



Tunelamiento Resonante En Heteroestructuras De Doble Barrera Basadas En Nitruros Y En Óxidos

Ovier de Jesús Izquierdo Pérez

Requisito para optar al título de Magister en Física

Asesor:

Dr. Alvaro Luis Morales Aramburo

Grupo de Materia Condensada - UdeA
Instituto de Física
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Antioquia

2024

© Ovier de Jesús Izquierdo Pérez

Email: ovier.izquierdop@udea.edu.co

El presente trabajo de investigación fue escrito por el autor usando el sistema de composición de textos L^AT_EX 2 ϵ .

Todos los derechos reservados.

Prohibida la reproducción total o parcial, por cualquier medio o con cualquier propósito, sin la autorización del autor.

Dedicatoria

A la memoria de mi padre (1951-2023).

Parafraseando a una cantante española:

“Prefiero estar dormido que despierto

De tanto que me duele que no estés”.

Índice General

Resumen	i
Capítulo 1: Introducción	1
1.1 Dispositivos basados en nitruros	1
1.2 Dispositivos basados en óxidos	6
1.3 Diodos de tunelamiento resonante	8
1.4 Electrostática en DTR	15
1.4.1 Modelo de Thomas-Fermi	15
1.4.2 Modelo de Hartree	16
1.5 Objetivo	17
1.6 Descripción general de la tesis	17
1.7 Referencias	17
Capítulo 2: Marco Teórico General	23
2.1 Ecuación de Poisson	24
2.2 Polarización eléctrica	26
2.3 Gas bidimensional de electrones	28
2.4 Ecuación de Schrödinger	28
2.5 Método de elementos finitos	30
2.6 Formalismo de Landauer	32
2.7 Referencias	34
Capítulo 3: Modelamiento	35
3.1 Introducción	35
3.2 Electrostática	35
3.2.1 Densidad superficial de carga	38
3.3 Método de Newton-Raphson	38
3.4 Transmisión	41
3.5 Referencias	42

Capítulo 4: Resultados y Discusión	45
4.1 Espacio de parámetros: nitruros	45
4.2 Optimización de parámetros: nitruros	49
4.2.1 Sistemas de doble barrera	49
4.2.2 Malla	52
4.2.3 Resultados	53
4.3 Espacio de parámetros: óxidos	62
4.4 Resultados de esta investigación	63
4.4.1 Resistencia diferencial negativa-sistema 3	69
4.4.2 Resistencia diferencial negativa-sistema 4	78
4.5 Referencias	82
Capítulo 5: Conclusiones	87
5.1 Perspectivas	87
Capítulo 6: Anexo	89
6.1 Hamiltoniano del sistema	89
6.2 Sistema fuera del equilibrio	91
6.3 Corriente de probabilidad	95
6.4 Referencias	100

Índice de Figuras

Figura 2.1: Diseño epitaxial de heterocapas del diodo de tunelamiento resonante	24
Figura 2.2: Mallado de 29, 45 y 90 elementos para un dominio unidimensional.	30
Figura 3.1: Diagrama de flujo del proceso autoconsistente	41
Figura 4.1: Diseño epitaxial de heterocapas del sistema de doble barrera	49
Figura 4.2: Potencial a 18 V de Tyler y de esta investigación para el sistema 1.	52
Figura 4.3: Potencial a 0 V de Tyler y de esta investigación para $P_s(AlN) = -0.090 C/m^2$, $P_s(GaN) = -0.029 C/m^2$	53
Figura 4.4: Potencial a 0 V de Tyler y de esta investigación para $P_s(AlN) = -0.081 C/m^2$, $P_s(GaN) = -0.035 C/m^2$	54
Figura 4.5: Potencial a 0 V de Tyler y de esta investigación para $P_s(AlN) = -0.081 C/m^2$, $P_s(GaN) = -0.029 C/m^2$	54
Figura 4.6: Potencial a 0 V de Tyler y de esta investigación para $P_s(AlN) = -0.090 C/m^2$, $P_s(GaN) = -0.035 C/m^2$	55
Figura 4.7: Potencial eléctrico a 0 V calculado en esta investigación para el sistema 1.	56
Figura 4.8: Transmisión a 0 V calculada para el sistema 1.	57
Figura 4.9: Perfil del potencial a 0 V para el sistema 2 y cuasinivel de Fermi obtenido por Growden	58
Figura 4.10: Transmisión a 0 V calculada para el sistema 2.	59
Figura 4.11: Convergencia alrededor del estado fundamental E_0 a 0 V del sistema 2 calculado en esta investigación.	60
Figura 4.12: Potencial a 0 V para el sistema 3	65
Figura 4.13: Transmisión para 0 V, 1 V, 2 V Y 3 V para el sistema 3.	67
Figura 4.14: Primera resistencia diferencial negativa para el sistema 3.	69

Figura 4.15: Potencial a 2 V, 2.6 V, 3 V y 3.3 V para el sistema 3. . . .	72
Figura 4.16: Curva característica corriente vs voltaje para el sistema 3. .	73
Figura 4.17: Potencial a 0 V para el sistema 4	75
Figura 4.18: Comparativo entre el sistema 3 y 4 para el potencial a 0 V	76
Figura 4.19: Transmisión para 0 V, 1 V, 2 V Y 3 V para el sistema 4. .	77
Figura 4.20: Potenciales a diferentes voltajes para sistema 4	79
Figura 4.21: Potencial a 3 V para sistema 4.	80
Figura 4.22: Curva característica corriente vs voltaje para sistema 4. . .	81

Índice de Tablas

Tabla 4.1: Polarización espontánea P_s , permitividad relativa ϵ_r , afinidad electrónica χ , brecha de banda prohibida E_g , parámetro de red a y masa efectiva m^* para GaN, AlN y AlGaN.	46
Tabla 4.2: Polarización piezoeléctrica P_p y densidad superficial de carga inducida ρ_s para la interfaz AlGaIn/GaN.	48
Tabla 4.3: Optimización de la densidad superficial de carga inducida ρ_s para las interfaces de AlGaIn/GaN.	53
Tabla 4.4: Autovalores del sistema 1 para 0 V calculados por Growden y en esta investigación.	57
Tabla 4.5: Autovalores del sistema 2 para 0 V calculados por Growden y en esta investigación.	59
Tabla 4.6: Autovalores calculados a 0 V para diferentes pasos en el barrido paramétrico y magnitud T en el pico de transmisión. Se presentan resultados de esta investigación y de Growden.	61
Tabla 4.7: Polarización espontánea P_s , permitividad relativa ϵ_r , afinidad electrónica χ , banda prohibida E_g , parámetro de red a , masa efectiva m^* para MgO, ZnO y MgZnO y polarización piezoeléctrica P_p para la interfaz AlGaIn/ZnO.	63
Tabla 4.8: Tabla de autovalores y picos de transmisión del sistema 3 para 0 V, 1 V, 2 V, 2.6 V, 3 V y 3.3 V.	68
Tabla 4.9: Tabla comparativa entre el sistema 2 de Growden [14] y el sistema 3. Se presentan zonas de resistencia diferencial negativa, corriente pico i_p y valle i_v medidas en miliamperios y PVCR.	74
Tabla 4.10: Tabla de autovalores y picos de transmisión del sistema 4 para 0 V, 0.8 V, 1 V y 1.2 V.	77

Tabla 4.11: Se presentan zonas de resistencia diferencial negativa, corriente pico i_p y valle i_v medidas en amperios y PVCR para el sistema 4. 82

Resumen

En este trabajo se han analizado diodos de tunelamiento resonante (DTR) de doble barrera que están conformados por diferentes heteroestructuras semiconductoras adyacentes y se han utilizado para muchas aplicaciones optoelectrónicas y microelectrónicas. El estudio hizo un comparativo entre sistemas preparados con materiales del grupo III-V y del grupo II-IV del tipo $AlN/GaN/AlN$, $AlN/ZnO/AlN$ y $Al_xGa_{1-x}N/ZnO/Al_xGa_{1-x}N$ teniendo en cuenta los efectos de polarización interna que los caracterizan. Las dimensiones y los dopamientos fueron los mismos para todos los sistemas estudiados y en el último sistema se utilizó una concentración del 30 % ($x = 0.3$). Se calcularon perfiles de potencial, curvas de transmisión y curvas características corriente versus voltaje I-V para cada uno de estos sistemas resolviendo la ecuación de Poisson y la ecuación de Schrödinger por el método de elementos finitos e implementando el formalismo de Landauer.

Los resultados muestran que los sistemas de doble barrera del tipo $AlN/GaN/AlN$ y $AlN/ZnO/AlN$ presentan curvas I-V en el rango de los miliamperios (mA) y zonas de resistencia diferencial negativa alrededor de 3 V, 3.5 V, 4.5 V, 5.5 V y 6.5 V; mientras que el sistema de doble barrera del tipo $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/ZnO/Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ presenta curva característica I-V en el rango de los amperios (A) y tiene zonas de resistencia diferencial negativa alrededor de 1 V, 2.1 V y 3.2 V.

Introducción

Este capítulo introductorio tiene la intención de mostrar la evolución de los dispositivos basados en nitruros y también los basados en óxidos, paradigmas para el crecimiento heteroepitaxial de estas películas, así como destacar las aplicaciones tecnológicas de dichos dispositivos y presentar algunos informes destacados que sirven como recorrido histórico.

Finalmente se presenta la organización en capítulos del documento y su respectivo contenido.

1.1 Dispositivos basados en nitruros

Los semiconductores basados en nitruros del grupo III-IV (GaN, AlGaN, InAlN, InGaN, InAlGaN, AlN) han sido objeto de interés en las últimas décadas para aplicaciones en optoelectrónica y dispositivos de alta potencia ya que tienen banda prohibida grande comparada con los semiconductores basados en silicio y germanio. La familia de los nitruros fue estudiada y sintetizada desde principios del siglo XX. Desde 1901 hasta 1925 se reportaron en la literatura la preparación de un nitruro con la familia del grupo III: nitruro de boro (BN), nitruro de aluminio (AlN), nitruro de indio (InN) y nitruro de talio (TlN). El primer material de nitruro de galio (GaN) policristalino fue sintetizado haciendo pasar amoníaco (NH_3) sobre galio líquido (Ga) a temperaturas elevadas. Este material fue examinado, demostrando su estabilidad hasta 800 °C en atmósfera de hidrógeno [1].

En 1969 se ha logrado la preparación de GaN monocristalino incoloro mediante una técnica de crecimiento en fase vapor previamente utilizada para la producción de GaAs, GaP y GaSb. Estos cristales representan los primeros especímenes de GaN informados adecuados para una exhaustiva evaluación eléctrica y óptica de este compuesto. Se ha determinado que GaN posee una brecha de energía directa de 3.39 eV y que los cristales no dopados obtenidos

mediante este método exhiben una concentración inherente de electrones muy elevada, generalmente superior a $10^{19}/\text{cm}^3$ que se ha querido solventar usando germanio (Ge) como dopante. Maruska y Tietjen cultivaron capas delgadas de GaN utilizando epitaxia en fase vapor de hidruro (HVPE, por sus siglas en inglés, Hydride Vapor Phase Epitaxy) en sustratos de zafiro. La HVPE es un proceso de crecimiento de películas delgadas cristalinas sobre sustratos mediante la deposición de vapor en fase gaseosa. En este método, los precursores gaseosos contienen hidruros metálicos que reaccionan con gases de portador, como hidrógeno o argón, a altas temperaturas para formar los componentes del material que se está depositando. Debido a una gran discrepancia en la red cristalina entre estos materiales, las capas sintetizadas mostraron una calidad cristalográfica deficiente. Sin embargo, a pesar de esta limitación, este trabajo fue fundamental para confirmar su estructura hexagonal con parámetros de red de $a = 0.3189$ nm y $c = 0.5185$ nm, y para los primeros conceptos sobre diodos emisores de luz (LED, del inglés) [2]. Siguiendo con la técnica HVPE, en el caso de GaN, por ejemplo, se utilizan precursores como trimetilgalio (TMG) y amoníaco (NH_3). Estos precursores reaccionan en la fase vapor sobre un sustrato, generalmente zafiro o silicio, y forman una película delgada de GaN cristalino. La HVPE es conocida por su capacidad para producir grandes volúmenes de material y por su relativa simplicidad en comparación con otros métodos de crecimiento de películas delgadas de GaN. Sin embargo, puede ser más desafiante en términos de control de la calidad cristalina y la uniformidad de la película. En 1973 la misma investigadora reportó emisión ultravioleta (UV) en unión p-n para diodos emisores de luz con voltajes de operación de 10-20 voltios. Para semiconductores tipo p anteriormente se había usado Zn como compensador por ser un aceptor común en compuestos III-V; con emisión roja, amarilla, verde y azul. Pero esta investigación que se cita hizo dopamientos con Mg para equilibrar los donadores nativos y obtuvo buenos resultados porque los voltajes de opera-

ción reportados anteriormente eran alrededor de los 160 V para emisión UV [3].

En el crecimiento de películas, una capa de nucleación es una capa delgada de material depositada en un sustrato antes de crecer la película principal. Su función principal es proporcionar un sustrato adecuado para que los átomos o moléculas de la película principal se adhieran y crezcan de manera ordenada y uniforme. Y esto fue lo que hizo en 1986 Hiroshi Amano del grupo de Isamu Akasaki (Universidad de Nagoya) para lograr un avance real en la epitaxia de GaN sobre sustrato de zafiro utilizando vapor metalorgánico a presión atmosférica al introducir una capa de nucleación de AlN a baja temperatura. Esta capa de nucleación permitió a Amano y Akasaki obtener GaN liso y transparente con buena calidad cristalográfica [4].

La técnica de irradiación con un haz de electrones de baja energía (LEEBI, del inglés) es una herramienta versátil utilizada en una variedad de campos científicos y tecnológicos para interactuar con muestras de manera controlada y precisa. Se utiliza en una variedad de aplicaciones; por ejemplo, en el campo de la investigación de materiales, puede utilizarse para activar dopantes en semiconductores. En microscopía electrónica, puede utilizarse para modificar la superficie de muestras: grabado o deposición controlada de materiales. En la fabricación de dispositivos electrónicos, puede utilizarse en procesos de litografía electrónica para la exposición y modificación de patrones en películas delgadas. De esta manera Amano y colaboradores elaboraron por primera vez una película semiconductor con dopamiento tipo p de baja resistividad en el año 1989 con GaN dopado Mg. Seguidamente diseñaron un LED por unión p-n que emitía en el espectro UV [5].

En 1991 se desarrollaron diodos emisores de luz azul de unión p-n de alta potencia usando películas de GaN crecidas sobre capas intermedias de GaN y sustrato de zafiro. El voltaje de operación fue de 4 V con corriente directa de 20 mA y la longitud de onda detectada fue de 430 nm. Nakamura ese año

optimizó la idea de sus predecesores para crecer sus heteroestructuras y obtuvo concentraciones de hoyos tipo-p del orden de $10^{18}/cm^3$; por las $10^{16}/cm^3$ obtenidas por Amano y Akasaki dos años antes. Luego entonces la cantidad total de energía luminosa por unidad de tiempo que el LED de Nakamura emitía fue 10 veces más alto que los LED de la época basados en SiC [6].

Nakamura y colaboradores en 1992 mejoraron la operatividad de estos dispositivos mediante un recocido térmico a una temperatura de 700 °C. Antes del recocido la resistividad era de $1 \times 10^6 \Omega \cdot cm$ y después del recocido la resistividad y la concentración de hoyos toman el valor de $2 \Omega \cdot cm$ y $3 \times 10^{17}/cm^3$ [7]. Cabe recordar que un material semiconductor con una baja resistividad puede permitir una mejor eficiencia eléctrica en un LED, ya que facilita el flujo de corriente a través del dispositivo. Esto significa que menos energía eléctrica se perderá en forma de calor debido a la resistencia interna del dispositivo. Es por ello que los trabajos de Nakamura dieron paso a toda la tecnología de LED y diodos láseres (LD) que tenemos hoy. A partir de la luz azul rápidamente se generó luz blanca con recubrimientos de materiales basados en fósforo debido a los procesos de fluorescencia y fosforescencia en este material. Un mercado multimillonario, desde señalización hasta imagenología médica, se abrió camino.

Siguiendo al mismo investigador, haría un aporte excepcional a través de un artículo en 1996. Nakamura se centra en el desarrollo y la caracterización de diodos láser basados en InGaN con estructuras de múltiples pozos cuánticos (MQW, del inglés). Estos dispositivos representaron una innovación significativa en la tecnología de láseres semiconductores, especialmente en longitudes de onda cortas, como el azul y el violeta. El proceso de fabricación de estos diodos láser implica el crecimiento epitaxial de múltiples capas de InGaN entre la unión p-n y sobre sustrato de zafiro mediante técnicas de deposición de vapor metalorgánico (MOCVD, del inglés). Luego, se construyen estructuras de MQW alternando capas de InGaN con barreras de GaN. Estas estructuras

optimizan las propiedades ópticas y eléctricas del material, lo que resulta en una eficiencia de emisión de luz mejorada y una menor densidad de corriente de umbral para la operación láser. Nakamura y su equipo obtuvieron emisión de 417 nm a temperatura ambiente con una densidad de corriente umbral de 4 kA/cm^2 [8]. En 2014 Akasaki, Amano y Nakamura serían honrados con el premio nobel por sus increíbles aportes a la ciencia y a la tecnología del led azul; fuente de luz eficiente, de larga vida y amigable con el medio ambiente. En los años siguientes se desarrolló la tecnología de blu-ray, transistor de alta movilidad electrónica (HEMT, del inglés) y láser de emisión en superficie de cavidad vertical (VCSEL, del inglés) basado en GaN.

En 2017 Mei y colaboradores abordan el desafío tecnológico de generar luz verde eficiente y de alta calidad utilizando láseres semiconductoras. La “brecha verde” se refiere a una región en el espectro visible donde es difícil lograr una emisión de luz eficiente y de buena calidad con los materiales y tecnologías convencionales. Lo hicieron diseñando VCSEL por MOCVD sobre sustrato de silicio (Si) y dos capas de puntos cuánticos en la región activa basados en In-GaN con 27 % de contenido de Indio. Ese año reportan longitudes de onda que se extienden desde 491.8 nm hasta 565.7 nm cubriendo gran parte de la brecha verde. Estos láseres establecieron el récord mundial de corriente umbral más baja (1 mA) a temperatura ambiente [9].

Para finalizar este recorrido destacamos el artículo de Zhang en 2019 el cual se centra en el desarrollo de un diodo láser de ultravioleta profundo (UV-C) con una longitud de onda de 271.8 nm, que es capaz de operar a temperatura ambiente. La estructura láser fue crecida en sustrato de AlN por la técnica MOCVD. El voltaje de operación fue de 13.8 V y la corriente umbral de emisión láser fue de 0.4 A. Las aplicaciones de estos dispositivos según los autores se relacionan con la desinfección, esterilización, detección y destrucción de microorganismos, tratamiento médico, sensores bioquímicos y monitoreo de superficies.

Si bien los LED ya habían alcanzado longitudes de onda corta de 210 nm, UV-C, los diodos láser estaban en el rango de 315-400 nm. De allí que estos investigadores hallan alcanzado un excelente rendimiento en la operatividad de su dispositivo [10].

1.2 Dispositivos basados en óxidos

El semiconductor óxido de zinc (ZnO), del grupo II-VI, es el mejor material para sustituir el GaN, ya que tiene una energía de unión del excitón muy grande de 60 meV [11] comparada con la del GaN que es de 26 meV lo cual lleva a fuentes de luz ultravioleta más intensas y brillantes a través de diodos emisores de luz (LED), diodos láser (LD) y fotodiodos. La energía de unión del excitón es la energía requerida para crear un excitón en un semiconductor. Si la energía de unión del excitón es grande, para romperla y llevar un electrón desde la banda de valencia a la banda de conducción (o en la misma banda de conducción pero a un estado superior) se necesita mucha energía. Esta es la diferencia en la intensidad luminosa para los dispositivos basados en ZnO. El ZnO exhibe tres estructuras cristalinas diferentes: wurtzita, blenda de zinc y sal de roca [12].

En Italia y en el año 1987 se hace crecimiento de películas de ZnO sobre sustrato de zafiro (Al_2O_3) en dirección c por medio de la técnica de recubrimiento conocida como pulverización catódica asistida por magnetrones para estudiar sus propiedades elásticas y piezoeléctricas. Carlotti y colaboradores señalan que las constantes elásticas obtenidas pueden ser una buena aproximación para futuros estudios [13].

Otro dato interesante que se informa en 2005 es que la temperatura de crecimiento del ZnO sobre zafiro por deposición de vapor metalorgánico es de 500 °C la cual es mucha más baja que los 1000 °C del GaN. Estos investigadores japoneses prepararon experimentalmente un sistema de doble barrera de

MgZnO y un pozo de ZnO sobre sustrato de zafiro por MOCVD. [14].

En 2009 el investigador alemán Benz y colaboradores han venido adelantando el diseño de dispositivos del tipo $n - MgZnO/p - AlGaN$ y $n - ZnO/p - GaN$ por MOCVD sobre zafiro ya que el ZnO presenta niveles de emisión de radiación más altos que el Si, GaAs, CdS y GaN. En ese año se detecta por electroluminiscencia una longitud de onda pico de 550 nm para sistemas LED del tipo $p - AlGaN/n - ZnO$ y $p - GaN/n - ZnO$ logrando un claro comportamiento rectificador en la curva corriente versus voltaje. Al final del estudio se recomienda agregar pozos cuánticos de MgZnO/ZnO para mejorar la electroluminiscencia. Además, el autor señala que la mayor energía de unión del excitón en el ZnO, en comparación con la del GaN, podría resultar en umbrales de potencia muy bajos para dispositivos basados en ZnO a temperatura ambiente. Estos umbrales de potencia indican el nivel de potencia de entrada necesario para que los dispositivos operen correctamente [15].

Un año después se producen heteroestructuras de buena calidad con una técnica de crecimiento alternativa pero semejante a MBE. La técnica de pulverización por plasma excitado por ondas helicon (HWPS, del inglés) se destacó como una de las técnicas de crecimiento epitaxial más adaptables para la producción de capas epitaxiales y heteroestructuras de semiconductores. Este método permite obtener semiconductores ZnO y MgZnO con una baja densidad de dislocaciones y una superficie extremadamente lisa a nivel atómico [16].

En 2018 se diseña un sistema de multicapas de ZnO/GaN por epitaxia de haces moleculares asistida por plasma híbrido. Las temperaturas de crecimiento son de 300 °C y 500 °C para ZnO, y de 500 °C y 635 °C para GaN. Se prueba que son una buena alternativa para el diseño de reflectores de Bragg distribuidos, también conocidos como DBR por sus siglas en inglés (Distributed Bragg Reflectors). Los DBR son componentes ópticos diseñados para reflejar selectivamente ciertas longitudes de onda de la luz mientras permiten el paso de otras. Consisten en capas alternadas de materiales con índices de refracción

diferentes, que actúan como una red de difracción y reflejan la luz incidente en una longitud de onda específica. Esta tecnología basada en estos materiales mencionados se implementa en láseres, diodos emisores de luz, filtros ópticos y moduladores ópticos en el rango visible y ultravioleta.

Los autores señalan que el desajuste de red y la diferencia de energía entre los niveles de banda de conducción en esta región de transición entre ZnO/GaN es pequeño [17].

1.3 Diodos de tunelamiento resonante

Se ha hecho una revisión sobre artículos teóricos, experimentales y aplicaciones tecnológicas de diodos emisores de luz (LED), diodos láseres (LD, VCSEL), reflectores de Bragg (DBR), y fotodiodos. Un dispositivo importante del que no hemos hecho ningún comentario hasta el momento y que son los que vamos a investigar son los diodos de tunelamiento resonante (DTR); que consisten en varias capas ultradelgadas sandwichadas entre sí de un semiconductor con una banda de energía prohibida (o bandgap) muy grande y un semiconductor con un bandgap mucho menor; que al momento de su descripción mecano-cuántica se modela como un sistema de barreras y pozos cuánticos adyacentes capaces de confinar portadores de carga como electrones y huecos dentro de una región muy delgada.

