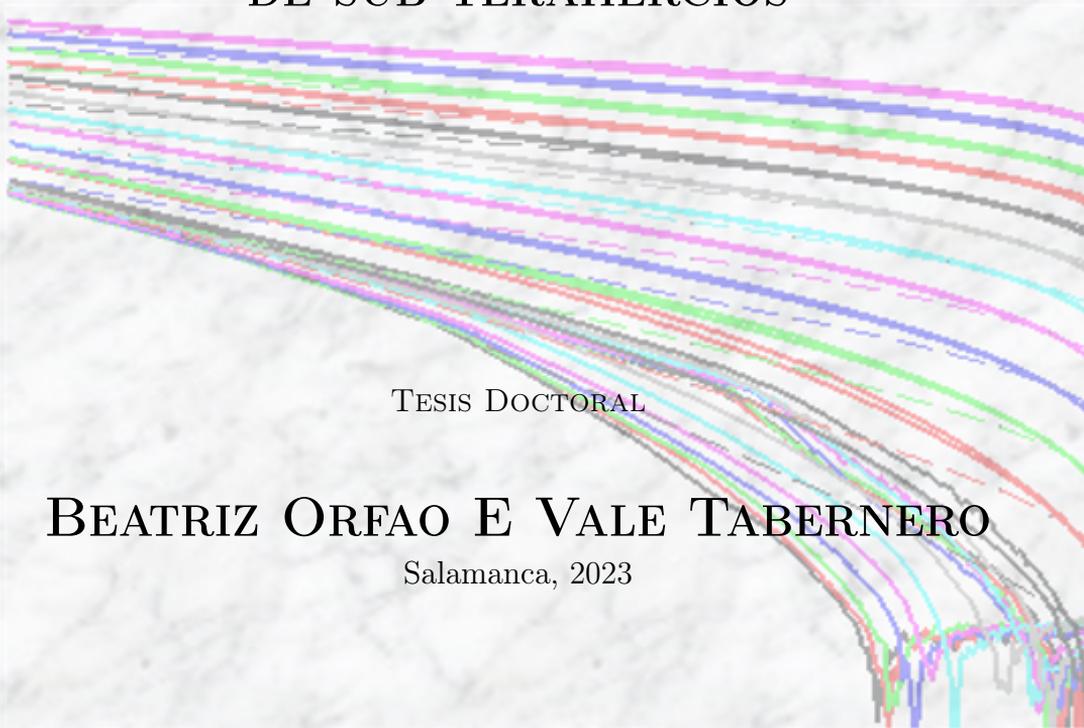




**VNiVERSIDAD
D SALAMANCA**

CAMPUS OF INTERNATIONAL EXCELLENCE

**SIMULACIÓN, FABRICACIÓN
Y CARACTERIZACIÓN
DE DIODOS DE BARRERA SCHOTTKY
DE NITRURO DE GALIO
PARA APLICACIONES EN EL RANGO
DE SUB-TERAHERCIOS**



TESIS DOCTORAL

BEATRIZ ORFAO E VALE TABERNERO

Salamanca, 2023



D. TOMÁS GONZÁLEZ SÁNCHEZ, Catedrático de Electrónica del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Salamanca, y **D. JAVIER MATEOS LÓPEZ**, Catedrático de Electrónica del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Salamanca,

CERTIFICAN:

Que la memoria del trabajo de investigación titulado “Simulación, fabricación y caracterización de diodos de barrera Schottky de nitruro de galio para aplicaciones en el rango de sub-terahercios” ha sido realizada por **Dña. BEATRIZ ORFAO E VALE TABERNERO** para optar al TÍTULO DE DOCTOR CON MENCIÓN DE DOCTOR INTERNACIONAL por la Universidad de Salamanca, bajo el marco del programa de doctorado **FÍSICA APLICADA Y TECNOLOGÍA**, y que ha sido desarrollada en su totalidad bajo la dirección de los directores de Tesis, en el Área de Electrónica del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Salamanca.

En Salamanca, a 27 de abril de 2023

Autor de la Tesis

Beatriz Orfao E Vale Tabernero

Directores

Tomás González Sánchez
Catedrático de Electrónica
Departamento de Física Aplicada

Javier Mateos López
Catedrático de Electrónica
Departamento de Física Aplicada

A mis padres, a mis hermanos,
a mis abuelas

Sabiduría es conocer y transformar.
Paulo Coelho.

Agradecimientos

En primer lugar me gustaría expresar mi gratitud a mis directores de tesis, los profesores Tomás González y Javier Mateos, que a lo largo de estos años han contribuido a mi desarrollo profesional y personal, y que han hecho posible que este trabajo pueda ver la luz. Gracias por toda la ayuda brindada, compromiso y profesionalidad mostrada durante estos cuatro años en mi formación como investigadora, profesora e incluso persona. Les agradezco su colaboración y disponibilidad absoluta y espero haber correspondido a la confianza que depositaron en mí y seguir aprendiendo de ellos en el futuro y contar con su apoyo.

De igual modo, no puedo dejar de agradecer a Susana Pérez y Beatriz García Vasallo por todas sus sugerencias y su participación activa a lo largo de toda mi tesis. A Ignacio Íñiguez de la Torre y Raúl Rengel por ayudarme a desenvolver mis capacidades como docente. Y al resto de miembros del Área de Electrónica de la Universidad de Salamanca, María Jesús Martín, Elena Pascual, Jesús Enrique Velázquez, Yahya Meziani y Roger Peña. Quiero también acordarme de los compañeros del edificio I+D+i Daniel Vaquero, Adrián Martín, Juanan Delgado y Juan Salvador, gracias por toda vuestra colaboración, y de forma especial a Vito Clericò por el tiempo y la dedicación empleados en enseñarme los fundamentos básicos de la fabricación.

Un especial agradecimiento se merecen mis compañeros Sergio García, Gaudencio Paz, Marcel Vicente y Héctor Sánchez por todas las horas de trabajo juntos, y por la ayuda y apoyo inestimables que me habéis brindado, haciendo más ameno y agradable el día a día. Y sobre todo, a mi compañera de despacho y amiga Elsa Pérez, con la cual he vivido desde el principio este bonito pero duro camino de doctorarse. Gracias por las risas y horas juntas, dentro y fuera del trabajo. Sin ti la tesis no hubiera sido lo mismo, gracias.

A los profesores Mohammed Zaknoune y Yannick Roelens, responsables de mi estancia en Lille en el laboratorio del Institut d'Électronique de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN). Quiero agradecerles la acogida y oportunidad de permitirme formar parte de su grupo durante unos meses muy fructíferos de trabajo y

formación. A mis compañeros franceses, Mahmoud Abou Daher y Hugo Bouillaud, por acogerme como una más del grupo y a todos los integrantes del grupo Anode (advanced nanometric devices) del IEMN que se implicaron y volcaron durante mi estancia.

Aux professeurs Mohammed Zaknoune et Yannick Roelens, je tiens à vous remercier pour votre accueil lors de mon séjour à Lille, mais également pour m' avoir permit de travailler à vos côtés et ce au sein de l' Institut d' Électronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN). Grâce à vous ce séjour fut des plus enrichissants. A mes collègues français Mahmoud Abou Daher et Hugo Bouillaud, vous m' avez accueilli comme un membre de votre équipe, et pour cela je vous remercie grandement. Enfin, je souhaite également remercier tous les membres du groupe Anode (advanced nanometric devices) pour l' implication dont ils ont fait preuve durant mon séjour.

Por último, y no menos importante, quiero agradecer a mi familia por toda la ayuda que me han brindado en cada paso de este periodo de mi vida, cuatro años muy enriquecedores. A mis padres, dos grandes investigadores que son mis referentes a nivel profesional y personal, gracias por el apoyo en los buenos y malos momentos. A mis abuelas por inculcarme la importancia de perseguir los sueños. Y por supuesto, a mis hermanos Alberto y Guillermo, dos pilares fundamentales en mi vida que siempre me han dado el apoyo y amor incondicional que he necesitado. A Ronan, por estar presente estos últimos meses y todas las llamadas desesperadas. Gracias a mi grupo de amigos de la carrera Noe, Laura, Ana, Nere, Javi, Cesitar, Sergio, Ger y especialmente a mi otra mitad, Vega. A todos mis amigos y amigas, destacando a Silvia, Igor, Loriz, Diego, Paola, Ana y Teresa que forman parte de mi familia y han entendido mi desconexión del mundo durante estos últimos meses.

Abstract

The aim of this thesis is to study gallium nitride (GaN) and gallium arsenide (GaAs) Schottky barrier diodes (SBDs) in DC and AC regimes from the point of view of experiments and simulations. On one hand, the non linearity of the voltage-dependent capacitance found in these diodes allows their operation as frequency multipliers. On the other hand, the non linearity of the current-voltage characteristic is fundamental for its operation as mixers and detectors. Despite of the good properties of GaN, there are still technological challenges that should be studied to develop the future electronic devices for high frequency and high power applications.

The simulations have been performed by means of a homemade Monte Carlo (MC) simulator, developed by the Research Group on High-Frequency Nanoelectronic Devices at the University of Salamanca. The simulation tool includes two surface charge models: (i) constant charge model (CCM) and (ii) self-consistent charge model (SCCM), based on an update of the surface charge considering the carrier concentration in the vicinity. The results demonstrate that the SCCM provides more realistic results, being the computational time the main advantage of CCM.

An analysis of the capacitance associated with the 2-D effects or edge effects for different GaAs and GaN diodes has been performed using simulations. The charge inside the device can be calculated by means of the MC model, thus obtaining, for different applied voltages, the ideal and edge effects contributions to the total capacitance. The influence of the doping level, passivation or geometrical parameters on the edge effect capacitance has been investigated. The main objective of this study is to optimize the Schottky diode, reducing the capacitance to improve its performance as a frequency multiplier and to obtain a more precise analytical formula describing the capacitance-voltage dependence in order to include it in the circuit simulators used to design the frequency multipliers, and enhance their predictive capabilities. Simulations show a decrease of the edge effects when the epilayer lateral extension is reduced, being even suppressed when the epilayer and the Schottky contact are aligned.

The comparison between static current-voltage measurements carried out as a function of temperature and a theoretical analytical model developed to estimate the ideal current has allowed us to study the additional reverse current mechanisms. The characteristic parameters of a Schottky diode such as doping level, barrier height or series resistance are needed for the model. These parameters are extracted from the fitting with the experimental curves in forward bias, considering the image force effect. The ideal current is calculated considering two contributions: the thermionic emission and tunneling current, generated by tunneled electrons from the metal to the semiconductor. The experimental curves show a nearly ideal behavior for the highest temperatures, validating our model. For all other temperatures, additional current contributions are generated by the presence of traps in the semiconductor. These current contributions are produced by two different mechanisms: Poole-Frenkel emission and trap-assisted tunneling.

