cdot (E_{cj} - (E_{c0} + E_{kx0})) \cdot (1 + \alpha \cdot (E_{cj} - (E_{c0} + E_{kx0})))} \quad (6. 34)$$

$$k_{x0} = \sqrt{\frac{2m_0^*}{\hbar^2} \cdot E_{kx0} \cdot (1 + \alpha \cdot E_{kx0})} \quad (6. 35)$$

donde se han escogido unas nuevas variables para posterior comodidad en la tabulación del coeficiente de transmisión en el simulador. E_{c0} es la energía potencial (nivel de la banda de conducción) en el punto de referencia y E_{kx0} es la energía cinética en la coordenada x de la onda incidente también medida en el punto de referencia.

La nueva forma de calcular estos parámetros si hay además un cambio de material se ilustrará en el apartado que sigue con el cálculo de k_{xN} , puesto que dicho valor forma parte también del procedimiento de cálculo del estado final de un electrón que logre cruzar la barrera.

6.1.3 Cálculo del estado final del electrón.

Para determinar el estado final de un electrón que consigue ser transmitido a la otra parte de la heterounión hay que aplicar dos principios de la teoría de propagación de ondas: a) conservación de la energía total, E y b) conservación del momento transversal,

k_t [Searles,1996], [Lorrain,1972]. Siguiendo con la nomenclatura indicada en la Figura 6.2, los dos principios anteriores se expresarían matemáticamente como:

$$E = E_{c0} + E_{k0} = E_{cN} + E_{kN} \quad (6.36)$$

$$k_t^2 = k_{t0}^2 = (k_{y0}^2 + k_{z0}^2) = (k_{yN}^2 + k_{zN}^2) = k_{tN}^2 \quad (6.37)$$

Estas dos ecuaciones, junto con la ecuación (6. 2) para la energía cinética transversal en semiconductores con bandas parabólicas nos permiten observar fácilmente que cuando un electrón cruza una heterounión abrupta experimenta un trasvase de energía entre las componentes longitudinal y transversal. En efecto, si la componente transversal del momento debe mantenerse constante y suponemos que hay una reducción de masa efectiva debido a un cambio de material, la energía cinética transversal deberá aumentar. Puesto que la energía total también debe conservarse, se concluye que el aumento de energía cinética transversal irá acompañado de un decremento equivalente en la energía cinética longitudinal. Este decremento provocaría en principio una reducción del módulo del vector de onda longitudinal, aunque el resultado final depende también del trasvase de energía potencial a energía cinética debido a la discontinuidad en las bandas. Esta situación se representa en la Figura 6.3, en la que se ha supuesto una polarización tal que no haya diferencia de energía potencial entre las posiciones inicial y final del electrón (para aislar los efectos). Para bandas parabólicas, la variación de energía cinética transversal es directamente la relación de masas.

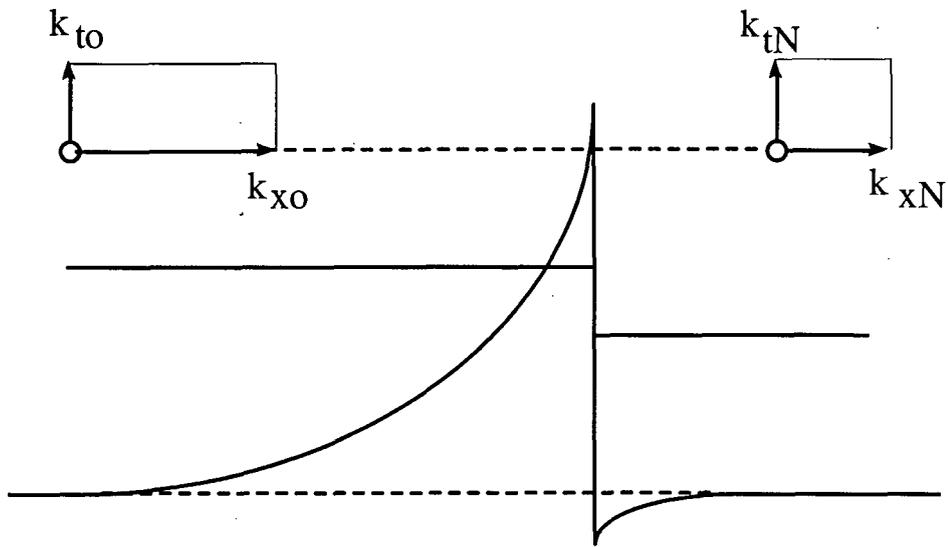


Figura 6. 3 Efecto de trasvase de energía cinética longitudinal del electrón a energía cinética transversal en una heterounión abrupta.

Algo similar ocurre en semiconductores con bandas no parabólicas, sólo que entonces la relación entre factores de no parabolicidad de las bandas en cada material también interviene en el resultado final. Resolviendo la ecuación cuadrática (6. 28) en la variable E_k se puede plantear el siguiente sistema de ecuaciones con las energías cinéticas inicial y final del electrón:

$$\left. \begin{aligned}
 E_{k0} &= \frac{\sqrt{1 + 4 \cdot \alpha_0 \cdot \frac{\hbar^2}{2 \cdot m_0^*} \cdot (k_{x0}^2 + k_t^2)} - 1}{2 \cdot \alpha_0} \\
 E_{kN} &= \frac{\sqrt{1 + 4 \cdot \alpha_N \cdot \frac{\hbar^2}{2 \cdot m_N^*} \cdot (k_{xN}^2 + k_t^2)} - 1}{2 \cdot \alpha_N}
 \end{aligned} \right\} \quad (6. 38)$$

donde ya se ha tenido en cuenta el principio de conservación del momento transversal. En la primera ecuación del sistema todos los valores están determinados como datos de entrada. En la segunda ecuación tenemos dos incógnitas: E_{kN} y k_{xN} . Introduciendo el principio de conservación de energía podemos relacionar las dos ecuaciones y resolver el sistema. Despejando E_{kN} de (6. 36) se tiene:

$$E_{kN} = E_{c0} + E_{k0} - E_{cN} \quad (6.39)$$

que substituida en (6.38) permite hallar el vector de onda del electrón después de cruzar la heterounión, necesario para el cálculo del coeficiente de transmisión:

$$k_{xN} = \sqrt{\frac{(1 + 2 \cdot \alpha_N \cdot [E_{c0} + E_{k0} - E_{cN}])^2 - 1}{2 \cdot \alpha_N \cdot \frac{\hbar^2}{m_N^*}} - k_t^2} \quad (6.40)$$

Volvamos ahora a la simulación de la dinámica MC de un electrón. Recordemos que la simulación avanza con pasos temporales Δt muy pequeños para poder reajustar el campo eléctrico de forma consistente a medida que se producen desplazamientos de carga. Por ello, los desplazamientos máximos del electrón durante un vuelo libre están también limitados, con lo que sólo los electrones cercanos a la heterounión o próximos a chocar contra la barrera de potencial serán candidatos a cruzar la interfaz. Algorítmicamente esto permite delimitar la búsqueda de los electrones a los que, después de finalizar su vuelo libre normal, se les deberá revisar su estado final. El beneficio final será una reducción adicional del tiempo de simulación.

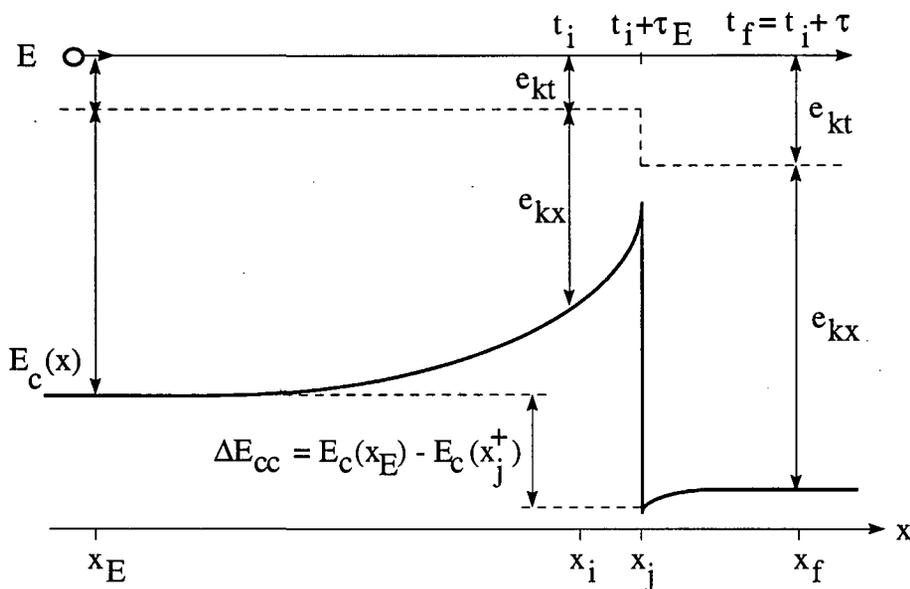


Figura 6.4 Emisión termoiónica de un electrón por encima de la barrera de potencial.

Reconsideremos los distintos casos posibles enumerados en el apartado 6.1.1. El primer caso es el de un electrón del emisor con energía total E superior a la energía máxima de

la barrera de potencial. Considérese la Figura 6.4. donde se representa el cruce del electrón por encima de la barrera de potencial (*emisión termoiónica*). Su estado inicial viene determinado por el instante t_i en el que inicia el vuelo libre (de duración τ), su posición x_i y su vector de onda k_i . A partir de estos datos se pueden calcular el resto de variables asociadas al electrón (energía potencial $E_c(x_i)$, cinética E_{k,x_i} y total E). Si aplicando los cálculos de la dinámica MC descritos en el tercer capítulo resulta que el electrón consigue cruzar la interfaz, se anula el estado final obtenido y se recalcula para simular los efectos de la heterounión. El procedimiento seguido es el siguiente:

- a) se calcula la energía cinética longitudinal $E_{k_x,xE}$ que tendría el mismo electrón en el punto de referencia x_E (tomado en el contacto de emisor).

$$E_{k_x,x_j^+} = E_{k_x,x_i} + E_c(x_i) - E_c(x_E) \quad (6.41)$$

- b) se genera un número aleatorio r que se compara con el coeficiente de transmisión $T(E_{k_x,xE})$, previamente tabulado.

- c) si $T(E_{k_x,xE}) > r$ se decide que hay transmisión hacia la base

- c1) se calcula la energía cinética total en el punto de la interfaz del lado de la base, E_{k,x_j^+} . Si da un valor negativo se salta al punto d).

$$E_{k,x_j^+} = E_{k,x_i} + E_c(x_i) - E_c(x_j^+) \quad (6.42)$$

- c2) aplicando la ecuación (6. 40) se calcula la componente longitudinal del vector de onda en x_j^+ . Si da un valor negativo se salta al punto d).

$$k_{x,x_j^+}^2 = \frac{\left(1 + 2 \cdot \alpha_{x_j^+} \cdot E_{k,x_j^+}\right)^2 - 1}{2 \cdot \alpha_{x_j^+} \cdot \frac{\hbar^2}{m_{x_j^+}^*}} - k_i^2 \quad (6.43)$$

- c3) se calcula la fracción τ_E de tiempo de vuelo libre que ha consumido el electrón para recorrer la distancia $x_j^+ - x_i$ siguiendo las leyes clásicas de un

movimiento uniformemente acelerado, tomando como fuerza motriz la del campo eléctrico en el punto inicial x_i .

$$\tau_E = \frac{\hbar \cdot k_{x,x_i}}{q \cdot E_{el,x_i}} - \sqrt{\left(\frac{\hbar \cdot k_{x,x_i}}{q \cdot E_{el,x_i}}\right)^2 - \frac{2 \cdot (x_j - x_i)}{q \cdot E_{el,x_i}} \cdot m_{x_i}^* \cdot \sqrt{1 + 4 \cdot \alpha_{x_i} \cdot \gamma}} \quad (6.44)$$

c4) se simula un nuevo vuelo libre (según el procedimiento habitual) iniciado en x_j^+ con duración $\tau_B = \tau - \tau_E$ y vector de onda inicial correspondiente al calculado en c2). Se actualiza el valor del campo eléctrico y, además, todos los parámetros necesarios debido al cambio de región en el dispositivo: masa efectiva, parámetro de no parabolicidad, mecanismos de dispersión, etc. El resultado de este nuevo vuelo proporciona el estado final del electrón transmitido de emisor a base: x_f y k_{x,x_f} .

d) si $T(E_{kx,xE}) < r$ se decide que hay reflexión hacia el emisor

d1) se calcula τ_E como en c3).

d2) se calcula el vector de onda en el punto x_j^- como resultado de un vuelo libre de duración τ_E y se le cambia el signo para proceder a la reflexión cuántica del electrón.

$$k_{x,x_j^-} = -\left(k_{x_i} + \Delta k \Big|_{\tau_E}\right) \quad (6.45)$$

d3) se simula un nuevo vuelo libre (según el procedimiento habitual) iniciado en x_j^- con duración $\tau_B = \tau - \tau_E$ y vector de onda inicial correspondiente al calculado en d2). Sin necesidad de cambios de valor en los parámetros de material, se obtiene el estado final del electrón transmitido de emisor a base: x_f y k_{x,x_f} .

$$x_f = x_j^- + \Delta x \Big|_{\tau_B} \quad (6.46)$$

$$k_{x,x_f} = k_{x,x_j^-} + \Delta k \Big|_{\tau_B} \quad (6.47)$$

El segundo caso especial es el de un electrón del emisor que, en la simulación normal de un vuelo libre, choca contra la barrera de potencial, invierte el sentido de su marcha y retrocede. Se detectan, por tanto, por un cambio de signo en la componente longitudinal del vector de onda. Para saber si el electrón puede pasar a la base por efecto túnel se realizan los mismos cálculos que se han expuesto en los puntos a) y b) del caso primero. Si se decide transmisión por efecto túnel, los cálculos a realizar son idénticos a los del punto c) excepto el de τ_E , que ahora corresponde al tiempo necesario para que el electrón se frene por completo (velocidad cero, justo en el momento de invertir su marcha):

$$\tau_E = -\frac{\hbar \cdot k_{x,x_i}}{q \cdot E_{el,x_i}} \quad (6.48)$$

Si se decide que hay reflexión, simplemente se tiene que aceptar el estado final calculado en la simulación inicial del vuelo libre.