El concepto de tunelamiento resonante a través de barreras dobles hace mucho tiempo se ha estudiado y plasmado en documentos como el de David Bohm en 1951 que, a través de la solución numérica de la ecuación diferencial de Schrödinger, calculó el transporte electrónico a través de barreras dobles. Halló transmisión del 100 % en este tipo de sistemas [18]; a diferencia de sistemas de una barrera de potencial, que según la mecánica cuántica, la transmisión nunca es del 100 %.

Según la propuesta del físico soviético Iogansen en 1964 un sistema cristalino,

dependiendo de la disposición atómica en la red, se puede ver como un sistema de barreras de potencial. Su investigación se centró en el fenómeno del tunelamiento de electrones a través de barreras de potencial en semiconductores. Luego entonces se esperaba que a través de estas estructuras ocurriera el tunelamiento resonante. El tunelamiento es el proceso mediante el cual los portadores de carga, como electrones o huecos, atraviesan una barrera de potencial, incluso cuando no tienen suficiente energía clásica para superarla [19]. Más adelante, en 1970, se propuso que el transporte unidimensional a través de heteroestructuras semiconductoras se diera como una consecuencia de la transmisión electrónica. El artículo de 1970 fue importante debido a su contribución a nuestra comprensión del fenómeno de la localización en sistemas unidimensionales, pero aún más significativamente, estableció una conexión entre la conductancia eléctrica y las probabilidades de transmisión, que ha sido la base de gran parte del trabajo futuro en sistemas mesoscópicos, a menudo referido como el formalismo de Landauer. Landauer establece que la conductancia eléctrica de un sistema desordenado está directamente relacionada con la probabilidad de transmisión a través del sistema. Cuanto mayor sea la probabilidad de transmisión, mayor será la conductancia del sistema, ya que habrá una mayor proporción de portadores de carga que lograrán pasar a través del sistema sin ser dispersados o reflejados significativamente [20].

Alrededor de 1973 los investigadores Tsu, Esaki y Chang resolvieron el problema numérico para una superred finita de múltiples barreras de potencial y encontraron el coeficiente de transmisión respectivo. Estas curvas presentaron algunos picos del 100%; lo que los llevó a concluir que el tunelamiento resonante no se da solamente para sistemas de doble barrera. Adicionalmente, calcularon las curvas características, que son curvas de corriente versus voltaje, y encontraron que se presenta el fenómeno de resistencia negativa. El fenómeno de la resistencia diferencial negativa (RDN) es un comportamiento inusual que ocurre en algunos materiales semiconductores bajo ciertas con-

diciones. Normalmente, cuando se aplica un voltaje a un semiconductor, su resistencia eléctrica disminuye a medida que aumenta la corriente que fluye a través de él, siguiendo la ley de Ohm. Sin embargo, en algunos casos, especialmente en dispositivos de alta frecuencia y en ciertos tipos de materiales, la resistencia puede comportarse de manera opuesta, es decir, aumenta con el aumento de la corriente. Los autores mencionados concluyeron que la RDN es una presentación alternativa del tunelamiento resonante en heteroestructuras semiconductoras [21].

En el año 1983 se diseñan experimentalmente sistemas de barreras y pozos cuánticos bajo la tecnología optimizada por Sollner y colaboradores. Luego entonces pasaron 10 años para verificar los desarrollos teóricos anteriores. A través de las técnicas de epitaxia por haces moleculares y epitaxia de fase de vapor de los investigadores mencionados se diseñan dispositivos de múltiples barreras y pozos, se mide su dinámica de transporte, se obtienen curvas características con resistencia diferencial negativa y las energías de emisión asociadas a este peculiar comportamiento se encontraban en el rango de los terahertz (Thz) [22]. La banda terahertz, no invasiva y no ionizante, es importante para imagenología, seguridad y detección de materiales, sistemas de comunicación por redes inalámbricas, espectroscopía y detección temprana de cáncer de piel [23].

Un equipo en el Massachusetts Institute of Technology (MIT) reportó emisión THz para dos sistemas diferentes: de 420 GHz en 1989 [24] y después, en 1991, arriba de los 712 Ghz. Los primeros dispositivos que desarrollaron estos investigadores estadounidenses fueron basados en arsenuros del tipo AlAs/GaAs y crecidos por epitaxia de haces moleculares (MBE, del inglés) cuyas dimensiones son de 1.1 nm para las barreras dobles y 4.5 nm para el pozo de potencial. Los posteriores dispositivos, de 1991, fueron basados en barreras de 1.5 nm de antimonio de aluminio (AlSb) y pozo de 6.4 nm de arsenuros de indio (InAs). Esta frecuencia que reportaron en su momento fue la más alta para un

oscilador electrónico de estado sólido.

Uno de los aspectos clave de los pozos cuánticos es su capacidad de ingeniería de banda prohibida. Esta capacidad permite a los científicos e ingenieros manipular las propiedades electrónicas del material permitiendo la inyección ultrarrápida de portadores en niveles discretos de energía lo que da lugar a una amplia gama de aplicaciones en varios campos [25].

En 1994 se demostró autoconsistentemente que los DTR basados en barreras dobles de AlGaAs de 3.4 nm, pozo de GaAs de las mismas dimensiones, área de $4.5 \mu\text{m}^2$ y concentración de aluminio del 30 % despliegan resistencia diferencial negativa con frecuencias de corte en la región del terahertz (THz) [26]. Esta frecuencia se refiere a la frecuencia máxima a la que el dispositivo puede operar de manera eficiente antes de que sus propiedades de resonancia y tunelamiento se vuelvan menos efectivas o prácticas.

Luego entonces la construcción de DTR basados en nitruros (GaN) que operen en el rango espectral del terahertz era cuestión de tiempo para que se dieran paso dada la optimización en el crecimiento de películas y el desarrollo de estas tecnologías epitaxiales.

Así fue que en 2001 desde japon Kikuchi y colaboradores preparan un DTR con barreras de AlN y pozos de GaN por MBE con capas dopadas adyacentes de n-GaN de $2 \times 10^{18} / \text{cm}^3$. Por primera vez se crece exitosamente un DTR de barreras dobles de 1 nm y pozo de GaN de 0.75 nm. Y una superred de seis barreras de 1 nm y cinco pozos de iguales dimensiones. Para el primer dispositivo obtienen RDN a 2.4 V, densidad de corriente pico de $930 \text{ mA}/\text{cm}^2$ y relación densidad de corriente pico-valle (PVR, del inglés) de 3.1. Para la superred la RDN se da en 1.6 V, la densidad de corriente pico fue de $142 \text{ A}/\text{cm}^2$ y PVR de 9.7 [27]. El PVR se refiere a la relación entre la corriente máxima (pico) y la corriente mínima (valle) en la curva de corriente-voltaje (I-V) de un RTD. Idealmente, se busca un alto PVR, ya que indica una diferencia significativa entre la corriente máxima y mínima, lo que significa una mayor eficiencia de

conmutación entre un estado de alta corriente (pico) y un estado de baja corriente (valle) y una resonancia más definida y clara en la curva I-V. Por lo tanto, el índice PVR es una métrica importante para evaluar la calidad y el rendimiento de los diodos de túnel resonante, y un PVR alto es generalmente deseable para un funcionamiento óptimo del dispositivo en diversas aplicaciones.

En 2002 se hace un estudio teórico por funciones de Green para un DTR AlN/GaN. El perfil del potencial muestra una fuerte asimetría por causa de los campos internos de polarización. Dichos campos lo que hacen es desplazar las resonancias en la probabilidad de transmisión. Además, se tienen en cuenta términos de interacción electrón-electrón e interacciones entre electrones e impurezas cargadas utilizando un potencial autoconsistente de Hartree. Las cargas de polarización en heterointerfaces de GaN/AlN se incluyen en forma de monocapas cargadas. Se observa una región de agotamiento a un lado del sistema y un pozo triangular al otro lado disponible para acumular electrones [28]. Ese mismo año se hace otro estudio por el modelo de enlace fuerte a temperatura 0 K. El sistema considera capas fuertemente dopadas de $3 \times 10^{19}/\text{cm}^3$ y una región activa de dos barreras y un pozo, todos de iguales dimensiones de 3.1 nm. Se observa el desplazamiento en la transmisión y un alto PVR por causa de la gran discontinuidad de la banda entre los materiales (1.7 eV) [29]. Dos años después, en 2004, Belyaev y su equipo de colaboradores reportan un DTR AlN/GaN crecido por MBE sobre sustrato de GaN. Hasta el momento se demandaba más calidad en las heteroestructuras (invarianza traslacional) para que el dispositivo funcione eficientemente. Las barreras de AlN son de anchura asimétrica de 1 nm y 2 nm; y el pozo es de 2 nm. El artículo se enfoca en el estudio de las inestabilidades de corriente que pueden ocurrir en estos dispositivos. Estas inestabilidades pueden manifestarse como oscilaciones no deseadas en la corriente a través del dispositivo, lo que podría afectar negativamente su rendimiento, estabilidad y reproducibilidad [30].

Experimentalmente la resistencia diferencial negativa de dos sistemas de DTR se estudia en 2010. La investigación presenta PVR de 2.15 a temperatura ambiente para AlN/GaN de doble barrera crecidos por MOCVD sobre diferentes capas intermedias cuya técnica da garantías de calidad cristalina. Los investigadores concluyen que el DTR crecido sobre la capa intermedia de GaN con menor densidad de defectos muestra un mejor perfil de RDN; y cuando la capa intermedia es AlN la RDN desaparece [31].

Estudiar el transporte electrónico vertical bajo diferentes regímenes de temperatura era cuestión de tiempo y en el año 2013 los autores presentan un artículo sobre DTR de doble barrera del tipo AlGa_{0.35}N/GaN con una concentración de aluminio del 35%. El crecimiento sobre GaN se hizo por epitaxia molecular de haz asistida por plasma. Esta técnica combina la epitaxia por haz molecular convencional con la asistencia de un plasma para depositar materiales con mayor precisión y control. El ancho de las regiones de pozo y barreras es de 2.4 nm y el área de sección transversal privilegiada es de $4 \times 4 \mu\text{m}^2$. Para áreas de $6 \times 6 \mu\text{m}^2$ y $30 \times 30 \mu\text{m}^2$ no se observaron RDN y los autores lo explican en términos del número de dislocaciones y la corriente de fuga. A mayor área mayor corriente de fuga debido a una mayor cantidad de dislocaciones en las heteroestructuras. Finalmente concluyen que la calidad de los materiales es muy importante para el éxito de los DTR basados en nitruros [32].

En 2016 se estudia un DTR de doble barrera basado en nitruros del tipo AlGa_{0.35}N/GaN resolviendo las ecuaciones acopladas de Schrödinger-Poisson. Se toman en cuenta rigurosamente los efectos de polarización que junto con el desplazamiento de las bandas de conducción en las interfaces de los semiconductores forman el gas bidimensional de electrones a uno de los lados de la doble barrera y una región de agotamiento al otro lado. El estudio se hace variando sistemas de barreras y pozos entre 1.0 y 2.4 nm, y concentraciones de aluminio entre 10% y 100%. Los autores prueban que al aumentar la concentración de aluminio los campos internos de polarización, la concentración

de electrones confinados del lado del emisor y la región de agotamiento al lado del colector aumenta [33].

Hace unos años, en 2019, se reportó un DTR crecido por deposición de vapor químico metalorgánico sobre sustrato de záfiro y testado en repetibilidad con resistencia diferencial negativa (RDN) para voltaje directo e inverso a bajas temperaturas. Las dimensiones de pozo y barreras dobles fueron de 2 nm, las capas espaciadoras de 6 nm, capas de 300 nm y 500 nm con dopamiento tipo n de 10^{19} cm^{-3} . Entre los resultados hallados destaca que hay un estado resonante en el pozo y que la densidad de corriente a una temperatura de 6.5 K es de 6 KA/cm^2 . Su dispositivo presenta rendimientos tan buenos como los crecidos en GaN pero es de más bajo costo. Aunque para operaciones a temperatura ambiente el GaN sería un mejor sustrato [34].

De lo anterior podemos concluir que el nitruro de galio GaN ha emergido como uno de los semiconductores más prometedores para aplicaciones comerciales; aunque, las dificultades en su crecimiento epitaxial fueron un limitante durante los primeros años [35]. Se presentan en diferentes fases cristalinas: wurtzita, zinc blenda y rock salt; correspondiente a sistemas cristalinos hexagonales y cúbicos. Además, destacan sus altos valores relacionados con el campo eléctrico crítico, la velocidad de saturación, la movilidad de electrones y una muy buena conductividad térmica [36].

La tecnología de nitruros es de especial interés en los campos de la microelectrónica para la manufactura de de osciladores electrónicos ultrarrápidos y en la optoelectrónica para la miniaturización de dispositivos que operen con frecuencias de oscilación dentro de la banda terahertz (THz) hasta el ultravioleta [37].

En las últimas décadas las características mencionadas han llevado a tiempos de tunelamiento del orden de los picosegundos y de los femtosegundos. La posibilidad de manipular la dinámica del transporte electrónico y combinado con la resistencia diferencial negativa (RDN) hace a los DTR atractivos para

su manufactura.

1.4 Electrostática en DTR

El problema de la electrostática en dispositivos electrónicos implica determinar tanto la densidad de electrones como el perfil del potencial electrostático de carga de manera autoconsistente. Esto es fundamental para comprender el comportamiento del dispositivo bajo diversas condiciones de operación.

Se han empleado dos técnicas principales para abordar este problema: el modelo de Thomas-Fermi y el modelo de Hartree.

1.4.1 Modelo de Thomas-Fermi

Este enfoque trata la densidad de electrones de una manera semiclásica. En esta aproximación, la distribución de electrones se calcula en función del potencial electrostático, pero se simplifica al considerar un enfoque continuo y evitar los detalles cuánticos. En gran parte de los trabajos teóricos sobre DTR, se asume que la carga del electrón en la región del pozo es cero y se asume la aproximación de Thomas-Fermi en las regiones del emisor y del colector.

Según Goud en 2011 es un modelo rápido pero no preciso [\[38\]](#).

En esta tesis de maestría el autor realiza el comparativo entre el modelo de Thomas-Fermi y el modelo de Hartree para un diodo de tunelamiento resonante de doble barrera basado en arsenuros del tipo AlGaAs/GaAs/AlGaAs. Presenta el fondo de la banda de conducción y las energías resonantes para un voltaje aplicado en los contactos de 0.175 V. Los autovalores que obtiene dentro del pozo son de 4.5 meV para el modelo semiclásico y 7.9 meV para el modelo cuántico; según Goud el desplazamiento hacia arriba para el resultado de Hartree se debe a la presencia de carga en el pozo que empuja el borde de la banda de conducción y el nivel de resonancia hacia arriba en contra del

voltaje aplicado que intenta tirarlos hacia abajo.

En otro trabajo, Bowen y colaboradores en 1997 desarrollaron una simulación cuantitativa de un diodo de tunelamiento resonante de doble barrera $InAlAs/InGaAs/InAlAs$ comparando la aproximación de Thomas-Fermi con el modelo cuántico de Hartree y probaron que estas consideraciones son buenas para muchos de estos dispositivos [39].

Los investigadores presentaron perfiles de potencial y energías resonantes dentro del pozo para dos tipos de voltaje: 0.27 V y 0.7 V. Para el primer voltaje estas energías fueron de 0.19 eV para el modelo cuántico; y 0.184 eV para el modelo semiclásico.

Para el segundo voltaje las energías resonantes fueron de -0.002 eV y 0.26 eV para el modelo cuántico; mientras que para el modelo semiclásico fueron de 0.009 eV y 0.27 eV.

Para el voltaje de 0.27 V el fondo de la banda de conducción del lado del emisor, E_{CE} , fue de 0.164 eV para el modelo cuántico y 0.166 eV para el modelo semiclásico. Cuando el voltaje se aumentó a 0.7 V para ambas aproximaciones el E_{CE} coincide y fue de 0.164 eV.

1.4.2 Modelo de Hartree

En este modelo, se resuelve de manera autoconsistente la distribución de carga cuántica con el potencial electrostático. Esto implica resolver iterativamente las ecuaciones de Poisson y Schrödinger para obtener una solución que sea consistente en ambos contextos: el electrostático y el cuántico. Aunque este enfoque es más complejo y requiere más tiempo computacional, produce resultados mucho más precisos, que suelen coincidir mejor con los datos experimentales. Esto lo hace indispensable para el diseño y análisis detallado de dispositivos electrónicos donde los efectos cuánticos no pueden ser ignorados.

En síntesis, ambos modelos tienen sus usos específicos, dependiendo de los requisitos de precisión y los recursos computacionales disponibles. El modelo de Thomas-Fermi es adecuado para situaciones que requieren cálculos rápidos y menos detallados, mientras que el modelo de Hartree es preferible para un análisis profundo y preciso.

1.5 Objetivo

El objetivo de esta investigación es realizar un estudio comparativo entre diodos de tunelamiento resonante de doble barrera basados en nitruros (AlN/GaN) y otros basados en la combinación de nitruros y óxidos (AlN/ZnO y AlGaN/ZnO) dada su versatilidad en aplicaciones nanotecnológicas.

1.6 Descripción general de la tesis

El presente manuscrito está organizado de la siguiente manera:

En el capítulo 2 se presenta el marco teórico general que fundamenta la investigación.

En el capítulo 3 se discute el modelamiento del dispositivo, las etapas computacionales realizadas para el cálculo del perfil de la banda de conducción y su respectiva descripción cuántica.

En el capítulo 4 se organizan los resultados obtenidos mediante el software COMSOL multiphysics 6.1 y se comparan con los obtenidos en la investigación hecha por Tyler Growden [40](#).

1.7 Referencias

- [1] Johnson W. C.; Parson J. B.; Crew M. C. **Nitrogen Compounds of Gallium**, J. Phys. Chem., 1931, 36, 2588-2594.

-
- [2] Maruska H. P.; Tietjen J. J. **The preparation and properties of vapor-deposited single-crystal-line GaN**, Appl. Phys. Lett., 1969, 15, 327.
- [3] Maruska H. P.; Stevenson D. A. **Violet luminescence of Mg-doped GaN**, Appl. Phys. Lett., 1973, 22, 6.
- [4] Amano H.; Sawaki N.; Akasaki I.; Toyoda Y. **Metalorganic vapor phase epitaxial growth of a high quality GaN film using an AlN buffer layer**, Appl. Phys. Lett., 1986, 48, 353.
- [5] Amano H.; Kito M.; Hiramatsu K.; Akasaki I. **P-Type conduction in Mg-doped GaN treated with low-energy electron beam irradiation (LEEBI)**, Jpn. J. Appl. Phys., 1989, 28(12), L2112-L2114.
- [6] Nakamura S.; Mukai T.; Senoh M. **High power GaN P-N junction blue-light-emitting diodes**, Jpn. J. Appl. Phys., 1991, 30(12A), L1998-L2001.
- [7] Nakamura S.; Mukai T.; Senoh M.; Iwasa N. **Thermal annealing effects on P-type Mg-doped GaN films**, Jpn. J. Appl. Phys., 1992, 31(2B), L139-L142.
- [8] Nakamura S.; Senoh M.; Nagahama S.; Iwasa N.; Yamada T.; Matshushita T.; Kiyoki H.; Sugimoto Y. **InGaN-based multi-quantum-well-structure laser diodes**, Jpn. J. Appl. Phys., 1996, 35(1B), L74-L76.
- [9] Mei Y.; Weng G.; Zhang B.; Liu J.; Hofmann W.; Ying L.; Zhang J.; Li Z.; Yang H.; Kuo H. **Quantum dot vertical-cavity surface-emitting lasers covering the ‘green gap’**, Light: Science & Applications. 2017, 6, e16199.
- [10] Zhang Z.; Kushimoto M.; Sakai T.; Sugiyama N.; Schowalter L. J.; Sasaoka C.; Amano H. **A 271.8 nm deep-ultraviolet laser diode for room temperature operation**, Appl. Phys. Express, 2019, 12, 124003.

-
- [11] Minimala N.S.; Peter a. J. **Nonlinear Optical Rectification of Confined Exciton in a ZnO/ZnMgO Strained Quantum Dot**, *J. Nano-electron. Phys.* 2012, 4, 04004.
- [12] Gu Z.; Li Z.; Liang J.; Tian H.; Jiang H.; Li G.; Tang H. **Linear and non-linear optical properties in wurtzite MgZnO/ZnO double quantum wells: Roles of external electric and magnetic fields**, *Micro and Nanostructures.* 2022, 169, 207341.
- [13] Carlotti G.; Socino G.; Petri A.; Verona E. **Acoustic investigation of the elastic properties of ZnO films**, *Appl. Phys. Lett.*, 1987, 51, 1889.
- [14] Zhang B. P.; Binh N. T.; Wakatsuki K.; Liu C. Y.; Segawa Y. **Growth of ZnO/MgZnO quantum wells on sapphire substrates and observation of the two-dimensional confinement effect**, *Appl. Phys. Lett.*, 2005, 86, 032105.
- [15] Benz J.; Eisermann S.; Klar P. J.; Meyer B. K.; Detchprom T.; Wetzell C. **GaN/ZnO and AlGaN/ZnO heterostructure LEDs: growth, fabrication, optical and electrical characterization**, *Mater. Res. Soc.* 2010, 1201, H01-08.
- [16] Sawai Y.; Hazu K.; Chichibu S. F. **Surface stoichiometry and activity control for atomically smooth low dislocation density ZnO and pseudomorphic MgZnO epitaxy on a Zn-polar ZnO substrate by the helicon-wave-excited-plasma sputtering epitaxy method**, *J. Appl. Phys.* 2010, 108, 063541.
- [17] Hjort F.; Hashemi E.; Adolph D.; Ive T.; Bäckcke O.; Halvarsson M.; Haglund A. **Vertical electrical conductivity of ZnO/GaN multilayers for application in distributed Bragg reflectors**, *IEEE J. Quantum Electron.* 2018, 54, 4.
- [18] Bohm D. **Quantum theory**, New York, Prentice-Hall, 1951.
- [19] Iogansen L. V. **The possibility of resonance transmission of electron in crystals**, *J. Exptl. Theoret. Phys.* 1964, 45, 207-213.

-
- [20] Landauer R. **Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices**, Philosophical Magazine, 1970, 21(172), 863-867.
- [21] Tsu R.; Esaki L. **Tunneling in a finite superlattice**, Appl. Phys. Lett., 1973, 22, 562.
- [22] Sollner T.C.L.G.; Goodhue W. D.; Tannenwald P. E.; Parker C. D.; Peck D. D. **Resonant tunneling through quantum wells at frequencies up to 2.5 THz**, Appl. Phys. Lett., 1983, 43, 588.
- [23] Valušis G.; Lisauskas A.; Yuan H.; Knap W.; Roskos H. G. **Roadmap of Terahertz Imaging 2021**, Sensors, 2021, 21, 4092.
- [24] Brown E. R.; Sollner T. C. L. G.; Parker C. D.; Goodhue W. D.; Chen C. L. **Oscillations up to 420 GHz in GaAs/AlAs resonant tunneling diodes**, Appl. Phys. Lett., 1989, 55, 1777.
- [25] Brown E. R.; Söderström J. R.; Parker C. D.; Mahoney L. J.; Molvar K. M. **Oscillations up to 712 GHz in InAs/AlSb resonant tunneling diodes**, Appl. Phys. Lett., 1991, 58, 2291.
- [26] Liou W.; Roblin P. **High Frequency Simulation of Resonant Tunneling Diodes**, IEEE Trans. Electron Devices, 1991, 38, 2006-2012.
- [27] Kikuchi A.; Bannai R.; Kishino K. **AlGaN resonant tunneling diodes grown by rf-MBE**, phys. stat. sol., 2001, 188(1), 187-190.
- [28] Indlekofer K. M.; Doná E.; Malindretos J.; Bertelli M. **Modelling of polarization charge-induced asymmetry of I-V characteristics of AlN/GaN-based resonant tunneling structures**, Phys. stat. sol., 2002, 234(3), 769-772.
- [29] Sacconi F.; Di Carlo A.; Lugli P. **Modeling of GaN-based resonant tunneling diodes: influence of polarization fields**, Phys. stat. sol., 2002, 190(1), 295-299.