The breakdown voltage is a key parameter in Schottky diodes that are used as multipliers. For this reason, simulations in reverse bias conditions have been performed for the understanding and optimization of the diode breakdown. First, unidimensional simulations have been done, showing the importance of considering a precise tunnel injection, the impact ionization phenomena and both electron and hole transport, being especially relevant the self-consistency between the carrier concentration and barrier profile to determine the tunnel injection. However, the 2-D effects in real diodes are important, especially for reverse bias where the higher value of the electric field found at the edge of the Schottky contact leads to an increase of the tunnel injection near this area. So, bidimensional simulations have been carried out. The tunneled electrons may generate impact ionizations leading to the breakdown of the diode. Diodes with different doping levels, thickness of epilayer and passivation dielectrics have been simulated, observing the effects on the leakage current and breakdown voltage. This voltage is enhanced with the diode passivation.

A small signal equivalent circuit description of the diodes has been obtained and an excellent agreement with the measured S -parameters has been achieved for different diodes. Extracting the values of the circuit elements, including the parasitics, allows to understand the dependence of the performance on the different geometrical and technological parameters. In addition, Schottky diodes can be also used as detectors and measurements of the responsivity are included in this work. When the diodes are biased, they present good capabilities as detectors, providing a constant responsivity up to a cut-off frequency of 20 GHz in GaN and 25 GHz in GaAs. At low frequencies, the responsivity extracted from measurements shows a good agreement with the calculations performed by means of a quasi-static model based on the resistance and curvature of the current-voltage characteristic.

Keywords: gallium nitride (GaN), Schottky-barrier diode (SBD), edge effects, passivation, Monte Carlo (MC), thermionic emission, tunneling current, breakdown voltage, impact ionization, traps, small-signal equivalent circuit (SSEC).

Resumen

En esta tesis se aborda el estudio de diodos de barrera Schottky (SBDs) de nitruro de galio (GaN) y arseniuro de galio (GaAs), tanto en el régimen DC como en AC, desde el punto de vista experimental y de simulaciones. La no linealidad de la característica capacidad-voltaje de estos diodos permite su operación como multiplicadores de frecuencia. Por otro lado, la no linealidad de la curva corriente-voltaje es clave para su uso como mezcladores y detectores. A pesar de las buenas propiedades del GaN, existen problemas tecnológicos que deben ser abordados para el progreso de los dispositivos electrónicos que se utilizan en aplicaciones de alta frecuencia y alta potencia.

Las simulaciones se han realizado con una herramienta Monte Carlo (MC) desarrollada por el grupo de Nanodispositivos Electrónicos de Alta Frecuencia de la Universidad de Salamanca. El simulador dispone de dos modelos de carga superficial: (i) modelo de carga constante (CCM) y (ii) modelo de carga autoconsistente (SCCM), que se basa en la actualización de la carga de superficie en función de la concentración de portadores en las proximidades. Los resultados obtenidos demuestran que el SCCM proporciona resultados más realistas, siendo la ventaja del CCM el tiempo de cálculo más reducido.

Se ha realizado un análisis de la capacidad asociada a los efectos bidimensionales o de borde para distintos diodos de GaAs y GaN, a través de simulaciones. El modelo MC permite calcular la carga en el interior del dispositivo, proporcionando así la capacidad ideal asociada al vaciamiento y la debida a los efectos de borde para distintos puntos de polarización. Se ha estudiado la influencia del dopaje, la pasivación o parámetros geométricos en la capacidad asociada a los efectos de borde. El objetivo de dicho estudio es optimizar el diodo Schottky, reduciendo la capacidad al máximo para su funcionamiento como multiplicador, y obtener expresiones analíticas que puedan ser utilizadas en simuladores circuitales y así predecir de forma más precisa las prestaciones de los multiplicadores de frecuencia y otros circuitos basados en SBDs. Las simulaciones muestran la disminución de los efectos de borde al reducir la extensión

lateral de la *epilayer*, llegando incluso a suprimirse cuando se alinean la *epilayer* y el contacto.

La comparación entre medidas estáticas de corriente-voltaje realizadas en temperatura y un modelo desarrollado para estimar la corriente ideal en el diodo ha permitido estudiar los mecanismos de corriente de pérdidas adicionales en inversa. Para dicho modelo, se deben utilizar una serie de parámetros característicos del diodo Schottky, como son: el dopaje, la altura de la barrera o la resistencia serie. Estos parámetros se obtienen del ajuste de las curvas experimentales en directa, teniendo en cuenta el efecto de la carga imagen. La corriente ideal considera dos contribuciones: la emisión termoiónica y la corriente túnel (generada por electrones que pasan desde el metal al semiconductor). Las medidas muestran un comportamiento ideal para las temperaturas más altas, hecho que muestra la validez del modelo. El resto de temperaturas han revelado la existencia de contribuciones adicionales de corriente generadas por la presencia de trampas, y que se producen por dos mecanismos diferentes: emisión de Poole-Frenkel y túnel asistido por trampas.

El voltaje de ruptura de los diodos Schottky es clave en su uso como multiplicadores, por lo que se han realizado simulaciones para tratar de entender y optimizar la ruptura del diodo. En primer lugar se han realizado simulaciones unidimensionales, mostrando la necesidad de considerar de manera adecuada la inyección túnel, la ionización por impacto y el transporte de electrones y huecos, siendo importante la autoconsistencia entre la concentración de portadores y el perfil de la barrera para determinar la inyección túnel. Sin embargo, en dispositivos reales los efectos bidimensionales son importantes y deben considerarse especialmente en inversa cuando el valor del campo eléctrico es más elevado en el borde del contacto, lo cual produce un aumento de la inyección túnel en esta zona. Por ello, se han llevado a cabo simulaciones bidimensionales. Los altos campos eléctricos hacen que aumente la inyección túnel, y esos electrones, al provocar ionizaciones por impacto, pueden producir la ruptura del diodo. Se han simulado diodos con diferentes dopajes, espesores de la *epilayer* y dieléctricos de pasivación, observándose que todos ellos afectan, en mayor o menor medida, a la corriente de pérdidas y al voltaje de ruptura. Se ha comprobado que la pasivación del diodo mejora el valor del voltaje de ruptura.

Se han obtenido los elementos discretos necesarios para representar mediante un circuito equivalente el comportamiento AC de los SBDs, obteniéndose un excelente acuerdo con los parámetros S medidos para diferentes diodos. La extracción de los elementos del circuito, incluyendo los parásitos, nos permite analizar su dependencia con parámetros geométricos y tecnológicos. Además los diodos Schottky pueden ser usados como detectores, por lo que se analizan los valores de la responsividad obtenidos experimentalmente. Los diodos medidos muestran buenas prestaciones como

detectores cuando se polarizan, obteniéndose un valor constante de la responsividad hasta una frecuencia de corte de 20 GHz para el diodo de GaN, mientras que para el diodo de GaAs se determinó una frecuencia de corte de 25 GHz. Para bajas frecuencias, la responsividad obtenida a partir de las medidas y la calculada con un modelo cuasiestático, cuya responsividad está directamente relacionada con la resistencia y la curvatura de la característica corriente-voltaje, prácticamente coinciden.

Palabras clave: nitruro de galio (GaN), diodo de barrera Schottky (SBD), efectos de borde, pasivación, Monte Carlo (MC), emisión termoiónica, corriente túnel, voltaje de ruptura, ionización por impacto, trampas, circuito equivalente de pequeña señal (SSEC).

Tabla de Contenidos

| | |
|---|-------------|
| Abstract | IX |
| Resumen | XIII |
| Introducción | XIX |
| 1. Diodos de barrera Schottky: Conceptos básicos y simulador Monte Carlo | 1 |
| 1.1. Descripción del dispositivo | 3 |
| 1.2. Parámetros característicos y mecanismos de corriente | 6 |
| 1.2.1. Conceptos básicos | 6 |
| 1.2.2. Procesos de transporte de corriente | 9 |
| 1.2.2.1. Emisión termoiónica | 10 |
| 1.2.2.2. Emisión túnel | 11 |
| 1.2.2.3. Mecanismos de pérdidas | 14 |
| 1.3. Monte Carlo | 15 |
| 1.3.1. Simulador de dispositivos | 16 |
| 1.3.2. Materiales semiconductores y sistema físico | 19 |
| 1.3.2.1. Bandas de energía | 19 |
| 1.3.2.2. Mecanismos de <i>scattering</i> | 20 |
| 1.3.2.3. Ionización por impacto | 21 |
| 1.3.3. Inyección túnel | 23 |
| 1.3.4. Cálculo de la corriente | 25 |
| 1.3.5. Resolución de la ecuación de Poisson | 26 |
| 2. Efectos de borde en diodos de barrera Schottky | 29 |
| 2.1. Los dispositivos | 30 |

| | |
|---|------------|
| 2.1.1. Estructuras simuladas | 30 |
| 2.2. Voltaje de difusión, $V_{n^{++}-n^{-}}$ | 32 |
| 2.3. Simulaciones 2-D | 35 |
| 2.3.1. Modelo de carga constante (CCM) | 36 |
| 2.3.2. Modelo de carga autoconsistente (SCCM) | 44 |
| 2.4. Efecto del dieléctrico | 51 |
| 3. Diodos de barrera Schottky: Comportamiento en DC | 63 |
| 3.1. Dispositivos | 64 |
| 3.2. Montajes experimentales | 67 |
| 3.3. Temperatura ambiente | 72 |
| 3.3.1. Características $I-V$ | 73 |
| 3.3.2. Características $C-V$ | 80 |
| 3.4. Modelo corriente ideal en inversa | 85 |
| 3.5. Medidas a diferentes temperaturas | 88 |
| 3.5.1. Run 1 | 89 |
| 3.5.1.1. Características $C-V-T$ | 89 |
| 3.5.1.2. Características $I-V-T$ | 90 |
| 3.5.2. Run 2 | 102 |
| 3.5.2.1. Características $C-V-T$ | 102 |
| 3.5.2.2. Características $I-V-T$ | 104 |
| 3.6. Análisis MC en condiciones de fuerte polarización en inversa | 111 |
| 3.6.1. Modelo 1-D | 111 |
| 3.6.2. Modelo 2-D sin procesos de II | 119 |
| 3.6.3. Modelo 2-D con procesos de II | 123 |
| 4. Diodos de barrera Schottky: comportamiento en AC | 133 |
| 4.1. Montajes experimentales | 133 |
| 4.2. Circuito equivalente de pequeña señal | 137 |
| 4.2.1. <i>De-embedding</i> | 138 |
| 4.2.2. SBDs de GaAs | 141 |
| 4.2.3. SBDs de GaN | 146 |
| 4.3. Detección de potencia RF | 149 |
| Conclusions/Conclusiones | 161 |
| Bibliografía | 177 |

Introducción

El rango de los terahercios comprende por definición frecuencias de entre 100 GHz y 10 THz [1, 2]. En la figura 1 se representa el espectro electromagnético, indicándose algunas de las posibles aplicaciones para dichas frecuencias, que incluyen entre otras: seguridad [3], diagnóstico médico [4], comunicaciones [5], ingeniería aeroespacial [6] o automovilística [7]. La identificación de múltiples aplicaciones ha permitido y estimulado el desarrollo de la tecnología en los últimos años, aunque siguen quedando aún importantes retos tecnológicos para su desarrollo.