Los dos casos restantes se pueden simular como un mismo caso, puesto que la barrera de potencial es abrupta y entonces no hay diferencia entre el tiempo de vuelo necesario para chocar contra la barrera o para alcanzar la heterounión. Los cálculos son similares a los de los dos primeros casos con algunas salvedades. Primera, que para aprovechar la misma tabulación del coeficiente de transmisión, $T(E_{kx,xE})$, hay que calcular cuál sería la energía cinética del electrón de la base si cruzara al emisor. Y, segunda salvedad, que si el electrón es finalmente transmitido al emisor por efecto túnel, se tiene que hallar la posición a partir de la cual se aplicará la segunda parte de vuelo libre (con $\tau_E = \tau - \tau_B$). Se trata de resolver el punto de intersección x^* de la recta horizontal que representa la suma de la energía potencial y cinética longitudinal del electrón incidente, $E_c(x_E) + E_{kx,xE}$, con la curva $E_c(x)$ en la región de emisor. Esto se hace en MCHBT de forma iterativa empezando por el punto de discretización x_j^- (el del pico de la barrera) descendiendo hasta que $E_{kx,x^*} > 0$.

6.2 Descripción del dispositivo de prueba.

En este apartado se describe el dispositivo utilizado como ejemplo para ilustrar los resultados obtenidos por el simulador MCHBT. Se trata de un HBT abrupto de InP/InGaAs unidimensional de $1\mu\text{m}$ de longitud total, distribuida de la siguiente forma: $0.3\mu\text{m}$ en el emisor, $0.1\mu\text{m}$ en la base y $0.6\mu\text{m}$ en el colector. Los niveles de impureza respectivos son de $2\cdot 10^{17}\text{cm}^{-3}$, $5\cdot 10^{18}\text{cm}^{-3}$ y $5\cdot 10^{16}\text{cm}^{-3}$ (Figura 6.5). La polarización aplicada es de 0.8V (directa) en la unión base-emisor y de 1.0V (inversa) entre colector y emisor. Los parámetros esenciales utilizados en los dos simuladores, HBTSIM para análisis por arrastre-difusión ampliado y MCHBT para análisis Monte Carlo, se muestran en la Tabla 6. 1 y en la Tabla 6. 2, respectivamente [Maloney,1977], [Adachi,1982], [Adachi,1985], [Brennan,1984], [Massengill,1985], [Kuhn,1992], [Chandramouli,1993], [Köpf,1997]. Los efectos de estrechamiento de la banda prohibida (*band gap narrowing, BGN*) y de variación de la afinidad electrónica con el nivel de dopaje [LópezG,1997], [Jain,1991] se incluyen de forma coherente en los dos simuladores siguiendo el mismo modelo de cálculo.

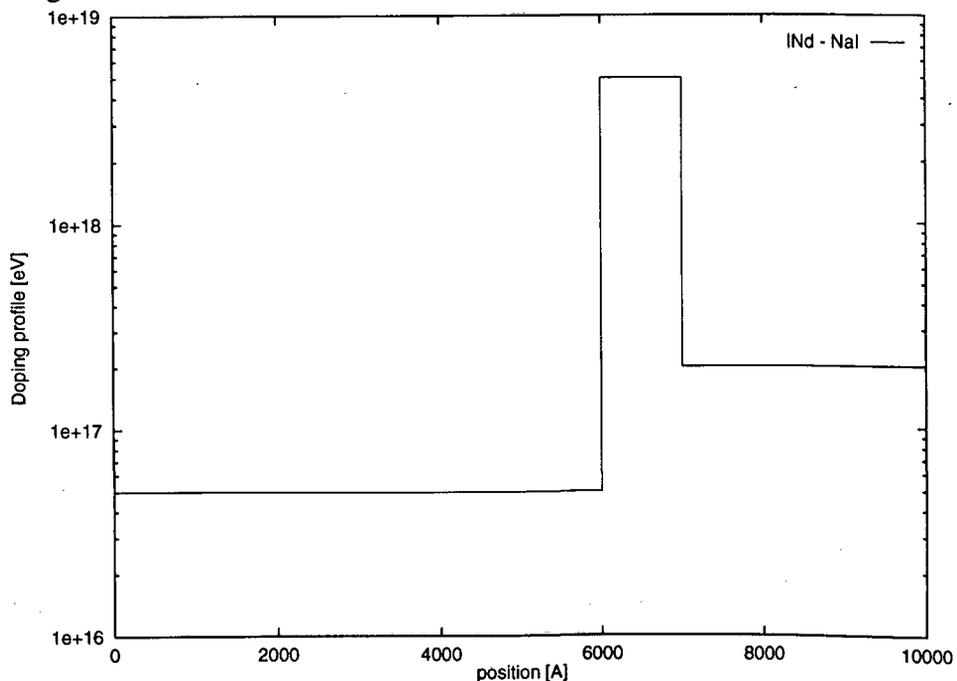


Figura 6. 5 Perfil de impurezas del HBT de InP/InGaAs de prueba.

La estructura cristalina de los dos materiales semiconductores que componen el dispositivo, InP y InGaAs, es la estructura de la blenda (*zinc blende*), la misma que en el GaAs. De momento, MCHBT considera el valle Γ y los 8 valles L equivalentes de la

banda de conducción. La inclusión de los valles X, poblados por electrones más energéticos, está prevista para un futuro próximo. En todos los valles se ha considerado simetría esférica (superficies de equienergía esféricas) y un coeficiente de no parabolicidad α_{iv} . Los mecanismos de dispersión actualmente incluidos en MCHBT para estos materiales son también comunes con los del GaAs, que fueron tratados en los capítulos anteriores. Está previsto también incluir nuevos mecanismos como el de aleaciones (*alloy scattering*) para el InGaAs y los de interacción colectiva electrón-plasma y binaria electrón-hueco en la base del HBT.

Material		InGaAs (base)	InP (emisor)
μ_{no}	[cm ² /V·s]	1790	4600
μ_{po}	[cm ² /V·s]	100	150
v_{nsat}	[cm/s]	$0.8 \cdot 10^7$	$0.8 \cdot 10^7$
E_{elh}	[V/cm]	$5 \cdot 10^3$	$5 \cdot 10^3$
τ_{no} (SHR)	[s]	10^{-9}	$1.12 \cdot 10^{-9}$
τ_{po} (SHR)	[s]	10^{-9}	$1.12 \cdot 10^{-9}$
$E_T - E_{Fi}$ (SHR)	[eV]	0	0
$C_{A_{no}}$ (Auger)	[cm ⁶ /s]	10^{-31}	10^{-31}
$C_{A_{po}}$ (Auger)	[cm ⁶ /s]	$4 \cdot 10^{-29}$	10^{-31}
B_o (Rec. dir.)	[cm ³ /s]	0	0
ϵ/ϵ_o	[1]	13.5	12.4
$q\chi_o$	[eV]	4.6	4.4
E_{go}	[eV]	0.75	1.35
m_{dn}^* / m_o	[1]	0.045	0.08
m_{dh}^* / m_o	[1]	0.535	0.869
m_{lh}^* / m_o	[1]	0.05	0.089
m_{hh}^* / m_o	[1]	0.65	0.85

Tabla 6. 1 Parámetros físicos en el simulador HBTSIM.

Material		InGaAs (base)	InP (emisor)
m_{Γ}^* / m_0	[1]	0.042	0.077
m_L^* / m_0	[1]	0.222	0.26
α_R	[eV ⁻¹]	1.455	0.67
α_L	[eV ⁻¹]	0.7214	0.23
$\Delta E_{\Gamma L}$	[eV]	0.72	0.61
E_g	[eV]	0.76	1.35
ϵ_s / ϵ_0	[1]	13.88	12.56
$\epsilon_{\infty} / \epsilon_0$	[1]	11.34	9.61
ρ	[Kg/m ³]	5608	4790
v_{sound}	[cm/s]	4745	5130
Ξ_d	[eV]	7	8
$D_{ij \Gamma-L}$	[eV/m]	$0.7 \cdot 10^{11}$	$1 \cdot 10^{11}$
$D_{ij L-L}$	[eV/m]	$0.7 \cdot 10^{11}$	$1 \cdot 10^{11}$
$\hbar\omega_{opt}$	[eV]	0.03241	0.043
$\hbar\omega_{\Gamma L}$	[eV]	0.0238	0.0278
$\hbar\omega_{LL}$	[eV]	0.0231	0.029

Tabla 6. 2 Parámetros físicos en el simulador MCHBT.

La solución en régimen permanente obtenida por el simulador HBTSIM se muestra en las figuras adjuntas (Figuras 6.6 a 6.9). Recordemos que esta solución sirve como solución inicial en MCHBT para acelerar la convergencia del algoritmo MC y que, además, será utilizada como punto de referencia para comparar las diferencias entre las soluciones de los dos modelos de simulación.

En la Figura 6.6 se representa el diagrama de bandas de energía calculado por HBTSIM en condiciones de equilibrio térmico. Además de los niveles E_C y E_V se muestra el nivel de Fermi E_F , de valor constante a lo largo del dispositivo. Su grado de aproximación a los límites de las bandas nos informa del grado de degeneración de los semiconductores en las diferentes zonas del dispositivo. En equilibrio térmico se observa un pico muy pronunciado en la discontinuidad de la banda de conducción. Los electrones ven una barrera muy alta que restringe mucho su paso desde el emisor hacia la base. Pero la barrera es a la vez muy fina, por lo que puede favorecer hasta cierto punto el paso de corriente por efecto túnel para niveles de polarización bajos (véase más adelante el análisis de la influencia del *spike* sobre la corriente).

En la Figura 6.7 se representan las bandas de energía del HBT polarizado en zona activa. Se representan los límites de las bandas y los cuasiniveles de Fermi para electrones y para huecos. Se observa que la altura efectiva de la barrera de energía en la banda de conducción ha disminuido considerablemente, favoreciendo la inyección de electrones hacia la base. No obstante, el espesor de la barrera ha aumentado con lo que se dificulta el paso por efecto túnel. Por su parte, la inyección de huecos desde la base hacia el emisor continúa bastante limitada gracias a la barrera que supone la existencia de la discontinuidad abrupta en la banda de valencia. Esta mayor eficiencia de inyección es la base de las ventajas que ofrece un HBT frente a un BJT como se vio en el capítulo de introducción.

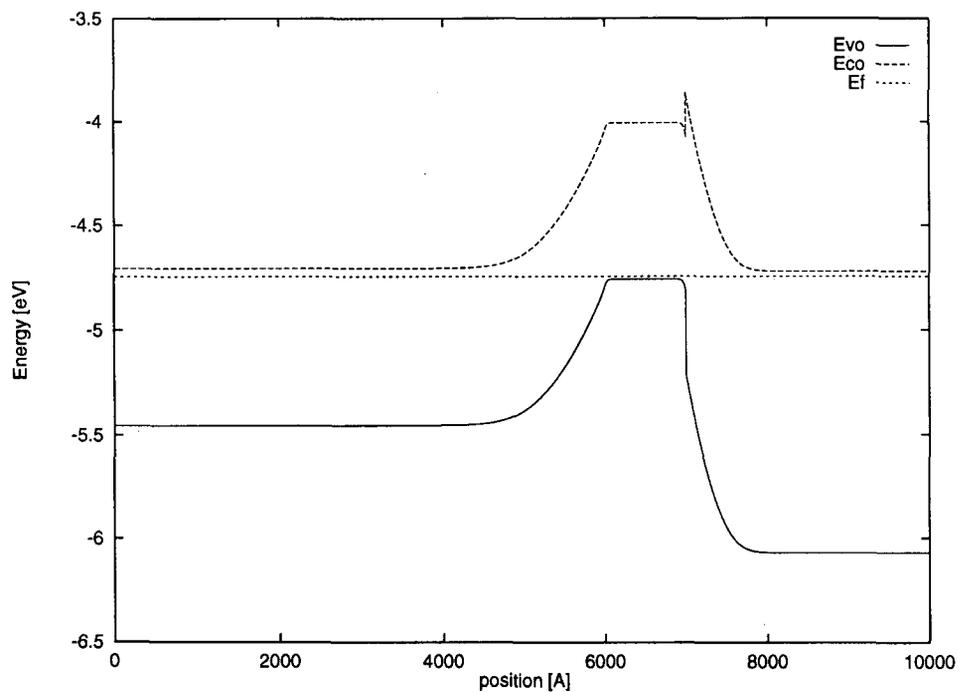


Figura 6. 6 Diagrama de bandas de energía del HBT de InP/InGaAs en equilibrio térmico (HBTSIM).

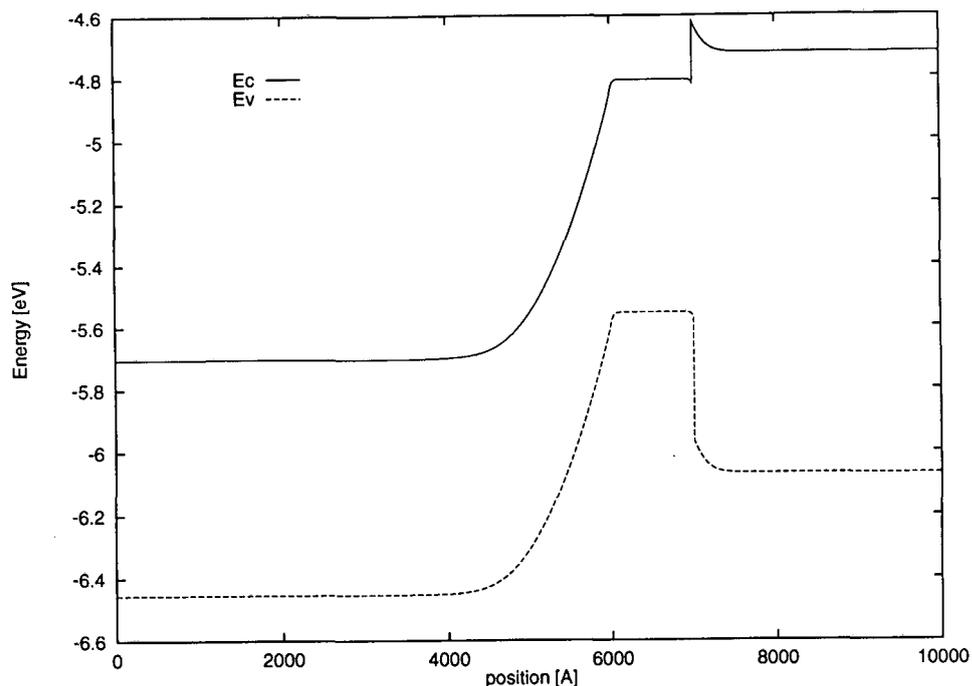


Figura 6. 7 Diagrama de bandas de energía del HBT de InP/InGaAs polarizado: $V_{BE}=0.8V$, $V_{CE}=1.0V$ (HBTSIM).