- [30] Belyaev A. E.; Makarovskiy O.; Walker D. J.; Eaves L.; Foxon C. T.; Novikov S. V.; Zhao L. X.; Dykeman R. I.; Danylyuk S. V.; Vitusevich S. A.; Kappers M. J.; Barnard J. S.; Humphreys C. J. **Resonance and current instabilities in AlN/GaN resonant tunneling diodes**, *Physica E.*, 2004, 21, 752-755.
- [31] Vashaei Z.; Bayram C.; Razeghi M. **Demonstration of negative differential resistance in GaN/AlN resonant tunneling diodes at room temperature**, *Appl. Phys. Lett.*, 2010, 107, 083505.
- [32] Li D.; Shao J.; Tang L.; Edmunds C.; Gardner G.; Manfra M. J.; Malis O. **Temperature-dependence of negative differential resistance in GaN/AlGaIn resonant tunneling structures**, *Semicond. Sci. Technol.*, 2013, 28, 074024.
- [33] Rached A.; Bhourri A.; Sakr S.; Lazzari J.-L.; Belmabrouk H. **Self-consistent vertical transport calculations in $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ based resonant tunneling diode**, *Superlattices and Microstructures*, 2016, 91, 37-50.
- [34] Wang D.; Chen Z. Y.; Wang T.; Yang L. Y.; Sheng B. W.; Liu H. P.; Su J.; Wang P.; Rong X.; Cheng J. Y.; Shi X. Y.; Tan W.; Guo S. P.; Zhang J.; Ge W. K.; Shen B.; Wang X. Q. **Repeatable asymmetric resonant tunneling in AlGaIn/GaN double barrier structures grown on sapphire**, *Appl. Phys. Lett.* 2019, 114, 073503.
- [35] Ellinghaus P. **Simulation of GaN/AlGaIn heterostructures for a HEMT simulator**. [Tesis de maestría]. L'Aquila: University of L'Aquila; 2011.
- [36] Roccaforte F.; Leszczynski M. **Nitride semiconductor technology: power electronics and optoelectronic devices**, Weinheim, Wiley-VCH, 2020, p. 20.
- [37] Xie D.; Ren Q. Z.; Liu Y.; Talwar D. N.; Wan L.; Zhang X.; Mei T.; Ferguson I. T.; Feng Z. C. **Influence of high-temperature AlN in-**

-
- intermediate layer on the optical properties of MOCVD grown AlGaIn films**, Mater. Res. Express, 2017, 4, 025903.
- [38] Goud A. A. **NEGF Simulation of electron transport in resonant tunneling and resonant interband tunneling diodes**. [Tesis de maestría]. Indiana: Purdue University; 2011.
- [39] Bowen R. C.; Klimeck G.; Lake R. K.; Frensley W. R.; Moise T. **Quantitative simulation of a resonant tunneling diode**, J. Appl. Phys. 1997, 81, 3207.
- [40] Growden T. **III-V Tunneling based quantum devices for high frequency applications**. [Tesis doctoral]. Columbus: The Ohio State University; 2016.

Marco Teórico General

Una simulación de los diodos de tunelamiento resonante (DTR), lo más precisa que se pueda teniendo en cuenta los recursos computacionales y el tiempo de procesamiento, es de vital importancia para diseñar dispositivos operativos y de completa fiabilidad. Este modelamiento es esencialmente un intento de explorar diversas consecuencias mecánico-cuánticas de heterocapas de baja dimensión basadas en nitruros y óxidos. El DTR es un sistema abierto conformado por una serie de heteroestructuras semiconductoras adyacentes. Un conjunto de ellas, las más externas, se modelan como un reservorio de electrones debido al dopamiento de impurezas tipo-n que se incorporan; y el otro conjunto, embebidas en el corazón de las capas epitaxiales, se denomina la región activa. Las capas espaciadoras cumplen la función de proteger la región activa de impurezas y garantizar que el transporte sea por tunelamiento resonante. Los contactos metálicos en los DTR están hechos típicamente de metales nobles, como oro (Au) o platino (Pt) u otras aleaciones [1] debido a las propiedades únicas de estos metales.

Los metales nobles tienden a ser químicamente inertes, lo que significa que son relativamente resistentes a la corrosión y la oxidación en condiciones normales. Y además, son excelentes conductores de electricidad y calor. Como se dijo en el capítulo anterior, en la región activa es que los parámetros físicos implementados y calculados toman un valor significativo ya que son responsables de los fenómenos optoelectrónicos y microelectrónicos que se destinan para las prestaciones del dispositivo. La misma es de dimensiones nanométricas muy pequeñas en comparación con el resto del dispositivo y en nuestra investigación consiste de un único pozo cuántico sandwichado por dos barreras de energía potencial como se

muestra en la figura 2.1.

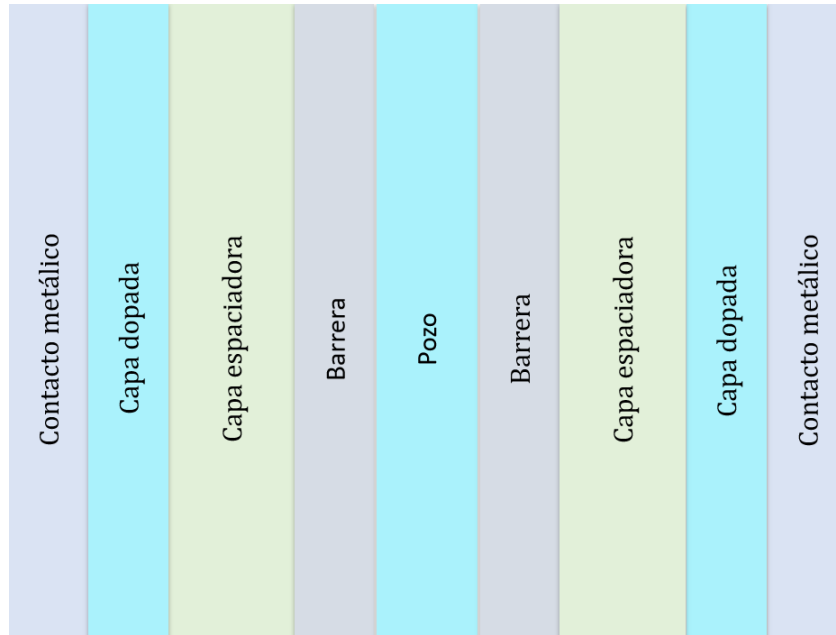


Figura 2.1: Sistema de heterocapas crecidas epitaxialmente.

A continuación se presentan las ecuaciones que soportan el modelo teórico junto con su respectiva descripción física; insumos decisivos que fortalecen la heurística del presente trabajo.

2.1 Ecuación de Poisson

Una forma general de analizar el campo eléctrico en un material es considerar dos tipos de densidades de cargas: las densidades de cargas libres ρ_f y las densidades de cargas ligadas ρ_b . A nivel microscópico, estas cargas ligadas pueden ser desplazadas por un campo eléctrico externo y resultar en dipolos eléctricos inducidos. Estos dipolos eléctricos inducidos son pa-

res de cargas positivas y negativas que de alguna manera se alinean con el campo eléctrico. Esto resulta en un campo eléctrico dentro de un material dieléctrico que es diferente al del espacio libre. Las cargas eléctricas libres, al contrario de las ligadas, son todas aquellas a las que se le puede controlar su distribución desplazándolas, esparciéndolas e introduciéndolas sobre o dentro de los materiales [2].

Para obtener una descripción macroscópica de este fenómeno, es conveniente introducir un campo vectorial de polarización \vec{P} , tal que,

$$\rho_b = -\nabla \cdot \vec{P}, \quad (2.1)$$

entonces la forma diferencial de la ley de Gauss quedaría,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= \frac{\rho_f + \rho_b}{\epsilon_0}, \\ \nabla \cdot \vec{E} &= \frac{\rho_f}{\epsilon_0} - \frac{\nabla \cdot \vec{P}}{\epsilon_0}, \\ \nabla \cdot \vec{E} + \frac{\nabla \cdot \vec{P}}{\epsilon_0} &= \frac{\rho_f}{\epsilon_0}, \\ \nabla \cdot \vec{D} &= \rho_f. \end{aligned} \quad (2.2)$$

donde ϵ_0 es la constante dieléctrica en el espacio libre y $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$.

En lo siguiente se considera que los materiales en estudio son dieléctricos lineales y es una aproximación muy fuerte e importante. Es decir, la respuesta eléctrica a un campo eléctrico aplicado sigue una relación lineal entre la polarización inducida \vec{P} y el campo eléctrico aplicado \vec{E} ; lo que generalmente ocurre a bajas intensidades de campo, temperaturas moderadas y bajos niveles de estrés mecánico:

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}, \quad (2.3)$$

con χ_e es la susceptibilidad eléctrica.

Usando [2.3](#) en [2.2](#),

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{E} + \nabla \cdot (\chi_e \vec{E}) &= \frac{\rho_f}{\epsilon_0}, \\ \nabla \cdot (1 + \chi_e) \vec{E} &= \frac{\rho_f}{\epsilon_0}, \\ \nabla \cdot (\epsilon_r \vec{E}) &= \frac{\rho_f}{\epsilon_0}, \\ \nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}) &= \rho_f,\end{aligned}\tag{2.4}$$

donde $\epsilon_r = 1 + \chi_e$ es la permitividad relativa.

En términos del potencial electrostático $E = -\nabla\Phi$, lo que nos lleva a la ecuación fundamental para la electrostática en materiales dieléctricos lineales:

$$-\nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon_r \nabla\Phi) = \rho_f.\tag{2.5}$$

2.2 Polarización eléctrica

Esta magnitud macroscópica se define en términos de la polarización piezoeléctrica y la polarización espontánea:

$$P = P_{pz} + P_{sp}\tag{2.6}$$

Para aplicaciones en dispositivos, los materiales de nitruro se prefieren en la estructura cristalina de wurtzita debido a su estabilidad termodinámica a temperatura ambiente.

Cuando se crecen a lo largo de la dirección $[0001]$, estos materiales de nitruro en estructura de wurtzita experimentan una influencia significativa de la polarización interna. Dos campos principales de polarización están asociados con la red cristalina y afectan la estructura general de

las bandas de energía, y por ende, las energías y funciones de onda: la polarización espontánea, surgida de la falta de simetría de inversión en el cristal a lo largo del eje [0001], y la polarización piezoeléctrica, que resulta de la deformación del material y depende del semiconductor en contacto, que puede ser por ejemplo el sustrato de crecimiento. Estas polarizaciones generan campos internos en la estructura, lo que influye notablemente en las características de las bandas de energía.

Otra forma de explicarlo es que en la polarización espontánea la desigualdad entre los enlaces de los vecinos más cercanos, donde un enlace, a lo largo de la dirección [0001], tiene una ionicidad diferente (enlace más largo) en comparación con los otros tres, hace que los centros geométricos de la carga negativa (electrones) y la carga positiva (núcleos) no coincidan y se origine una red dipolar en estos materiales, incluso en ausencia de un campo eléctrico externo; y la polarización piezoeléctrica está asociada al desajuste de la red en la interfaz entre dos materiales [4], [5].

La polarización eléctrica es responsable de la formación de un gas bidimensional de electrones en la interfaz de la heteroestructura. Para mantener la neutralidad de la carga en el sistema, los electrones libres tenderán a compensar la carga inducida por polarización.

Esta propiedad es muy notoria en los nitruros en fase wurtzita.

Como se mencionó arriba este fenómeno da cuenta de la densidad de los momentos dipolares inducidos o permanentes en un material dieléctrico.

Un material que exhibe una distribución dipolar volumétrica conlleva la generación de una densidad volumétrica de carga en todo el espacio ocupado por dicha distribución ρ_v , y al mismo tiempo, origina una carga superficial en la interfaz ρ_s que delimita el material con su entorno. En el caso de heteroestructuras semiconductoras adyacentes de muy baja dimensionalidad se presta especial atención a ρ_s y se considera que por compensación $\rho_v = 0$.

Es en esta particularidad que la tesis de Rrustemi [3] presenta una condición de frontera asociada a la discontinuidad del campo de desplazamiento eléctrico \vec{D} en estructuras semiconductoras con campos internos de polarización:

$$n \cdot (\vec{D}_2 - \vec{D}_1) = \rho_s. \quad (2.7)$$

2.3 Gas bidimensional de electrones

Un gas bidimensional de electrones (2DEG, del inglés) en heteroestructuras semiconductoras es un sistema cuántico avanzado donde los electrones están confinados en un plano bidimensional, permitiendo alta movilidad en dos dimensiones mientras se restringe su movimiento en la tercera. Este fenómeno se logra superponiendo capas de materiales semiconductores distintos con propiedades electrónicas variadas. Las heterouniones de semiconductores basados en nitruros, como AlGa_N/Ga_N, y la interfaz AlGaAs/GaAs, han sido ampliamente exploradas por su alta movilidad de electrones [6]. La diferencia en las bandas de energía entre estos materiales crea una discontinuidad, formando un pozo cuántico en la interfaz donde los electrones quedan atrapados, resultando en propiedades electrónicas únicas aprovechadas en aplicaciones tecnológicas como los transistores de alta movilidad de electrones (HEMT, del inglés).

2.4 Ecuación de Schrödinger

Para sistemas de baja dimensionalidad, como es el caso de los diodos de tunelamiento resonante (DTR), el tratamiento cuántico se debe hacer resolviendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo ya que el hamiltoniano es independiente del tiempo y es una función de las coord-

nadas x , y , y z .

Se debe recordar que este tratamiento se realiza para electrones que se movilizan a través de todo el dispositivo. En la región activa el transporte se da por efecto tunel debido al campo eléctrico externo que se aplica. Además, la aproximación de masa efectiva es de suma importancia en este tipo de tratamientos físico-matemáticos; la cual establece que bajo ciertas condiciones los electrones y los huecos de un cristal en presencia de campos externos, y demás interacciones que se consideren, viajan a través de las heteroestructuras como si fuese una partícula libre en el vacío pero con una masa diferente, llamada *efectiva*, que por lo general no es igual a la masa del electrón pero guardan una relación de proporcionalidad.

Con esto presente tenemos que en representación de coordenadas el problema *unidimensional* de eigenvalores se puede escribir como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} + E_c(z) \right] \psi_j^{(0)}(z) = E_j^{(0)} \psi_j^{(0)}(z), \quad (2.8)$$

con m^* como la masa efectiva, \hbar la constante de Planck reducida, $E_c(z)$ es la energía potencial electrostática total que es conformada por el potencial de Hartree de la ecuación [2.5], el voltaje externo aplicado y la afinidad electrónica del material. La función de onda $\psi_j^{(0)}(z)$ debe satisfacer las condiciones de frontera que preestablece la mecánica cuántica. En el otro par de coordenadas, x y y , el movimiento de los electrones es libre, creando una subbanda de energía parabólica.

2.5 Método de elementos finitos

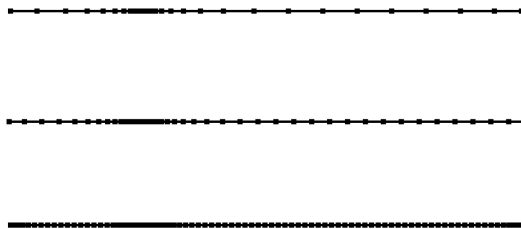


Figura 2.2: Mallado de 29, 45 y 90 elementos para un dominio unidimensional.

El Método de Elementos Finitos (MEF) constituye una técnica numérica empleada para obtener soluciones aproximadas a problemas de valores de frontera de ecuaciones diferenciales parciales (EDP) no triviales que surgen en sistemas de geometría compleja [7]. Su objetivo principal radica en transformar un problema de EDP en un sistema de ecuaciones algebraicas.

El MEF se utiliza en diferentes disciplinas de la ciencia y la ingeniería para problemas unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales. La premisa fundamental del MEF consiste en la subdivisión del dominio en elementos más pequeños como se ve en la figura 2.2, donde se resuelve la ecuación diferencial en cada uno de ellos mediante una aproximación polinómica. Por lo general el mallado se optimiza en algunas regiones con el objetivo de concentrar los recursos computacionales donde más se necesitan para obtener resultados más precisos. Posteriormente, se ensamblan las soluciones de los elementos individuales para obtener la solución global.

Considere el problema de valores en la frontera:

$$\nabla \cdot [f(\vec{r})\nabla] u(\vec{r}) + g(\vec{r})u(\vec{r}) = \lambda u(\vec{r}), \quad (2.9)$$

donde λ es un parámetro independiente de la coordenada \vec{r} . En este punto, se puede ver que la ecuación de Schrödinger es un caso particular de [2.9](#). La ecuación anterior debe comportarse bien en un a región Ω con frontera $\partial\Omega$ y satisfacer la condición de Dirichlet $u(\partial\Omega) = 0$. Multiplicando [2.9](#) por una función suave y de prueba ϕ que satisfaga además $\phi(\partial\Omega) = 0$ e integrando en toda la región indicada tenemos

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot [f(\vec{r})\nabla] u(\vec{r})\phi + g(\vec{r})u(\vec{r})\phi - \lambda u(\vec{r})\phi] d\Omega = 0,$$

reorganizando quedaría

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot [f(\vec{r})\nabla] u(\vec{r})\phi d\Omega + \int_{\Omega} (g(\vec{r}) - \lambda) u(\vec{r})\phi d\Omega = 0. \quad (2.10)$$

Recordando la propiedad vectorial $\nabla \cdot (\vec{A}v) = \vec{A} \cdot \nabla v + (\nabla \cdot \vec{A})v$, donde $\vec{A} = f(\vec{r})\nabla u(\vec{r})$ y $v = \phi$ la ecuación [2.10](#) se transforma en:

$$\int_{\Omega} f\nabla u \cdot \nabla \phi d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot (f\nabla u)\phi d\Omega + \int_{\Omega} (g - \lambda) u\phi d\Omega = 0. \quad (2.11)$$

Si usamos la primera identidad de Green

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (a\nabla b) d\Omega = \oint_{\partial\Omega} a\nabla b \cdot \hat{\mathbf{n}} d(\partial\Omega), \quad (2.12)$$

donde $\hat{\mathbf{n}}$ es un vector unitario perpendicular al diferencial de superficie. Luego entonces, si insertamos [2.12](#) en [2.11](#) obtenemos,

$$\int_{\Omega} f\nabla u \cdot \nabla \phi d\Omega + \oint_{\partial\Omega} f\nabla u \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi d(\partial\Omega) + \int_{\Omega} (g - \lambda) u\phi d\Omega = 0. \quad (2.13)$$

En problemas estacionarios, debido a la condición de flujo cero en la frontera, el segundo término en [2.13](#) se anula, por lo que finalmente quedaría:

$$\int_{\Omega} f \nabla u \cdot \nabla \phi d\Omega + \int_{\Omega} (g - \lambda) u \phi d\Omega = 0. \quad (2.14)$$

El procedimiento anterior recibe el nombre de *formulación débil*; y se usa junto con la discretización de la EDP. Esto consiste en transformar la EDP de su forma operativa diferencial en una forma integral; y en términos de discretización, las integrales se reemplazan por sumas utilizando la regla del trapecio o cualquier otra técnica de integración numérica. Esto nos permite expresar la ecuación en términos de variables que llamamos variables nodales. La solución completa corresponde a cada una de las contribuciones de cada elemento.

Finalmente, lo que resulta es un sistema de n-ecuaciones algebraicas que corresponde a los n-nodos de la discretización.

2.6 Formalismo de Landauer

La fórmula de Landauer para la corriente de túnel describe la corriente que fluye a través de una barrera de túnel en un sistema cuántico. La fórmula se basa en el formalismo de Landauer-Büttiker [\[8\]](#). Se expresa como:

$$I = \frac{e}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) [f_r(E) - f_l(E)] dE \quad (2.15)$$

I es la corriente de túnel, e es la carga elemental, \hbar es la constante reducida de Planck, $T(E)$ es la probabilidad de transmisión de un electrón con energía E a través de la barrera, $f_{l,r}(E)$ son las funciones de distribución de Fermi-Dirac para los electrodos izquierdo y derecho, respectivamente.

La integral se realiza sobre todos los niveles de energía E de los electrones involucrados en el proceso de túnel.

La fórmula de Landauer es una expresión fundamental para comprender el transporte de electrones en sistemas mesoscópicos [9], especialmente en el contexto del túnel a través de barreras. Destaca la conexión entre la probabilidad de transmisión y la corriente de túnel, enfatizando la naturaleza cuántica del transporte electrónico en tales sistemas.

A continuación haremos la demostración.

La ecuación [2.15] es conocida como la fórmula de Landauer para la corriente de tunelamiento y se usa para calcular propiedades de transporte a través de estructuras semiconductoras o sistemas moleculares.

En la mayoría de estos tipos de nanodispositivos, es razonable considerar que la dirección de crecimiento de la estructura es significativamente menor en comparación con sus direcciones transversales. Teniendo en cuenta esta consideración, la energía electrónica asociada con dichas direcciones transversales se expresa mediante,

$$\epsilon_{y,z} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_y^2 + k_z^2), \quad (2.16)$$

por lo que [2.15] se transforma en una integral lineal sobre la energía longitudinal E que en la literatura se conoce como la relación de Tsu-Esaki [10],

$$J = \frac{em^*}{2\beta\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \mathbf{T}(E) \ln \left[\frac{1 + e^{\beta(E_f - E)}}{1 + e^{\beta(E_f - E - V_a)}} \right] dE, \quad (2.17)$$

donde $J = I/S$ es la densidad de corriente, I es la corriente eléctrica, S es el área de sección transversal del dispositivo, $T(E)$ es la transmisión, E_f es el nivel de Fermi, β es $1/kT$ y V_a es la energía asociada al voltaje aplicado en los extremos del dispositivo.

2.7 Referencias

- [1] Encomendero J.; Faria F. A.; Islam S. M.; Protasenko V.; Rouvimov S.; Sensale-Rodriguez B.; Fay P.; Jena D.; Xing H. G. **New tunneling features in polar III-nitride resonant tunneling diodes**, Phys. Rev. X. 2017, 7, 041017.
- [2] Wangness R. K. **Campos electromagnéticos**, México, Limusa, 2001, p. 194.
- [3] Rrustemi B. **Calculation and characterization of electrostatic and low-field electron transport properties in GaN-on-Si MOS-HEMT transistors**. [Tesis doctoral]. Grenoble: Université Grenoble Alpes, 2022.
- [4] Saha S. **Fully self-consistent analysis of III-nitride quantum cascade structures**. J. Comput. Electron. 2016, 4, 1531-1540.
- [5] Ellinghaus P. **Simulation of GaN/AlGaN heterostructures for a HEMT simulator**. [Tesis de maestría]. L'Aquila: University of L'Aquila; 2011.
- [6] Lee S. W. **Two-Dimensional Electron Gas at SrTiO3-Based Oxide Heterostructures via Atomic Layer Deposition**, J. Nanomater. 2016, 1–9.
- [7] Logan D. L. **A first course in the finite element method**, Cengage Learning, ISBN 978-0495668251, 2016.
- [8] Paulsson M. **Non Equilibrium Greenâs Functions for Dummies: Introduction to the One Particle NEGF equations, Mesoscale and Nanoscale Physics**, cond-mat.mes-hall, 2008, pp9.
- [9] Data S. **Electronic transport in mesoscopic systems**, UK, Cambridge University Press, 1997.
- [10] Tsu R.; Esaki L. **Tunneling in a finite superlattice**. Appl. Phys. Lett. 1973, 22, 562.

Modelamiento

3.1 Introducción

En este capítulo, se describe la técnica de modelamiento utilizada y que se implementa en el software Comsol Multiphysics 6.1 [1].

Con esta técnica se estudian las características eléctricas y el transporte en diodos de tunelamiento resonante (DTR) de doble barrera. El modelo computacional se divide en dos etapas: primero se estudia la electrostática en el dispositivo teniendo en cuenta la distribución espacial de la carga y finalmente el transporte unidimensional (1D) de los portadores de carga [2].

Este estudio presta especial interés a los electrones como portadores de carga.

3.2 Electrostática

El problema de la electrostática en el sistema involucra la densidad de carga electrónica y su respectivo perfil de energía potencial E_c , que en la literatura se le denomina *potencial*, y se define como:

$$E_c(\Phi) = -(q_e\Phi + \chi), \quad (3.1)$$

donde Φ es el potencial de Hartree y χ es la afinidad electrónica y su introducción significa que la energía de referencia es la energía del vacío.