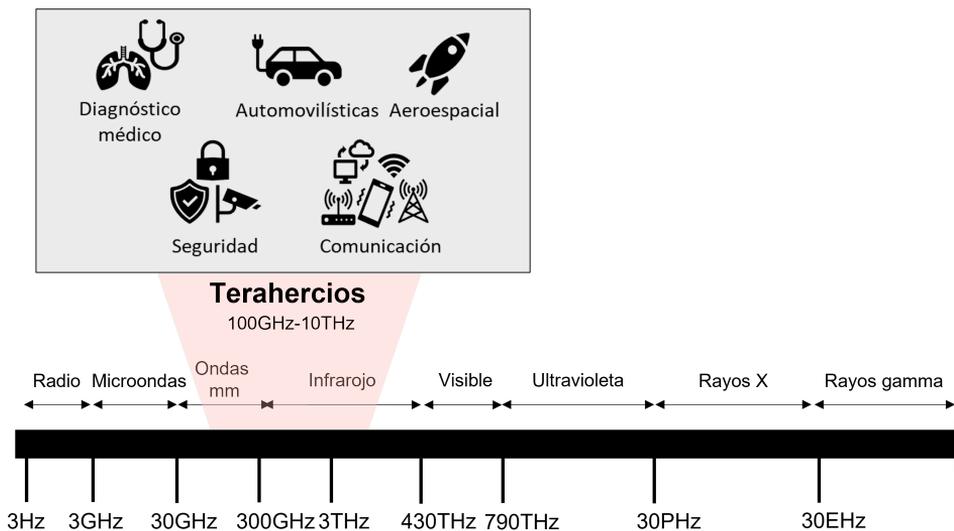


Figura 1: Espectro electromagnético destacando el rango de frecuencias de terahercios y algunas de las aplicaciones.

Los detectores de THz han evolucionado de forma exitosa en los últimos años. Sin embargo, el desarrollo de fuentes eficientes en este rango de frecuencia supone todavía un reto. Un nuevo campo de investigación surge de la necesidad de disponer de dispositivos de estado sólido compactos capaces de generar señales de potencia

suficiente en este rango [8]. A estas frecuencias, algunas de las limitaciones más importantes son: la potencia de salida, las temperaturas de operación criogénicas, el tamaño, la complejidad o el elevado coste de los dispositivos. En la figura 2 se muestra una representación gráfica de la potencia de salida frente a la frecuencia para las principales fuentes de THz [9]. Para frecuencias menores de 1 THz predominan los amplificadores que trabajan como osciladores basados en transistores, y otras fuentes electrónicas como diodos Gunn y diodos túnel resonantes (RTDs). Para frecuencias cercanas a 1 THz destacan los multiplicadores de frecuencia, generalmente basados en diodos Schottky. Finalmente, por encima de 10 THz se encuentran los láseres de gas, láseres de cascada cuántica (QCL) y otras tecnologías ópticas.

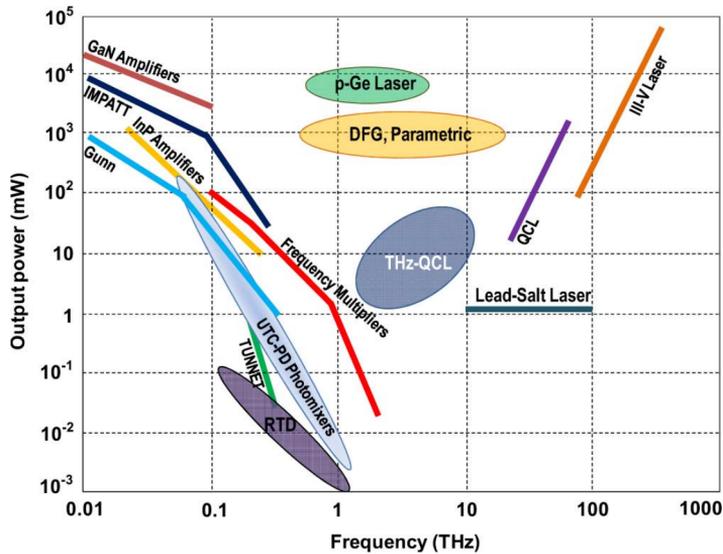


Figura 2: Representación de la potencia de salida frente a la frecuencia para las principales fuentes de THz extraída de [9].

Los diodos Schottky juegan un papel fundamental entre las diferentes tecnologías disponibles para fuentes de THz. Gracias a su no linealidad y rapidez estos diodos pueden usarse como detectores, mezcladores y multiplicadores de frecuencia en ese rango. Destacando los detectores heterodinos formados por un oscilador local (LO, *local oscillator*) que genera una señal, la cual es multiplicada N veces hasta alcanzar la frecuencia necesitada por un mezclador, a donde a su vez, llega la señal de radiofrecuencia (RF). De hecho, una de las características más destacables de estos diodos es su alta frecuencia de corte. El uso habitual de diodos de barrera Schottky (SBDs) de arseniuro de galio (GaAs) como multiplicadores de frecuencia [2, 10] a partir de osciladores fundamentales, tales como TUNNET, IMPATT o diodos Gunn, se ve fa-

vorecido por su reducido tamaño, la facilidad de sintonización y el nivel de potencia obtenido. Sin embargo, persiste una importante limitación relacionada con la falta de fuentes fundamentales de sub-THz con suficiente potencia.

Multiplicadores de frecuencia basados en diodos de barrera Schottky

Un multiplicador de frecuencia es un componente electrónico utilizado para proporcionar una señal de alta frecuencia en un sistema eléctrico. A partir de una señal de entrada de baja frecuencia, se generan armónicos de distinto orden basados en la no linealidad del dispositivo [11]. Los multiplicadores de frecuencia tienen el objetivo de aumentar la frecuencia de la señal de entrada y sus principales características son: una estructura compacta, un bajo consumo de potencia y un comportamiento/rendimiento estable. El desarrollo de los multiplicadores de frecuencia de estado sólido basados en SBDs en el rango de los THz ha avanzado considerablemente gracias a la investigación realizada en grandes empresas e instituciones como Virginia Diodes Inc. y JPL en Estados Unidos, ACST en Alemania, LERMA en Francia y Teratech en el Reino Unido [12, 13, 14, 15]. En la figura 3 se muestran diferentes imágenes de un doblador [16], incluyendo desde fotos del bloque compacto hasta un esquema del módulo MMIC (*monolithic microwave integrated circuits*).

El objetivo principal en la fabricación de un buen multiplicador de frecuencia consiste en determinar los parámetros físicos óptimos del diodo, y establecer la adaptación en cada armónico, tratando de maximizar la transferencia de energía. Al aumentar la frecuencia, el proceso se complica y es necesario utilizar modelos electromagnéticos. La metodología a emplear a la hora de diseñar y optimizar un módulo MMIC basado en un diodo Schottky para su utilización como multiplicador de frecuencia consta de tres bloques principales: la optimización de la estructura del diodo, la optimización electromagnética del MMIC (incluye los diodos, una zona del canal y una sección de la línea de transmisión) y la optimización del circuito completo [17]. El bloque de optimización del diodo consiste en determinar las propiedades intrínsecas del diodo, como son: el material, el dopaje, el espesor de la *epilayer*, el tamaño, el número de diodos y/o la capacidad. Para ello, se utilizan modelos analíticos o numéricos basados en la física. Esta tesis se centrará en este paso, basándonos en la utilización de un simulador Monte Carlo (MC). El segundo bloque consiste en realizar simulaciones electromagnéticas tridimensionales, mediante el uso de programas como HFSS (*high frequency simulation/structure software*), para determinar los coeficientes de transmisión/reflexión (parámetros S) y caracterizar las pérdidas en función de la geometría,

material y adaptación de la impedancia del dispositivo. El objetivo de este paso es evitar la propagación de los modos no deseados y maximizar la respuesta eléctrica [15]. En el tercer bloque, a través de programas como ADS (*advanced design system*), se realizarán simulaciones circuitales para evaluar el funcionamiento y optimizar la respuesta. Los resultados obtenidos de cada una de las etapas serán utilizados para realimentar las otras.

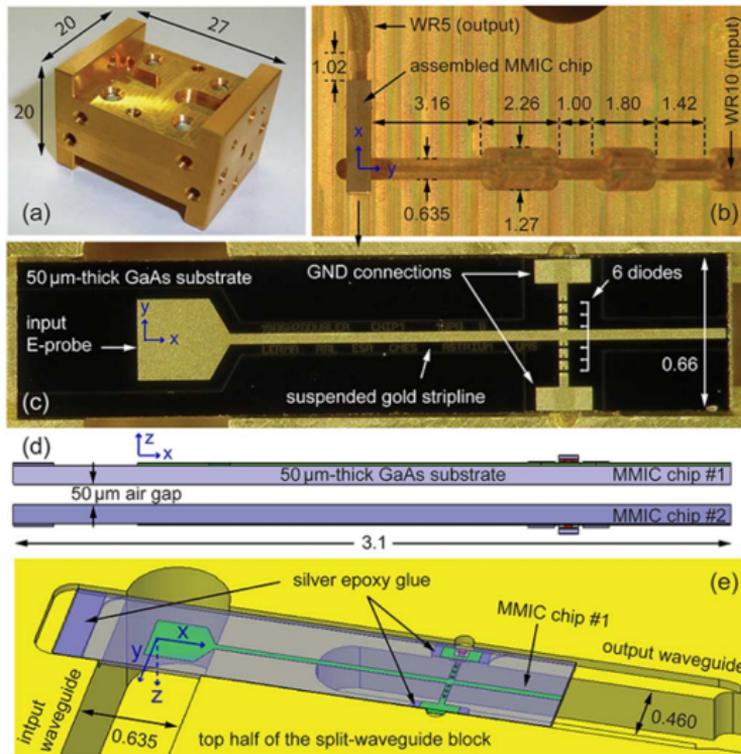


Figura 3: Imágenes de un doblador de frecuencia de 190 GHz extraídas de [16]. (a) Bloque compacto. (b) Ampliación de la mitad superior del bloque compacto donde se observan la entrada y la salida. (c) Esquema del módulo MMIC. (d) Diagrama de la posición de los dos módulos MMIC después del montaje y (e) el montaje de cada MMIC individualmente (las dimensiones se expresan en mm).