Las concentraciones de portadores para la polarización en activa considerada en este ejemplo ilustrativo se muestran en la Figura 6.8. Debido a las grandes diferencias en el margen dinámico de cada tipo de portador, la concentración de electrones se representa de nuevo en la Figura 6.9. En el gráfico destaca la discontinuidad también en forma de pico en la concentración de electrones, asociado al que aparece en las bandas de energía.

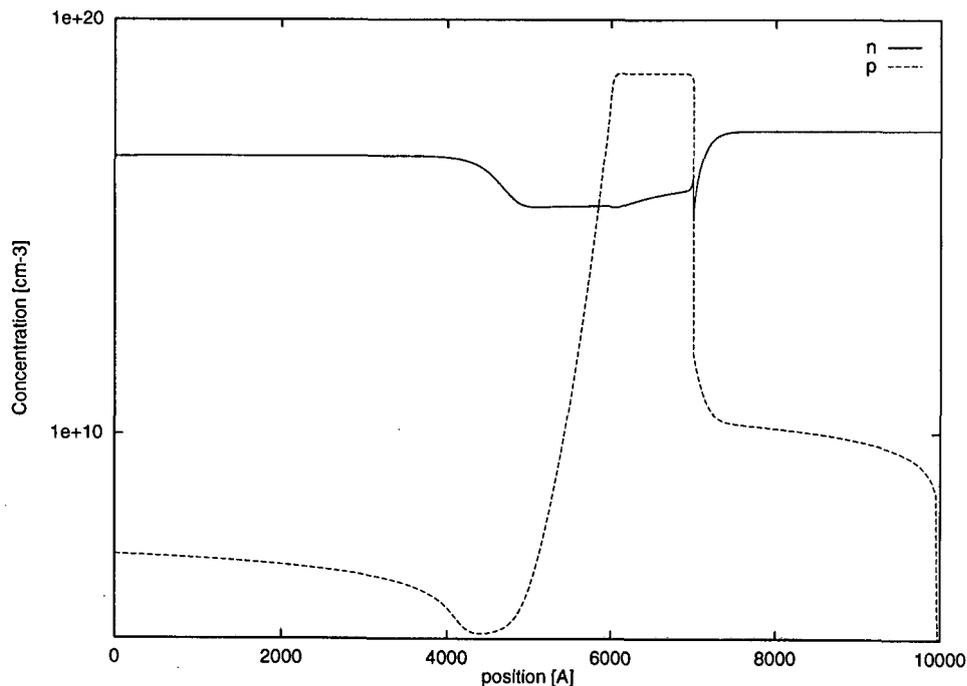


Figura 6. 8 Concentración de portadores en el HBT polarizado (HBTSIM).

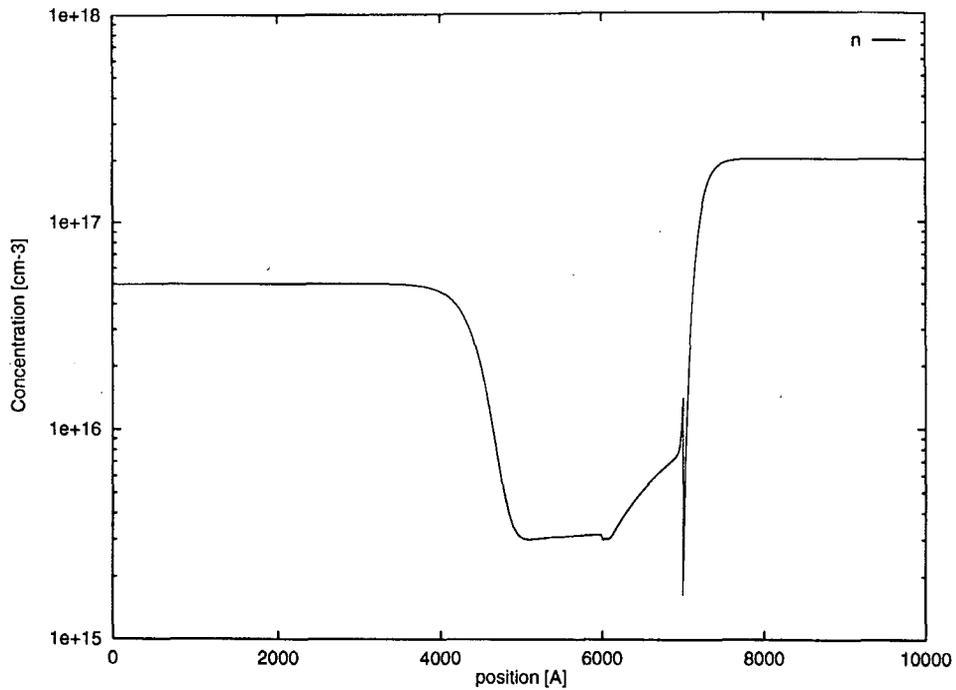


Figura 6. 9 Concentración de electrones en el HBT polarizado (HBTSIM).

Para esta polarización, el simulador HBTSIM prevé una densidad de corriente de colector $J_C=3940 \text{ A/cm}^2$ y una corriente de base $J_B=17 \text{ A/cm}^2$. La ganancia de corriente es $\beta=230$.

6.3 Análisis del coeficiente de transmisión cuántico.

La Figura 6.10 amplía el diagrama de bandas de energía de la Figura 6.7 para poder apreciar con más detalle la discontinuidad en el mínimo de la banda de conducción y la forma en pico de la barrera de potencial que afecta a los electrones cercanos a la heterounión base-emisor. La discontinuidad en E_C es de 200meV , que es aproximadamente la barrera de energía que vería un electrón de la base para poder pasar al emisor. La altura de la barrera vista por los electrones del emisor es de 104meV para la polarización considerada. La diferencia de energía potencial entre el punto del contacto de base y el del contacto de emisor (zonas neutras de las regiones respectivas) es de unos 86meV .

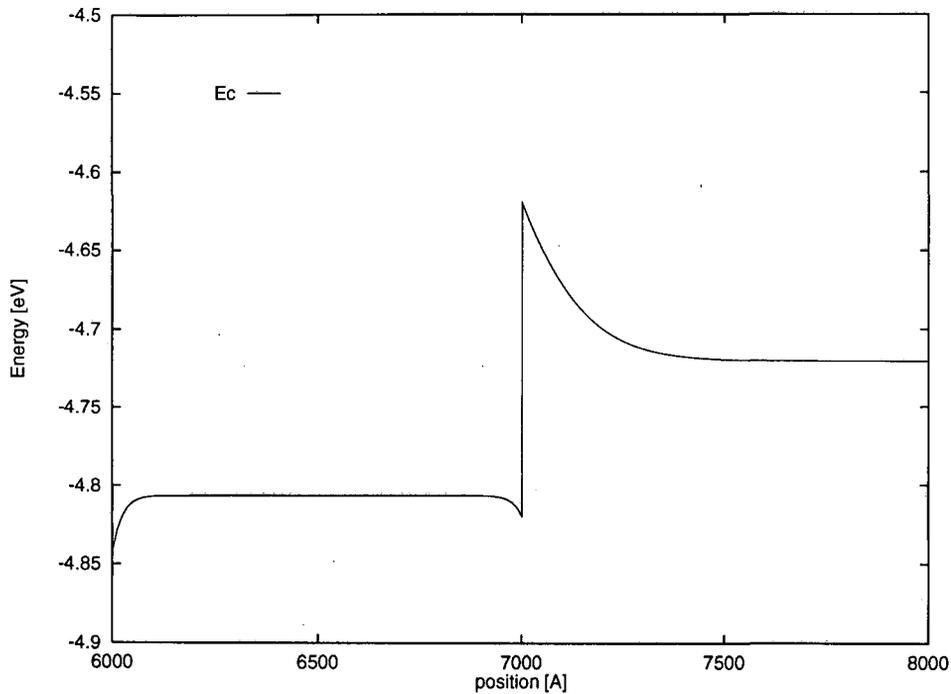


Figura 6. 10 Detalle del diagrama de E_C para el HBT polarizado.

Dada esta barrera de potencial en el dispositivo, se ha procedido a calcular el coeficiente de transmisión cuántico de los electrones que incidan contra la barrera. Los resultados se representan en la Figura 6.11 para diferentes situaciones y modelos. El coeficiente se representa en función de la energía cinética longitudinal del electrón. La energía cinética transversal se utiliza como parámetro, cuya influencia proviene de la diferencia entre las masas efectivas del electrón y el requisito de conservación del momento transversal. Según los datos en la Tabla 6. 1, la relación de masas efectivas entre el InP y el InGaAs es $m_E^*/m_B^*=0.077/0.042=1.83$ en el valle Γ y $m_E^*/m_B^*=0.26/0.303=0.85$ en los valles L . Por otra parte se utiliza el coeficiente de no parabolicidad de las bandas como segundo parámetro de la representación. Para bandas no parabólicas se utilizan los valores de α de la Tabla 6. 1. Tomando un valor de α muy próximo a cero se pueden simular bandas parabólicas sin tener que retocar las fórmulas del programa. La energía cinética longitudinal con la que se ha representado el coeficiente de transmisión está referida al punto de la discretización correspondiente al contacto de emisor.

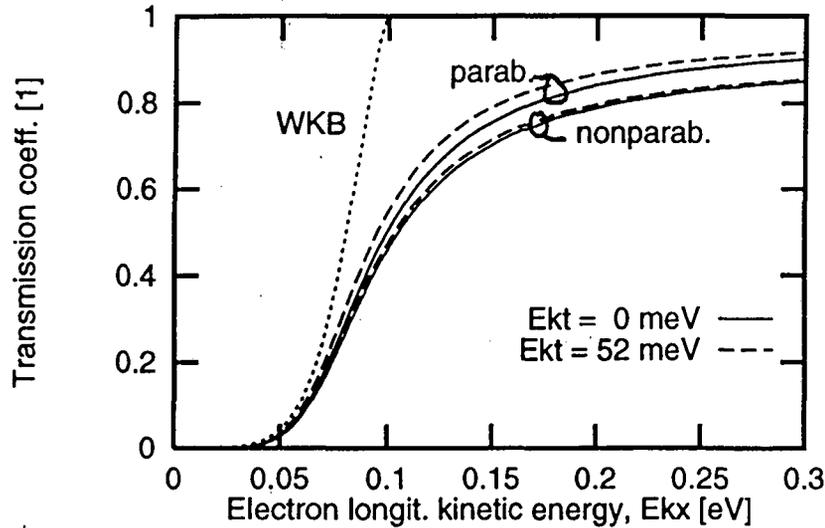


Figura 6. 11 Coeficiente de transmisión para diferentes energías transversales del electrón y con bandas parabólicas y no-parabólicas. Aproximación WKB y resolución numérica de la ecuación de Schrödinger.

La diferencia más notoria es la que existe entre la de la aproximación WKB y la solución numérica de la ecuación de Schrödinger expuesta en el apartado 6.1.2 [Chen,1992], [Betser,1994], [Das,1988]. Para la aproximación WKB el coeficiente de transmisión es igual a 1 para los electrones con energía cinética longitudinal mayor o igual que la altura de la barrera de potencial. En otras palabras, no hay reflexión cuántica; todos los electrones pasan la barrera como si fueran una partícula clásica. Además, la aproximación WKB en este caso da valores superiores a la solución numérica exacta en todo el rango de energías, aunque esta situación depende del nivel de energía potencial relativo entre los contactos de emisor y de base. Para polarizaciones más bajas el nivel de energía en el emisor baja respecto al de la base y entonces existe un margen de energías en los que el coeficiente de transmisión calculado según el método numérico es mayor que el calculado con la aproximación WKB. Esto supone un cierto *efecto de compensación* sobre el número total de electrones inyectados a través de la heterounión, aunque se trata de un efecto *sesgado* ya que la aproximación WKB tiende a inyectar más portadores *calientes* y a retener a los más *fríos*.

En la misma figura se puede observar el efecto que tienen la energía cinética transversal y la no parabolicidad de las bandas sobre el coeficiente de transmisión. Para un mismo valor de energía cinética longitudinal, el coeficiente de transmisión aumenta con la

energía transversal. Es decir, el hecho de que el electrón cuente con energía adicional le facilita el paso de la barrera. Esto se nota especialmente en el caso de bandas parabólicas, donde el incremento observado en el factor de transmisión es significativamente mayor. También se observa que el coeficiente de transmisión resulta ser mayor para el caso de bandas parabólicas que para bandas no parabólicas.

Puesto que el simulador MCHBT trabaja con bandas no parabólicas y se observa que en este caso la dependencia del coeficiente de transmisión con respecto a la energía cinética transversal es poco significativa, se ha preferido asumir un valor único de energía transversal y tabular así un solo coeficiente de transmisión. El valor escogido ha sido el valor medio esperado, 26 meV, que es el correspondiente a la energía de un gas de electrones bidimensional en equilibrio térmico con la red a la temperatura de 300K. Esta elección ahorrará espacio de memoria y tiempo de cálculo, puesto que el valor del coeficiente se recalcula cada vez que se actualiza el potencial electrostático (intervalos de simulación Δt).