En esta investigación se hace el tratamiento semiclásico para la densidad de electrones con la aproximación de Thomas-Fermi que desarrolla Rrus-

temi en su tesis doctoral de 2022 [3] ya que como se indicó en el capítulo 1 del manuscrito nos aporta velocidad computacional; reconociendo que integrar los efectos de campos internos de polarización induce por defecto demoras de cálculo en el programa, acumulación en memoria y lentitud en el procesamiento de los datos.

En este modelo la densidad de carga electrónica en las barreras y el pozo se considera cero. La densidad de carga $n(z)$ en el emisor y el colector; y el potencial electrostático $\Phi(z)$ a través de la estructura puede ser determinada solucionando autoconsistentemente las ecuaciones de densidad de carga semiclásica de Thomas-Fermi y la de Poisson:

para z fuera de la región activa,

$$n(z) = N_c F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_c(z)}{k_B T} \right), \quad (3.2)$$

$$F_{1/2}(\eta) = \int_0^\infty \frac{E^{1/2} dE}{1 + e^{(E-\eta)}},$$

para z dentro de la región activa,

$$n(z) = 0, \quad (3.3)$$

para z en todo el dispositivo,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{D} &= \rho_f, \\ \nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}) &= \rho_f, \\ -\nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon_r \nabla \Phi) &= \rho_f \\ \rho_f &= -q_e (n(z) - N_D^+). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Donde $F_{1/2}$ es la integral de Fermi-Dirac de orden 1/2.

Las condiciones de frontera que aplicaremos para resolver la ecuación de Poisson [3.4] se conocen en la literatura como condiciones de Dirichlet y

son,

$$\begin{aligned}\Phi(z = 0) &= 0, \\ \Phi(z = L) &= V_a\end{aligned}\tag{3.5}$$

Donde V_a es el voltaje aplicado en el colector del dispositivo. En lugar de que el potencial sea nulo en la frontera del sistema, ahora el potencial se ajusta para que coincida con el voltaje externo aplicado en la frontera del sistema. Esto se hace para mantener la continuidad del potencial en todo el sistema, incluida la interfaz entre el sistema y el entorno externo. Nótese que V_a produce un campo eléctrico adicional cuya energía potencial asociada contribuye a la energía potencial total del sistema.

Las condiciones de Dirichlet se aplican en las fronteras del semiconductor para especificar el valor del potencial eléctrico en esas fronteras. Por ejemplo, en un dispositivo semiconductor como un diodo, puede haber una diferencia de potencial aplicada en las uniones p-n del dispositivo. Las condiciones de Dirichlet se utilizan para describir esta diferencia de potencial en la interfaz entre las regiones p y n.

Los términos en las ecuaciones anteriores corresponden con los de cualquier texto de física de materiales:

E_F , es el cuasinivel de Fermi

$E_C(z)$, perfil de la banda de conducción

ϵ_0 , permitividad del vacío

ϵ_r , permitividad relativa del material

N_C , densidad efectiva de la banda de conducción $2\left[\frac{m^*kT}{2\pi\hbar^2}\right]^{3/2}$

N_D^+ , concentración de dopamiento donador

3.2.1 Densidad superficial de carga

Los efectos de polarización, tanto espontánea como piezoeléctrica, se tienen en cuenta por la condición de frontera del vector de campo de desplazamiento \vec{D} entre un medio 1 y un medio 2,

$$\hat{n} \cdot (\vec{D}_2 - \vec{D}_1) = \rho_s. \quad (3.6)$$

donde \hat{n} es un vector unitario perpendicular a la interfaz

Para una interfaz de $AlGaN/GaN$ los autores [4], [5] y [6] presentan una relación entre la polarización piezoeléctrica P_{pz} , la polarización espontánea P_{sp} de los materiales en contacto y la densidad de carga ligada superficial inducida ρ_s la cual depende de la concentración x :

$$|\rho_s(x)| = |P_{sp}(Al_xGa_{1-x}N) + P_{pz}(Al_xGa_{1-x}N) - P_{sp}(GaN)|. \quad (3.7)$$

La ecuación [3.7] es válida para dos heteroestructuras cualesquiera de materiales piezoeléctricos diferentes y en contacto.

3.3 Método de Newton-Raphson

En esta sección se pretende explicar la forma en que el método de Newton-Raphson complementa el método de elementos finitos para optimizar el potencial electrostático de Hartree y construir el fondo de la banda de conducción E_C .

La resolución inicia cuando proveemos una primera suposición para el potencial electrostático Φ la cual consiste en que cada heterocapa es eléctricamente neutra ($\rho = 0$). Una vez obtenemos este primer potencial que en adelante llamaremos Φ_0 con esta primera densidad de carga que deno-

taremos ρ_0 verificamos que se cumpla la ecuación de Poisson [3.4](#) en su forma matricial (discretizada). La discretización se construye con el método de elementos finitos. Si se cumple el proceso termina; si no se cumple debemos hacer una corrección $d\Phi$ al potencial Φ_0 siguiendo el método de Newton-Raphson. Esta corrección se hace en la próxima iteración que denotaremos Φ_1 , tal que,

$$\Phi_1 = \Phi_0 + d\Phi. \quad (3.8)$$

Esta última relación debe satisfacer la ecuación de Poisson también:

$$\begin{aligned} A(\Phi_1) + \rho(\Phi_1) &= o, \\ A(\Phi_0 + d\Phi) + \rho(\Phi_0 + d\Phi) &= o, \end{aligned} \quad (3.9)$$

donde A es la discretización del primer término de la ecuación [3.4](#).

Si se hace una expansión a primer orden de $\rho(\Phi_0 + d\Phi)$ tenemos que:

$$\rho(\Phi_0 + d\Phi) = \rho(\Phi_0) + \frac{d\rho}{d\Phi}d\Phi, \quad (3.10)$$

por lo que la ecuación [3.9](#) quedaría:

$$\begin{aligned} A(\Phi_0 + d\Phi) + \rho(\Phi_0) + \frac{d\rho}{d\Phi}d\Phi &= o, \\ A(\Phi_0) + A(d\Phi) + \rho(\Phi_0) + \frac{d\rho}{d\Phi}d\Phi &= o, \\ A(\Phi_0) + \rho(\Phi_0) + [A + \frac{d\rho}{d\Phi}]d\Phi &= o, \\ A(\Phi_0) + \rho(\Phi_0) &= -[A + \frac{d\rho}{d\Phi}]d\Phi, \\ -[A + \frac{d\rho}{d\Phi}]^{-1}[A(\Phi_0) + \rho(\Phi_0)] &= d\Phi. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Nótese que la última ecuación de [3.11](#) nos da $d\Phi$ en términos del paso previo.

Esta corrección en la ecuación [3.8](#) implementada de manera recurrente nos da un nuevo potencial Φ_{j+1} ,

$$\Phi_{j+1} = \Phi_j + d\Phi. \quad (3.12)$$

Sin embargo, no es posible hacer esto indefinidamente. Hay que truncar el proceso cuando el potencial nuevo $d\Phi_n$ difiere del potencial anterior (o viejo) $d\Phi_v$ en un factor que por lo general y en la literatura científica es del orden de 10^{-6} .

Una vez se trunque el proceso y se obtenga el potencial definitivo Φ , con ayuda de la ecuación [3.1](#) se construye el perfil de la banda de conducción E_c del dispositivo. Todo el proceso comentado hasta el momento se condensa en el diagrama de flujo de la figura [3.1](#).

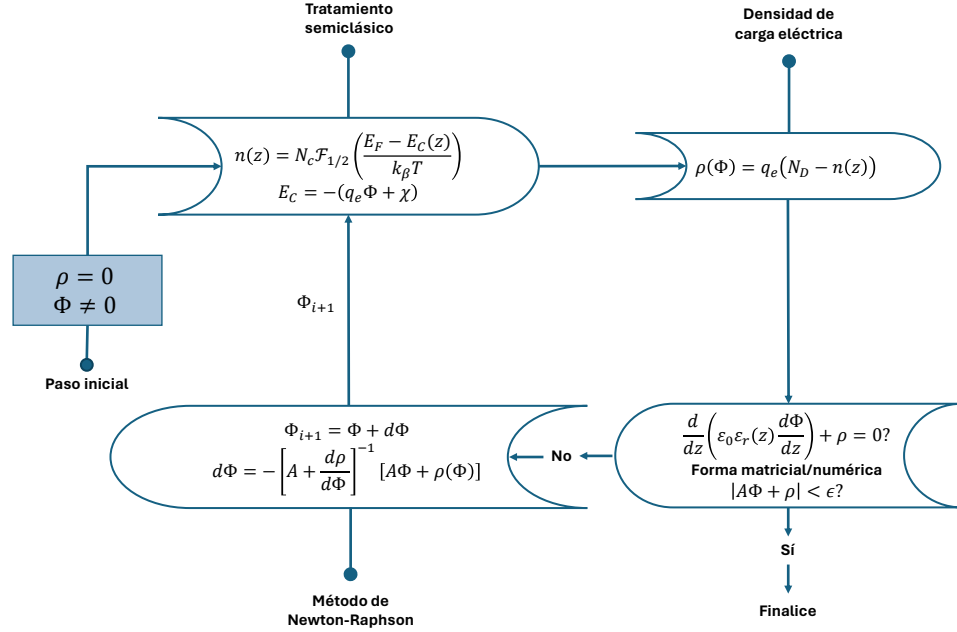


Figura 3.1: Diagrama de flujo del proceso autoconsistente para hallar el potencial E_c .

En la sección siguiente se resolverá la ecuación de Schrödinger en la aproximación de un electrón libre con masa efectiva m^* viajando a través del potencial efectivo E_c que generan las heteroestructuras que conforman el nanodispositivo.

3.4 Transmisión

En mecánica cuántica, hay una probabilidad finita de que la partícula pueda atravesar una barrera de potencial; incluso si su energía es menor que la altura de la barrera. Esta probabilidad se mide con el coeficiente

de transmisión $T(E)$:

$$T(E) = \frac{|A(r_f)|^2}{|A(r_i)|^2}, \quad (3.13)$$

donde $A(r_i)$ es la amplitud de la onda del lado del emisor y $A(r_f)$ es la amplitud de la onda del lado del colector.

Es evidente que esta magnitud se calcula a partir de la solución de la ecuación de Schrödinger,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} + E_c \right] \psi_j^{(0)}(z) = E_j^{(0)} \psi_j^{(0)}(z). \quad (3.14)$$

Si bien en el anexo al final de este trabajo se usa la relación de Fischer-Lee para hallar la transmisión $T(E)$ en términos de las funciones de Green y posteriormente llegar la fórmula de Landauer, calcular la transmisión de esta forma alternativa sigue siendo efectiva y la fórmula de Landauer para calcular la corriente eléctrica tiene completa validéz.

3.5 Referencias

- [1] COMSOL Multiphysics, v. 6.1 ; COMSOL AB: Stockholm, Sweden, 2022.
- [2] Goud A. A. **NEGF Simulation of electron transport in resonant tunneling and resonant interband tunneling diodes.** [Tesis de maestría]. Indiana: Purdue University; 2011.
- [3] Rustemi B. **Calculation and characterization of electrostatic and low-field electron transport properties in GaN-on-Si MOS-HEMT transistors.** [Tesis doctoral]. Grenoble: Université Grenoble Alpes, 2022.
- [4] Ambacher O.; Smart J.; Shealy J. R.; Weimann N. G.; Chu K.; Murphy M.; Schaff W. J.; Eastman L. F.; Dimitrov R.; Wittmer L.;

-
- Stutzmann M.; Rieger W.; Hilsenbeck J. **Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGa_{0.3}N/GaN heterostructures**, J. Appl. Phys. 1999, 85, 3222.
- [5] Roccaforte F.; Leszczynski M. **Nitride semiconductor technology: power electronics and optoelectronic devices**, Weinheim, Wiley-VCH, 2020, p. 20.
- [6] Bommalingaiah B.; Narayan G.; Vaidya R. G. **Effect of spontaneous polarization field on diffusion thermopower in AlGa_{0.3}N/GaN heterostructures**, Chem. Phys. 2023, 7, 100251.

Resultados y Discusión

Este capítulo es el corazón de esta investigación y lo conforman cuatro secciones de gran relevancia. En la primera sección se presentan tabulados los parámetros asociados a nitruros que se encontraron por revisión bibliográfica. En la segunda y tercera sección se presenta el proceso de selección y optimización que nos permite elegir los parámetros para nuestra investigación tanto para nitruros como para óxidos. Y en la última sección presentamos los resultados de nuestra investigación para sistemas de doble barrera del tipo Al/ZnO/Al y AlGAN/ZnO/AlGAN.

OBSERVACIÓN: Se debe tener en cuenta que los parámetros que aparecen resaltados de color en las tablas [4.1](#), [4.2](#) y [4.7](#) que se presentan a lo largo de este capítulo son los que se usarán en esta investigación.

4.1 Espacio de parámetros: nitruros

A continuación se muestra en tablas la lista de parámetros hallados en la literatura.

En la tabla [4.1](#) se relaciona la polarización espontánea, la permitividad relativa, la afinidad electrónica, el bandgap, el parámetro de red y la masa efectiva para diferentes semiconductores indicando su respectiva referencia. La variable x en algunas relaciones representa la concentración de aluminio usada para formar los compuestos ternarios que se indican.

Ref.	Magnitud	Semiconductor	
1	$P_s[C/m^2]$	GaN	-0.035
		AlN	-0.090
2		GaN	-0.029
		AlN	-0.081
3,4		AlGa _N	$-0.0368x - 0.0191x^2 - 0.0339$
5	ϵ_r	AlN	8.5
		GaN	8.9
		AlGa _N	$\epsilon_r(AlN)x + \epsilon_r(GaN)(1 - x)$
6	$\chi[eV]$	AlN	2.05
		GaN	4.2
		AlGa _N	$\chi(AlN)x + \chi(GaN)(1 - x)$
2	$E_g[eV]$	AlN	6.2
		GaN	3.39
6		AlN	6.2
		GaN	3.4
7		AlGa _N	$E_g(AlN)x + E_g(GaN)(1 - x) - x(1 - x)$
8	$a[nm]$	GaN	0.3189
		AlN	0.3112
4		AlGa _N	$0.31986 - 0.00891x$
2,5,8	$m^*[m_e]$	GaN	0.2
		AlN	0.32
1		AlGa _N	$m^*(AlN)x + m^*(GaN)(1-x)$

Tabla 4.1: Polarización espontánea P_s , permitividad relativa ϵ_r , afinidad electrónica χ , brecha de banda prohibida E_g , parámetro de red a y masa efectiva m^* para GaN, AlN y AlGa_N.

Del mismo modo, la tabla 4.2 presenta formas alternativas de relacionar la polarización piezoeléctrica y la densidad superficial de carga inducida en la interfaz de un compuesto ternario Al(In)Ga_N y el binario GaN. Mientras no se encuentre un artículo como el de los muy citados Fiorentini y/o Bernardini que tiene en cuenta efectos

no lineales de P_p en su estudio ab initio por funcional de la densidad [4] usaremos la forma estándar de calcular P_p para cualesquier semiconductores en contacto que Ellinghaus y Li presentan [1] [10]. Además, se tabulan constantes elásticas que dan cuenta de la deformación de un material semiconductor bajo la acción de campos externos. Las constantes elásticas son parámetros que se utilizan en el contexto de la elasticidad piezoeléctrica, que describe la capacidad de ciertos materiales para generar una carga eléctrica cuando se someten a tensiones mecánicas, o para deformarse cuando se aplican campos eléctricos. Estas constantes son específicas para un material piezoeléctrico particular y describen su comportamiento en respuesta a un estímulo mecánico o eléctrico.

Nótese que ϵ da cuenta del desajuste basal de la red en la interfaz y depende de los parámetros de red de los materiales en contacto. En ningún momento debe confundirse con la permitividad relativa ϵ_r .

Ref.	Magnitud	Interfaz		
4	$P_p[C/m^2]$	AlGa _N /Ga _N	-1.808 ϵ +5.624 ϵ^2 , $\epsilon < 0$ -1.808 ϵ -7.888 ϵ^2 , $\epsilon > 0$ $\epsilon=(a_{GaN} - a(x))/a(x)$ $a(x)=a_{AlGaN}(x)$	
1, 10	$P_p[C/m^2]$	Al(In)Ga _N /Ga _N	$2\epsilon(e_{31} - e_{33}C_{13}/C_{33})$ $\epsilon=(a_{GaN} - a(x))/a(x)$ $a(x)=a_{Al(In)GaN}(x)$	
11	e_{33}	AlN	1.67	
	e_{33}	GaN	0.75	
	e_{31}	AlN	-0.67	
	e_{31}	GaN	-0.44	
	C_{13}	AlN	115	
	C_{13}	GaN	117	
	C_{33}	AlN	372	
	C_{33}	GaN	400	
	2	e_{33}	AlN	1.79
		e_{33}	GaN	1.27
		e_{31}	AlN	-0.5
		e_{31}	GaN	-0.35
		C_{13}	AlN	108
		C_{13}	GaN	106
C_{33}		AlN	373	
C_{33}		GaN	398	
12	e_{33}	AlGa _N	0.73x+0.73	
	e_{31}	AlGa _N	-0.11x-0.49	
	C_{13}	AlGa _N	5x+103	
	C_{33}	AlGa _N	-32x+405	
12, 13	$\rho_s[C/m^2]$	AlGa _N /Ga _N	-0.1063	

Tabla 4.2: Polarización piezoeléctrica P_p y densidad superficial de carga inducida ρ_s para la interfaz AlGa_N/Ga_N.

4.2 Optimización de parámetros: nitruros

En esta sección se presentan los primeros cálculos realizados para semiconductores del grupo III-V. Enseguida se hace una descripción del sistema físico sobre el que calcularemos, la malla de puntos usada y finalmente los resultados obtenidos; optimizados y listos para implementar en nuestra investigación.

4.2.1 Sistemas de doble barrera

A continuación se reproducen algunos cálculos de la tesis doctoral de Tyler Growden para sistemas de doble barrera basados en nitruros [14] presentada en 2016 con los parámetros indicados anteriormente en las tablas 4.1 y 4.2.

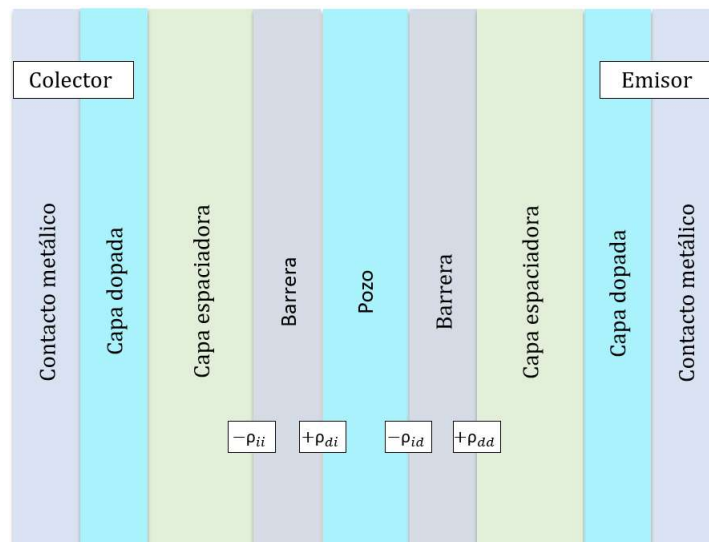


Figura 4.1: Diseño de heterocapas del dispositivo. En las interfaces se indican las densidades de cargas superficiales ρ_{ii} , ρ_{di} , ρ_{id} y ρ_{dd} .

Se estudia el sistema presentado en la figura 4.1 que está conformado por una capa central que hace las veces del pozo de potencial, dos

capas adyacentes que serán las barreras de potencial, dos capas espaciadoras cuyo propósito es controlar la difusión de impurezas a la región activa a menos que sea por tunelamiento cuántico, dos capas dopadas que para nuestros intereses será con dopamiento tipo n y los respectivos contactos metálicos que hacen las veces de los electrodos. Se considera que el crecimiento epitaxial se hace de derecha a izquierda por lo que las capas a la derecha las denominaremos capas del lado del emisor y las capas de la izquierda capas del lado del colector. En la región activa de dos barreras y un pozo de potencial se forman cuatro interfaces entre AlGa_N/Ga_N o Ga_N/AlGa_N y por tanto cuatro densidades superficiales de carga inducida que observadas de izquierda a derecha denotaremos como ρ_{ii} , ρ_{di} , ρ_{id} , ρ_{dd} y son susceptibles de un proceso de optimización.

El primer reto que enfrentamos es conocer completamente las dimensiones del dispositivo y luego las polarizaciones que Growden utiliza. Téngase presente que en adelante L_w es el ancho del pozo, L_b el ancho de las barreras, L_{se} el ancho de la capa espaciadora del lado del emisor, L_{sc} el ancho de la capa espaciadora del lado del colector, L_{de} el ancho de la región dopada del lado del emisor, L_{dc} el ancho de la región dopada del lado del colector en nm, A el área de la sección transversal del dispositivo en μm^2 , n_{de} y n_{dc} es el dopamiento tipo n del lado del emisor y del colector en cm^{-3} .

SISTEMA 1 - AlN/GaN/AlN

En este sistema los parámetros usados y asociados a las dimensiones, el dopamiento y las polarizaciones son:

$$L_b = 2 \text{ nm}$$

$$L_w = 3 \text{ nm}$$

$$L_s = 10 \text{ nm}$$

$$n_d = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

$$P_s(\text{GaN}) = -0.035 \text{ C/m}^2$$

$$P_s(\text{AlN}) = -0.090 \text{ C/m}^2$$

$$P_p(\text{AlN}) = -0.051 \text{ C/m}^2.$$

Se debe recordar que las polarizaciones se toman de Ellinghaus [1] y Fiorentini [4] como se resalta en las tablas anteriores; y son optimizadas a través de la densidad superficial de carga ρ_s como se indica posteriormente.

En la tesis de Growden no hay información explícita sobre el ancho de las capas dopadas L_{dc} y L_{de} ; sin embargo, midiendo las dimensiones sobre los perfiles del potencial que se presentan en la figura 4.2 a +18 V se encontró que:

$$L_{dc} = 73 \text{ nm}$$

$$L_{de} = 84 \text{ nm.}$$

En esta figura la curva verde es el perfil que reporta Growden y la curva rosada es la calculada en esta investigación. Se pudo determinar que la altura de las barreras calculadas por Growden T. son de 2.9394 eV y 3.0033 eV; mientras que las calculadas en esta investigación son de 2.9472 eV y 3.0412 eV.

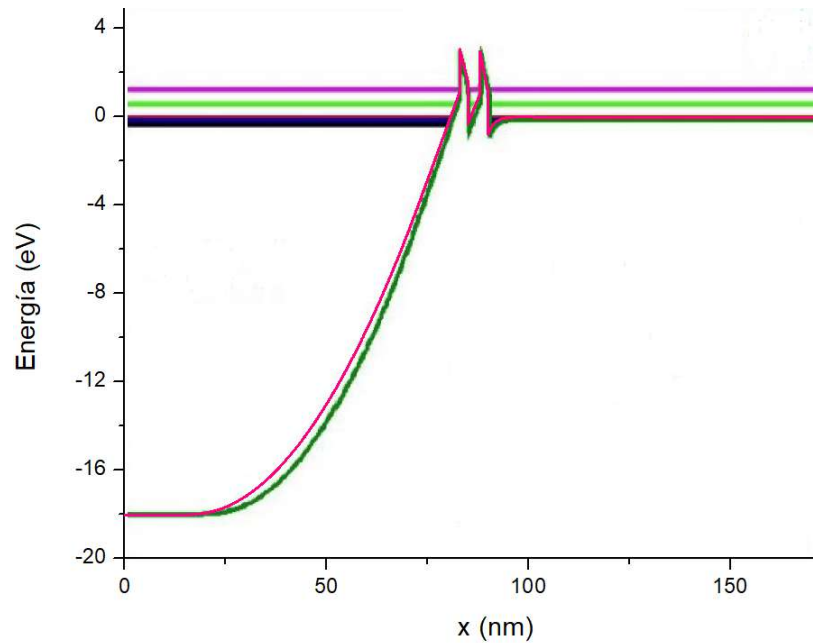


Figura 4.2: Potencial a 18 V del sistema 1. La curva verde la reporta Growden y la curva rosada se calcula en este trabajo. Las líneas horizontales son los autovalores que presenta Growden: 0.016 eV, 0.65 eV y 1.28 eV.