La optimización del diodo se basa en la retroalimentación entre tres pasos fundamentales, que son la fabricación, la caracterización y la simulación; estos dos últimos se estudiarán en profundidad en esta tesis. La caracterización nos permite extraer los parámetros específicos de un diodo Schottky, como es por ejemplo la altura de la barrera. Este parámetro afecta directamente a los procesos de transporte de corriente (emisión termoiónica e inyección túnel), que pueden ser estimados con modelos

analíticos. Además, para predecir la inyección túnel debe calcularse el coeficiente de transmisión resolviendo la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, su resolución es compleja por lo que generalmente se usan aproximaciones. El uso de técnicas de simulación, como la técnica MC [18, 19, 20], facilita el cálculo y permite simular de manera correcta el transporte de portadores y comparar los resultados obtenidos con medidas experimentales, retroalimentando el proceso de diseño y fabricación de los diodos. Otros parámetros fundamentales de los SBDs para su utilización como multiplicadores, que estudiaremos en esta tesis, son la capacidad y el voltaje de ruptura [21]. Como ya se ha mencionado, los multiplicadores se basan en la no linealidad de la característica capacidad-voltaje ($C-V$) y es importante obtener una expresión analítica para la capacidad.

Un aspecto importante a tener en cuenta en el diseño de multiplicadores es su capacidad para manejar potencia. En este ámbito, la tecnología de GaAs en los SBDs es la más desarrollada, pero para aplicaciones de alta potencia el uso de este material tiene también importantes limitaciones debido a su bajo campo de ruptura y moderada conductividad térmica. Como alternativa, el nitruro de galio (GaN) constituye un material prometedor debido a sus propiedades [22, 23]: gap ancho (lo cual supone un campo de ruptura elevado) y buena conductividad térmica. En los últimos años se han publicado varios trabajos que demuestran las capacidades de los SBDs de GaN para su uso en multiplicadores de frecuencia. En 2016 se publicó un triplicador de frecuencia (usando 4 diodos Schottky de GaN en serie) con un pico de potencia de salida de 2.1 W a 103.5 GHz [24]. Ese mismo año se fabricó un SBD de GaN de $2\ \mu\text{m}$ de diámetro y una frecuencia de corte de 902 GHz [25]. En 2019 se ha descrito un triplicador de frecuencia de 220 GHz y alta potencia basado en SBDs de GaN [26], y en 2020 se utilizó un diodo Schottky con una frecuencia de corte de 459 GHz para formar un doblador con una potencia de salida de 200-244 mW a frecuencias de 177-183 GHz [27]. Sin embargo, todavía la potencia de salida de los SBDs de GaN está por debajo de los niveles esperados teóricamente.

Objetivos principales

El objetivo principal de esta tesis es la optimización de SBDs basados en GaN para su uso como multiplicadores de frecuencia. Para su mejor funcionamiento, debe mejorarse el diseño de los dispositivos, que se realizará a través de las conclusiones extraídas tanto de los resultados de las simulaciones, como de la caracterización de dispositivos fabricados. Se hará especial hincapié en estudiar la no linealidad de las curvas corriente-voltaje ($I-V$) y $C-V$, y se extraerán los parámetros clave de los diodos. En particular se han planteado cuatro objetivos:

- En el caso de diodos de tamaño reducido, la capacidad de efectos de borde puede ser significativa, por lo que proponemos optimizar parámetros geométricos y del material (por ejemplo el dopaje) para reducir al máximo esta contribución a la capacidad total. Se proporcionarán expresiones analíticas precisas de la dependencia de la capacidad con el voltaje y se analizará la influencia en la capacidad de diferentes materiales dieléctricos utilizados en la pasivación del diodo.
- En el caso de los SBDs de GaN, el voltaje de ruptura es importante, ya que mejora con respecto al GaAs, pero, debido a defectos del material, el valor obtenido de forma experimental generalmente es menor que el valor teórico. Planteamos estudiar los procesos de transporte de corriente, analizando los posibles mecanismos no ideales, generalmente asociados a trampas o defectos del semiconductor, cuyo exceso de corriente provoca la ruptura para voltajes menores de los esperados. Para ello se utilizarán medidas experimentales, cuya comparación con un modelo que estima la corriente ideal en el diodo nos proporcionará la información necesaria sobre dichos mecanismos.
- Además trataremos de determinar a través de simulaciones las causas que producen la ruptura por avalancha del diodo, pudiendo así seleccionar la estructura de capas más adecuada. Para ello en el simulador MC se incluirá un modelo de inyección túnel y la ionización por impacto, esta última introducida como un mecanismo de *scattering*.
- Finalmente nos proponemos estudiar el circuito equivalente de pequeña señal para ayudar al diseño de multiplicadores y analizar el funcionamiento de los diodos Schottky como detectores.

Estructura de la tesis

En la presente tesis doctoral, para el estudio de los SBDs se han retroalimentado las simulaciones MC con datos experimentales, organizando la tesis en cuatro capítulos. Se comienza con un primer capítulo en el que se presentan los conceptos básicos de los SBDs y el simulador MC utilizado. Se explican en profundidad los procesos de transporte de corriente ideales y se describen los no ideales (debidos normalmente a trampas o defectos en el diodo), importantes de cara a estudiar el voltaje de ruptura. El simulador que se ha utilizado durante toda la tesis ha sido desarrollado por el grupo de investigación durante los últimos años. Se trata de un simulador MC de dispositivos acoplado de manera autoconsistente con la resolución de la ecuación de Poisson. Se explicará de manera general su funcionamiento, centrándonos en el modelo que simula el transporte de portadores a través de una barrera por túnel cuántico, cuya

probabilidad es calculada con la aproximación WKB (*Wentzel-Kramers-Brillouin*) [28]. Para polarizaciones elevadas en inversa, cuando el valor del campo eléctrico es alto, la inyección túnel tiene lugar de forma intensa. Además, este aumento en la inyección de electrones produce un incremento de los procesos de ionización por impacto de electrones y huecos.

Posteriormente, en el segundo capítulo se presentan los resultados de las simulaciones para el estudio de la característica C - V de los diodos. Para dichas simulaciones es importante considerar la carga de superficie en la interfaz semiconductor-dieléctrico, por lo que se han realizado simulaciones con dos modelos de carga superficial distintos. Uno de ellos considera una carga constante en toda la superficie, y el otro la actualiza de manera autoconsistente en función de la concentración de portadores en su proximidad. Analizaremos en primer lugar dos estructuras y dos materiales (GaAs y GaN) para determinar cuál es el modelo que proporciona resultados más realistas. Partiendo de una estructura basada en los diodos fabricados, se estudiará la influencia de la pasivación y de determinados parámetros geométricos en la capacidad.

A continuación, en el tercer capítulo nos centraremos en la caracterización eléctrica de los diodos, describiendo previamente las geometrías y la estructura de capas. Los diodos presentados en esta tesis han sido fabricados por el Institut d'Électronique de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN) de la Universidad de Lille, y caracterizados en el rango de temperatura de 33 K hasta 475 K por la doctoranda en las instalaciones de la Universidad de Salamanca. En este tercer capítulo se muestran esquemas de los montajes experimentales utilizados. Para extraer información de las medidas, se ha desarrollado un modelo que predice la corriente ideal en inversa a partir de los parámetros extraídos en directa. Las medidas experimentales de curvas I - V en temperatura pueden ajustarse con el modelo, obteniéndose que para las temperaturas más altas se tiene un comportamiento ideal, y para el resto de temperaturas aparecen procesos de inyección de corriente no ideales. Estos mecanismos adicionales se deben en su mayoría a trampas situadas en la interfaz y/o en el semiconductor, y se han estudiado para identificar qué tipo de mecanismo y en qué medida contribuye a la corriente. Finalmente, se aportan resultados de simulaciones MC, tanto unidimensionales como bidimensionales, en las que se ha incluido la inyección túnel y la ionización por impacto de los portadores. Ambos fenómenos son fundamentales a la hora de estudiar el voltaje de ruptura de los SBDs.

El cuarto capítulo se ha dedicado al análisis del circuito equivalente y el comportamiento en frecuencia a temperatura ambiente de diodos tanto de GaN como de GaAs. Se han extraído los parámetros del circuito equivalente de pequeña señal a través de medidas de los parámetros S . Finalmente, hemos investigado las prestaciones de los diodos Schottky como detectores de potencia en alta frecuencia.

Por último, se exponen las principales conclusiones derivadas de este trabajo doctoral y se plantean futuras líneas de investigación relacionadas con los resultados del mismo.

Capítulo 1

Diodos de barrera Schottky: Conceptos básicos y simulador Monte Carlo

Los diodos de barrera Schottky (SBDs) son dispositivos electrónicos que presentan un comportamiento rectificador, es decir, permiten el paso de la corriente únicamente en una dirección, bloqueándola en la otra, y unipolares (únicamente se produce transporte de electrones). Los diodos Schottky se forman por la unión de un metal y un semiconductor, a diferencia de los diodos convencionales formados por una unión p-n. Los SBDs se caracterizan por una tensión umbral baja, corrientes elevadas para voltajes relativamente bajos y un tiempo de respuesta rápido. La combinación de estas características hace que estos diodos sean ideales para aplicaciones de alta frecuencia en el rango de los terahercios (THz).

En la actualidad, en frecuencias del rango de THz, los diodos Schottky utilizados son generalmente de arseniuro de galio (GaAs). A medida que la tecnología ha ido evolucionando, los diodos Schottky de contacto *whisker* (área pequeña) [29], cuyo contacto es frágil, han sido sustituidos por diodos Schottky planares [17, 30, 31]. Sin embargo, los diodos Schottky planares tienen una capacidad parásita mayor, lo que afecta a alta frecuencia [32]. Por ello, el estudio del circuito equivalente de pequeña señal es fundamental para obtener tanto los valores de los elementos parásitos como los intrínsecos. Además, la no linealidad de la característica capacidad-voltaje ($C-V$) es crucial para optimizar los diodos Schottky que funcionan como multiplicadores de frecuencia [33]. Es importante destacar que para aplicaciones de alta frecuencia es necesario reducir el tamaño del diodo lo máximo posible, con lo cual los efectos de

borde pueden ser significativos y se necesitan modelos bidimensionales para analizarlos [34].