Otro parámetro que afecta al cálculo del coeficiente de transmisión es el valle que ocupa el electrón dentro de la banda de conducción. En la Figura 6.12 se representa el coeficiente calculado para un electrón en el valle Γ y otro en un valle L . Se observa como un electrón en un valle L es transmitido con mayor probabilidad para cualquier valor de energía cinética longitudinal. La diferencia no puede venir de la forma o curvatura de la barrera de potencial, que es idéntica, sino básicamente de la magnitud de la discontinuidad de la banda entre los dos materiales. También pueden influir, aunque seguramente de forma más secundaria, las diferencias de masa efectiva o las de coeficiente de no parabolicidad. Con ayuda de la Tabla 6. 1 podemos ver como la discontinuidad de la banda de conducción es de 200 meV en el valle Γ y de 189meV en los valles L .

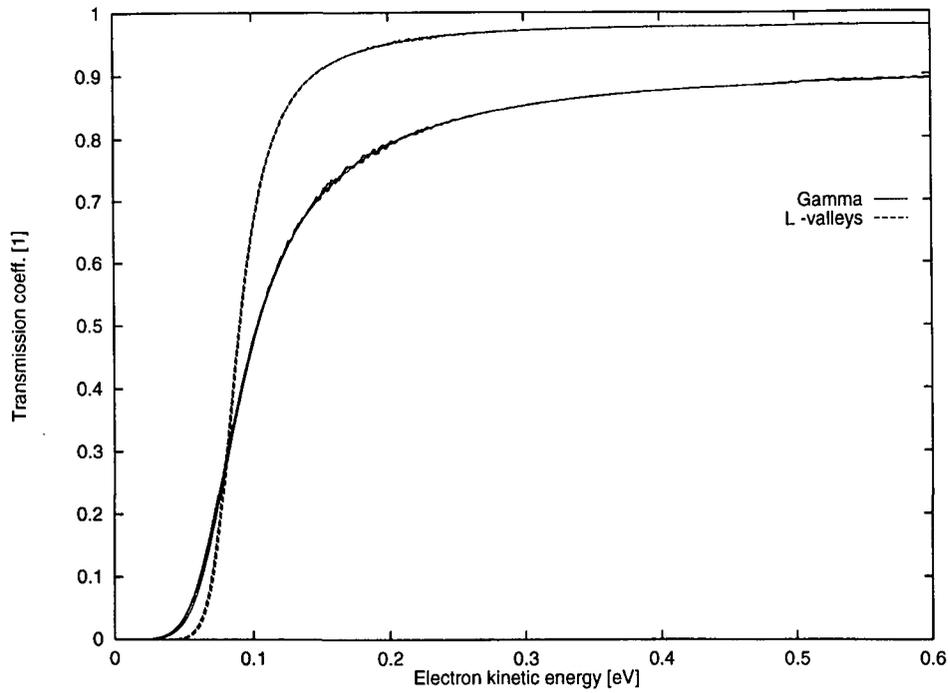


Figura 6. 12 Coeficiente de transmisión para diferentes valles de la banda de conducción ($E_{kt}=26$ meV).

En la Figura 6.13 se representa el coeficiente de transmisión en escala logarítmica para poder observar su ritmo de decrecimiento a medida que el electrón incide con menor energía contra la barrera. Las cuatro curvas representadas corresponden a la aproximación WKB y a la solución numérica de la ecuación de Schrödinger con $E_{kt}=26$ meV; dos para cada valle. Efectivamente, se observa cómo en este HBT la aproximación WKB sobrevalora el coeficiente de transmisión en todo el margen de energías del electrón y también la limitación adicional que introduce la no parabolicidad de las bandas al paso de electrones.

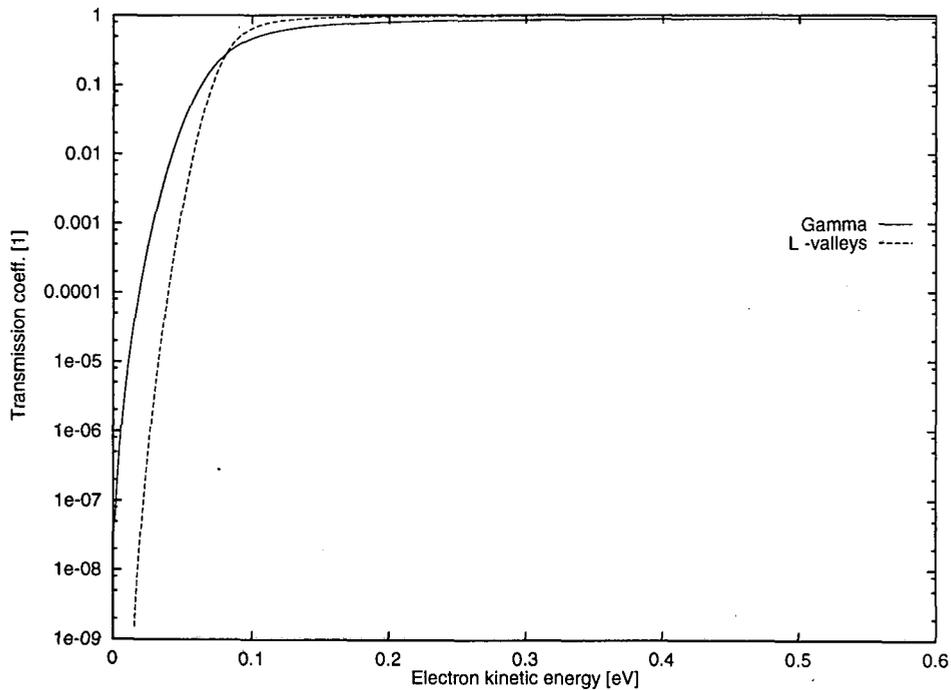


Figura 6. 13 Coeficiente de transmisión en escala logarítmica ($E_{kt}=26$ meV).

6.4 Análisis de la corriente en el dispositivo.

En este apartado se analizan los resultados obtenidos por el simulador MC, intentando relacionar las diferentes magnitudes físicas asociadas al electrón y al dispositivo, y contrastándolos con los proporcionados por el modelo de arrastre-difusión extendido. Se tienen en cuenta también expresiones analíticas del modelo presentado en el segundo capítulo y otras deducidas del modelo hidrodinámico como métodos de interpretación física de los resultados numéricos obtenidos por los dos simuladores.

El análisis se realiza por partes en los tres subapartados que componen este punto, dedicados cada uno al análisis de la corriente en tres zonas importantes del dispositivo: la heterounión, la base y la zona de carga espacial del colector. Antes de entrar en los detalles del análisis de la corriente se presentan de forma rápida los diferentes resultados obtenidos por el simulador MCHBT, puesto que serán datos comunes que se irán analizando detenidamente en los subapartados siguientes.

El simulador MCHBT toma como solución inicial de su proceso iterativo la solución de HBTSIM (que es una solución en régimen estacionario). Así, el número inicial de partículas y su distribución espacial es coherente con la solución HBTSIM, que es una *buena solución inicial* que ahorra muchas iteraciones en el proceso de convergencia global del algoritmo. El momento de cada partícula se inicializa de forma aleatoria según una distribución maxweliana de energía. En principio, se podría pensar en una distribución maxweliana desplazada calculada en base a la corriente neta en el dispositivo que da HBTSIM. No obstante, esto representaría una complicación adicional en el proceso de inicialización que sería en vano ya que, por los resultados finales del simulador MC, se verá que no refleja bien la realidad en la distribución final del momento en todos los puntos del dispositivo. Por tanto, dada una *buena solución inicial*, es igualmente necesario dedicar un período transitorio de simulación durante el cual la muestra de partículas irá evolucionando hasta alcanzar un estado estacionario para el conjunto, aunque se trate de un equilibrio dinámico. En esta simulación MC concreta se han realizado 30000 iteraciones del bucle autoconsistente con un paso temporal Δt de 0.1fs para asegurar que la muestra de la población alcanzaba el estado estacionario (transitorio de 3ps). A continuación se han simulado 2ps adicionales para extraer medias de las variables de interés.

El resultado ha sido una densidad de corriente de colector $J_C=6770 \text{ A/cm}^2$ y una densidad de corriente de base $J_B=5.4 \text{ A/cm}^2$, con lo que se obtiene una ganancia de corriente $\beta=1250$, relativamente superior a la prevista por el modelo de HBTSIM, tanto por lo que respecta a la corriente de colector (un 70% mayor en MCHBT) como a la de base (un 70% menor). Más que centrarnos en una discusión sobre el valor numérico concreto de los resultados, nos centraremos en el análisis de las diferencias relativas y sus posibles causas y justificaciones, intentando obtener un *primer grado de validación* del nuevo simulador MCHBT. Con toda su importancia, la validación de los valores numéricos concretos proporcionados por los simuladores (en especial MCHBT) requiere un estudio que va más allá de los objetivos planteados en esta tesis y que, en cualquier caso, forman parte de las líneas de trabajo futuro. Téngase en cuenta que se trata de dispositivos y materiales con un grado de conocimiento bastante menor por ahora del que se tiene sobre el silicio o el arseniuro de galio. Por tanto, cualquier pequeño desconocimiento de los parámetros del material podría ser la causa de discrepancias en los resultados numéricos, sin que ello descalifique los métodos,

modelos o algoritmos incluidos en el simulador. Por otra parte, téngase en cuenta que diferencias aparentemente grandes entre resultados pueden relativizarse si se piensa en los grandes márgenes dinámicos entre los que se mueven muchas de las magnitudes consideradas en un dispositivo electrónico semiconductor.

La Figura 6.14 muestra la concentración de electrones en régimen permanente a lo largo del dispositivo según MCHBT y según HBTSIM para la polarización en continua especificada anteriormente. Las diferencias entre los dos modelos son muy claras en la región de base y en la zona de carga espacial de la unión base-colector. Puesto que la corriente en el dispositivo es básicamente debida al flujo de electrones de emisor a colector y puesto que en régimen permanente el flujo neto debe ser aproximadamente constante a lo largo de todo el dispositivo, se deduce que el modelo MC considera una velocidad de los electrones mayor que la implícita en el modelo de HBTSIM. En efecto, considerando que la densidad de corriente de electrones se puede expresar como producto de la densidad de carga por la velocidad media de los portadores:

$$J_n = q \cdot n(x) \cdot v(x) \cong \text{constante} \quad (6.49)$$

en aquellas regiones donde la concentración es la misma para los dos modelos, la velocidad de los electrones según el simulador MC es mayor puesto que también lo es la corriente obtenida. En las regiones antes citadas de base y zona de carga espacial del colector la velocidad en MC es todavía mayor puesto que la concentración de portadores es inferior. Estas diferencias de velocidad pueden observarse gráficamente en la Figura 6.15. En el caso de la simulación MC la velocidad se ha obtenido por técnicas estadísticas promediando la velocidad de cada partícula de una misma celda de la discretización durante la fase de extracción de datos (véase también la Figura 6.16). La velocidad de HBTSIM, al no ser una variable explícita del modelo, se ha obtenido por simple inversión de la curva de concentración de electrones teniendo en cuenta la ecuación (6.49).

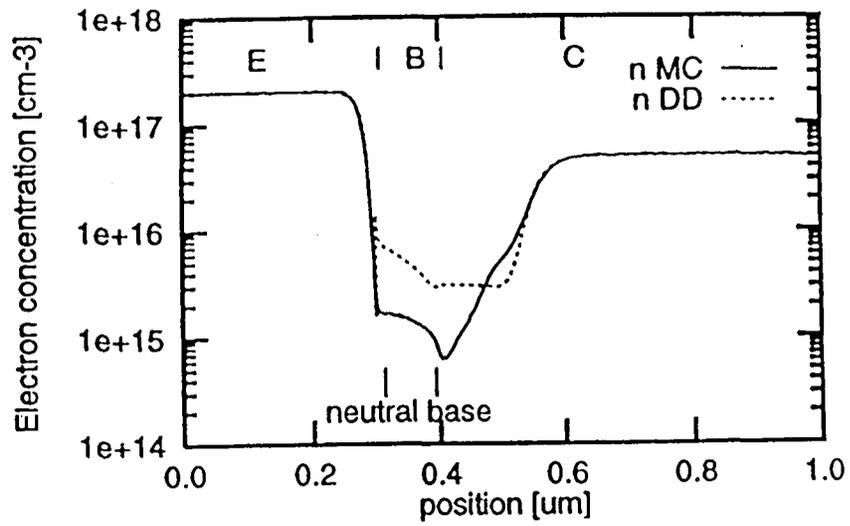


Figura 6. 14 Concentración de electrones a lo largo del dispositivo según MCHBT y según HBTSIM.

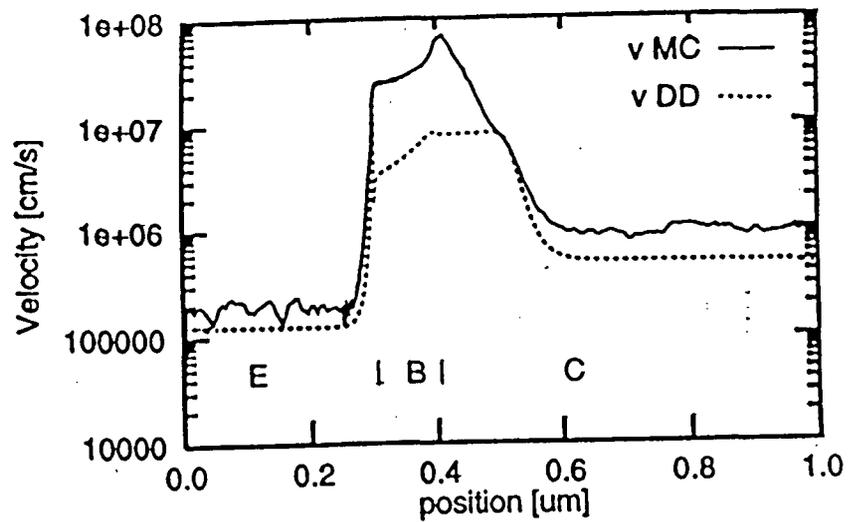


Figura 6. 15 Velocidad longitudinal media de los electrones a lo largo del dispositivo según MCHBT y según HBTSIM (escala logarítmica).