Todo lo anterior se hizo con el objetivo de coleccionar todos los parámetros necesarios para calcular figuras, tanto la del potencial como la de transmisión, que como se ha indicado el investigador estadounidense no presenta explícitamente en los documentos que publica.

4.2.2 Malla

Como se señaló en capítulos anteriores las ecuaciones diferenciales no lineales (Poisson, Schrödinger) se resuelven numéricamente por el método de elementos finitos.

El mallado para resolver el problema por este método se tomó extremadamente fino con 10003 elementos sobre el dominio total que es de 184 nm y es equivalente a las dimensiones del dispositivo.

4.2.3 Resultados

En esta etapa se presentan perfiles del potencial asociados a la banda de conducción para 0 V.

Para reproducir figuras de Tyler [14] se variaron las polarizaciones y se optimizaron cada una de las densidades superficiales de carga ρ_s de la Tabla 4.2, así:

ρ_s [C/m ²]	optimización	
ρ_{ii}	$1.050\rho_s$	-0.1117
ρ_{di}	$-1.050\rho_s$	0.1117
ρ_{id}	$1.17\rho_s$	-0.12447
ρ_{dd}	$-1.3\rho_s$	0.1383

Tabla 4.3: Optimización de la densidad superficial de carga inducida ρ_s para las interfaces de AlGa_{0.3}N/GaN.

Nótese que ρ_s se calcula con las polarizaciones de los semiconductores mediante la ecuación [3.7].

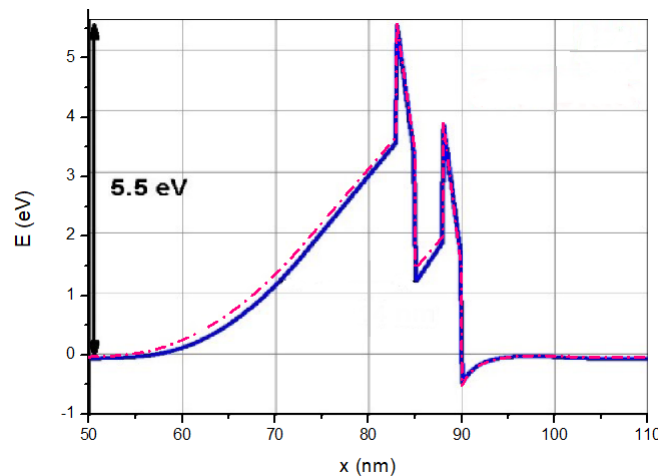


Figura 4.3: Potencial a 0 V para $P_s(\text{AlN}) = -0.090 \text{ C/m}^2$, $P_s(\text{GaN}) = -0.029 \text{ C/m}^2$.

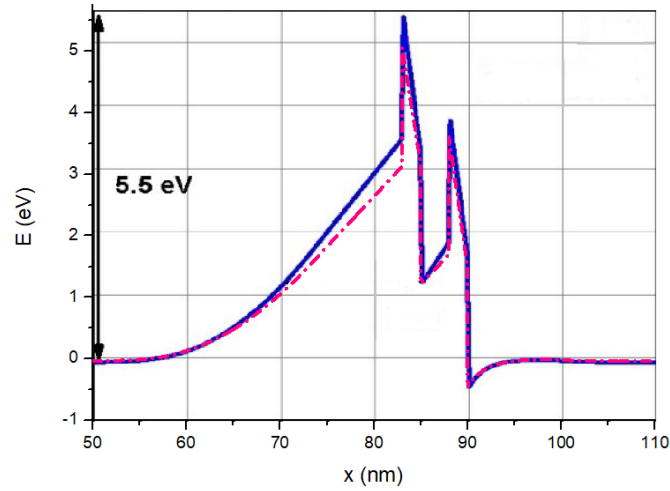


Figura 4.4: Potencial a 0 V para $P_s(\text{AlN}) = -0.081 \text{ C/m}^2$, $P_s(\text{GaN}) = -0.035 \text{ C/m}^2$.

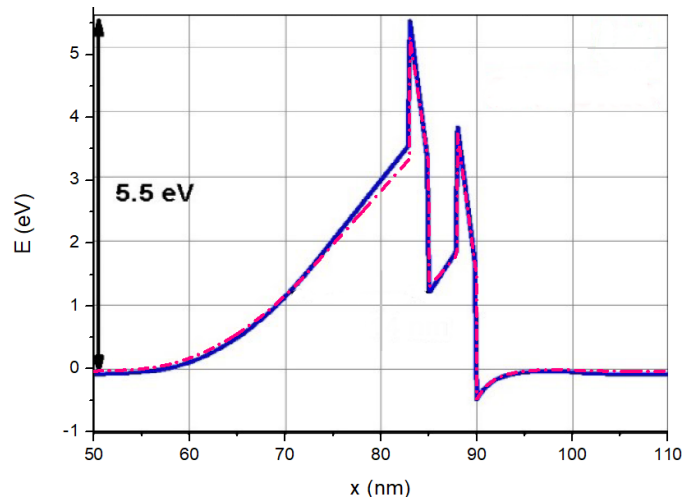


Figura 4.5: Potencial a 0 V para $P_s(\text{AlN}) = -0.081 \text{ C/m}^2$, $P_s(\text{GaN}) = -0.029 \text{ C/m}^2$.

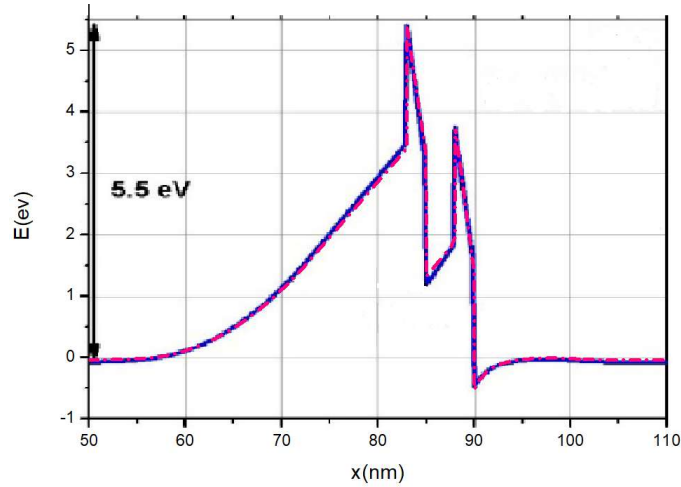


Figura 4.6: Potencial a 0 V para $P_s(\text{AlN}) = -0.090 \text{ C/m}^2$, $P_s(\text{GaN}) = -0.035 \text{ C/m}^2$.

En la figura 4.3, 4.4, 4.5 y 4.6 se observa el perfil del potencial a 0 V para diferentes combinaciones de polarización espontánea y piezoeléctrica reportadas en la literatura; la línea azul y continua corresponde a la que presenta Growden y la curva rosada segmentada corresponde a los cálculos hechos en este trabajo.

Es claro que de todas las que mejor se ajustan (luego de optimización) son las de la figura 4.6. Para estas, las alturas de las barreras de potencial reportadas por Growden son de 3.7 eV y 5.5 eV, al igual que las obtenidas.

Se observa que cuando el sistema está en equilibrio los perfiles de la banda de conducción en ambas investigaciones se ajustan correctamente. Además, los campos internos forman un pozo de potencial triangular del lado del emisor que conforman una región de acumulación de electrones que se conoce como gas bidimensional de electrones (2DEG, del inglés). Esta región se forma porque a ese lado la heteroestructura que forma la barrera tiene una densidad superficial de carga eléctrica positiva y atrae electrones hasta dicho pozo triangular y externo.

Las barreras no son simétricas porque la distribución de cargas a

lo largo del dispositivo inducen un potencial eléctrico o de Hartree asimétrico como se ve en la figura 4.7.

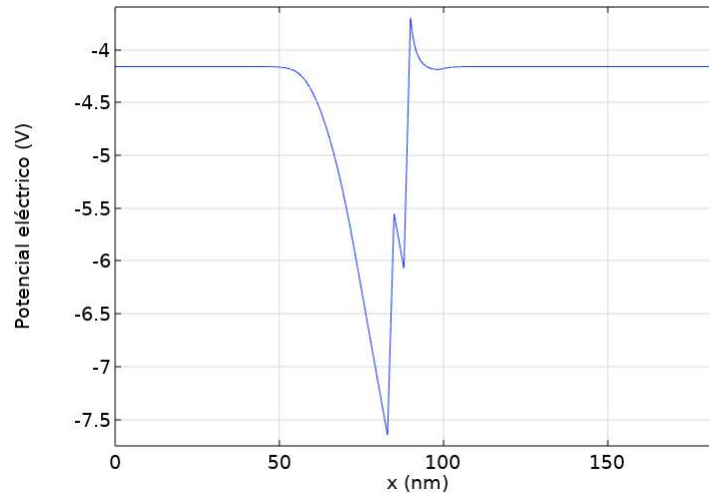


Figura 4.7: Potencial eléctrico a 0 V calculado para el sistema 1.

Para la transmisión se hace un barrido paramétrico sobre la energía con pasos de 0.0005 eV sobre un intervalo que es determinado por el potencial E_c . Los resultados obtenidos se comparan con los presentados por Tyler Growden.

En la tabla 4.4 se encuentran los autovalores asociados a los picos de la curva de transmisión de la figura 4.8 y se hace un comparativo entre los cálculos realizados aquí que son de color morado y los realizados en la tesis de Growden que son de color rojo. Se observa que hay dos autoestados dentro del pozo de potencial que corresponden a los picos en la curva de transmisión.

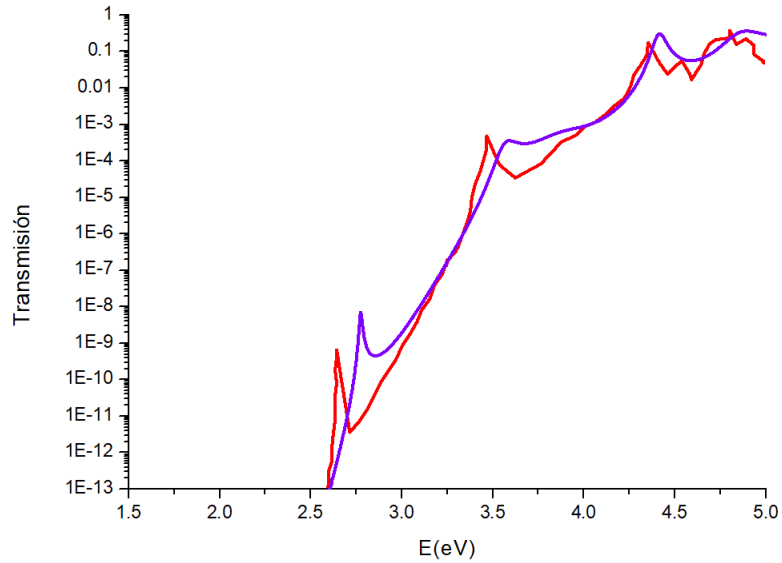


Figura 4.8: Transmisión a 0 V. La curva roja es de Growden y la curva morada se calcula en este trabajo para el sistema 1.

E_n (eV)	Growden [14]	Esta investigación
E_0	2.6528	2.786
E_1	3.4764	3.604

Tabla 4.4: Autovalores del sistema 1 para 0 V calculados por Growden y en esta investigación.

SISTEMA 2 - AlN/GaN/AlN

Continuando con este proceso de verificación y optimización hicimos cálculos sobre otro de los sistemas que presenta Tyler en su tesis de 2016 del tipo AlN/GaN.

El sistema elegido tiene las siguientes dimensiones:

$$L_b = 2 \text{ nm}$$

$$L_w = 4 \text{ nm}$$

$$L_{sc} = 6 \text{ nm}$$

$$L_{se} = 12 \text{ nm}$$

$$\begin{aligned}
L_{dc} &= 100 \text{ nm} \\
L_{de} &= 300 \text{ nm} \\
n_{dc} &= 8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3} \\
n_{de} &= 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3} \\
P_s(\text{GaN}) &= -0.035 \text{ C/m}^2 \\
P_s(\text{AlN}) &= -0.090 \text{ C/m}^2 \\
P_p(\text{AlN}) &= -0.051 \text{ C/m}^2.
\end{aligned}$$

Las polarizaciones se toman de Ellinghaus [1] y Fiorentini [4].

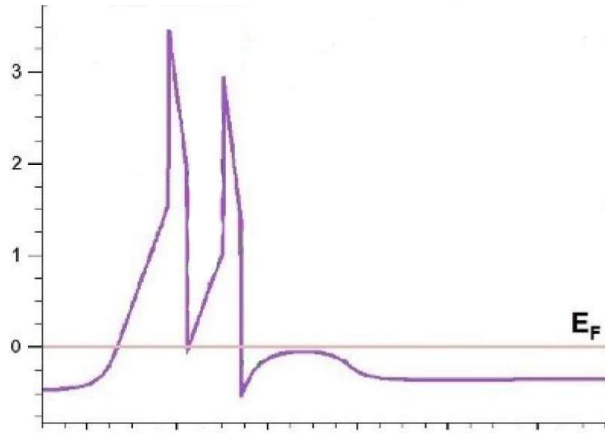


Figura 4.9: Perfil del potencial a 0 V para el sistema 2 y cuasinivel de Fermi obtenido por Growden.

Growden obtiene barreras de potencial asimétricas de 3.47 eV y de 2.95 eV medidas desde el cero de la energía como se puede ver en la figura 4.9. La línea horizontal pálida es el cuasinivel de Fermi $E_F = 0.009 \text{ eV}$.

En la figura 4.10 se presenta la curva de transmisión a 0 V para este sistema. La curva roja es del investigador estadounidense Growden y la curva morada se calcula en este trabajo de investigación. Observamos que hay seis cuasiestados de energía para este sistema ordenados en la tabla 4.5. Este aumento en el número de autovalores respecto

al sistema anterior es debido primordialmente a que el confinamiento se disminuye al aumentar el ancho del pozo cuántico de 3 nm a 4 nm.

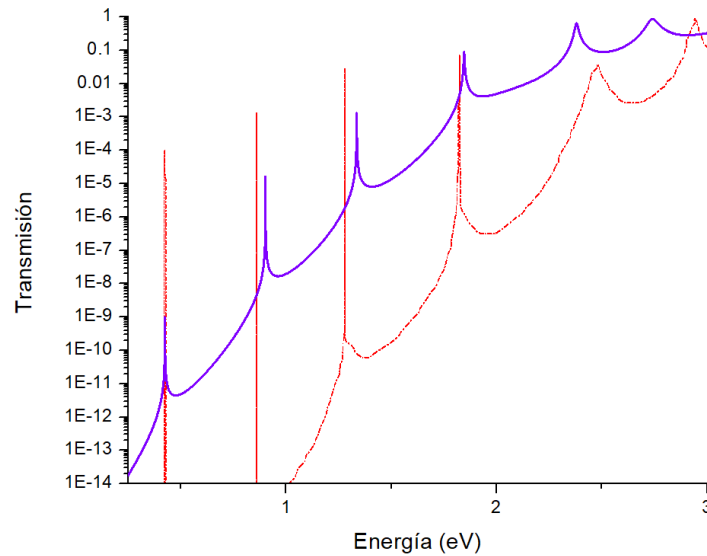


Figura 4.10: Transmisión a 0 V. La curva roja es de Growden y la curva morada se calcula en este trabajo para el sistema 2.

E_n (eV)	Growden [14]	Esta investigación
E_0	0.425	0.425
E_1	0.855	0.902
E_2	1.273	1.336
E_3	1.814	1.845
E_4	2.466	2.376
E_5	2.92	2.741

Tabla 4.5: Autovalores del sistema 2 para 0 V calculados por Growden y en esta investigación.

Para aumentar la altura de los picos de transmisión, sobretodo aquellos asociados a cuasiestados de baja energía, aumentamos el número de pasos en el barrido paramétrico como se muestra para el estado

fundamental E_0 en la figura 4.11. No es factible hacerlo para rangos de energía extensos por las limitaciones computacionales tanto de memoria como de disco duro. Sin embargo esto no impide que tengamos buenos resultados porque las curvas características (corriente vs voltage) son directamente proporcionales al área bajo la curva de transmisión como indica la ecuación 2.17.

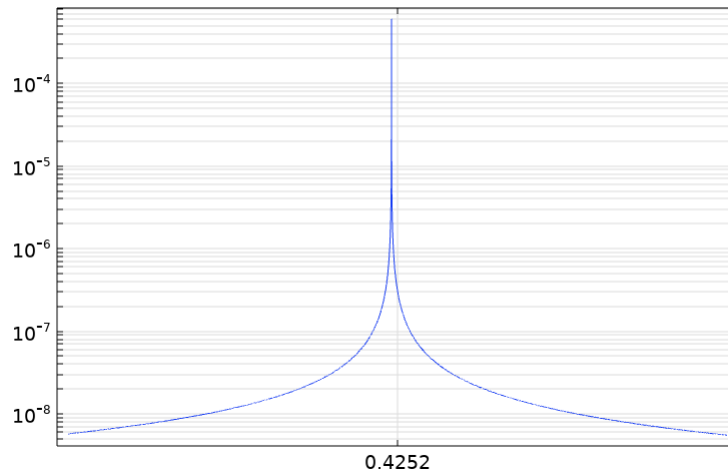


Figura 4.11: Transmisión alrededor del estado fundamental E_0 del sistema 2 calculado en esta investigación para pasos de 1×10^{-9} .

Los datos que se obtuvieron en este proceso de convergencia se organizan en la tabla 4.6. Para estos resultados se dejó fijo el mallado en 10003 elementos en todo el dominio y se variaron los pasos en la transmisión. Con base en la tabla de datos y la figura 4.11 se puede concluir que hay cambios significativos en los primeros autovalores E_0 , E_1 y E_2 , pero no en los otros autoestados excitados E_3 , E_4 y E_5 . Estos efectos numéricos debido a la convergencia ocurren porque la función de onda de un estado de baja energía está más concentrada en el pozo cuántico, por lo que se requieren más puntos para calcular con mejor precisión el coeficiente de transmisión. Otra forma de decirlo es que los estados más bajos son los estados más probables, el estado fundamental es el más probable de todos para ser ocupado por los electrones de tunelamiento, y por eso el pico de transmisión

es tan estrecho. Este estrechamiento indica que el tiempo de vida es muy alto y se necesita un mejor refinamiento para su computación.

	Pasos	E_n (eV)	T-investigación	T [14]
E ₀	1x10 ⁻⁴	0.425	2.4x10 ⁻⁹	1.25x10 ⁻⁴
	1x10 ⁻⁶	0.425	3.1x10 ⁻⁷	
	1x10 ⁻⁹	0.425	6x10 ⁻⁴	
E ₁	1x10 ⁻⁴	0.902	1.6x 10 ⁻⁵	1.3x10 ⁻³
	1x10 ⁻⁶	0.902	2.3x 10 ⁻³	
	1x10 ⁻⁹	0.902	3.5x 10 ⁻³	
E ₂	1x10 ⁻⁴	1.336	6.3x10 ⁻³	2.9x10 ⁻²
	1x10 ⁻⁶	1.336	2x10 ⁻²	
	1x10 ⁻⁹	1.336	2x10 ⁻²	
E ₃	1x10 ⁻⁴	1.845	0.104	0.17
	1x10 ⁻⁶	1.845	0.104	
E ₄	1x10 ⁻⁴	2.376	0.65	0.045
	1x10 ⁻⁶	2376.	0.65	
E ₅	1x10 ⁻⁴	2.741	0.95	0.94
	1x10 ⁻⁶	2.741	0.95	

Tabla 4.6: Autovalores calculados a 0 V para diferentes pasos en el barrido paramétrico y magnitud T en el pico de transmisión. Se presentan resultados de esta investigación y de Growden.

Como cierre de esta sección, se puede decir que los parámetros asociados a los nitruros ya están determinados y optimizados en término de la densidad superficial de carga inducida ρ_s ; la cual colecta los campos de polarización eléctrica espontánea y piezoeléctrica según la ecuación [3.7].

En cuanto a los parámetros ordenados en las tablas 4.1 y 4.2 que se repitan, tales como la brecha prohibida E_g y las constantes elásticas e y C , elegiremos aquellas recientemente publicadas, de preferencia experimentales o teóricas que sean compatibles con resultados expe-

rimentales . Podemos decir que son las adecuadas porque se ajustan al perfil de potencial y los autovalores que Tyler Growden presenta en su manuscrito.

4.3 Espacio de parámetros: óxidos

En esta sección se presentan los parámetros hallados en la literatura para los materiales basado en óxidos que se estudiarán y posteriormente el criterio empleado para la elección de aquellos que tendremos en cuenta para nuestros cálculos.

En la tabla 4.7 se presenta la polarización espontánea, la permitividad relativa, la afinidad electrónica, el bandgap, el parámetro de red y la masa efectiva del semiconductor ZnO. Para la polarización espontánea P_s elegimos el valor que entrega el artículo de Jang y Chichibu del año 2012 [17] ya que aunque es tipo teórico (ab initio) entrega parámetros de red y constantes piezoeléctricas del ZnO en fase wurtzita que son compatibles con resultados experimentales. Otra razón por la que elegimos este artículo es que comparado con los otros artículos es más reciente.

Este último criterio se utiliza también para la permitividad relativa ϵ_r , para el bandgap E_g y el parámetro de red a .

Ref.	Magnitud	Semiconductor	
15	$P_s[C/m^2]$	ZnO	-0.022
16		ZnO	-0.057
17		ZnO	-0.053
18	ϵ_r	ZnO	8.1
19		ZnO	8.4
11		ZnO	7.4
20,21	$\chi[eV]$	ZnO	3.174
18	$E_g[eV]$	ZnO	3.37
19		ZnO	3.25
22		ZnO	3.44
11		ZnO	3.35
23		ZnO	3.36
18	$a[nm]$	ZnO	0.320
19		ZnO	0.567
11		ZnO	0.3198
17		ZnO	0.3254
18, 24, 25	$m^*[m_e]$	ZnO	0.24
19, 11, 10	$P_p[C/m^2]$	AlGaN/ZnO	$2\epsilon(e_{31} - e_{33}C_{13}/C_{33})$ $\epsilon=(a_{ZnO} - a(x))/a(x)$ $a(x)=a_{AlGaN}(x)$

Tabla 4.7: Polarización espontánea P_s , permitividad relativa ϵ_r , afinidad electrónica χ , banda prohibida E_g , parámetro de red a , masa efectiva m^* para MgO, ZnO y MgZnO y polarización piezoeléctrica P_p para la interfaz AlGaN/ZnO.

4.4 Resultados de esta investigación

En las secciones anteriores se hicieron cálculos de perfiles de potencial y transmisión para dispositivos de doble barrera del tipo AlN/GaN que llamamos **SISTEMA 1** y **SISTEMA 2** y que previamente fueron reportados por Growden. En estos sistemas la densidad su-

periferal de carga inducida por los campos internos de polarización es de $|\rho_s| = 0.1063 \text{ C/m}^2$ como se indica en la tabla 4.2.

SISTEMA 3 - AlN/ZnO/AlN

El sistema 3 tiene las siguientes dimensiones:

$$L_b = 2 \text{ nm}$$

$$L_w = 4 \text{ nm}$$

$$L_{sc} = 6 \text{ nm}$$

$$L_{se} = 12 \text{ nm}$$

$$L_{dc} = 100 \text{ nm}$$

$$L_{de} = 300 \text{ nm}$$

$$n_{dc} = 8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

$$n_{de} = 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

$$P_s(\text{ZnO}) = -0.053 \text{ C/m}^2$$

$$P_s(\text{AlN}) = -0.090 \text{ C/m}^2$$

$$P_p(\text{AlN}) = -0.051 \text{ C/m}^2.$$

Las polarizaciones asociadas al AlN se hallan con Gorczyca [11] y Ellinghaus [1]; y la polarización espontánea de ZnO se toma de Jang [17].