Uno de los parámetros fundamentales que limita la gestión de potencia de estos diodos es el voltaje de ruptura, voltaje en inversa para el cual se produce un aumento brusco de corriente (y normalmente se quema). Al realizar la caracterización de los SBDs, el valor del voltaje de ruptura que se obtiene es generalmente menor que el esperado teóricamente [35, 36]. Este hecho se puede estudiar mediante modelos que incluyen los fenómenos físicos que ocurren dentro del dispositivo. El uso del simulador Monte Carlo (MC) nos permite estimar las corrientes ideales en inversa, formadas por las contribuciones de la emisión termoiónica y la inyección túnel [37], las cuales se presentarán en este capítulo y deben ser modeladas de manera precisa para poder determinar si existen otros mecanismos no ideales [38] que provocan un aumento de la corriente. Tales mecanismos están generalmente asociados a trampas que favorecen el paso de portadores del metal al semiconductor, por lo que aumenta la corriente y se produce una reducción del voltaje de ruptura. En un caso ideal (donde sólo se consideraran las contribuciones ideales a la corriente, termoiónica y túnel), el alto campo eléctrico en la interfaz entre el metal y el semiconductor hace que la corriente túnel aumente. Por lo tanto se inyectan más electrones desde el metal al semiconductor a través del contacto Schottky, aumentando las ionizaciones por impacto [39] y desembocando en la ruptura del diodo, producida en la mayoría de los casos por una avalancha de portadores.

La estructura de los SBDs consiste en un material semiaislante (sustrato), seguido de dos capas de semiconductor, la primera de ellas altamente dopada (capa n^{++}) y la segunda con un dopaje menor (capa n^-). La función principal de la capa n^{++} es formar el contacto óhmico, por lo que el valor del dopaje y el espesor debe ser lo más grande posible, tratando de reducir al máximo la resistencia serie. La capa n^- es la encargada de formar el contacto Schottky, siendo por lo tanto clave el valor del dopaje y su espesor en las características del dispositivo.

En el caso del nitruro de galio (GaN), algunos de los sustratos más utilizados habitualmente son zafiro, carburo de silicio o silicio. Para seleccionar el sustrato existen múltiples factores a tener en cuenta, como el desajuste de la constante de red, el coste, las propiedades térmicas y eléctricas, etc. El uso de sustratos del mismo material que las capas que constituyen el diodo permitiría reducir el número de defectos [40] debido a una mejora del desajuste entre las constantes de red. Sin embargo, la ruptura seguiría produciéndose de manera prematura debido al alto campo eléctrico que se genera en el borde del contacto Schottky [41]. Por otra parte, el elevado coste ha retrasado su fabricación, la cual se ha iniciado recientemente [38, 42].

En este capítulo, describiremos el proceso de fabricación de los diodos y explicaremos los conceptos básicos y los principales procesos de transporte de corriente, tanto ideales como mecanismos de pérdidas. Por último, presentaremos de manera global los conceptos básicos del código MC desarrollado por el grupo, que nos ha permitido realizar simulaciones para estudiar la física de los dispositivos. Se ha implementado un modelo para calcular la corriente túnel en inversa consistentemente con las concentraciones de portadores (electrones y huecos) en el semiconductor, e incluyendo la ionización por impacto de ambos.

1.1. Descripción del dispositivo

Los SBDs estudiados en esta tesis han sido fabricados por el grupo del Prof. M. Zaknourne en el Institut d'Électronique de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN), perteneciente a la Universidad de Lille. Se dispone de SBDs tanto de GaAs como de GaN, pero ya que la línea principal de investigación de la tesis son los SBDs de GaN, nos centraremos en explicar el proceso de fabricación para dicho material. Tal y como ya hemos mencionado, el GaN es un material con unas características prometedoras para su uso en aplicaciones de alta frecuencia, dado que permite gestionar niveles de potencia muy superiores a los que actualmente proporcionan los SBDs de GaAs. Sin embargo, su fabricación supone un gran reto tecnológico. El crecimiento de las obleas de GaN puede realizarse por métodos distintos: deposición de vapor mediante procesos químicos organometálicos (MOCVD), epitaxia en fase de vapor de hidruro (HVPE) o epitaxia de haces moleculares (MBE) [43]. Las obleas que vamos a estudiar están formadas por tres capas epitaxiales: sobre el sustrato se crece una capa muy resistiva (*buffer*) para aislar el diodo, a continuación una capa altamente dopada (capa n^{++}) y por último una capa de GaN con un dopaje bajo (capa n^-).

Antes de comenzar con el proceso de fabricación se realiza una limpieza de la muestra, normalmente con acetona e isopropanol, seguida de algún tratamiento más específico para eliminar posibles restos orgánicos o suciedad. En la figura 1.1 se muestra un esquema con los principales pasos a seguir en la fabricación. El proceso comienza con la definición de la mesa del contacto Schottky. Para ello se deposita una capa de SiO_2 de 150 nm de espesor mediante deposición química de vapor mejorada por plasma (PECVD), que actúa como máscara dura para el grabado protegiendo la capa n^{++} . Sobre el SiO_2 depositamos una bicapa de resina de 370 nm de espesor y una pequeña capa de germanio (Ge) para disipar las cargas generadas al realizar la litografía por haz de electrones, ya que nuestros sustratos son aislantes. Para todo el proceso, se utilizará la litografía por haz de electrones, que consiste en exponer la resina con un haz de electrones con una determinada intensidad (dosis). Se utiliza

una máscara con la definición de las mesas de los diodos. Una vez expuesta la muestra, revelamos la resina y depositamos una capa de paladio (Pd) que se utiliza como máscara para la metalización y para proteger la capa n^{++} . Se realizan después un *lift-off* para eliminar toda la resina y un grabado seco del SiO_2 mediante grabado iónico reactivo (RIE) utilizando SF_6 . Posteriormente, eliminamos la capa de Pd para realizar el grabado de la capa n^- de GaN. El paso de la definición de la mesa del contacto Schottky finaliza con el grabado del GaN, realizado mediante un proceso de plasma acoplado inductivamente (ICP) con Cl_2/Ar .

A continuación se define la mesa del diodo, para lo cual es necesario grabar la capa n^{++} de GaN. Mediante un proceso similar al de la definición de la mesa del contacto Schottky: se deposita una capa de SiO_2 seguida de una bicapa de resina y una de Ge. Se realiza la litografía por haz de electrones, se revela la muestra, se deposita una capa de Pd y se realiza el *lift-off* para eliminar el resto de la resina. Se graba el SiO_2 mediante un proceso RIE con SF_6 , se quita el Pd y se graba la capa n^{++} de GaN mediante un proceso ICP con Cl_2/Ar .

El siguiente paso es la realización del contacto óhmico, que será un contacto óhmico estándar mediante la deposición de Ti/Al/Ni/Au con una evaporadora de haz de electrones. A través de una litografía por haz de electrones se define dónde se depositan los metales. Antes de la deposición de metales se realiza una limpieza BOE (*buffered oxide etch*), que es un proceso de grabado húmedo para eliminar restos de SiO_2 . Esta limpieza, además de eliminar el SiO_2 , se utiliza como tratamiento de la superficie para evitar contaminantes o incluso la oxidación del GaN. El contacto óhmico se deposita sobre la capa n^{++} . Tras la deposición de metales se realiza un tratamiento de ozono ultravioleta y a continuación un recocido térmico rápido (RTA, *rapid thermal annealing*) a una temperatura de 850°C durante 30 s en un ambiente de N_2 , para hacer que los metales difundan en el material.

Por último para formar el contacto Schottky, se depositan los metales Pt/Au sobre la capa n^- , y de nuevo se realiza un proceso RTA tras una limpieza con ozono. En las obleas medidas se dispone de algunos diodos con puentes para conectar los contactos con los *pads*. La fabricación de los puentes es una técnica estándar en dispositivos electrónicos, sin embargo, es uno de los pasos de fabricación más complejos y laboriosos. Los diodos disponibles para esta tesis se han fabricado con accesos coplanares (CPW), los cuales se utilizan para la caracterización de los diodos, véase la figura 1.1. Sin embargo, a la hora de fabricar los multiplicadores, se pueden realizar los accesos de tipo *microstrip* (donde la tierra se sitúa por debajo). Se muestra un ejemplo en la figura 1.2, extraída de [44].

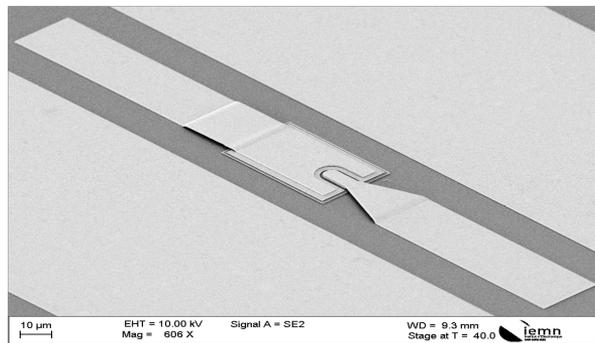
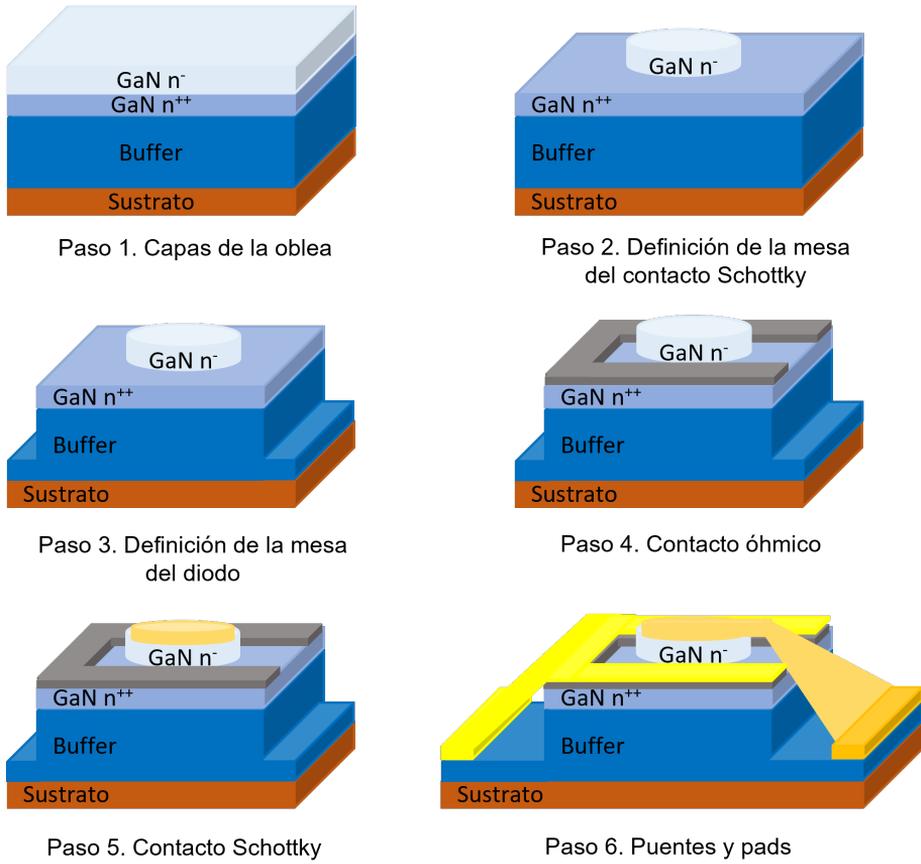


Foto del dispositivo

Figura 1.1: Esquema del proceso de fabricación de los diodos de barrera Schottky.