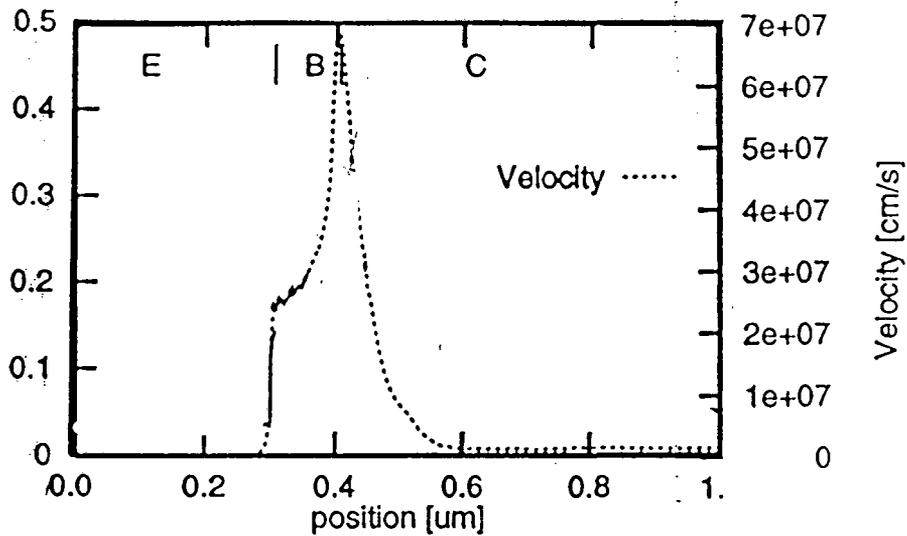


Figura 6. 16 Velocidad longitudinal media de los electrones a lo largo del dispositivo según MCHBT.

Según se observa en la Figura 6.16, la velocidad máxima de los electrones en HBTSIM es de $0.8 \cdot 10^7$ cm/s, que corresponde a la velocidad de saturación de los electrones sometidos a campos eléctricos elevados. Esta velocidad es la que mantienen los electrones en la zona de carga espacial del colector en el simulador HBTSIM. En cambio, en el simulador MCHBT los electrones son capaces de superar esta velocidad máxima en buena parte del dispositivo y, puntualmente, en la unión base-colector llegan a una velocidad máxima casi diez veces superior, $7 \cdot 10^7$ cm/s.

La energía cinética media de los electrones también presenta una discontinuidad en la unión base-emisor y un pico cercano a la unión base-colector, según puede apreciarse en la Figura 6.17. El pico de energía es más pronunciado si la energía cinética se representa por valles. En la Figura 6.18 se representa de nuevo la distribución espacial de la energía cinética media de todos los electrones junto con la energía cinética media de los electrones que ocupan el valle inferior de la banda de conducción (valle Γ). Los electrones en el valle Γ llegan a energías bastante superiores a la media en la región de carga espacial del colector, lo cual indica que en esta zona hay una transferencia importante de electrones a los valles L con la pérdida de energía cinética que esto representa debido al incremento de energía potencial $\Delta E_{\Gamma L}$ inherente al cambio de valle.

La población relativa de los valles superiores de energía a lo largo del dispositivo se representa en la Figura 6.19 (eje de ordenadas de la derecha). Asimismo, en la misma figura se representan el campo eléctrico y la velocidad longitudinal media de los electrones con el objeto de poder relacionar fácilmente las evoluciones de cada curva en las discusiones posteriores.

En la Figura 6.20 queda patente que los máximos de velocidad media longitudinal y de energía cinética media no coinciden en el espacio. Mientras que el primero coincide aproximadamente con el pico de campo eléctrico, el segundo está retardado respecto a este punto. De hecho, “*sorprendentemente a primera vista*”, la energía cinética media empieza a aumentar justo cuando la velocidad media decrece.

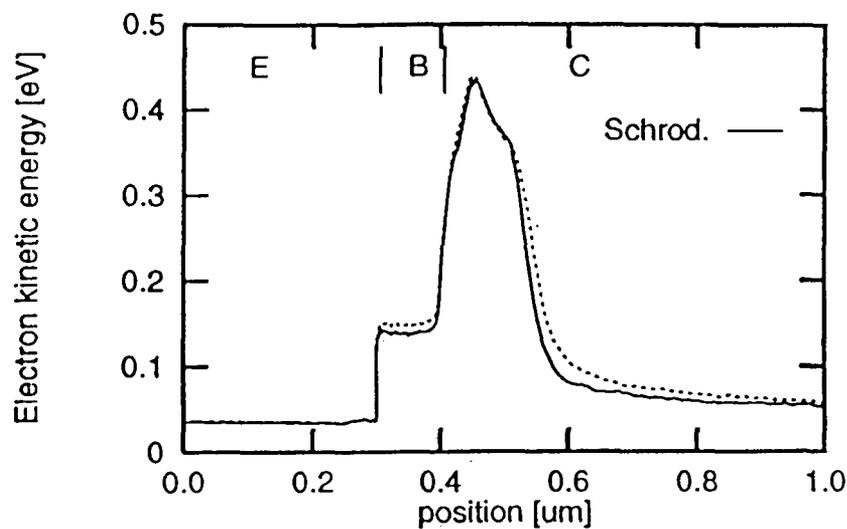


Figura 6. 17 Energía cinética media de los electrones a lo largo del dispositivo (MCHBT).

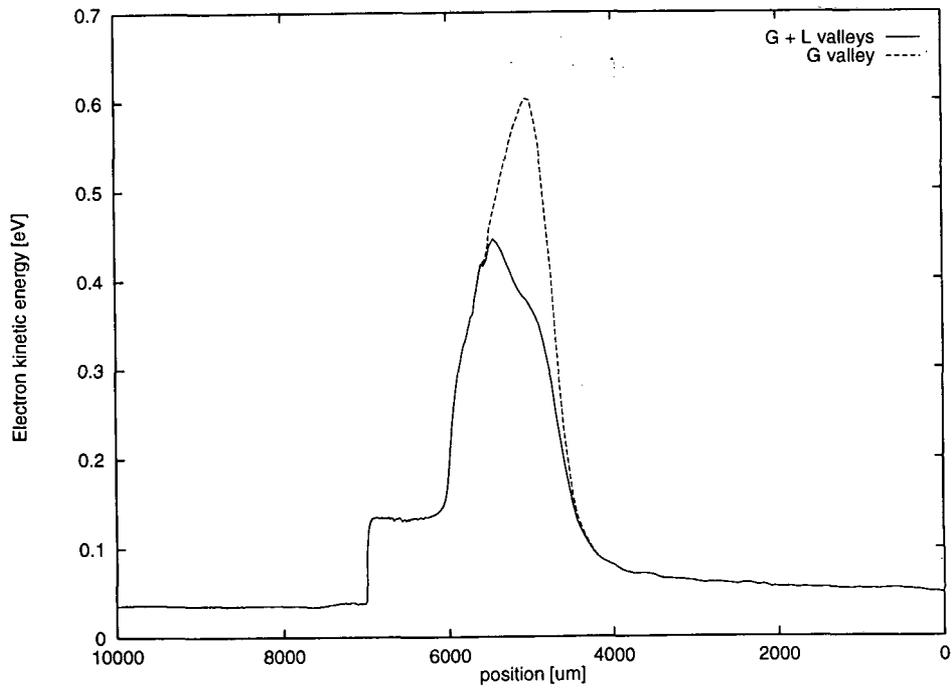


Figura 6. 18 Energía cinética media de los electrones a lo largo del dispositivo por valles de la banda de conducción (MCHBT).

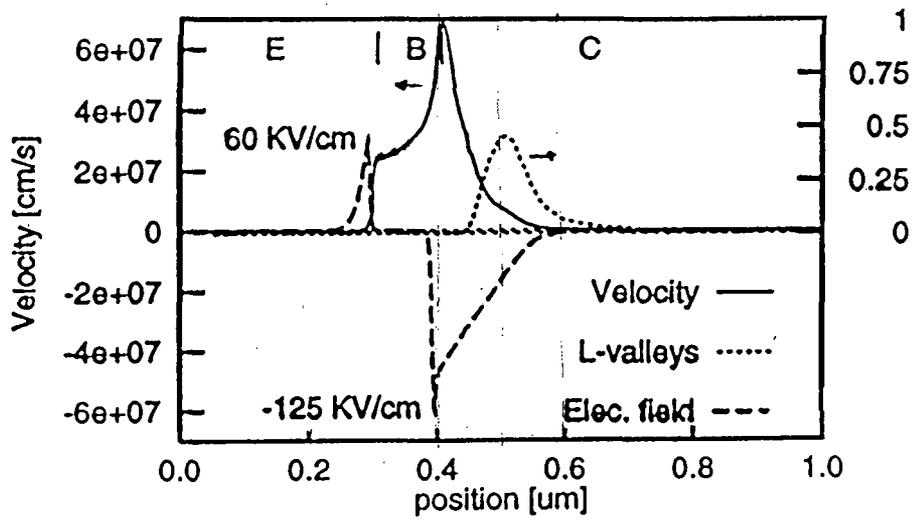


Figura 6. 19 Velocidad longitudinal media de los electrones, ocupación relativa de los valles L y campo eléctrico a lo largo del dispositivo (MCHBT).

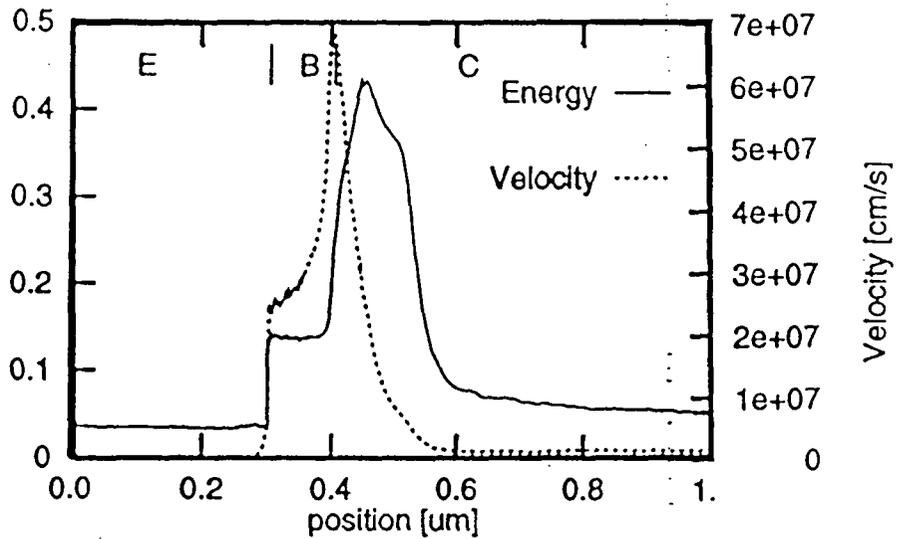


Figura 6. 20 Energía cinética media y velocidad longitudinal media de los electrones a lo largo del dispositivo (MCHBT).

Es también muy ilustrativo observar una *foto instantánea* del conjunto de electrones. Esto se representa en las figuras adjuntas donde cada punto representa el estado de una de las partículas simuladas en la región activa del dispositivo (sin tener en cuenta el peso de las partículas en el algoritmo MC ponderado o WMC). En el primer grupo de figuras (Figura 6.21, Figura 6.22 y Figura 6.23) se representa la energía total de cada electrón. En el segundo grupo de figuras (Figura 6.24, Figura 6.25 y Figura 6.26) se representa su velocidad longitudinal. En cada grupo de figuras, la primera incluye todos los electrones, la segunda sólo incluye los electrones del valle Γ y la tercera los electrones de los valles L .

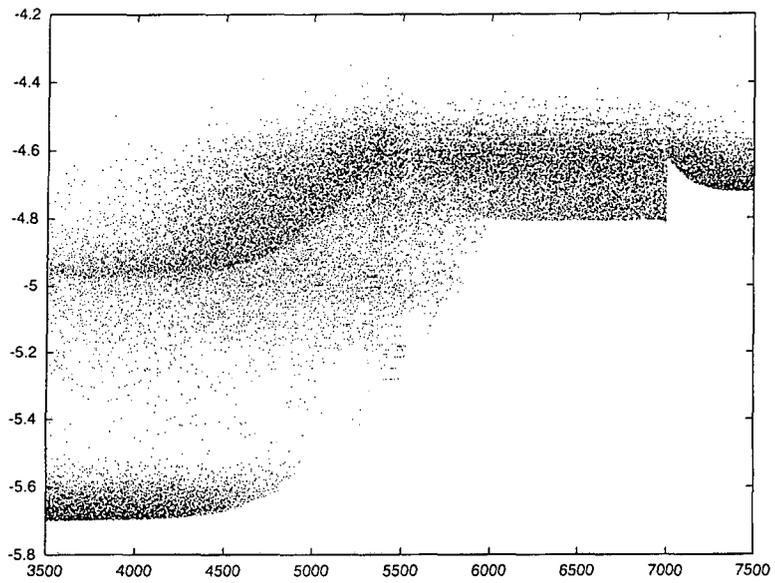


Figura 6. 21 Distribución energética de los electrones en la región activa del dispositivo. *Foto instantánea de los electrones en todos los valles (MCHBT).*

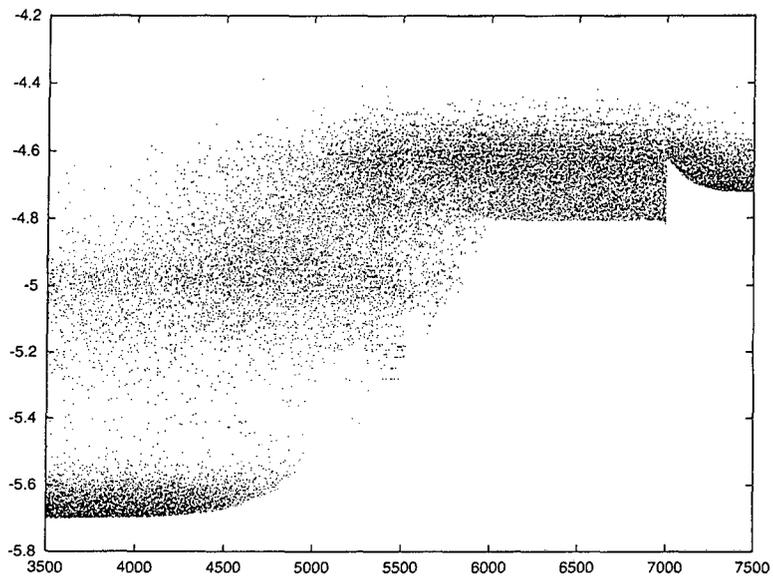


Figura 6. 22 Distribución energética de los electrones en la región activa del dispositivo. *Foto instantánea de los electrones en el valle Γ (MCHBT).*

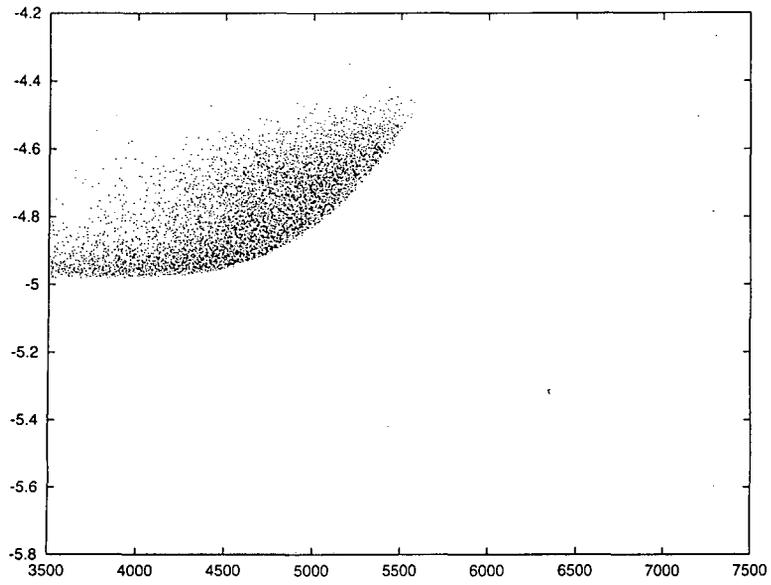


Figura 6. 23 Distribución energética de los electrones en la región activa del dispositivo. *Foto instantánea* de los electrones en los valles *L* (MCHBT).