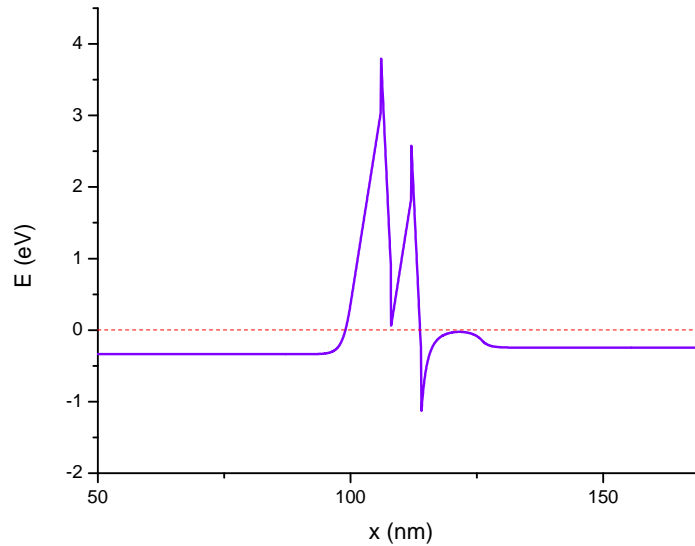


Figura 4.12: Perfil del potencial a 0 V para el sistema 3 y cuasinivel de Fermi.

Con la expectativa de comparar figuras y datos se procede a calcular sobre un par de sistemas específicos del tipo AlN/ZnO y AlGaIn/ZnO que denominamos **SISTEMA 3** y **SISTEMA 4**. En estos casos $|\rho_s| = 0.14526 \text{ C/m}^2$ ya que el material del semiconductor asociado al pozo de potencial, las capas espaciadoras y las capas dopadas se modifican del nitruro GaN al óxido ZnO, pero que hereda las mismas dimensiones espaciales y el mismo dopamiento que el **SISTEMA 2**. Esto es:

$$L_b = 2 \text{ nm}, L_w = 4 \text{ nm}, L_{sc} = 6 \text{ nm}, L_{se} = 12 \text{ nm}, L_{dc} = 100 \text{ nm}, \\ L_{de} = 300 \text{ nm}, n_{dc} = 8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}, n_{de} = 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}.$$

El sistema 3 es un dispositivo de doble barrera de potencial basado en los semiconductores AlN del grupo III-V y un pozo de cuántico basado en los semiconductores ZnO del grupo II-VI.

En la figura 4.12 se observa el perfil del potencial respectivo para 0 V. El fondo de la banda de conducción del lado del emisor es

de -0.245 eV y al mismo lado se presenta un pozo triangular para formar el gas bidimensional de electrones (2DEG del inglés). La altura de las barreras asimétricas medidas desde el cero de la energía es de 2.59 eV (del lado del emisor) y 3.80 eV (del lado del colector). Su forma triangular es debido al fuerte efecto de los campos de polarización y por tanto un aumento en la densidad superficial de carga ρ_s respecto a los otros sistemas. Además, del lado del emisor y adyacente al pozo triangular mencionado se forma una barrera con forma parabólica debido a los campos internos de polarización.

Otra de las diferencias que se pueden observar entre el sistema 2 y el sistema 3 es que al cambiar las capas semiconductoras asociadas al pozo cuántico y las espaciadoras de GaN a ZnO aumenta la altura de la barrera de potencial del lado del colector en 0.33 eV mientras que la barrera del lado del emisor disminuye en 0.36 eV.

Es decir, la asimetría del sistema se incrementa. Estos datos se pueden verificar en la figura 4.9.

Este cambio en el material incluye cambiar una serie de parámetros que se enlistan en las tablas 4.1, 4.2 y 4.7.

El cuasinivel de Fermi E_F calculado en el sistema 3 es de 0.0009 eV y corresponde a la línea segmentada roja. Dado que el sistema está en equilibrio el cuasinivel E_F es el mismo tanto para el lado del emisor (E_{FE}) como para el lado del colector (E_{FC}). Este valor cobra importancia porque define el proceso de tunelamiento y consecuentemente la corriente a través del dispositivo.

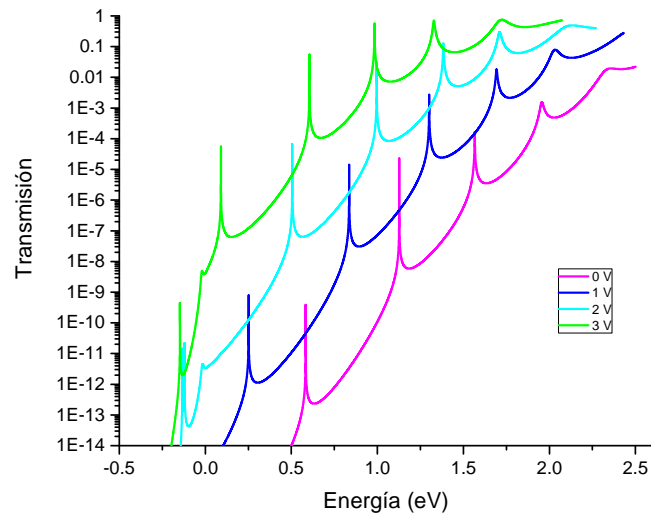


Figura 4.13: Transmisión calculada en esta investigación para voltajes de 0 V, 1 V, 2 V Y 3 V para el sistema 3.

En la figura 4.13 se muestra la curva de transmisión para voltajes entre 0 V y 3 V. Para 0 V y 1 V se hallan cinco autovalores. Todos estos autovalores calculados son positivos. Cuando se aumenta el voltaje a 2 V los autovalores se desplazan hacia abajo energéticamente hablando tal que aparece un sexto autovalor dentro del pozo cuántico como se presenta en la tabla 4.8. Aparece un autovalor negativo posicionado entre el fondo de la banda de conducción del lado del emisor y el cuasinivel de Fermi indicando que hay corriente eléctrica. Además, para el barrido paramétrico que se hizo (0.0005) se observa que a medida que el voltaje va aumentando los picos aparte de desplazarse a la izquierda también se desplazan hacia arriba indicando que la probabilidad de tunelamiento aumenta también. Sin embargo, según la figura no pasa así entre el nivel de Fermi y el fondo de la banda de conducción, porque los picos de transmisión en esta zona de transporte disminuyen; pero no debemos olvidar los criterios de convergencia mencionados en secciones anteriores sobretodo para

estados de mínima energía. Con un ajuste numérico en el barrido veremos nuevamente el aumento en la probabilidad de transmisión cuando el voltaje aumenta.

Los autovalores y los picos calculados para distintas curvas de transmisión se presentan en las tablas 4.8.

0 V	E_n (eV)	T	1 V	E_n (eV)	T
E_0	0.580	4.12×10^{-10}	E_0	0.250	8.63×10^{-10}
E_1	1.126	2.45×10^{-5}	E_1	0.837	1.44×10^{-5}
E_2	1.566	1.71×10^{-4}	E_2	1.301	2.91×10^{-3}
E_3	1.957	1.73×10^{-3}	E_3	1.692	1.94×10^{-2}
E_4	2.344	2.15×10^{-2}	E_4	2.035	8.91×10^{-2}
2 V	E_n (eV)	T	2.6 V	E_n (eV)	T
E_0	-0.119	2.16×10^{-11}	E_0	-0.13	1.71×10^{-11}
E_1	0.507	7.38×10^{-5}	E_1	0.208	6.21×10^{-5}
E_2	0.996	3.85×10^{-2}	E_2	0.54	4.06×10^{-2}
E_3	1.382	1.35×10^{-1}	E_3	1.028	4.83×10^{-1}
E_4	1.708	3.31×10^{-1}	E_4	1.406	2.1×10^{-1}
E_5	2.124	5.32×10^{-1}	E_5	1.726	3.85×10^{-1}
3 V	E_n (eV)	T	3.3 V	E_n (eV)	T
E_0	-0.245	4.59×10^{-10}	E_0	-0.0139	1.66×10^{-9}
E_1	0.091	5.98×10^{-5}	E_1	0.136	3.02×10^{-4}
E_2	0.605	5.54×10^{-2}	E_2	0.644	3.68×10^{-1}
E_3	0.984	6.22×10^{-1}	E_3	1.017	0.64
E_4	1.329	7.67×10^{-1}	E_4	1.362	0.76
E_5	1.721	0.81	E_5	1.752	0.86

Tabla 4.8: Tabla de autovalores y picos de transmisión del sistema 3 para 0 V, 1 V, 2 V, 2.6 V, 3 V y 3.3 V.

4.4.1 Resistencia diferencial negativa-sistema 3

En este apartado se presenta la interpretación física de la primera resistencia diferencial negativa que se exhibe en la curva característica de corriente versus voltaje de la figura 4.14 para el sistema 3.

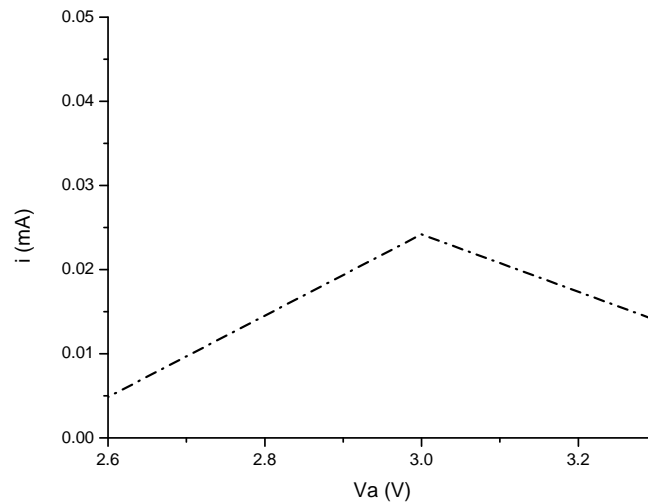


Figura 4.14: Primera resistencia diferencial negativa para el sistema 3.

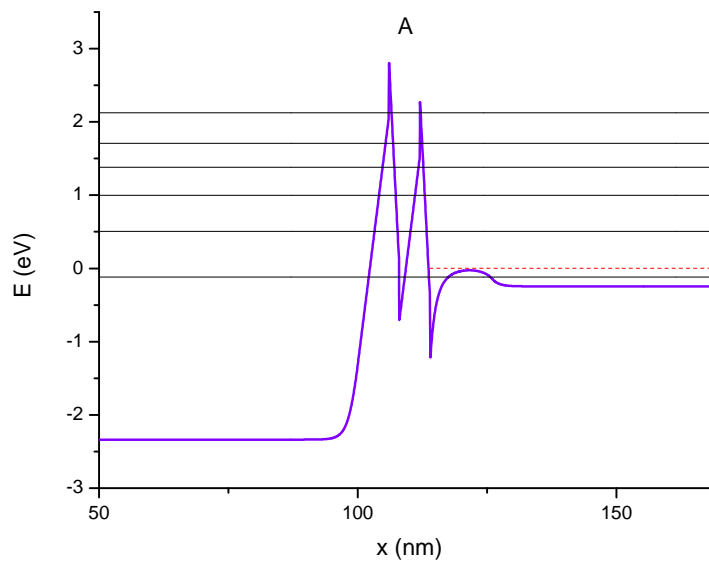
Para iniciar vemos que a 2 voltios hay un cuasiestado ubicado entre el fondo de la banda de conducción del lado del emisor y el cuasinivel de Fermi E_F ; disponible para transporte y de autovalor -0.119 como se observa en la figura 4.15-A y en la tabla 4.8.

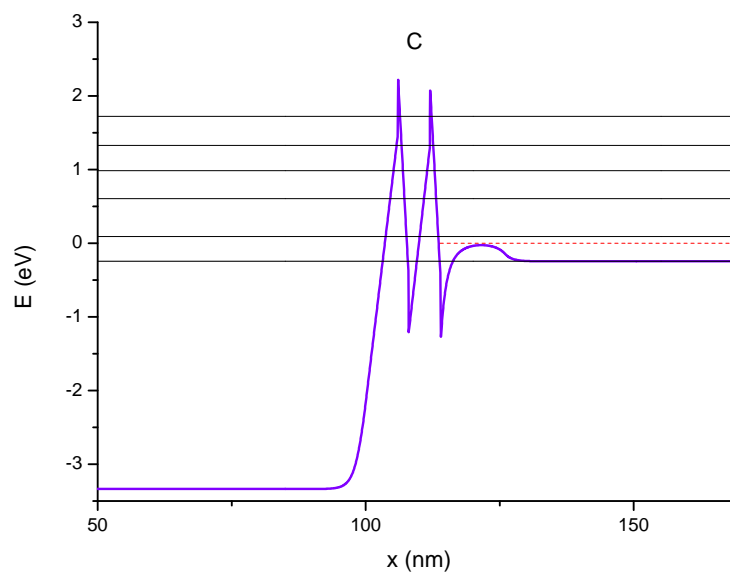
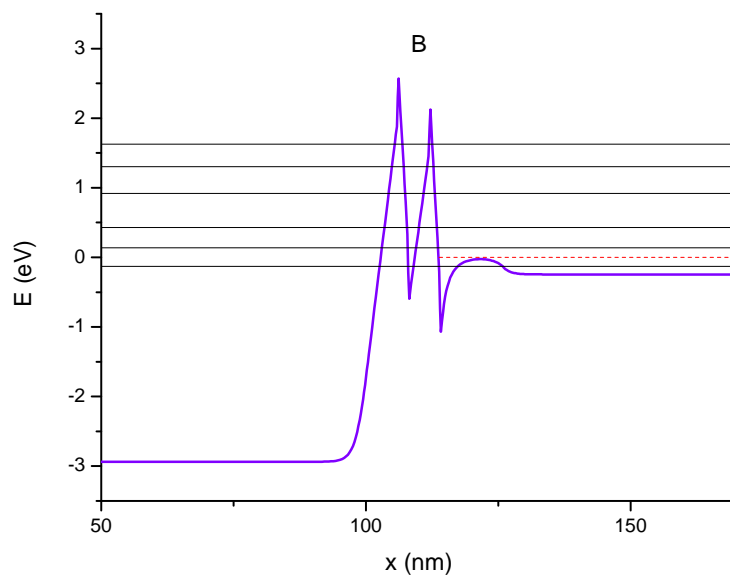
A medida que el voltaje va aumentando el perfil del potencial va cambiando; pero lo realmente interesante es que el autovalor antes mencionado se acerca más y más al fondo de la banda de conducción (figura 4.15-B).

En este proceso la corriente eléctrica sigue aumentando hasta que

alrededor de los 3 voltios el autovalor toca el fondo de la banda de conducción y la corriente cae dramáticamente (figura 4.15-C). Hasta que aparece otro autovalor disponible para transporte y el proceso anterior se repite como se muestra en la figura 4.15-D.

Según la tabla de 4.8 este otro autovalor que mencionamos a 3.3 V es de -0.0139 eV.





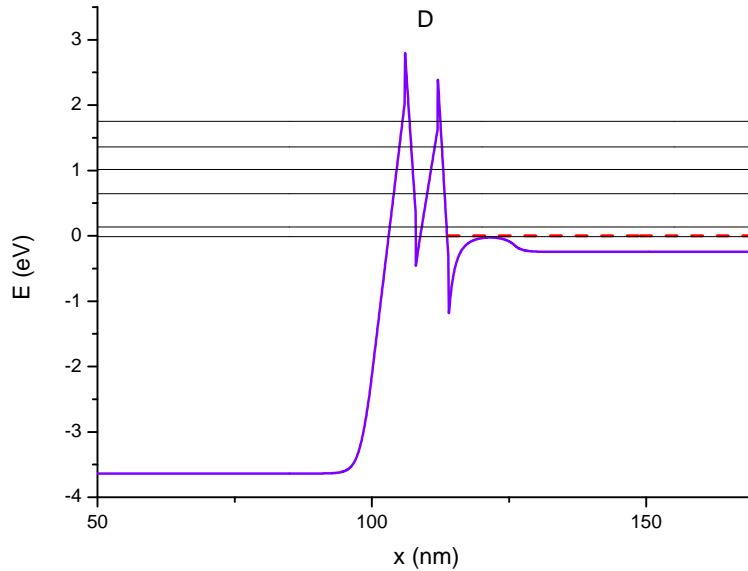


Figura 4.15: Las figuras A, B, C y D representan el potencial a 2 V, 2.6 V, 3 V y 3.3 V para el sistema 3 y los autovalores dentro del pozo cuántico.

En la figura 4.16 se exhibe la curva característica de corriente versus voltaje para el sistema 3 de doble barrera (AlN/ZnO/AlN). La corriente eléctrica para diferentes voltajes aplicados al dispositivo tiene unidades de miliamperios.

Se presentan cinco zonas de resistencia diferencial negativa alrededor de 3 V, 3.5 V, 4.5 V, 5.5 V y 6.5 V.

En la tesis de Growden que corresponde al sistema 2 descrito al principio de este capítulo (AlN/GaN/AlN) se despliega la primera región de resistencia diferencial negativa (RDN) en 2.2 V, las demás en 3.6 V, 4.8 V, 5.6 V y 6.4 V [14].

Como la diferencia significativa entre el sistema 2 y el sistema 3 son los efectos asociados a las polarizaciones que se computan en la densidad superficial de carga eléctrica, $|\rho_s - \text{sistema2}| = 0.1063 \text{ C/m}^2$ y $|\rho_s - \text{sistema3}| = 0.14526 \text{ C/m}^2$, podemos concluir que esta

diferencia es influyente en la primera zona de resistencia diferencial negativa donde los efectos piezoeléctricos son más protagonistas. Cuando el voltaje aumenta a partir de 3.5 V estas diferencias tienen menor influencia dada la energía que alcanzan los electrones provenientes del emisor.

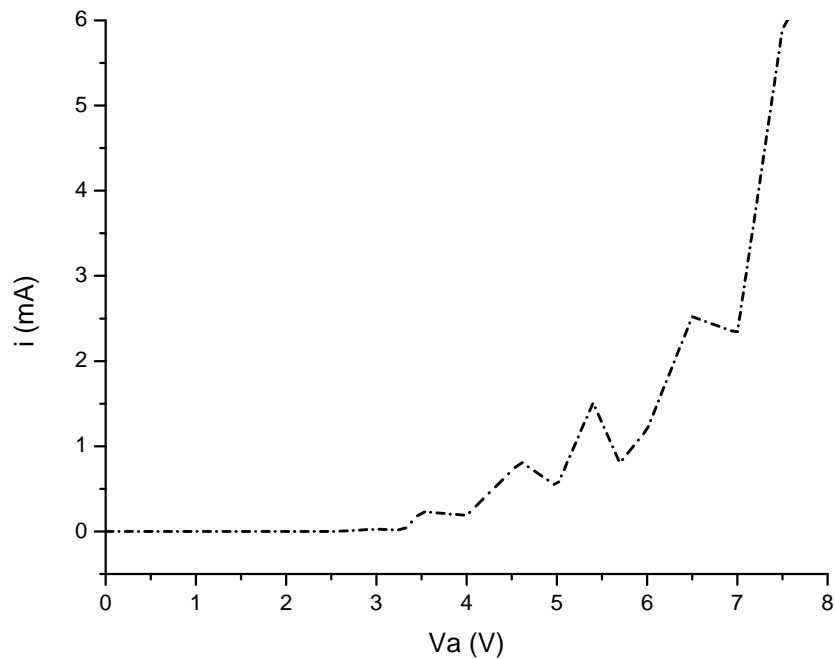


Figura 4.16: Curva característica corriente vs voltaje para el sistema 3.

Para cerrar el estudio sobre el sistema 3 calculamos la relación para la corriente pico-valle (PVCR, del inglés) sobre la curva característica de la figura 4.16 y los comparamos con los resultados de Growden. Para cada zona de resistencia negativa medimos la corriente pico i_p , la corriente valle i_v y el índice PVCR para ambos sistemas. Los resultados se ubican en la tabla 4.9. No fue posible tomar los datos asociados a la zona 1 de Growden

porque es muy pequeña; pero no es importante porque para efectos prácticos (y tecnológicos) es inútil. De hecho, para ambos sistemas las zonas 3, 4 y 5 son las de mejor comportamiento tanto por los valores de la corriente como por los coeficientes calculados.

Zona	$i_p - 2$	$i_v - 2$	PVCR-2	$i_p - 3$	$i_v - 3$	PVCR-3
1				0.024	0.013	1.84
2	0.102	0.018	5.67	0.24	0.17	1.41
3	0.61	0.56	1.09	0.82	0.53	1.54
4	1.63	0.79	2.06	1.51	0.80	1.89
5	2.19	2.14	1.02	2.50	2.31	1.08

Tabla 4.9: Tabla comparativa entre el sistema 2 de Growden [14] y el sistema 3. Se presentan zonas de resistencia diferencial negativa, corriente pico i_p y valle i_v medidas en miliamperios y PVCR.

Finalmente podemos decir que el sistema 3 que investigamos en este trabajo es una alternativa para diseñar diodos de tunelamiento resonante que operen para corrientes en miliamperios (mA) con la ventaja que la epitaxia para semiconductores del tipo ZnO es energéticamente menos demandante que para los semiconductores del tipo GaN como se indicó en el capítulo introductorio.

SISTEMA 4 - AlGaN/ZnO/AlGaN

El dispositivo que denominamos sistema 4 consta de barreras dobles con una concentración del 30 % de aluminio y 70 % de galio. El pozo cuántico es de ZnO. Este sistema tiene las siguientes dimensiones:

$$L_b = 2 \text{ nm}$$

$$L_w = 4 \text{ nm}$$

$$L_{sc} = 6 \text{ nm}$$

$$L_{se} = 12 \text{ nm}$$

$$L_{dc} = 100 \text{ nm}$$

$$L_{de} = 300 \text{ nm}$$

$$n_{dc} = 8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

$$n_{de} = 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

$$P_s(\text{ZnO}) = -0.053 \text{ C/m}^2$$

$$P_s(\text{AlGaIn}) = -0.046 \text{ C/m}^2$$

$$P_p(\text{AlGaIn}) = -0.040 \text{ C/m}^2.$$

Las polarizaciones asociadas al AlGaIn se toman de Fiorentini [4] y Ambacher [12]; y la de ZnO se toman de Jang [17].

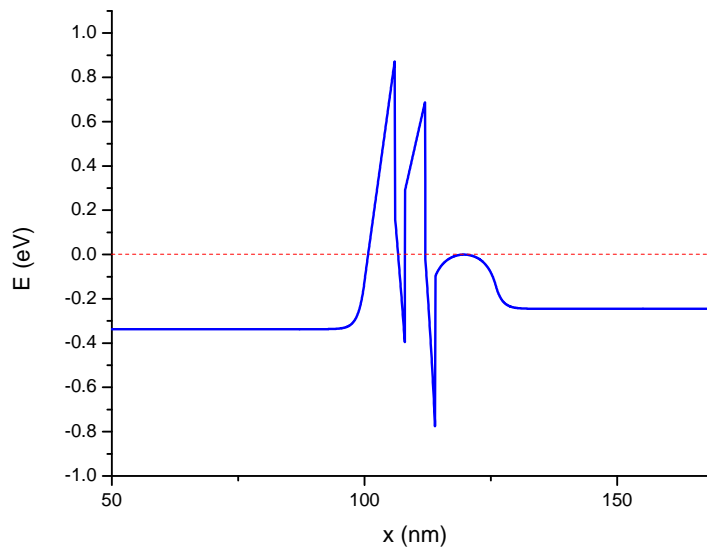


Figura 4.17: Perfil del potencial a 0 V para sistema 4.

Como se puede ver en la figura 4.17 las barreras asimétricas tienen alturas de 0.69 eV y 0.88 eV. El cuasinivel de Fermi E_F sigue siendo de 0.0009 eV ya que no se hicieron cambios en el dopamiento ni en la temperatura de los sistemas estudiados. La forma irregular de las barreras es debido a la estequiometría del sistema 4 y a las cargas eléctricas superficiales inducidas por los campos internos de polarización. En este sistema también se observa una barrera con forma parabólica al lado del pozo triangular.