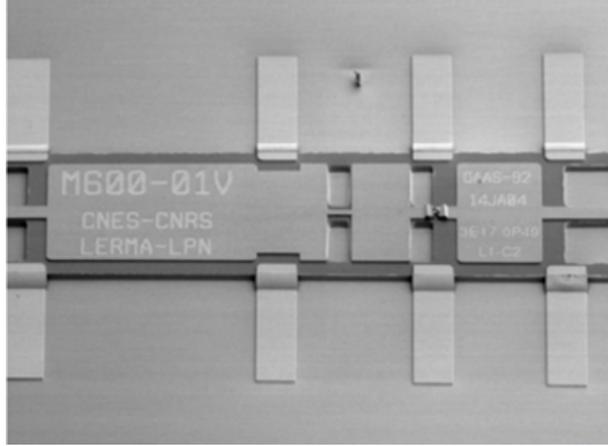


Figura 1.2: Imagen de un circuito con accesos *microstrip* fabricado sobre un sustrato de GaAs extraída de [44].

1.2. Parámetros característicos y mecanismos de corriente

La unión de un metal y un semiconductor, dependiendo de las propiedades de los materiales, puede dar lugar a dos tipos de contactos: óhmico o rectificador. Un contacto óhmico permite el paso de corriente en ambas direcciones, del metal al semiconductor y viceversa. Por otro lado, el contacto rectificador o contacto Schottky permite el paso de corriente en un único sentido. En esta sección, presentaremos los principales parámetros de estos diodos y los procesos de transporte de corriente.

1.2.1. Conceptos básicos

Antes de estudiar los procesos de transporte de corriente en un SBD, es necesario definir algunos conceptos básicos. En la figura 1.3 se ha representado el diagrama de bandas de un metal y un semiconductor tipo n, sin estar en contacto. En el metal la función trabajo ($e\phi_M$) viene dada por la diferencia entre el nivel de vacío (ε_0) y el nivel de Fermi del metal (ε_{Fm}). En el semiconductor, de igual modo, tenemos que la función trabajo ($e\phi_S$) es la diferencia entre ε_0 y el nivel de Fermi del semiconductor (ε_{FS}). Además $e\chi_S$ es la afinidad electrónica del semiconductor, definida como la energía necesaria para que un electrón en el fondo de la banda de conducción (ε_C) abandone el material (alcance ε_0).

Cuando el metal y el semiconductor se ponen en contacto los niveles de Fermi de ambos materiales quedan alineados, apareciendo una barrera en la interfaz metal-

semiconductor, véase la figura 1.4(a). Este valor de la barrera, $e\phi_{B0}$, se calcula como la diferencia entre $e\phi_M$ y $e\chi_S$. V_B es el potencial de contacto o *built-in*, voltaje que cae en el semiconductor en equilibrio, y viene dado por la diferencia entre la altura de la barrera ($e\phi_{B0}$) y la energía eV_n , $eV_B = e\phi_{B0} - eV_n$, donde $eV_n = \epsilon_C - \epsilon_{FS}$. En la figura 1.4(b) la unión está polarizada en directa ($V > 0$, siendo V el voltaje aplicado entre los contactos Schottky y óhmico), desplazándose el nivel de Fermi del lado del semiconductor hacia arriba con respecto al metal. En directa se reduce la barrera para los electrones que se desplazan del semiconductor hacia el metal, mientras que en sentido contrario no varía. El flujo de corriente es no lineal, puesto que la corriente aumenta exponencialmente con V debido a la emisión termiónica. En la figura 1.4(c) se ha polarizado en inversa ($V < 0$), desplazándose el nivel de Fermi del semiconductor en sentido contrario (hacia abajo). En este caso, la barrera para los electrones del semiconductor aumenta y, en principio, apenas hay corriente.

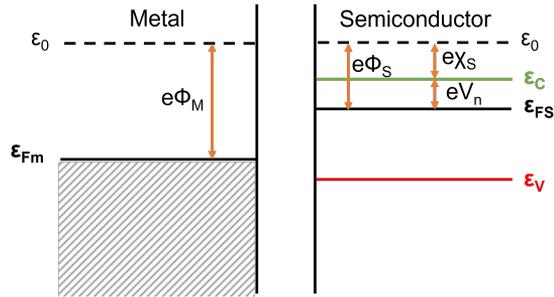


Figura 1.3: Diagrama de las bandas de energía de un metal y un semiconductor sin estar en contacto.

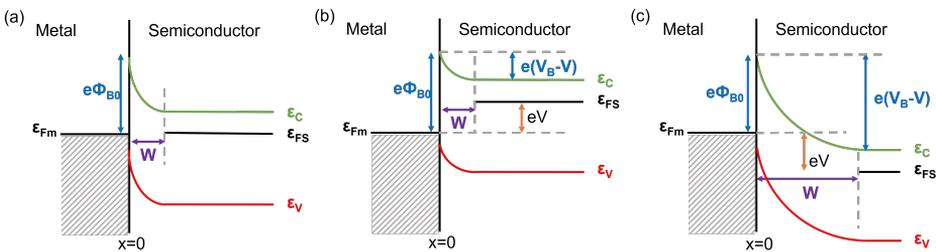


Figura 1.4: Diagrama de las bandas de energía de un metal y un semiconductor (a) en equilibrio, aplicando un voltaje (b) en directa ($V > 0$) y (c) en inversa ($V < 0$).

Al realizar la unión del metal y el semiconductor, se genera una región de vaciamiento en el semiconductor de anchura W , ver figura 1.4. A esta región también se le conoce como zona de carga espacial. Para mantener la neutralidad, en el metal apa-

recen cargas negativas, y se genera un campo eléctrico que será máximo en la interfaz de la unión. El ancho de la zona de vaciamiento viene dado por la ecuación [45]

$$W(V) = \sqrt{\frac{2\kappa_{SC}(V_B - V)}{eN_D}}, \quad (1.1)$$

donde V_B es el voltaje de *built-in*, κ_{SC} la permitividad del semiconductor, N_D el dopaje de la *epilayer*, e la carga del electrón y V el voltaje aplicado al contacto Schottky. En la zona de vaciamiento se genera un campo eléctrico que depende de la posición

$$E(x) = \frac{-eN_D(W(V) - x)}{\kappa_{SC}}, \quad (1.2)$$

alcanzándose el campo máximo en la interfaz metal-semiconductor ($x = 0$), cuyo módulo será igual a $E = \sqrt{\frac{2eN_D}{\kappa_{SC}}(V_B - V)}$.

La carga de la zona de vaciamiento por unidad de área es [46]

$$Q_d(V) = eN_D W(V). \quad (1.3)$$

Y la capacidad de la unión viene dada por

$$C_j(V) = \frac{dQ_d(V)}{dV} = \frac{C_j(0)}{\sqrt{1 - \frac{V}{V_B}}} = \frac{\kappa_{SC}}{W(V)}, \quad (1.4)$$

donde $C_j(0) = e\kappa_{SC}N_D/2V_B$. Por lo tanto, la capacidad de la unión equivale a la capacidad de un condensador plano paralelo con una separación igual al ancho de la zona de vaciamiento, que tiene por dieléctrico al semiconductor.

Como hemos visto, en los contactos Schottky se crea una barrera rectificadora de altura ϕ_{B0} , que se opone al paso de los electrones desde el metal al semiconductor cuando polarizamos en inversa (ver figura 1.4). Sin embargo, es necesario tener en cuenta un efecto real conocido como el efecto Schottky o efecto de carga imagen [46], por el cual la altura efectiva de la barrera disminuye. Se puede explicar como si se generase una carga positiva en el metal que atrajese a un electrón que se encontrase a una distancia x de la interfaz metal-semiconductor. La fuerza de atracción es igual a la atracción electrostática entre el electrón y una carga idéntica pero de signo positivo, llamada carga imagen. La fuerza Coulombiana creada sobre los electrones debida a las cargas imagen en la interfaz, viene dada por

$$F(x) = \frac{-e^2}{4\pi\kappa_{SC}(2x)^2} = \frac{-e^2}{16\pi\kappa_{SC}x^2}. \quad (1.5)$$

La energía correspondiente a la fuerza Coulombiana a la que está sometida un electrón situado a una distancia x del metal es igual a

$$e\varphi_p^{CI}(x) = \int_0^\infty F dx = \frac{-e^2}{16\pi\kappa_{SC}x}. \quad (1.6)$$

Si se aproxima la banda de conducción en las proximidades de la interfaz por una barrera triangular correspondiente a E , la energía total resultante será

$$e\varphi_p(x) = \frac{-e^2}{16\pi\kappa_{SC}x} - eEx. \quad (1.7)$$

A partir de la ecuación 1.7, podemos extraer los parámetros del efecto de la carga imagen: el valor máximo de $e\varphi_p(x)$ y la posición x_m en que se alcanza, y la disminución de la barrera $\Delta\phi$.

$$x_m = \sqrt{\frac{e}{16\pi\kappa_{SC}E}}, \quad (1.8)$$

$$\Delta\phi = \sqrt{\frac{eE}{4\pi\kappa_{SC}}} = 2Ex_m. \quad (1.9)$$

Por lo tanto, la altura de la barrera teniendo en cuenta los efectos reales es $\phi_B = \phi_{B0} - \Delta\phi$, ver figura 1.5. Como veremos más adelante, la reducción de la altura de la barrera es fundamental a la hora de estudiar los procesos de transporte de corriente, principalmente la emisión termoiónica, la cual se verá significativamente afectada.

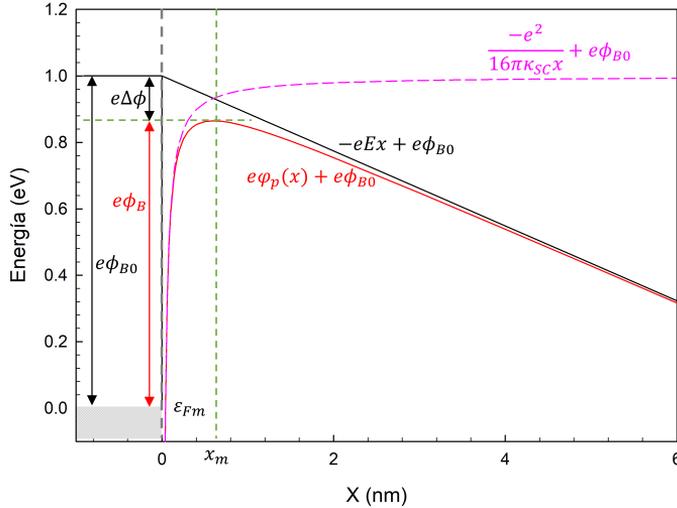


Figura 1.5: Ejemplo de la disminución de la altura de la barrera debido al efecto de la carga imagen.