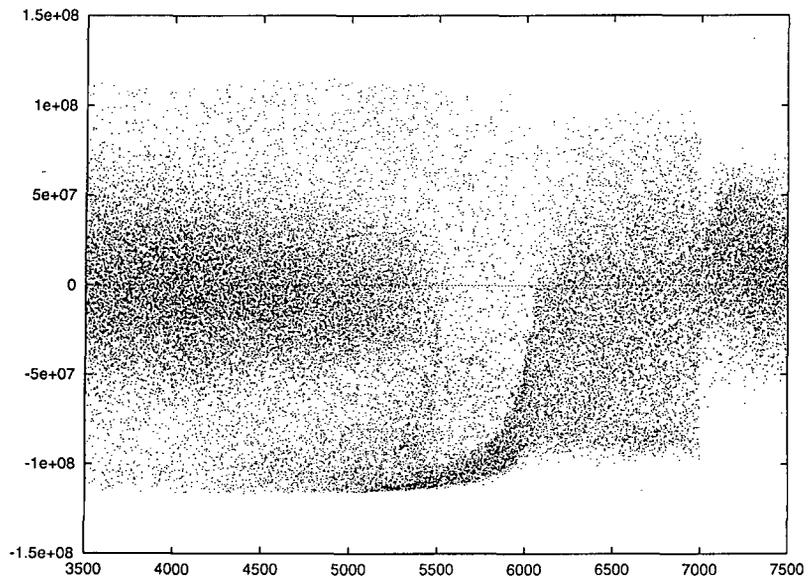


Figura 6. 24 Distribución de la velocidad longitudinal de los electrones en la región activa del dispositivo. *Foto instantánea* de los electrones todos los valles (MCHBT).

partículas para cada histograma), pero que dan una visión bastante ilustrativa de lo que sucede con la función de distribución de velocidad a lo largo del dispositivo.

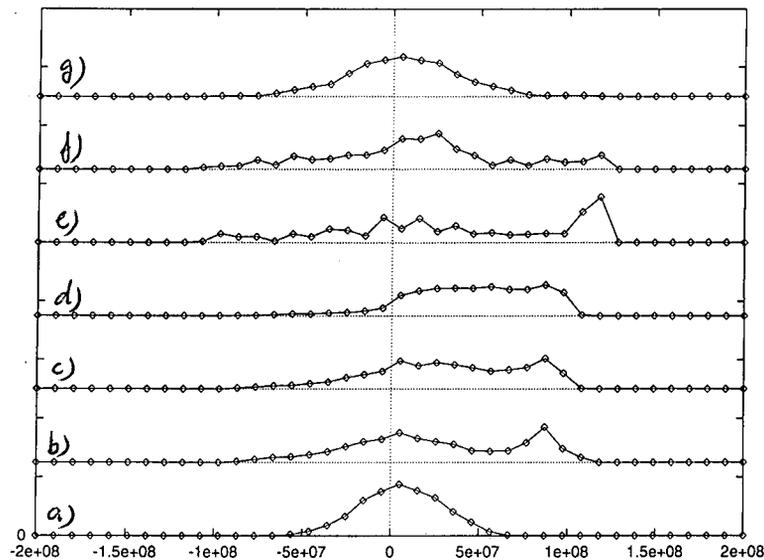


Figura 6. 27 Distribución de la velocidad longitudinal de los electrones en puntos específicos del dispositivo: a) $x=0.27\mu\text{m}$, b) $x=0.31\mu\text{m}$, c) $x=0.36\mu\text{m}$, d) $x=0.39\mu\text{m}$, e) $x=0.45\mu\text{m}$, f) $x=0.50\mu\text{m}$ g) $x=0.60\mu\text{m}$ (MCHBT).

Por último, la Figura 6.28 representa la distribución energética de los electrones inyectados a la base desde el emisor. En este caso los datos se han obtenido mediante contadores específicos que registraban el paso de electrones a través de la interfaz hacia la base. Los contadores se han activado una vez se ha entrado en el régimen estacionario junto con el resto de contadores específicos para obtener los valores medios de cada variable analizada.

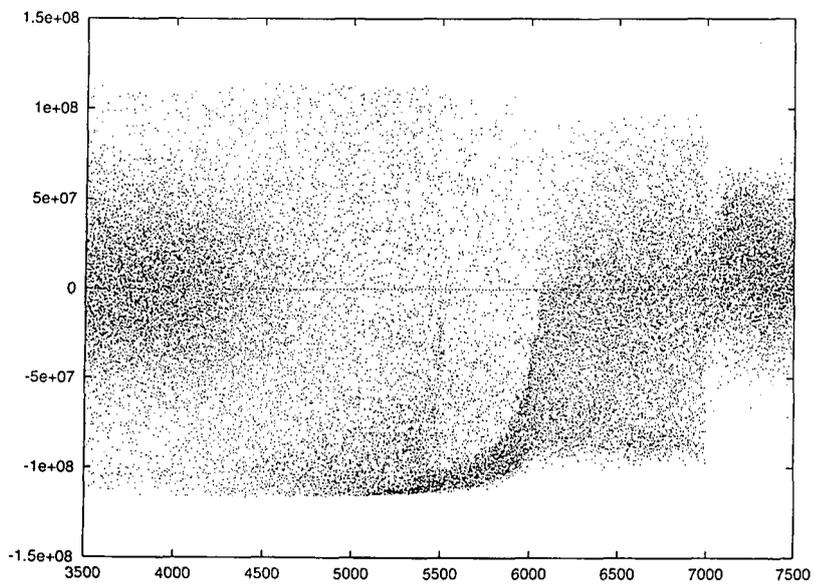


Figura 6. 25 Distribución de la velocidad longitudinal de los electrones en la región activa del dispositivo. *Foto instantánea* de los electrones en el valle Γ (MCHBT).

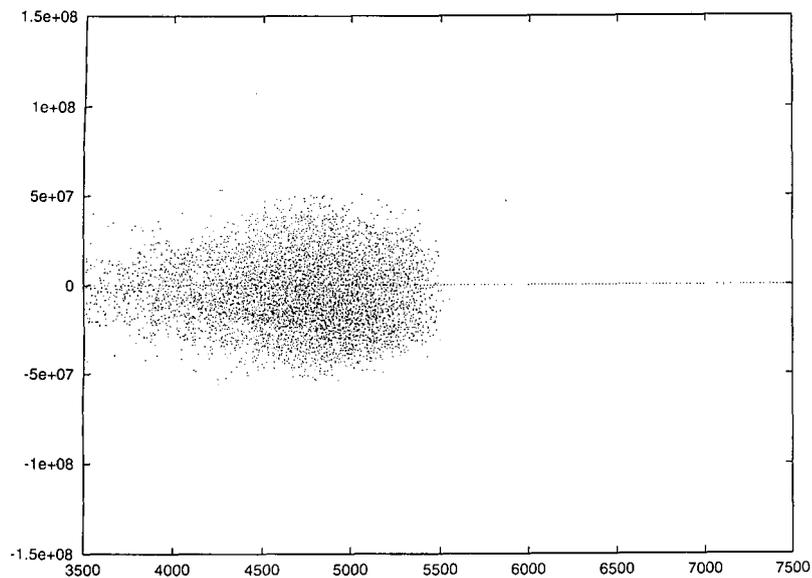


Figura 6. 26 Distribución de la velocidad longitudinal de los electrones en la región activa del dispositivo. *Foto instantánea* de los electrones en los valles L (MCHBT).

La Figura 6.27 representa la distribución de velocidad longitudinal de los electrones en puntos concretos del dispositivo. Son histogramas de velocidad extraídos a partir de los mismos datos utilizados para la confección de la Figura 6.24, pero teniendo en cuenta el peso de cada partícula (MC ponderado o WMC). Se trata, por tanto de funciones *ruidosas* porque corresponden a una solo *foto instantánea* de los electrones (unas 500

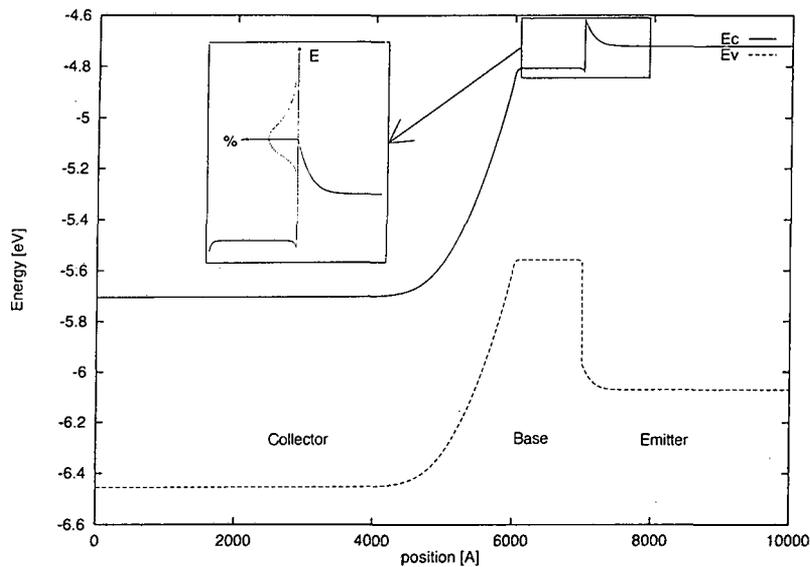


Figura 6. 28 Distribución energética de los electrones inyectados a la base en el punto de interfaz base-emisor (MCHBT).

A continuación se analiza en detalle la corriente en regiones específicas del dispositivo haciendo uso de la información contenida en los gráficos anteriores.

6.4.1 Análisis de la corriente interfacial base-emisor.

Analizando la Figura 6.15 y la Figura 6.16 se observa un cambio abrupto en la velocidad de los electrones, que pasan de una velocidad media constante en el emisor en torno a los $2 \cdot 10^5$ cm/s a una velocidad media superior a los $2.5 \cdot 10^7$ cm/s; más de dos órdenes de magnitud de cambio entre las dos caras de la interfaz. En estos casos se dice que la barrera de energía abrupta actúa como *rampa de lanzamiento* de los electrones. El cambio abrupto de velocidad coincide con otro cambio abrupto en la energía cinética media de los electrones, que experimentan un salto desde una energía cinética media de unos 36meV en la cara del emisor hasta unos 130meV en la cara de la base (Figura 6.17). El valor de la energía cinética en el emisor, que se mantiene muy estable en toda la región, coincide aproximadamente con el que le correspondería a un gas de electrones tridimensional en equilibrio térmico con la red cristalina a una temperatura de 300K:

$$E_k \cong \frac{3}{2} k_B T \Big|_{T=300K} \cong 38meV$$

(6. 50)

Esta situación concuerda con la distribución de velocidades observada en la Figura 6.27-a, que corresponde a una distribución maxweliana ligeramente desplazada.

El incremento de energía cinética cuando el electrón es inyectado desde el emisor a la base coincide, por conservación de energía total, con el decremento de energía potencial existente entre el punto del contacto de emisor y el punto de la heterounión en la parte de la base (ecuación (6. 36)). En el caso que nos ocupa, esta discontinuidad en la energía cinética media es de unos 100meV; la mitad aproximadamente de la discontinuidad en la banda de conducción en el punto de interfaz (Figura 6.10 o Figura 6.21).

El efecto combinado de la ganancia de energía cinética total debida a la discontinuidad, la conservación del momento transversal del electrón y el cambio de masa efectiva y de parámetro de parabolicidad de las bandas sobre la velocidad de los electrones inyectados a la base se traduciría en una velocidad longitudinal centrada alrededor de los $8.5 \cdot 10^7$ cm/s tal como muestra el pico en la distribución de velocidad de la Figura 6.27-b. No obstante, los choques de los electrones debidos a los diferentes mecanismos de dispersión en la base hacen que rápidamente se aleatorice la dirección de la velocidad y que, debido a la ausencia de un campo eléctrico que pueda arrastrarlos de forma eficiente hacia el colector, buena parte de ellos retroceda (*back-scattering*), con lo que la velocidad longitudinal de los electrones en esta zona baja a un valor medio de $2.5 \cdot 10^7$ cm/s, tal como hemos visto antes.