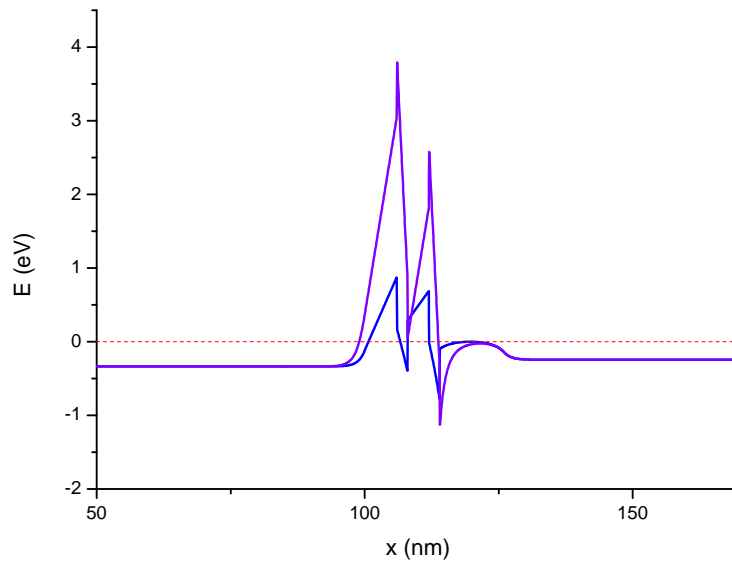


Figura 4.18: Comparativo entre el sistema 3 y 4 para el potencial a 0 V.

Al disminuir la concentración de aluminio de 100 % en el sistema 3 al 30 % en el sistema 4 las barreras de potencial disminuyen 2.92 eV del lado del colector, 1.9 eV del lado del emisor, la forma de los picos es menos puntuda y la asimetría se regula como se observa en la figura 4.18. Además la barrera del lado del emisor en el sistema 4 tiene forma rectangular.

En la figura 4.19 se observan las curvas de transmisión del sistema 4 para 0 V, 1 V, 2 V y 3 V. Nótese que los picos se desplazan a la izquierda a niveles de menor energía y hacia arriba dado que la probabilidad de tunelamiento aumenta cuando se aumenta el voltaje. Para el estado fundamental se deben mejorar los pasos del barrido paramétrico en el cálculo de la transmisión pero como se indicó anteriormente no afectan los resultados para la curva característica.

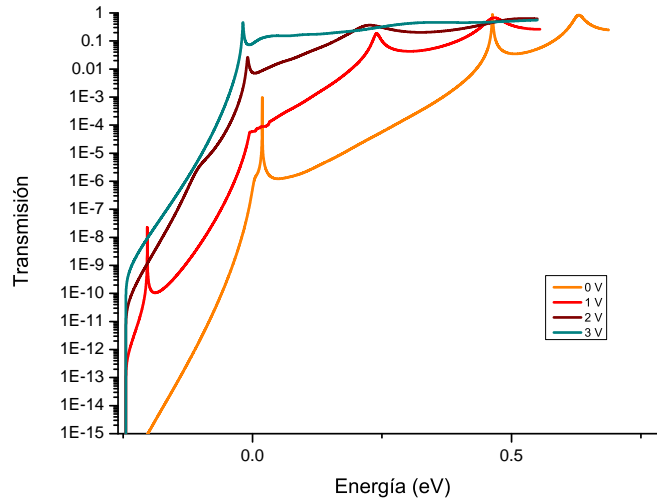


Figura 4.19: Transmisión calculada en esta investigación para voltajes de 0 V, 1 V, 2 V y 3 V para el sistema 4.

En el conjunto de tablas 4.10 observamos los autovalores y los picos de transmisión para algunos voltajes que nos van a permitir comprender el proceso de resistencia diferencial negativa en el sistema 4.

Podemos ver que los autovalores van disminuyendo a medida que el voltaje aumenta de igual forma que se observa en la figura 4.19.

0 V	E_n (eV)	T	0.8 V	E_n (eV)	T
	E_0	1.1×10^{-3}		E_0	5.49×10^{-7}
	E_1	0.92		E_1	0.29
	E_2	0.630		E_2	0.79
1 V	E_n (eV)	T	1.2 V	E_n (eV)	T
	E_0	2.41×10^{-8}		E_0	5×10^{-4}
	E_1	0.21		E_1	0.11
	E_2	0.467		E_2	0.61

Tabla 4.10: Tabla de autovalores y picos de transmisión del sistema 4 para 0 V, 0.8 V, 1 V y 1.2 V.

4.4.2 Resistencia diferencial negativa-sistema 4

En el grupo de figuras 4.20 se observa el fenómeno de resistencia diferencial negativa en la primera región desde el punto de vista del transporte electrónico y los perfiles de potencial.

Nótese que para 0.8 V el autovalor que se encuentra entre el nivel de Fermi E_F y el fondo de la banda de conducción del lado del emisor y disponible para conducción es de -0.128 eV (figura 4.20-A).

Cuando se aumenta el voltaje a 1 V el autovalor cae a -0.203 eV muy cerca del fondo de la banda de conducción por lo que la corriente está a punto de alcanzar el máximo valor en esta región (figura 4.20-B).

Como se puede ver en las tablas de datos anteriores cuando el voltaje es de 1.2 V aparece un nuevo autovalor muy cerca del cuasinivel de Fermi de -0.002 eV (figura 4.20-C).

Estas etapas descritas explican físicamente la primera resistencia negativa en el sistema 4 de $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/ZnO/Al_{0.3}Ga_{0.7}N$.

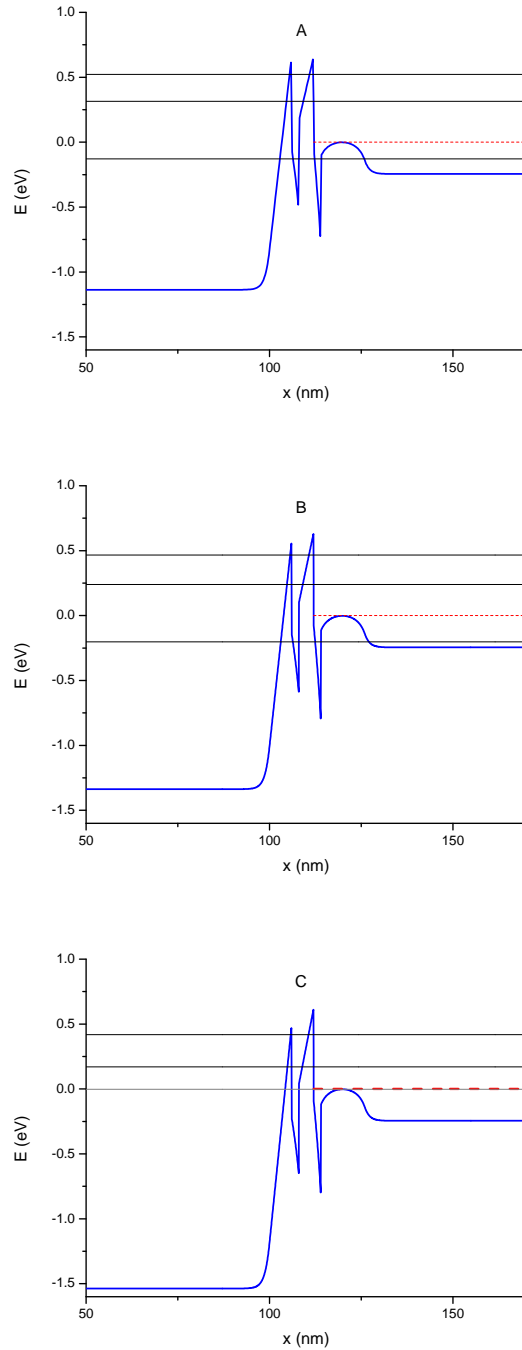


Figura 4.20: Las figuras A, B y C representan el potencial a 0.8 V, 1.0 V y 1.2 V para el sistema 4. La línea roja segmentada es el cuasinivel de Fermi E_F del lado del emisor y las líneas oscuras horizontales son los cuasiniveles de energía.

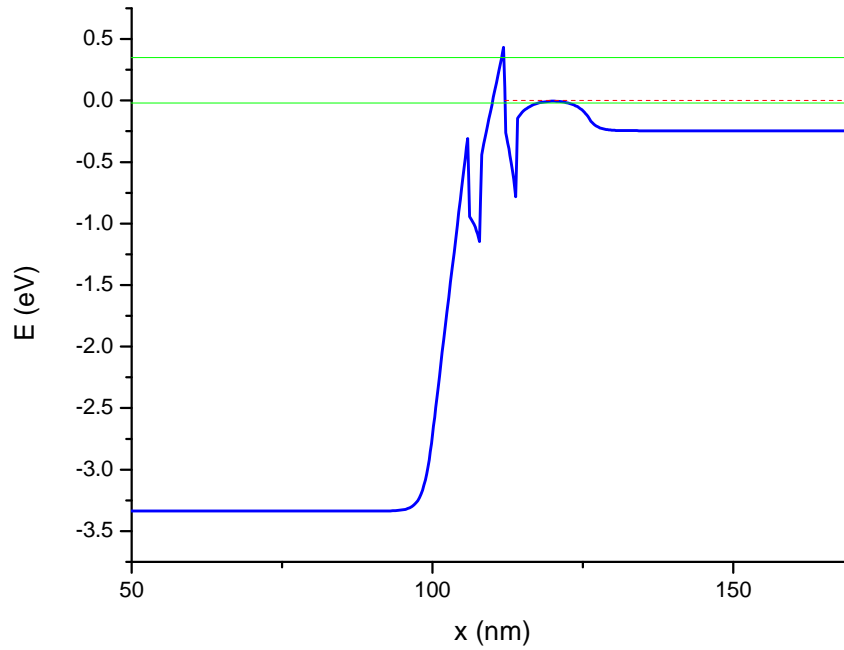


Figura 4.21: Potencial a 3 V para el sistema 4. Las líneas horizontales verdes son los autovalores: -0.02 eV y 0.35 eV.

En la figura 4.22 se presenta la curva característica de corriente versus voltaje para el sistema 4. La corriente es medida en amperios y el voltaje en voltios.

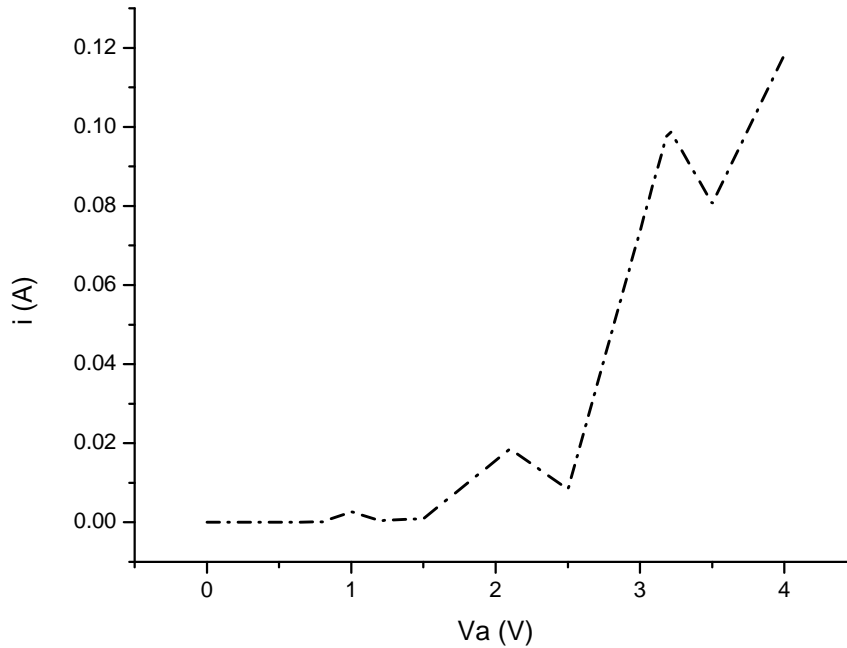


Figura 4.22: Curva característica corriente vs voltaje para el sistema 4.

Se puede observar que aparecen tres zonas de resistencia diferencial negativa alrededor de 1 V, 2.1 V y 3.2 V. En las primeras dos zonas encontramos que el sistema 4 se comporta como de doble barrera asimétrica en la región activa según lo esperado. Sin embargo, cuando el voltaje se aproxima a la zona 3 (alrededor de 3.2 V) tenemos un sistema de una sola barrera en la región activa como se puede ver en la figura 4.21. Se hace la claridad sobre el número de barreras en la región activa porque hay una sutileza con la barrera semicircular que se forma del lado del emisor cuando se tienen en cuenta efectos de polarización. Es decir, que el sistema al completo se comporta como de barrera triple cuando se mide desde el emisor hasta el colector.

Finalmente, para cada una de las zonas de resistencia diferencial negativa de la figura 4.22 se mide la corriente pico i_p , la corriente

valle i_v y el coeficiente PVCR para el sistema 4 y se organizan en la tabla 4.11.

Zona	$i_p - 4$	$i_v - 4$	PVCR-4
1	0.003	0.0005	6
2	0.019	0.008	2.38
3	0.10	0.08	1.25

Tabla 4.11: Se presentan zonas de resistencia diferencial negativa, corriente pico i_p y valle i_v medidas en amperios y PVCR para el sistema 4.

Si bien la zona 1 tiene el más alto PVCR los valores de la corriente son pequeños en comparación con los demás. Sería de utilidad para un dispositivo que opere en el rango de los miliamperios mA.

Para un dispositivo que opere en el rango de los amperios la zona 2 y la zona 3 serían importantes tanto por los valores de la corriente como por el PVCR.

4.5 Referencias

- [1] Ellinghaus P. **Simulation of GaN/AlGaN heterostructures for a HEMT simulator.** [Tesis de maestría]. L'Aquila: University of L'Aquila; 2011.
- [2] Rached A.; Bhourri A.; Sakr S.; Lazzari J.-L.; Belmabrouk H. **Self-consistent vertical transport calculations in $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ based resonant tunneling diode,** Superlattices and Microstructures, 2016, 91, 37-50.
- [3] Saha S. **Fully self-consistent analysis of III-nitride quantum cascade structures.** J. Comput. Electron. 2016, 4, 1531-1540.

-
- [4] Fiorentini V.; Bernardini F.; Ambacher O. **Evidence for non-linear macroscopic polarization in III-V nitride alloy heterostructures**, Appl. Phys. Lett. 2002, 80, 1204.
- [5] Chafai A.; Essaoudi I.; Ainane A.; Dujardin F.; Ahuja R. **Binding energy of an exciton in a GaN/AlN nanodot: Role of size and external electric field**, Phys. B: Condens. Matter. 2019, 559, 23-28.
- [6] Kim H.; Choi S.; Choi B. J. **Forward current transport properties of AlGaIn/GaN Schottky diodes prepared by atomic layer deposition**, Coatings. 2020, 10, 194.
- [7] Ipsita S.; Mahapatra P. K.; Panchadhyayee P. **Optimum device parameters to attain the highest peak to valley current ratio (PVCR) in resonant tunneling diodes (RTD)**, Phys. B: Condens. Matter. 2021, 611, 412788.
- [8] Kudrawiec R.; Hommel D. **Bandgap engineering in III-nitrides with boron and group V elements: toward applications in ultraviolet emitters**, Appl. Phys. Lett. 2020, 7, 041314.
- [9] Rrustemi B. **Calculation and characterization of electrostatic and low-field electron transport properties in GaN-on-Si MOS-HEMT transistors** [Tesis doctoral]. Grenoble: Université Grenoble Alpes; 2022.
- [10] Li J.; Liu L.; Yao D. **Piezoelectric field-dependent optical nonlinearities induced by interband transition in In-GaN/GaN quantum well**, Physica E. 2005, 27, 221â226.
- [11] Gorczyca I.; Suski T.; Christensen N. E.; Svane A. **Theoretical study of nitride short period superlattices**, J. Phys.: Condens. Matter. 2018, 30, 063001.
- [12] Ambacher O.; Smart J.; Shealy J. R.; Weimann N. G.; Chu K.; Murphy M.; Schaff W. J.; Eastman L. F.; Dimitrov R.; Wittmer L.; Stutzmann M.; Rieger W.; Hilsenbeck J. **Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric**

- polarization charges in N- and Ga-face AlGaN/GaN heterostructures**, J. Appl. Phys. 1999, 85, 3222.
- [13] Roccaforte F.; Leszczynski M. **Nitride semiconductor technology: power electronics and optoelectronic devices**, Weinheim, Wiley-VCH, 2020, p. 20.
- [14] Growden T. **III-V Tunneling based quantum devices for high frequency applications**. [Tesis doctoral]. Columbus: The Ohio State University; 2016.
- [15] Gopal P.; Spaldin N. **Polarization, Piezoelectric Constants, and Elastic Constants of ZnO, MgO, and CdO**, J. Electron. Mater. 2006, 35, 4.
- [16] Bernardini F.; Fiorentini V.; Vanderbilt D. **Polarization-Based Calculation of the Dielectric Tensor of Polar Crystals**, Phys. Rev. Lett. 1997, 79, 20.
- [17] Jang S. H.; Chichibu S. F. **Structural, elastic, and polarization parameters and band structures of wurtzite ZnO and MgO**, J. Appl. Phys. 2012, 112, 073503.
- [18] Gu Z.; Li Z.; Liang J.; Tian H.; Jiang H.; Li G.; Tang H. **Linear and nonlinear optical properties in wurtzite MgZnO/ZnO double quantum wells: Roles of external electric and magnetic fields**, Micro and Nanostructures. 2022, 169, 207341.
- [19] Minimala N.S.; Peter a. J. **Nonlinear Optical Rectification of Confined Exciton in a ZnO/ZnMgO Strained Quantum Dot**, J. Nano-electron. Phys. 2012, 4, 04004.
- [20] kurban M. **properties of ZnO nanoparticles: Insights from DFTB calculations**, Computational and Theoretical Chemistry. 2023, 1224, 114112.
- [21] Hernández-Valle A.; Chaves-Villarreal C. **Síntesis de nanoestructuras de ZnO en vidrio recubierto con In₂O₃/SnO₂ Deposición química en fase gaseosa**, Tecnología en Marcha. 2014, 41-51.

- [22] Mang A.; Reimann K.; Rübénacke St. **Band gaps, crystal-field splitting, spin-orbit coupling, and exciton binding energies in ZnO under hydrostatic pressure**, Solid State Communications. 1995, 94(4), 251-254.
- [23] Ohtomo A.; Kawasaki M.; Koida T.; Masubuchi K.; Koinuma H. *Mg_xZn_{1-x}O as a II-VI widegap semiconductor alloy*, Appl. Phys. Lett. 1998, 72, 2466.
- [24] Park S-H.; Ahn D. **Crystal orientation effects on electronic and optical properties of wurtzite ZnO/MgZnO quantum well lasers**, Opt. Quantum Electron. 2006, 38, 935-952.
- [25] Gu Z.; Zhu Z. N.; Wang M. M.; Wang Y. Q., Wang M. S.; Qu Y.; Ban S. L. **Interband optical absorption in wurtzite Mg_xZn_{1-x}O/ZnO/Mg_yZn_{1-y}O asymmetric quantum wells**, Superlattices and Microstructures. 2017, doi:10.1016/j.spmi.2016.10.051.

Conclusiones

1. El sistema con una composición del 30% de Aluminio $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/ZnO/Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ presenta barreras de potencial de menor altura en comparación con el sistema de barreras de potencial de $AlN/ZnO/AlN$.
2. El sistema con barreras de potencial más alta $AlN/ZnO/AlN$ presenta más cuasiestados dentro del pozo de potencial que el sistema $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/ZnO/Al_{0.3}Ga_{0.7}N$.
3. El sistema de doble barrera del tipo $AlN/ZnO/AlN$ presenta curva característica de corriente versus voltaje en el rango de los miliamperios (mA).
4. El sistema de doble barrera del tipo $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/ZnO/Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ presenta curva característica de corriente versus voltaje en el rango de los amperios (A).
5. El sistema $AlN/ZnO/AlN$ presenta cinco zonas de resistencia diferencial negativa alrededor de 3 V, 3.5 V, 4.5 V, 5.5 V y 6.5 V.
6. El sistema $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/ZnO/Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ tiene tres zonas de resistencia diferencial negativa alrededor de 1 V, 2.1 V y 3.2 V.
7. Cuando se tienen en cuenta efectos de polarización como en los sistemas estudiados se forma una barrera adicional semicircular del lado del emisor, formando un sistema de tres barreras a través de todo el dispositivo.

5.1 Perspectivas

Para futuras investigaciones sobre diodos de tunelamiento resonante se pueden hacer cambios en la concentración de aluminio, en las dimensiones del dispositivo, en el dopamiento tipo n y estudiar figuras de mérito. Además, se pueden estudiar diodos de tunelamiento resonante o superredes a través de diferentes combinaciones de sistemas del tipo $AlGaIn/MgZnO/AlGaIn$ variando la composición de alumi-

nio y de magnesio.

Se puede cambiar la geometría de los dispositivos para estudiar anillos y puntos cuánticos basados en diferentes combinaciones de sistemas del tipo *AlGa_N/MgZnO*.

Finalmente, en vez de usar la aproximación semiclásica de Thomas-Fermi para la densidad de carga electrónica, como se hizo en esta investigación, se puede usar la aproximación cuántica de Hartree y hacer un comparativo entre los resultados obtenidos.

Anexo

Este apartado muestra el desarrollo sistemático para obtener la fórmula de Landauer en términos de las funciones de Green.

6.1 Hamiltoniano del sistema

El punto de partida es la ecuación de Schrödinger para un sistema central C en contacto con dos reservorios que denotaremos por L el de la izquierda y R el de la derecha,

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (6.1)$$

donde \hat{H} es el hamiltoniano completo del sistema compuesto por operadores que involucran el contacto de la izquierda \hat{H}_L , el contacto de la derecha \hat{H}_R y la región central \hat{H}_C ; E es la energía del sistema y $|\psi\rangle$ es la función de onda que tiene las componentes $|\psi_L\rangle$, $|\psi_C\rangle$ y $|\psi_R\rangle$ respectivamente [1]. Con estas consideraciones la ecuación [6.1] quedaría,

$$\begin{bmatrix} \hat{H}_L & \hat{V}_{LC} & 0 \\ \hat{V}_{LC}^\dagger & \hat{H}_C & \hat{V}_{CR}^\dagger \\ 0 & \hat{V}_{CR} & \hat{H}_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |\psi_L\rangle \\ |\psi_C\rangle \\ |\psi_R\rangle \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} |\psi_L\rangle \\ |\psi_C\rangle \\ |\psi_R\rangle \end{bmatrix}, \quad (6.2)$$

donde $\hat{V}_{L(R)C}$ representa la interacción entre el contacto izquierdo (derecho) y la región central.