1.2.2. Procesos de transporte de corriente

En los contactos Schottky el transporte de corriente se debe principalmente a los portadores mayoritarios. Los dos procesos de transporte de corriente básicos (siempre presentes) en los diodos Schottky son [46]:

- a) **Corriente termoiónica:** asociada a la emisión de electrones por encima de la barrera, ver mecanismo (a) en la figura 1.6. Hay dos contribuciones, la asociada a los electrones que van del metal al semiconductor y viceversa. Generalmente, a temperatura ambiente esta corriente será la que predomina cuando se polariza en directa.
- b) **Corriente túnel:** debida al paso de los electrones a través de una barrera cuando no tienen la energía suficiente para pasar por encima, representada por el mecanismo (b) en la figura 1.6. Los electrones son transportados por efecto túnel cuántico.

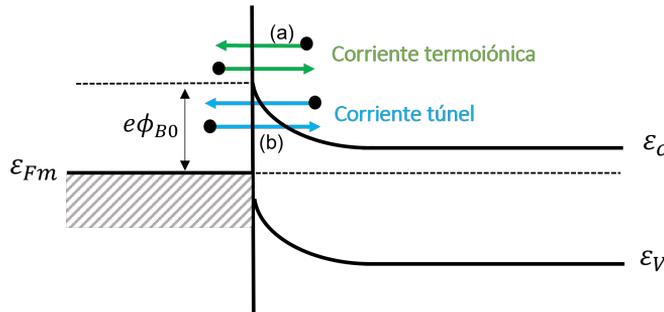


Figura 1.6: Esquema de los procesos de transporte básicos en un diodo Schottky.

La disminución de la altura de la barrera debido al efecto de la carga imagen afecta directamente al transporte de portadores, al cambiar la altura y la forma de la barrera Schottky, y por lo tanto a la corriente. Debe tenerse en cuenta que además, para polarizaciones en inversa, estarán presentes en los diodos Schottky procesos de transporte de corriente no ideales, que en la mayoría de los casos estarán relacionados con trampas. A continuación explicaremos brevemente tanto los mecanismos ideales como posibles mecanismos adicionales (no ideales) que podemos encontrar en los SBDs.

1.2.2.1. Emisión termoiónica

La teoría de la emisión termoiónica fue desarrollada por Bethe en 1942 [47]. Este mecanismo es el dominante para polarizaciones en directa en SBDs (siempre que la impurificación de la *epilayer* no sea muy elevada o la temperatura muy baja). La densidad de corriente desde el semiconductor hasta el metal, $J_{th}^{s \rightarrow m}$, se puede calcular a partir de la concentración de electrones que tienen una energía suficiente para superar la barrera de potencial [46], siendo la expresión final

$$J_{th}^{s \rightarrow m} = A^* T^2 \exp\left(\frac{-e\phi_B}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right), \quad (1.10)$$

con A^* la constante de Richardson efectiva para la emisión termoiónica, que viene dada por la expresión

$$A^* = \frac{4\pi em^* k_B^2}{h^3}, \quad (1.11)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, m^* la masa efectiva del electrón del semiconductor y h la constante de Planck. En la ecuación 1.10 la altura de la barrera ϕ_B tiene en cuenta el efecto de la carga imagen; si no se considerara este efecto en la ecuación, en vez de ϕ_B sería ϕ_{B0} . Para el cálculo de la otra contribución a la densidad de corriente termoiónica, electrones que pasan del metal al semiconductor, la altura de la barrera no cambia con el voltaje aplicado (en ausencia de carga imagen). Esta contribución debe ser igual pero de signo contrario a $J_{th}^{s \rightarrow m}$ cuando se está en la condición de equilibrio ($V = 0$ V). Al sustituir $V = 0$ V en la ecuación 1.10 se obtiene

$$J_{th}^{m \rightarrow s} = -A^* T^2 \exp\left(\frac{-e\phi_B}{k_B T}\right). \quad (1.12)$$

La densidad de corriente total asociada a la emisión termoiónica se obtiene por tanto de la suma de las dos contribuciones, dadas por las ecuaciones 1.10 y 1.12

$$J_{th} = A^* T^2 \exp\left(\frac{-e\phi_B}{k_B T}\right) (\exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1) = J_0 (\exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1), \quad (1.13)$$

donde

$$J_0 = A^* T^2 \exp\left(\frac{-e\phi_B}{k_B T}\right), \quad (1.14)$$

siendo J_0 la densidad de corriente inversa de saturación. La ecuación 1.13 es la expresión ideal para la emisión termoiónica en un diodo Schottky. Esta ecuación puede modificarse para incluir efectos reales como la influencia de la resistencia serie (R_s) y el factor de idealidad (η), obteniéndose

$$J_{th} = J_0 \left[\exp\left(\frac{e(V - J_{th} S R_s)}{\eta k_B T}\right) - 1 \right], \quad (1.15)$$

donde S es la superficie del diodo. El voltaje intrínseco entre los extremos de la zona de carga espacial será el voltaje aplicado menos el voltaje que cae en la resistencia ($J_{th} S R_s$).

1.2.2.2. Emisión túnel

Electrones con una energía menor que la altura de la barrera pueden atravesarla por efecto túnel. La corriente túnel es muy importante para voltajes aplicados en inversa altos, ya que el estrechamiento de la barrera favorece este mecanismo. Del mismo modo, la densidad de corriente asociada al efecto túnel es más significativa, comparada con la termoiónica, para semiconductores altamente dopados (barrera más

estrecha) y para temperaturas bajas (la contribución de la emisión túnel es constante pero la emisión termoiónica disminuye).

La densidad de corriente túnel del semiconductor al metal para cada nivel de energía es proporcional al coeficiente de transmisión multiplicado por la probabilidad de ocupación del semiconductor y por la probabilidad de no ocupación del metal [48, 49, 50]

$$J_{Tunel}^{s \rightarrow m} = \frac{A^*T}{k_B} \int_{\varepsilon_C}^{e\phi_B} f_{sc}(\varepsilon)T_C(\varepsilon)[1 - f_m(\varepsilon)]d\varepsilon, \quad (1.16)$$

donde $f_{sc}(\varepsilon)$ y $f_m(\varepsilon)$ son las funciones de distribución de Fermi-Dirac para el semiconductor y el metal, respectivamente, y $T_C(\varepsilon)$ es el coeficiente de transmisión a través de la barrera para cada energía. La otra componente de la corriente túnel (del metal al semiconductor) viene dada por la expresión

$$J_{Tunel}^{m \rightarrow s} = -\frac{A^*T}{k_B} \int_{\varepsilon_{min}}^{e\phi_B} f_m(\varepsilon)T_C(\varepsilon)[1 - f_{sc}(\varepsilon)]d\varepsilon, \quad (1.17)$$

donde de manera análoga a la ecuación 1.16, $f_m(\varepsilon)$ es la probabilidad de ocupación del metal y $[1 - f_{sc}(\varepsilon)]$ es la probabilidad de no ocupación del semiconductor. El signo menos indica que las corrientes tienen sentidos opuestos. La densidad de corriente túnel total es la suma de las ecuaciones 1.16 y 1.17. Para energías mayores que la barrera $T_C = 1$ y tendremos la contribución de la corriente termoiónica, y para energías menores $0 \leq T_C(\varepsilon) \leq 1$ y tendremos la contribución de la corriente túnel. La expresión analítica de la densidad de corriente túnel es bastante compleja, por lo que se suelen obtener los resultados haciendo uso de modelos numéricos, como explicaremos más adelante.

Sin embargo, en la literatura existen modelos analíticos, como el de Murphy y Good (MG) [51] y el de Padovani y Stratton (PS) [52], que son válidos para un determinado rango de campo eléctrico en la interfaz. Estos modelos dividen la corriente total en tres componentes: termoiónica (Th), y para la contribución túnel se diferencia entre la emisión termoiónica por campo (TFE) y la emisión por campo (FE). En la figura 1.7 se presenta un esquema de estas componentes. La componente Th se produce para energías por encima de la barrera, TFE para energías entre la altura de la barrera y el nivel de Fermi y FE para energías cerca del nivel de Fermi. La componente Th se corresponde con la corriente termoiónica y los procesos de emisión túnel son tanto FE como TFE (en este caso electrones excitados térmicamente). La contribución de estas componentes dependerá no sólo de la temperatura, sino también del dopaje.

El modelo de MG proporciona expresiones analíticas para las tres componentes de la corriente mencionadas anteriormente. A pesar de que considera la emisión de electrones desde un metal hacia el vacío, se puede adaptar al caso de contactos Schottky.

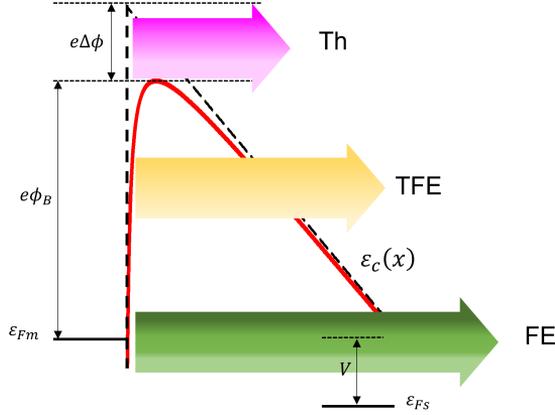


Figura 1.7: Esquema de las componentes de la corriente en inversa para los modelos analíticos de MG [51] y PS [52].