La medida de la corriente de electrones a través de la interfaz de la heterounión se ha llevado a cabo mediante el uso de cuatro contadores específicos que permiten analizar a la vez el origen del flujo de electrones. Dos contadores son para el recuento de partículas que cruzan la interfaz en sentido emisor-base; el primero para registrar las partículas con energía superior a la de la barrera y el segundo para registrar las partículas con energía inferior a la de la barrera de potencial. Así pues, el primer contador informa sobre la corriente por emisión termoiónica y el segundo sobre la corriente por efecto túnel. Los otros dos contadores son para hacer las mismas medidas para electrones que crucen en sentido base-emisor. El resultado de las medidas es que alrededor de un 35% de la corriente neta a través de la interfaz es debida a emisión termoiónica y el 65% restante a efecto túnel. La corriente de base a emisor representa un 2.5% del total, repartida en un 58% de corriente por emisión termoiónica y un 42% por

efecto túnel. Utilizando un conjunto equivalente de contadores para los electrones en las bandas L se constata que ni una sola partícula cruzó la interfaz entre esos valles, lo cual es coherente con la ocupación relativa de valles mostrada en la Figura 6.19.

Extendiendo la idea de los contadores a un número mayor de niveles de energía, se obtuvo el histograma de la Figura 6.28, que muestra la distribución energética de los electrones que cruzan la interfaz desde el emisor hacia la base. Se observa como la energía cinética total de los electrones que cruzan es en media ligeramente superior a la energía máxima de la barrera de potencial. Teniendo en cuenta que la energía cinética transversal representa un valor de unos 26meV (por equipartición de la energía cinética total media en el emisor), esto confirma que para esta polarización los electrones pasan más la barrera por efecto túnel que por emisión termoiónica. Esta distribución energética de los electrones que son inyectados a la base concuerda con la zona superior de la nube de puntos en la base representada en la Figura 6.21.

La medida de la corriente con los cuatro contadores de flujo se repitió utilizando esta vez en la simulación MC la aproximación WKB para el cálculo del coeficiente de transmisión. En este caso el porcentaje de corriente termoiónica sobre el total subió hasta el 40%. Además, la corriente total de electrones a través de la interfaz fue un 56% mayor. El incremento de la corriente a través de la interfaz utilizando la aproximación WKB es un reflejo directo de la mayor permeabilidad de la barrera según este método de cálculo del coeficiente de transmisión. Como se vio, la aproximación WKB no pone ningún impedimento a los electrones que cruzan por emisión termoiónica y, en el dispositivo que nos ocupa, daba un valor superior del coeficiente de transmisión en todo el margen de energías.

Por otra parte, el hecho de que la corriente total a través de la interfaz aumente al aumentar la permeabilidad de la barrera nos indica que la corriente total a través del dispositivo para esta *polarización alta* está limitada por el *spike* y no por la difusión a través de la base, tal como predice el modelo analítico presentado en el segundo capítulo de esta memoria (Figura 2.4).

Por su parte, el modelo numérico de HBT SIM calcula la corriente a través de la interfaz utilizando un factor túnel que vale, en este caso, $p_t=1.88$, que representa un factor del 65% respecto a la velocidad efectiva total (túnel más emisión termoiónica) utilizada en

el mismo simulador. El hecho que HBTSIM calcule la corriente en cualquier punto de la discretización por el modelo de arrastre-difusión y utilice una velocidad efectiva superior *sólo en el punto de interfaz* para incluir la emisión termoiónica y el efecto túnel provoca una fuerte discontinuidad en forma de depresión (*notch*) en la concentración de electrones y un pico de velocidad muy puntual que no aparece en los resultados MC (Figura 6.9, Figura 6.14 y Figura 6.15).

6.4.2 Análisis de la corriente a través de la base.

Para el simulador HBTSIM la corriente de electrones a través de la base responde claramente a un mecanismo de difusión. Según se observa en la Figura 6.19 o como se deduce de la inclinación de las bandas de energía en esta región del transistor, el campo eléctrico en la base es muy bajo. Casi toda la base es neutra gracias a su elevado nivel de impurezas, que impiden la penetración excesiva de las zonas de carga espacial. Por ello, en la base de este transistor la componente de difusión domina sobre la componente de arrastre:

$$J_n(x) \approx q \cdot D_n \cdot \frac{dn(x)}{dx} \quad (6.51)$$

con lo que en régimen permanente, cuando el valor de la corriente debe permanecer constante, se deduce que la concentración de electrones a lo largo de la base debe seguir una variación lineal, como efectivamente se observa en la Figura 6.14 en la respuesta del simulador HBTSIM. De forma complementaria la Figura 6.15 muestra cómo la velocidad efectiva de los electrones en la base aumenta progresivamente hasta que llegan a la velocidad de saturación en la unión base-colector, donde el campo eléctrico es ya intenso. Puesto que el campo eléctrico en esta zona crece muy abruptamente, apenas se observa un tímido *overshoot*, consecuencia del modelo de movilidad en función del campo eléctrico local utilizado.

Sin embargo, según MCHBT la concentración de electrones en la base presenta un perfil bien diferente. A partir de una pendiente *con tendencia a la horizontalidad* en la unión base-emisor, la concentración va disminuyendo y acaba con una pendiente *con tendencia a la verticalidad* en la unión base-colector. Esta evolución de la

concentración tiene su reflejo en un aumento progresivo y muy pronunciado de la velocidad media de los electrones a la largo de la base.

El primer caso límite correspondería a un flujo de electrones que es inyectado a gran velocidad en la base y que la cruzaría a velocidad constante, sin apenas chocar, por tanto, con la red cristalina. Es el denominado transporte balístico, interesante para conseguir dispositivos de alta velocidad aunque difícil de conseguir en dispositivos reales [Lundstrom,1990]. Efectivamente los electrones en este transistor son inyectados a la base con una velocidad media netamente superior a la velocidad de saturación considerada por HBTSIM. Son electrones *calientes* que no obedecen a las leyes de arrastre-difusión.

Aún cuando los electrones penetran en la base con una velocidad media superior a la de saturación, todavía consiguen aumentarla casi triplicándolo en su recorrido hasta la unión con el colector. Sin embargo, el aumento de velocidad media no va acompañado de un incremento en la energía cinética media. La Figura 6.17 indica claramente cómo la energía cinética media de los electrones permanece prácticamente constante a lo largo de toda la base del transistor. Si sufre algún cambio es más bien una ligera reducción con respecto a la energía con que se inyectan en el extremo con el emisor que, más que atribuirse a pérdida de energía por intercambio con la red, parece atribuible a la curvatura de la banda de conducción en ese extremo. El hecho de que la energía cinética permanezca constante sin aumentar a lo largo de la base es lógico puesto que se trata de una región neutra. Al no haber campo eléctrico, los electrones en conjunto no pueden ganar energía. La energía cinética con que los electrones son inyectados en la base es relativamente alta gracias a la discontinuidad abrupta en la heterounión (Figura 6.28). En principio los electrones deberían atravesar la base neutra manteniendo constante su velocidad y energía cinética. La nube de puntos de la Figura 6.21 muestra como una parte considerable de los electrones consigue cruzar la base con esa energía, pero los choques con la red cristalina lo impiden en muchos otros casos.

Los mecanismos de dispersión dominantes en la base de InGaAs para electrones con energías inferiores a 300meV son por orden de importancia: las impurezas ionizadas, la emisión y absorción de fonones polares ópticos y los fonones acústicos. La dispersión por impurezas ionizadas es un proceso elástico que no cambia la energía del portador pero que cambia su dirección de forma anisotrópica, fundamentalmente en electrones

lentos. En nuestro caso puede contribuir en cierta medida a la aleatorización observada en la velocidad longitudinal de los electrones cercanos al emisor. La emisión/absorción de fonones ópticos polares es inelástica ($\mp\hbar\omega_0 \approx 32\text{meV}$) y anisotrópica. Puesto que la emisión es más probable que la absorción, este mecanismo parece ser el responsable de los choques que han provocado la aparición de electrones en la base con poca energía cinética y también responsable de parte de la aleatorización de la velocidad. Por último, los fonones acústicos suponen un mecanismo elástico pero muy dispersivo para la velocidad.

Así pues, las colisiones de los electrones con la red hacen que la velocidad media en la base sea bastante menor que la de los electrones inyectados. Esta situación se observa claramente en la Figura 6.27-b, donde aparece un pico de distribución de electrones con velocidad alrededor de $8\text{-}9 \cdot 10^7\text{cm/s}$ superpuesto a una distribución ancha de velocidades centrada prácticamente en el origen. A medida que nos acercamos al colector (Figura 6.27-c y Figura 6.27-d) la distribución de velocidades mantiene el pico de velocidad alrededor de $8\text{-}9 \cdot 10^7\text{cm/s}$ y el resto de velocidades se agrupan hacia valores positivos. Hemos visto que este hecho no se traduce en ningún aumento de energía cinética. El incremento de velocidad media se debe pues al hecho *anticipatorio* del fuerte campo eléctrico presente en la zona de carga espacial del colector. Puesto que el campo eléctrico arrastra con fuerza a los electrones que llegan a la zona de carga espacial hacia el colector, se reduce cada vez más la posibilidad de encontrar electrones con velocidades negativas en los puntos de la base cercanos al colector. Por ello, el fuerte aumento en la velocidad media de los electrones en la base es simplemente debido a que el conjunto de electrones avanza cada vez más “*en fase*”.

En definitiva, la inyección de portadores *calientes* capaces de viajar a velocidades hasta diez veces superiores a la velocidad de saturación ponen en entredicho la validez del modelo de arrastre-difusión para estudiar la corriente a través de la base del HBT, incluso cuando esta es todavía relativamente larga. Véase, a este respecto, la discusión planteada en el último apartado de este capítulo.

6.4.3 Análisis de la corriente a través de la zona de carga espacial base-colector.

En la zona de carga espacial del colector el campo eléctrico asociado a la polarización en inversa de la unión semiconductor toma valores muy elevados (Figura 6.19). El modelo de HBTSIM con movilidades dependientes del campo eléctrico local hace que los electrones viajen a velocidad constante igual a la velocidad de saturación del material para campos intensos en régimen permanente. Puesto que la velocidad se estabiliza a un valor constante y la corriente de colector en régimen permanente también, la concentración llega a su valor mínimo en toda esta región del dispositivo (Figura 6.14). Cuando el campo eléctrico desaparece, ya en la región neutra del colector, la concentración de electrones vuelve a subir hasta igualarse con la de equilibrio.

La situación en MCHBT vuelve a ser substancialmente diferente. Los electrones, que llegan *en masa* desde la base se encuentran con un campo intenso que los acelera rápidamente hasta alcanzar la mayoría de ellos una velocidad del orden de $1.2 \cdot 10^8$ cm/s nada más entrar en la zona de carga espacial (Figura 6.24 y Figura 6.27-e). A diferencia de lo que ocurría en la base, en este caso sí que el aumento de velocidad longitudinal de los portadores va acompañado de un aumento de energía cinética media. Pero precisamente este hecho provoca que la tasa de dispersión de los mecanismos aumente y aparezcan los choques con transferencia de electrones a los valles L de la banda de conducción (fonones ópticos no polares) (Figura 6.18, Figura 6.19, Figura 6.23 y Figura 6.26). En estas condiciones, la velocidad media longitudinal baja en picado por diferentes causas: los choques con los fonones ópticos no polares aleatorizan la dirección de la velocidad; en la transferencia los electrones pierden energía cinética para compensar el incremento de energía potencial (ΔE_{FL}); y porque la masa efectiva de los electrones en los valles altos es mucho mayor. La caída de la velocidad media longitudinal también tiene un aspecto anticipatorio con respecto a la energía cinética media de las partículas en la celda (Figura 6.20), debido a la llegada de las partículas en retroceso desde las celdas contiguas (fenómeno de *back-scattering*).

A medida que los electrones llegan a la zona neutra del colector van recuperando una distribución de velocidades del tipo maxweliana desplazada, como se puede observar en la evolución de la Figura 6.27-f a la Figura 6.27-g.

6.5 **Discusión de la validez del modelo de DD ampliado para el análisis de HBTs abruptos.**

Una técnica para modelar los HBTs abruptos es suponer que la corriente a través del *spike* interfacial está determinada por los mecanismos de emisión termiónica y transmisión túnel, mientras que en el resto de regiones el transporte es por arrastre y difusión [Grinberg,1984], [Horio,1990], [Yang,1994], [Chang,1993]. Este es precisamente el punto de partida del modelo de HBTSIM presentado en el capítulo 2. En este apartado discutiremos la validez de esta modelización a la vista de los resultados de la simulación MC.

Las limitaciones de la aproximación de Grinberg para el cálculo de la corriente interfacial ya han sido tratadas en los apartados anteriores, por lo que no repetiremos aquí la discusión de su validez. Nos limitaremos ahora a contrastar la validez del modelo DD en las regiones volumétricas del HBT. Usaremos para ello la misma metodología que utilizamos en el capítulo anterior, es decir, aplicaremos la ecuación de balance del momento.

Al igual que ocurría en los transistores bipolares de GaAs, los términos de esta ecuación no pueden evaluarse fácilmente en el emisor debido a dificultades numéricas para estimar con precisión las derivadas de densidad de portadores y de energía cinética media. En la zona de carga espacial de la unión colectora, la curva de velocidad y energía de los electrones en el HBT pone de manifiesto que su comportamiento será muy similar al del BJT. Por esta razón, sólo analizaremos la región neutra de la base que, a la vista de los resultados MC, presenta un comportamiento muy distinto al del transistor bipolar de GaAs.

Para realizar el análisis hemos escogido dos puntos de la región neutra de la base: uno próximo a la zona de carga espacial del emisor y otro próximo a la del colector. En la Tabla 6. 3 se presentan los datos obtenidos en estos puntos con la simulación MC.

x	E_{el}	n	$\frac{dn}{dx}$	v_x	$\frac{dv_x}{dx}$	u	$\frac{du}{dx}$
[Å]	[V/cm]	[cm ⁻³]	[cm ⁻⁴]	[cm/V·s]	[s ⁻¹]	[eV]	[eV/cm]
6650	0.76	1.82·10 ¹⁵	2.12·10 ²⁰	2.56·10 ⁷	-3.46·10 ¹²	0.133	≈ 0
6350	0.87	1.52·10 ¹⁵	1.27·10 ²⁰	3.05·10 ⁷	-1.33·10 ¹²	0.134	≈ 0

Tabla 6. 3 Datos de la simulación MC en dos puntos de la base del HBT.