El operador de Green del sistema se define como el operador \hat{G} tal que,

$$(E - \hat{H})\hat{G} \equiv \hat{I}, \quad (6.3)$$

donde \hat{I} es la matriz identidad. Combinando las ecuaciones [6.2] y [6.3] podemos escribir el hamiltoniano completo del sistema en ter-

minos de la matriz de Green:

$$\begin{bmatrix} E - \hat{H}_L & -\hat{V}_{LC} & 0 \\ -\hat{V}_{LC}^\dagger & E - \hat{H}_C & -\hat{V}_{CR}^\dagger \\ 0 & -\hat{V}_{CR} & E - \hat{H}_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{G}_L & \hat{G}_{LC} & \hat{G}_{LR} \\ \hat{G}_{CL} & \hat{G}_C & \hat{G}_{CR} \\ \hat{G}_{RL} & \hat{G}_{RC} & \hat{G}_R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix}, \quad (6.4)$$

al multiplicar la matriz con la segunda columna obtenemos el sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} (E - \hat{H}_L)\hat{G}_{LC} - \hat{V}_{LC}\hat{G}_C &= 0, \\ -\hat{V}_{LC}^\dagger\hat{G}_{LC} + (E - \hat{H}_C)\hat{G}_C - \hat{V}_{CR}^\dagger\hat{G}_{RC} &= \hat{I}, \\ -\hat{V}_{CR}\hat{G}_C + (E - \hat{H}_R)\hat{G}_{RC} &= 0, \end{aligned} \quad (6.5)$$

que al reordenar apropiadamente para \hat{G}_{LC} y \hat{G}_{RC} quedaría así:

$$\begin{aligned} (E - \hat{H}_L)\hat{G}_{LC} &= \hat{V}_{LC}\hat{G}_C, \\ \hat{G}_{LC} &= (E - \hat{H}_L)^{-1}\hat{V}_{LC}\hat{G}_C, \\ \hat{G}_{LC} &= \hat{G}_L\hat{V}_{LC}\hat{G}_C, \end{aligned} \quad (6.6)$$

y también,

$$\begin{aligned} (E - \hat{H}_R)\hat{G}_{RC} &= \hat{V}_{CR}\hat{G}_C, \\ \hat{G}_{RC} &= \hat{G}_R\hat{V}_{CR}\hat{G}_C, \end{aligned} \quad (6.7)$$

en las ecuaciones [6.6](#) y [6.7](#) se usó la definición:

$$\hat{G}_{L(R)} = (E - \hat{H}_{L(R)})^{-1}. \quad (6.8)$$

Remplazando [6.6](#) y [6.7](#) en la ecuación del medio en [6.5](#) nos quedaría:

$$\begin{aligned} -\hat{V}_{LC}^\dagger\hat{G}_L\hat{V}_{LC}\hat{G}_C + (E - \hat{H}_C)\hat{G}_C - \hat{V}_{CR}^\dagger\hat{G}_R\hat{V}_{CR}\hat{G}_C &= \hat{I}, \\ \left(-\hat{V}_{LC}^\dagger\hat{G}_L\hat{V}_{LC} + (E - \hat{H}_C) - \hat{V}_{CR}^\dagger\hat{G}_R\hat{V}_{CR}\right)\hat{G}_C &= \hat{I}, \end{aligned} \quad (6.9)$$

Los términos $\hat{V}_{LC}^\dagger \hat{G}_L \hat{V}_{LC} \equiv \hat{\Sigma}_L$ y $\hat{V}_{CR}^\dagger \hat{G}_R \hat{V}_{CR} \equiv \hat{\Sigma}_R$ se conocen como las autoenergías del sistema,

$$\left(-\hat{\Sigma}_L + (E - \hat{H}_C) - \hat{\Sigma}_R\right) \hat{G}_C = \hat{I}, \quad (6.10)$$

de esta última ecuación [6.10](#) obtenemos la función de Green asociada a la región central:

$$\begin{aligned} \hat{G}_C &= \left(E - \hat{H}_C - \hat{\Sigma}_L - \hat{\Sigma}_R\right)^{-1} \\ \hat{G}_C &= \left(E - (\hat{H}_C + \hat{\Sigma}_L + \hat{\Sigma}_R)\right)^{-1}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Esta última ecuación indica que el efecto de los contactos sobre el dispositivo es adicionar las autoenergías al hamiltoniano del dispositivo; ya que cuando calculamos la función de Green en el dispositivo calculamos la función de Green para el hamiltoniano efectivo $\hat{H}_{eff} = \hat{H}_C + \hat{\Sigma}_L + \hat{\Sigma}_R$.

6.2 Sistema fuera del equilibrio

Cuando el sistema no está en equilibrio las funciones de onda asociadas con los electrones pueden pasar a través de la región central debido a la diferencia entre las funciones de Fermi en ambos contactos [2](#).

Considere el contacto L aislado de otros contactos y del dispositivo. A cierta energía tenemos soluciones correspondientes a una onda entrante que es totalmente reflejada en el final del contacto [1](#). Denotaremos estas soluciones con $|\psi_{L,n}\rangle$, donde L es el nombre del contacto y n es un número cuántico asociado a muchos modos en los contactos. Al conectar el contacto al dispositivo podemos calcular la función de onda total generada por la onda entrante por el contacto L (el electrón incidente actúa como una perturbación en la región central) que tiene la forma $|\psi_{L,n}\rangle + |\phi^R\rangle$; donde $|\psi_{L,n}\rangle$ es la onda

totalmente reflejada y $|\phi^R\rangle$ es la respuesta retardada del sistema. La ecuación de Schrödinger sería:

$$\begin{aligned}
\hat{H} (|\psi_{L,n}\rangle + |\phi^R\rangle) &= E (|\psi_{L,n}\rangle + |\phi^R\rangle), \\
\left(\hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_C + \hat{V}_{LC} + \hat{V}_{LC}^\dagger + \hat{V}_{CR}^\dagger + \hat{V}_{CR} \right) (|\psi_{L,n}\rangle + |\phi^R\rangle) &= \\
E (|\psi_{L,n}\rangle + |\phi^R\rangle), & \\
\hat{H}_L |\psi_{L,n}\rangle + \hat{H}_R |\psi_{L,n}\rangle + \hat{H}_C |\psi_{L,n}\rangle + \hat{V}_{LC} |\psi_{L,n}\rangle + \hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,n}\rangle + & \\
\hat{V}_{CR}^\dagger |\psi_{L,n}\rangle + \hat{V}_{CR} |\psi_{L,n}\rangle + \hat{H} |\phi^R\rangle &= E |\psi_{L,n}\rangle + E |\phi^R\rangle, \\
\left(E |\psi_{L,n}\rangle + \hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,n}\rangle \right) + \hat{H} |\phi^R\rangle &= E |\psi_{L,n}\rangle + E |\phi^R\rangle, \\
\hat{H} |\phi^R\rangle &= E |\phi^R\rangle - \hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,n}\rangle,
\end{aligned} \tag{6.12}$$

Se observa que $|\phi^R\rangle$ es la respuesta del sistema a la perturbación de $\hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,n}\rangle$. La última ecuación se puede escribir en la forma,

$$(E - \hat{H}) |\phi^R\rangle = \hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,n}\rangle, \tag{6.13}$$

De la ecuación [6.3](#) vemos que,

$$(E - \hat{H}) = \hat{G}^{-1}. \tag{6.14}$$

Al reemplazar [6.14](#) en [6.13](#),

$$\hat{G}^{-1} |\phi^R\rangle = \hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,n}\rangle, \tag{6.15}$$

finalmente obtenemos,

$$|\phi^R\rangle = \hat{G} \hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,n}\rangle. \tag{6.16}$$

La ecuación [6.16](#) es un estado de dispersión generado por el electrón incidente desde el contacto L representado por $|\psi_{L,n}\rangle$.

Con esto último presente y de forma directa se establece para $|\psi_C\rangle$,

$$|\psi_C\rangle = \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,n}\rangle. \quad (6.17)$$

Multiplicando la fila 3 por el vector $|\psi\rangle$ en la ecuación [6.2](#), se puede mostrar que la función de onda en el contacto R está dado por:

$$|\psi_R\rangle = \hat{G}_R \hat{V}_{CR} |\psi_C\rangle = \hat{G}_R \hat{V}_{CR} \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,n}\rangle. \quad (6.18)$$

Similarmente, se adiciona la onda incidente para hallar la función de onda en el contacto L; esto es:

$$|\psi_L\rangle = |\psi_{L,n}\rangle + \hat{G}_L \hat{V}_{LC} \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,n}\rangle = \left(1 + \hat{G}_L \hat{V}_{LC} \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger\right) |\psi_{L,n}\rangle, \quad (6.19)$$

Por medio de las funciones de onda [6.17](#) a [6.19](#) es posible calcular el conjunto completo de soluciones para la ecuación de Schrödinger en términos de la perturbación incidente $|\psi_{L,n}\rangle$.

Cuando se calcula la corriente electrónica a través del dispositivo es necesario conocer la densidad de carga en cada reservorio. Para el sistema fuera del equilibrio esta cantidad es diferente en cada uno. Iniciamos escribiendo la matriz densidad del sistema,

$$\rho = \sum_k f(E_k, E_F) |\psi_k\rangle \langle \psi_k|. \quad (6.20)$$

La ocupación electrónica de los reservorios puede ser medida por medio de la distribución de Fermi-Dirac en términos del nivel de Fermi $E_{F,L(R)}$ en cada reservorio a una temperatura fija T :

$$f(E_k, E_{F,L}) = \frac{1}{1 + e^{(E_k - E_{F,L})/k_\beta T}}. \quad (6.21)$$

El reservorio es el encargado de inyectar electrones a la región central. La suma en [6.20] corre sobre todos los estados ocupados dados por [6.21]. La función de onda en el dispositivo [6.17] generada por una onda entrante desde el contacto L y en un modo k es:

$$|\psi_{C,k}\rangle = \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,k}\rangle. \quad (6.22)$$

Con ayuda de la función delta de Dirac la ecuación [6.20] se puede escribir como,

$$\rho_{C,L} = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_k f(E, E_{F,L}) |\psi_{C,k}\rangle \langle \psi_{C,k}| \delta(E - E_k) dE, \quad (6.23)$$

usando [6.22] en [6.23],

$$\begin{aligned} \rho_{C,L} &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_k f(E, E_{F,L}) \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger |\psi_{L,k}\rangle \langle \psi_{L,k}| \hat{V}_{LC} \hat{G}_C^\dagger \delta(E - E_k) dE, \\ \rho_{C,L} &= \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger \left(\sum_k \delta(E - E_k) |\psi_{L,k}\rangle \langle \psi_{L,k}| \right) \hat{V}_{LC} \hat{G}_C^\dagger dE, \end{aligned} \quad (6.24)$$

el término entre paréntesis es conocido como la función espectral, de la cual solo mencionaremos que se escribe en términos de la función de Green avanzada \hat{G}^+ y retardada \hat{G}^- , y que además es solución de la ecuación de Schrödinger del sistema perturbado. Se define como:

$$\hat{D}(E) \equiv i(\hat{G}^+ - \hat{G}^-) = \sum_k \delta(E - E_k) |\psi_{L,k}\rangle \langle \psi_{L,k}|. \quad (6.25)$$

La ecuación [6.24] se reescribe,

$$\rho_{C,L} = \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger \hat{D}(E) \hat{V}_{LC} \hat{G}_C^\dagger dE, \quad (6.26)$$

teniendo en cuenta que,

$$\begin{aligned} \hat{V}_{LC}^\dagger \hat{D}(E) \hat{V}_{LC} &= \hat{V}_{LC}^\dagger \left(i \frac{\hat{G}^+ - \hat{G}^-}{2\pi} \right) \hat{V}_{LC} = \\ \frac{i}{2\pi} \left(\hat{V}_{LC}^\dagger \hat{G}^+ \hat{V}_{LC} - \hat{V}_{LC}^\dagger \hat{G}^- \hat{V}_{LC} \right) &= \frac{i}{2\pi} \left(\hat{\Sigma}^+ - \hat{\Sigma}^- \right) \equiv \frac{i}{2\pi} \hat{\Gamma}_L. \end{aligned} \quad (6.27)$$

El término $\hat{\Gamma}_L$ corresponde al potencial de acoplamiento entre la región central y el contacto L . Reemplazando [6.27](#) en [6.26](#),

$$\rho_{C,L} = \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \hat{G}_C \hat{\Gamma}_L \hat{G}_C^\dagger dE. \quad (6.28)$$

Similarmente, una expresión es obtenida para la densidad de carga asociada con el contacto R ,

$$\rho_{C,R} = \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,R}) \hat{G}_C \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C^\dagger dE. \quad (6.29)$$

La densidad de carga total es la suma sobre los dos contactos L y R , teniendo en cuenta el factor 2 por la degeneración de espín,

$$\begin{aligned} \rho &= 2(\rho_{C,L} + \rho_{C,R}), \\ \rho &= \frac{2}{2\pi} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \hat{G}_C \hat{\Gamma}_L \hat{G}_C^\dagger dE + \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,R}) \hat{G}_C \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C^\dagger dE \right], \\ \rho &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[f(E, E_{F,L}) \hat{G}_C \hat{\Gamma}_L \hat{G}_C^\dagger + f(E, E_{F,R}) \hat{G}_C \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C^\dagger \right] dE. \end{aligned} \quad (6.30)$$

Fisicamente se interpreta como la probabilidad de que la región central del sistema contenga uno de los estados electrónicos $|\psi_{L(R),k}\rangle$ provenientes de los contactor $L(R)$.

6.3 Corriente de probabilidad

Ahora es posible calcular la corriente de tunelamiento que es generada por la diferencia de población de electrones en ambos reservorios.

Se debe usar la conservación de la densidad de probabilidad total en el sistema completo [2].

La conservación de la densidad de probabilidad es un concepto importante en física y matemáticas, particularmente en mecánica cuántica. Se refiere al hecho de que la probabilidad total de encontrar una partícula en un sistema debe ser constante en el tiempo, es decir, la suma de todas las probabilidades de encontrar la partícula en todas las posiciones posibles debe permanecer constante a lo largo del tiempo:

$$0 = \frac{\partial \sum_j |\psi_j|^2}{\partial t} = \sum_j \frac{\partial \langle \psi | j \rangle \langle j | \psi \rangle}{\partial t} = \sum_j \left(\frac{\partial \langle \psi | j \rangle}{\partial t} \langle j | \psi \rangle + \langle \psi | j \rangle \frac{\partial \langle j | \psi \rangle}{\partial t} \right), \quad (6.31)$$

usando la ecuación de Schroödinger:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} &= \hat{H} |\psi\rangle, \\ \langle j | i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} &= \langle j | \hat{H} |\psi\rangle, \\ i\hbar \frac{\partial \langle j | \psi \rangle}{\partial t} &= \langle j | \hat{H} |\psi\rangle, \\ \frac{\partial \langle j | \psi \rangle}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} \langle j | \hat{H} |\psi\rangle, \end{aligned} \quad (6.32)$$

y también,

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial \langle \psi |}{\partial t} &= \langle \psi | \hat{H}, \\ -i\hbar \frac{\partial \langle \psi |}{\partial t} &= \langle \psi | \hat{H} | j \rangle, \\ -i\hbar \frac{\partial \langle j | \psi \rangle}{\partial t} &= \langle \psi | \hat{H} | j \rangle, \\ \frac{\partial \langle j | \psi \rangle}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{H} | j \rangle, \end{aligned} \quad (6.33)$$

reemplazando [6.32](#) y [6.33](#) en [6.31](#),

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_j \left(\frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{H} | j \rangle \langle j | \psi \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi | j \rangle \langle j | \hat{H} | \psi \rangle \right), \\
0 &= \frac{i}{\hbar} \sum_j \left(\langle \psi | \hat{H} | j \rangle \langle j | \psi \rangle - \langle \psi | j \rangle \langle j | \hat{H} | \psi \rangle \right), \\
0 &= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \psi | \hat{H} \left[\sum_j | j \rangle \langle j | \psi \rangle \right] - \left[\sum_j \langle \psi | j \rangle \langle j | \right] \hat{H} | \psi \rangle \right).
\end{aligned} \tag{6.34}$$

Por otro lado, vemos que:

$$\begin{aligned}
|\psi_C\rangle &= \left(\sum_j | j \rangle \langle j | \right) |\psi_C\rangle = \sum_j | j \rangle \langle j | \psi_C\rangle = \sum_j | j \rangle \psi_j = \sum_j | j \rangle \langle j | \psi \rangle, \\
\langle \psi_C | &= \langle \psi_C | \left(\sum_j | j \rangle \langle j | \right) = \sum_j \langle \psi_C | j \rangle \langle j | = \sum_j \psi_j^* \langle j | = \sum_j \langle \psi | j \rangle \langle j |,
\end{aligned} \tag{6.35}$$

que al reemplazar [6.35](#) en [6.34](#) y expandir \hat{H} ,

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \psi | \hat{H} | \psi_C \rangle - \langle \psi_C | \hat{H} | \psi \rangle \right), \\
0 &= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \psi | \left(\hat{H}_C + \hat{V}_{LC} + \hat{V}_{CR} \right) | \psi_C \rangle - \langle \psi_C | \left(\hat{H}_C + \hat{V}_{LC}^\dagger + \hat{V}_{CR}^\dagger \right) | \psi \rangle \right), \\
0 &= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \psi | \hat{H}_C | \psi_C \rangle + \langle \psi | \hat{V}_{LC} | \psi_C \rangle + \langle \psi | \hat{V}_{CR} | \psi_C \rangle - \langle \psi_C | \hat{H}_C | \psi \rangle - \right. \\
&\quad \left. \langle \psi_C | \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi \rangle - \langle \psi_C | \hat{V}_{CR}^\dagger | \psi \rangle \right), \\
0 &= \frac{i}{\hbar} \left(E_C \langle \psi | \psi_C \rangle + \langle \psi | \hat{V}_{LC} | \psi_C \rangle + \langle \psi | \hat{V}_{CR} | \psi_C \rangle - E_C \langle \psi_C | \psi \rangle - \right. \\
&\quad \left. \langle \psi_C | \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi \rangle - \langle \psi_C | \hat{V}_{CR}^\dagger | \psi \rangle \right), \\
0 &= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \psi | \hat{V}_{LC} | \psi_C \rangle + \langle \psi | \hat{V}_{CR} | \psi_C \rangle - \langle \psi_C | \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi \rangle - \langle \psi_C | \hat{V}_{CR}^\dagger | \psi \rangle \right), \\
0 &= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \psi_L | \hat{V}_{LC} | \psi_C \rangle - \langle \psi_C | \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_L \rangle \right) + \left(\langle \psi_R | \hat{V}_{CR} | \psi_C \rangle - \langle \psi_C | \hat{V}_{CR}^\dagger | \psi_R \rangle \right),
\end{aligned} \tag{6.36}$$

Los términos individuales y entre paréntesis corresponden a las **corrientes de probabilidad** entrantes desde los contactos L y R. Para un contacto arbitrario k , la **corriente eléctrica** está dada:

$$i_k = -\frac{ie}{\hbar} \left(\langle \psi_k | \hat{V}_{Ck} | \psi_C \rangle - \langle \psi_C | \hat{V}_{Ck}^\dagger | \psi_k \rangle \right). \quad (6.37)$$

En términos de la función de onda $|\psi_{L,n}\rangle$ y haciendo uso de [6.17](#), [6.18](#) y [6.19](#) la corriente eléctrica es:

$$\begin{aligned} i_{L \rightarrow R} &= -\frac{ie}{\hbar} \left(\langle \psi_R | \hat{V}_{CR} | \psi_C \rangle - \langle \psi_C | \hat{V}_{CR}^\dagger | \psi_R \rangle \right), \\ i_{L \rightarrow R} &= -\frac{ie}{\hbar} \left(\langle \psi_R | \hat{V}_{CR} \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_{L,n} \rangle - \langle \psi_{L,n} | \hat{V}_{LC} \hat{G}_C^\dagger \hat{V}_{CR}^\dagger | \psi_R \rangle \right), \end{aligned} \quad (6.38)$$

$$i_{L \rightarrow R} = -\frac{ie}{\hbar} \langle \psi_{L,n} | \hat{V}_{LC} \hat{G}_C^\dagger \hat{V}_{CR}^\dagger \left[\hat{G}_R^\dagger - \hat{G}_R \right] \hat{V}_{CR} \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_{L,n} \rangle,$$

teniendo en cuenta [6.27](#) reescribimos,

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}_R &= i \left[\hat{\Sigma}_R^+ - \hat{\Sigma}_R^- \right], \\ \hat{\Gamma}_R &= i \left[\hat{V}_{CR}^\dagger \hat{G}_R^\dagger \hat{V}_{CR} - \hat{V}_{CR}^\dagger \hat{G}_R^- \hat{V}_{CR} \right], \\ \hat{\Gamma}_R &= i \hat{V}_{CR}^\dagger \left[\hat{G}_R^\dagger - \hat{G}_R^- \right] \hat{V}_{CR}, \\ \hat{\Gamma}_R &= i \hat{V}_{CR}^\dagger \left[\hat{G}_R^\dagger - (\hat{G}_R^\dagger)^\dagger \right] \hat{V}_{CR}, \\ i \hat{\Gamma}_R &= -\hat{V}_{CR}^\dagger \left[\hat{G}_R^\dagger - (\hat{G}_R^\dagger)^\dagger \right] \hat{V}_{CR}, \\ i \hat{\Gamma}_R &= \hat{V}_{CR}^\dagger \left[\hat{G}_R - \hat{G}_R^\dagger \right] \hat{V}_{CR}, \end{aligned} \quad (6.39)$$

Remplazando estos resultados de [6.39](#) en la expresión [6.38](#) para $i_{L \rightarrow R}$, obtenemos,

$$\begin{aligned} i_{L \rightarrow R} &= -\frac{ie}{\hbar} \langle \psi_{L,n} | \hat{V}_{LC} \hat{G}_C^\dagger i \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_{L,n} \rangle, \\ i_{L \rightarrow R} &= \frac{e}{\hbar} \langle \psi_{L,n} | \hat{V}_{LC} \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_{L,n} \rangle, \end{aligned} \quad (6.40)$$

Esta ecuación corresponde a la corriente en el dispositivo de un electrón incidente $|\psi_{L,n}\rangle$ de una energía E y en el modo n en el contacto L a través del acoplamiento \hat{V}_{CR} . Sumando sobre los n modos y teniendo en cuenta el espín (2),

$$i_{L \rightarrow R} = \frac{2e}{\hbar} f(E, E_{F,L}) \sum_n \delta(E - E_n) \langle \psi_{L,n} | \hat{V}_{LC} \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_{L,n} \rangle. \quad (6.41)$$

Finalmente se suma sobre todas las posibles energías E de la onda incidente:

$$\begin{aligned} I_{L \rightarrow R} &= \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \sum_n \delta(E - E_n) \langle \psi_{L,n} | \hat{V}_{LC} \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_{L,n} \rangle dE, \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \sum_n \delta(E - E_n) \langle \psi_{L,n} | \hat{V}_{LC} \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_{L,n} \rangle dE, \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \sum_n \delta(E - E_n) \langle \psi_{L,n} | \hat{V}_{LC} \left(\sum_m |m\rangle \langle m| \right) \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_{L,n} \rangle dE, \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \sum_{m,n} \delta(E - E_n) \langle \psi_{L,n} | \hat{V}_{LC} |m\rangle \langle m| \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_{L,n} \rangle dE, \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \sum_{m,n} \delta(E - E_n) \langle m| \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_{L,n} \rangle \langle \psi_{L,n} | \hat{V}_{LC} |m\rangle dE, \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \sum_{m,n} \langle m| \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger \delta(E - E_n) | \psi_{L,n} \rangle \langle \psi_{L,n} | \hat{V}_{LC} |m\rangle dE, \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \\ &\quad \sum_m \langle m| \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{V}_{LC}^\dagger \left(\sum_n \delta(E - E_n) | \psi_{L,n} \rangle \langle \psi_{L,n} | \right) \hat{V}_{LC} |m\rangle dE. \end{aligned}$$

Usando la ecuación [6.25](#) y [6.27](#) tenemos,

$$\begin{aligned}
I_{L \rightarrow R} &= \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \sum_m \langle m | \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \left(\frac{\hat{\Gamma}_L}{2\pi} \right) | m \rangle dE, \\
I_{L \rightarrow R} &= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \sum_m \langle m | \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{\Gamma}_L | m \rangle dE, \quad (6.43) \\
I_{L \rightarrow R} &= \frac{e}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \sum_m \langle m | \hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{\Gamma}_L | m \rangle dE, \\
I_{L \rightarrow R} &= \frac{e}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(E, E_{F,L}) \mathbf{Tr} \left(\hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{\Gamma}_L \right) dE,
\end{aligned}$$

Luego entonces, la corriente total a través del dispositivo es,

$$\begin{aligned}
I &= I_{L \rightarrow R} - I_{R \rightarrow L}, \quad (6.44) \\
I &= \frac{e}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} [f(E, E_{F,L}) - f(E, E_{F,R})] \mathbf{Tr} \left(\hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{\Gamma}_L \right) dE.
\end{aligned}$$

La transmisión en el sistema puede ser calculada por las funciones de Green de acuerdo a la relación conocida como relación de Fischer-Lee [3](#),

$$\mathbf{T}(E) = \mathbf{Tr} \left(\hat{G}_C^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_C \hat{\Gamma}_L \right) \quad (6.45)$$

La corriente de tunelamiento finalmente es obtenida en términos de la diferencia de población electrónica en ambos reservorios y la probabilidad de transmisión a través del sistema,

$$I = \frac{e}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} [f(E, E_{F,L}) - f(E, E_{F,R})] \mathbf{T}(E) dE. \quad (6.46)$$

6.4 Referencias

- [1] Gil J. A. **Electronic properties in heterostructures under external fields**. [Tesis doctoral]. Medellín: Universidad de

Antioquia; 2022.

- [2] Paulsson M. **Non Equilibrium Greenâs Functions for Dummies: Introduction to the One Particle NEGF equations, Mesoscale and Nanoscale Physics**, cond-mat.mes-hall,2008, pp9
- [3] Data S. **Electronic transport in mesoscopic systems**, UK, Cambridge University Press, 1997.