A partir de estos datos, y aplicando las ecuaciones desarrolladas en el capítulo anterior, se calcula la temperatura de los portadores T_c , el tiempo medio de relajación del momento τ_m , la movilidad μ_n y la constante de difusión D_n , cuyos valores aparecen en la Tabla 6. 4. (Para su cálculo se ha utilizado un valor redondeado de la corriente de colector, $J_c=7500A/cm^2$).

x	T_c	τ_m	μ_n	$\frac{2u_{xx}}{q}\mu_n$	$\frac{k_B T_c}{q}\mu_n$	$\frac{k_B T_L}{q}\mu_n$
[Å]	[K]	[s]	[cm ² /V·s]	[cm ² /s]	[cm ² /s]	[cm ² /s]
6650	968	4.04·10 ⁻¹⁴	2950	292	246	76
6350	952	9.93·10 ⁻¹⁴	4157	432	341	107

Tabla 6. 4 Parámetros de la ecuación de balance del momento calculados a partir de los datos de la simulación MC en los puntos de la base del HBT.

Los valores de estos parámetros ponen de manifiesto tres aspectos importantes:

- La temperatura de los portadores en la base es alta, próxima a 1000K, comparada con la temperatura de la red cristalina, supuesta a 300K.
- La movilidad en la base toma valores razonables, comprendidos entre 3000 y 4000cm²/V·s. (Téngase en cuenta que el ruido estadístico intrínseco del método MC puede afectar significativamente la estimación de las derivadas).
- La constante de difusión, D_n , toma valores muy distintos según el método de cálculo seguido. Su valor correcto, $(2 \cdot u_{xx}/q) \cdot \mu_n$ es un 300% mayor que el que se obtendría usando la ecuación de Einstein con $T_L=300K$. El error se reduce

considerablemente, aunque sigue siendo importante, si en la ecuación de Einstein se usa la temperatura de los portadores, T_c , en lugar de la de la red.

En la Tabla 6. 5 se presentan las componentes de la corriente total para los dos puntos de la base considerados: $J_a=q \cdot \mu_n \cdot n \cdot E_{el}$, $J_{dif}=2 \cdot u_{xx} \cdot dn/dx$, $J_k=2 \cdot n \cdot du_{xx}/dx$. Obsérvese que en la base de este dispositivo la corriente de arrastre es prácticamente despreciable.

x	J_a	J_{dif}	J_k	J_{Tot}	$e_r=J_k/J_{Tot}$
[Å]	[A/cm ²]	[A/cm ²]	[A/cm ²]	[A/cm ²]	[%]
6650	0.64	9918	-2420	7498	-32 %
6350	0.88	8784	-1289	7495	-17 %

Tabla 6. 5 Corrientes de la ecuación de balance del momento calculadas a partir de los datos de la simulación MC en los puntos de la base del HBT.

La corriente más importante en la zona neutra de la base es, como era de esperar, la corriente debida al gradiente en la concentración de portadores, J_{dif} . Sin embargo, nótese que la corriente debida al gradiente de energía, J_k , toma un valor muy significativo, del orden del 25% de la corriente total. Esto significa que *no puede utilizarse el modelo de arrastre-difusión en la región neutra de la base del HBT*. Para este transistor, el error que se comete al hacer esta aproximación sería sobrestimar la corriente de electrones a través de la base en un factor cercano al 25%.

La ecuación de balance del momento también nos permite plantear una ecuación alternativa a la de difusión para el transporte de electrones en la zona neutra de la base. En efecto; hagamos las siguientes aproximaciones en esta región:

- a) corriente de arrastre despreciable,
- b) corriente de electrones constante a través de toda la base (ignoramos las pérdidas por recombinación),
- c) energía cinética media de desplazamiento muy inferior a la de agitación térmica: $\frac{1}{2} \cdot m^* \cdot v_x^2 \ll u_{xx}$
- d) temperatura media de los electrones prácticamente constante en toda la base

e) gradiente de energía: $du_{xx}/dx \approx d(1/2 \cdot m^* \cdot v_x^2)/dx$

Estas aproximaciones se justifican a partir de los valores numéricos presentados en las tablas anteriores. Aplicando las aproximaciones a), c), d) y e) la ecuación de la corriente J_c puede aproximarse por:

$$\begin{aligned}
 J_c &= q \cdot \mu_n \cdot n \cdot E_{elx} + 2 \cdot \mu_n \cdot u_{xx} \cdot \frac{\delta n}{\delta x} + 2 \cdot \mu_n \cdot n \cdot \frac{\delta u_{xx}}{\delta x} \approx \\
 &\approx 2 \cdot \mu_n \cdot \frac{1}{2} \cdot k_B \cdot T_c \cdot \frac{\delta n}{\delta x} + 2 \cdot \mu_n \cdot n \cdot \frac{\delta \left(\frac{1}{2} \cdot m^* \cdot v_x^2 \right)}{\delta x} = \\
 &= \mu_n \cdot k_B \cdot T_c \cdot \frac{\delta n}{\delta x} + \mu_n \cdot n \cdot m^* \cdot \frac{\delta (v_x^2)}{\delta x}
 \end{aligned}
 \tag{6.52}$$

Aplicando la aproximación b) y teniendo en cuenta que $J_c = q \cdot n \cdot v_x$ se tiene que:

$$v_x^2 = \frac{J_c^2}{q^2 \cdot n^2} \Rightarrow \frac{\delta (v_x^2)}{\delta x} = - \frac{2 \cdot J_c^2}{q^2 \cdot n^3} \cdot \frac{\delta n}{\delta x}
 \tag{6.53}$$

que, substituido en (6.52) da:

$$\begin{aligned}
 J_c &\approx q \cdot \mu_n \cdot \frac{k_B \cdot T_c}{q} \cdot \frac{\delta n}{\delta x} - \frac{2 \cdot \mu_n \cdot m^* \cdot J_c^2}{q^2 \cdot n^2} \cdot \frac{\delta n}{\delta x} = \\
 &= q \cdot D_n^* \cdot \frac{\delta n}{\delta x} - q \cdot D_n^* \cdot \frac{\delta n}{\delta x} \cdot \frac{J_c^2}{q^2 \cdot n^2 \cdot k_B \cdot T_c / (2 \cdot m^*)} = \\
 &= q \cdot D_n^* \cdot \frac{\delta n}{\delta x} - q \cdot \left[D_n^* \cdot \left(\frac{J_c}{q \cdot n \cdot \sqrt{\frac{k_B \cdot T_c}{2 \cdot m^*}}} \right)^2 \right] \cdot \frac{\delta n}{\delta x}
 \end{aligned}
 \tag{6.54}$$

donde:

$$D_n^* = \mu_n \cdot \frac{k_B \cdot T_c}{q}
 \tag{6.55}$$

Esta ecuación de corriente pone de manifiesto que la componente de difusión tiene la misma expresión formal que la ecuación de difusión habitual del modelo DD, sólo que en la relación de Einstein se usa la temperatura T_c en lugar de T_L . Por otra parte, la componente del gradiente de energía J_K , puede aproximarse por el segundo término de (6. 54), que depende de la concentración n , de su gradiente dn/dx y de la densidad de corriente total J_c .

Para evaluar la discrepancia de (6. 54) con la corriente de difusión convencional, podemos expresar esta ecuación como:

$$\begin{aligned}
 J_c &= q \cdot D_n \cdot \frac{\delta n}{\delta x} \cdot \frac{T_c}{T_L} \cdot \left[1 - \left(\frac{J_c}{q \cdot n \cdot \sqrt{\frac{k_B \cdot T_c}{2 \cdot m^*}}} \right)^2 \right] = \\
 &= q \cdot D_n \cdot \frac{\delta n}{\delta x} \cdot HE
 \end{aligned}
 \tag{6. 56}$$

donde

$$D_n = \mu_n \cdot \frac{k_B \cdot T_L}{q}
 \tag{6. 57}$$

El factor HE mide la discrepancia buscada, y se define como:

$$HE = \frac{T_c}{T_L} \cdot \left[1 - \left(\frac{J_c}{q \cdot n \cdot \sqrt{\frac{k_B \cdot T_c}{2 \cdot m^*}}} \right)^2 \right] = \frac{T_c}{T_L} \cdot \left[1 - \left(\frac{J_c}{q \cdot n \cdot v_{th}} \right)^2 \right]
 \tag{6. 58}$$

donde $v_{th} = (k_B \cdot T_c / (2 \cdot m^*))^{1/2}$ es aproximadamente la *velocidad térmica* equivalente del *gas de electrones*. Obsérvese que el factor HE varía a lo largo de la base, ya que T_c , J_c y v_{th} se mantienen prácticamente constantes mientras la concentración n es variable. La concentración en la base disminuye desde la unión emisora hacia la unión colectora; por tanto, el factor HE es mayor al principio de la base que al final (colector). Como consecuencia de este hecho, la ecuación (6. 56) predice una pendiente menor en el lado

de emisor que en el de colector, puesto que la corriente debe permanecer constante (régimen permanente).

Nótese que para corrientes débiles, $J_c \ll q \cdot n \cdot v_{th}$, la corriente en la base se podrá aproximar por la ecuación de difusión convencional, pero usando T_c en lugar de T_L .

Sin embargo, cuando J_c se aproxima a $q \cdot n \cdot v_{th}$, el factor HE no puede aproximarse por T_c/T_L y la aproximación de difusión deja de ser válida. En este caso hay que obtener J_c resolviendo la ecuación de segundo grado (6. 54).

Para simplificar la escritura de esa ecuación definiremos los términos J_{dif} y J_{th} :

$$J_{dif} = q \cdot D_n^* \cdot \frac{dn}{dx} \quad (6. 59)$$

$$J_{th} = q \cdot n \cdot v_{th} = q \cdot n \cdot \sqrt{\frac{k_B \cdot T_c}{2 \cdot m^*}} \quad (6. 60)$$

Entonces la ecuación (6. 54) se convierte en:

$$J_c^2 + \frac{J_{th}^2}{J_{dif}} \cdot J_c - J_{th}^2 = 0 \quad (6. 61)$$

cuya solución es:

$$J_c = \frac{J_{th}^2}{2 \cdot J_{dif}} \cdot \left[\sqrt{1 + \left(\frac{2 \cdot J_{dif}}{J_{th}} \right)^2} - 1 \right] \quad (6. 62)$$

La solución de la ecuación tiene dos valores asintóticos. Cuando $J_{dif} \ll J_{th}/2$ la corriente J_c se puede aproximar por:

$$J_c \approx \frac{J_{th}^2}{2 \cdot J_{dif}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{2 \cdot J_{dif}}{J_{th}} \right)^2 = J_{dif} \quad (6. 63)$$

que reproduce el resultado discutido anteriormente con el factor HE . Pero ahora, la asíntota cuando $J_{dif} \gg J_{th}/2$ es:

$$J_c \approx \frac{J_{th}^2}{2 \cdot J_{dif}} \cdot \left(\frac{2 \cdot J_{dif}}{J_{th}} \right) = J_{th} \quad (6.64)$$

es decir, J_c se aproxima asintóticamente a la corriente $q \cdot n \cdot v_{th}$.

De las consideraciones anteriores vemos como las corrientes asintóticas J_{dif} y J_{th} pueden identificarse como dos mecanismos de transporte en la base, el más restrictivo de los cuales es el que acaba fijando el valor de la corriente total, J_c , que llega al colector.

Obsérvese, además, que en el segundo caso, cuando J_c tiende a J_{th} , la concentración de electrones a lo largo de la base deberá permanecer constante, puesto que J_c y v_{th} son también valores constantes.

Como hemos indicado anteriormente, la corriente a través de la base puede aproximarse por J_{dif} cuando $J_{dif} \ll J_{th}/2$. En estas condiciones, como $J_c \cong J_{dif} = \text{constante}$, el término dn/dx debe ser aproximadamente constante y puede aproximarse por:

$$\frac{dn}{dx} \approx \frac{n(0)}{w_B} \quad (6.65)$$

donde $n(0)$ es la concentración en el inicio de la región neutra de base, y w_B es el espesor de dicha región. Entonces, la condición de validez $J_{dif} \ll J_{th}/2$ conduce a:

$$q \cdot D_n^* \cdot \frac{dn}{dx} \approx q \cdot D_n^* \cdot \frac{n(0)}{w_B} \ll q \cdot \frac{n(0)}{2} \cdot v_{th} \quad (6.66)$$

por lo que

$$\frac{2 \cdot D_n^*}{w_B} = \frac{2}{w_B} \cdot \frac{k_B \cdot T_c}{q} \cdot \frac{q \cdot \tau_m}{m^*} \ll \sqrt{\frac{k_B \cdot T_c}{2 \cdot m^*}} \quad (6.67)$$

es decir,

$$w_B \gg 4 \cdot \tau_m \cdot \sqrt{\frac{k_B \cdot T_c}{2 \cdot m^*}} = 4 \cdot \tau_m \cdot \sqrt{\frac{u/3}{m^*}} \quad (6.68)$$

donde $(u/(3 \cdot m^*))^{1/2}$ es aproximadamente la velocidad térmica. Este resultado tiene una fácil interpretación: el modelo de difusión en la base de un HBT es válido si la anchura de la base es muy superior a cuatro veces el camino libre medio entre dispersiones.

Para el transistor considerado $\tau_m = m^* \cdot \mu_n / q$ es aproximadamente 10^{-13} s, mientras que $u \cong 130$ meV, por lo que resulta que $(u/(3 \cdot m^*))^{1/2} \cong 4.25 \cdot 10^7$ cm/s y, de ahí, (6.68) establece que w debe ser muy superior a $0.17 \mu\text{m}$. Como el espesor de base de los HBT de InP/InGaAs de alta eficiencia es muy inferior a este valor, concluimos que en estos transistores no es adecuado utilizar el modelo de transporte por difusión.