Además, considera el efecto de la carga imagen, pero no el efecto del dopaje, como se explicará con mayor profundidad en el capítulo 3. Las expresiones en función del campo eléctrico en la superficie (E), para las tres contribuciones a la corriente (Th, que en este modelo incluye la contribución túnel, TFE y FE) son [51, 53]

$$J_{Th}^{M-G}(E) = A^* T^2 \left(\frac{\pi d}{\sin \pi d} \right) \exp \left(-\frac{\phi_{B0} - \Delta\phi(E)}{k_B T} \right), \quad (1.18)$$

$$J_{TFE}^{M-G}(E) = A^* T^2 \exp \left(-\frac{-e\phi_{B0}}{k_B T} \right) \left(\frac{2\sqrt{\pi} E}{E_0} \right) \sqrt{t} \exp \left(\frac{\theta E^2}{3E_0^2} \right), \quad (1.19)$$

$$J_{FE}^{M-G}(E) = \frac{A^* T \pi \exp \left[-\frac{4\sqrt{2m^*} (e\phi_{B0})^{3/2} \nu}{3e\hbar E} \right]}{\left[\frac{2\sqrt{2m^*} k_B (e\phi_{B0})^{1/2}}{e\hbar E} \right] t \sin \left[\frac{2\sqrt{2m^*} \pi k_B T (e\phi_{B0})^{1/2} t}{e\hbar E} \right]}, \quad (1.20)$$

donde d , E_0 , θ , t y ν son parámetros cuyas expresiones se definen en [51]. Otro modelo es el de PS, que tiene en cuenta el efecto del dopaje, pero ignora el efecto de la carga imagen. Este modelo define el parámetro E_{00} como

$$E_{00} = \frac{e\hbar}{2} \sqrt{\frac{N_D}{m^* \kappa_{sc}}}. \quad (1.21)$$

Comparando E_{00} con $k_B T$, se determina que contribución domina. Si $k_B T \gg E_{00}$, TE domina; si $k_B T \ll E_{00}$, FE domina; y si $k_B T \approx E_{00}$, domina TFE. El modelo PS propone expresiones en función del voltaje aplicado (V) para las contribuciones túnel, TFE y FE dadas por las expresiones siguientes [46, 52, 53]

$$J_{FE}^{P-S}(V) = A^* \left(\frac{E_{00}}{k_B} \right)^2 \left(\frac{\phi_{B0} + V}{\phi_{B0}} \right) \exp \left(- \frac{2e\phi_{B0}^{3/2}}{3E_{00}\sqrt{\phi_{B0} + V}} \right), \quad (1.22)$$

$$J_{TFE}^{P-S}(V) = \frac{A^*T}{k_B} \sqrt{\pi E_{00} e \left[V + \frac{\phi_{B0}}{\cosh^2(E_{00}/k_B T)} \right]} \exp \left(\frac{-e\phi_{B0}}{E_0} \right) \exp \left(\frac{eV}{\varepsilon'} \right), \quad (1.23)$$

donde E_0 y ε' son parámetros que se encuentran definidos en [52].

1.2.2.3. Mecanismos de pérdidas

A la hora de caracterizar SBDs, es importante conocer de forma precisa el valor de la corriente en inversa dado que es la precursora de la ruptura. Para diodos ideales tendremos las contribuciones mencionadas anteriormente: termoiónica y túnel. Sin embargo, principalmente en dispositivos basados en GaN, la densidad de dislocaciones y defectos da lugar a mecanismos no ideales que generan corrientes de pérdidas en inversa. Los mecanismos no ideales están generalmente relacionados con trampas y los más destacados son: emisión Poole-Frenkel (PFE) [46, 54], saltos de rango variable (VRH) [55, 56] y túnel asistido por trampas (TAT) [57, 58]. En la literatura existen diversos estudios de los mecanismos no ideales en inversa en diodos Schottky de GaN [38, 59, 60]. En la figura 1.8 se muestra un esquema de estos procesos de corriente no ideales.

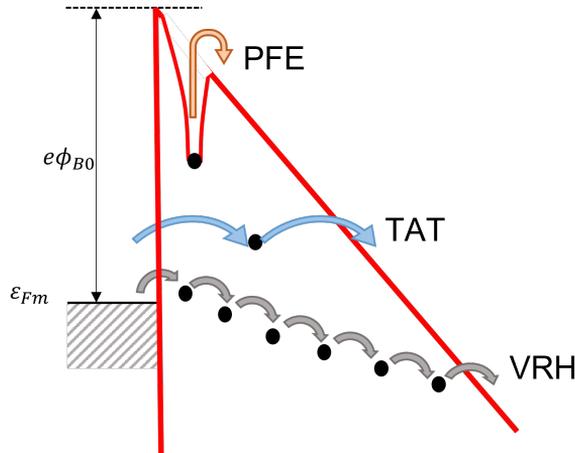


Figura 1.8: Esquema de los principales procesos de corriente inversa no ideales.

El primer mecanismo, PFE, se produce por la emisión de electrones atrapados en estados próximos a la banda de conducción, ver figura 1.8. La emisión de electrones desde las trampas se produce por excitación térmica favorecida por el campo eléctrico

[61, 62]. La expresión de PFE será similar a la de la emisión termoiónica, siendo en este caso la barrera la profundidad a la que se encuentra la trampa. El proceso PFE será más significativo a altas temperaturas y altos campos eléctricos. La densidad de corriente asociada a la emisión de Poole-Frenkel viene dada por [46]

$$J_{PFE} \approx E \exp \left[\frac{-e(\phi_t - \sqrt{eE/\pi\kappa_{sc}})}{k_B T} \right], \quad (1.24)$$

donde E es el campo eléctrico en la interfaz y ϕ_t la energía de la trampa y por lo tanto la barrera que deberán superar los electrones.

En segundo lugar, el proceso VRH se caracteriza por el transporte de portadores que son inyectados en el semiconductor y que pasan de un estado localizado a otro, ver figura 1.8. La densidad de corriente asociada al proceso VRH viene dada por [38, 63]

$$J_{VRH} \approx \exp \left(-\left(\frac{T_c}{T}\right)^\nu \right), \quad (1.25)$$

donde T_c es la temperatura característica y ν es igual a 1/2, 1/3 o 1/4 en función de si el sistema bajo estudio es unidimensional, bidimensional o tridimensional, respectivamente. Fijándonos en la ecuación 1.25, se puede concluir que este mecanismo será significativo para temperaturas altas.

En tercer lugar existe el túnel asistido por trampas, que es uno de los mecanismos más estudiados en la literatura [38, 59, 64]. Para polarizaciones en inversa, los electrones desde el metal llegan a una trampa a través de la barrera Schottky por túnel, y posteriormente de nuevo por túnel hasta el continuo de estados de la banda de conducción. Estas trampas se originan generalmente debido a dislocaciones que alcanzan la superficie, siendo el GaN un material con una alta densidad de ellas [64]. Esta contribución será más evidente para diodos con barreras altas. La densidad de corriente asociada al túnel asistido por trampas viene dada por la expresión [38, 58]

$$J_{TAT} \approx \exp \left(\frac{-4\sqrt{2em^*}\phi_t^{3/2}}{3\hbar E} \right), \quad (1.26)$$

donde de nuevo ϕ_t es el nivel de energía de la trampa. Cabe destacar que J_{TAT} es independiente de la temperatura. Se estudiará la presencia de algunos de estos mecanismos en los diodos medidos en este trabajo doctoral.

1.3. Monte Carlo

El objetivo principal de esta sección es presentar la herramienta MC que utilizaremos a lo largo de toda la tesis para simular el transporte en los SBDs. El código MC ha sido desarrollado por el grupo de investigación del área de Electrónica de la

Universidad de Salamanca [65, 66, 67]. De manera general, el método de MC consiste en la generación de números aleatorios para resolver problemas estocásticos con distribuciones de probabilidad complejas [68]. A lo largo del tiempo, este método se ha utilizado en múltiples ramas del conocimiento como física nuclear, electrónica, química o economía, para dar solución a problemas cuyos cálculos estadísticos deben realizarse con un ordenador.

1.3.1. Simulador de dispositivos

El método de MC se utiliza para simular la dinámica de portadores (en el interior de un dispositivo) sometidos a las interacciones con la red cristalina (mecanismos de *scattering*) y la acción del campo eléctrico, considerando las condiciones de contorno adecuadas. Nuestra herramienta es un simulador *ensemble* de MC semiclásico acoplado de forma autoconsistente con una resolución bidimensional de la ecuación de Poisson, para lo cual debe realizarse una discretización temporal y espacial. En primer lugar se define un paso temporal, Δt , durante el cual se simula de manera simultánea la dinámica de todos los portadores, y al finalizar este tiempo se resuelve la ecuación de Poisson (se actualiza el perfil del campo eléctrico) para calcular el campo eléctrico presente durante el siguiente intervalo de tiempo [69]. La ecuación de Poisson se resuelve para cada nodo del mallado. El tamaño de las mallas debe ser menor que la longitud de Debye del material para realizar de forma correcta el cálculo del campo eléctrico [18]. En nuestros diodos utilizaremos mallas cuadradas de 5 nm de lado y en la zona de cambio de las capas $n^{++} - n^{-}$, mallas rectangulares de 5 nm en la dirección horizontal y de 2 nm en la vertical. En la figura 1.9 se representa un esquema simplificado de la dinámica de un portador para el simulador MC bidimensional de dispositivos electrónicos, en la que se indican los hitos fundamentales que tienen lugar en su movimiento. Los portadores realizan recorridos libres, y durante su movimiento pueden sufrir mecanismos de *scattering*, así como pasar a otra malla, donde el campo eléctrico será distinto.

Lo ideal a la hora de simular los dispositivos sería realizar simulaciones tridimensionales, pero desde el punto de vista computacional, aparte de la complejidad de desarrollar una simulación 3-D, supondría un tiempo de simulación demasiado elevado. Por ello, se realizan simulaciones bidimensionales de los SBDs y se define el parámetro que denominamos EPE (equivalente partícula electrón), que corresponde al número de portadores por unidad de longitud en la dirección no simulada que representa cada partícula simulada. El EPE puede entenderse también como el inverso del tamaño del dispositivo en la dirección no simulada.

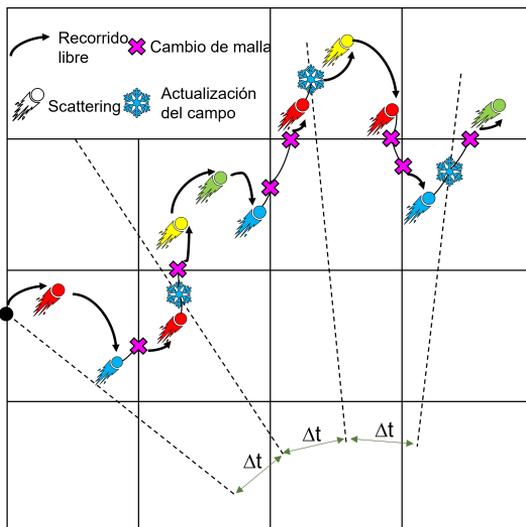


Figura 1.9: Dinámica de un portador en el simulador MC de dispositivos, donde se indican los hitos fundamentales.

La estructura del simulador de dispositivos se presenta en la figura 1.10. Se han utilizado colores para identificar los distintos bloques y recuadros discontinuos para destacar los aspectos más importantes para las simulaciones de la tesis y que trataremos con mayor profundidad, ya que el resto han sido objeto de estudio en otras tesis desarrolladas en el grupo de investigación [65, 66, 67, 69, 70, 71]. En color verde se han representado los pasos previos a la simulación, que son: la definición del semiconductor y sus parámetros físicos (dopaje, mecanismos de *scattering*, etc.), la geometría del dispositivo, los parámetros de la simulación (Δt , partículas, EPE, etc.) y las condiciones iniciales. El número inicial de partículas y su posición se define en función del dopaje de cada malla, y a cada partícula se le asocia aleatoriamente una energía cinética que sigue la distribución de Maxwell-Boltzmann. A continuación comienza el bucle de simulación de portadores representado en color azul. Cada portador se simula durante un tiempo Δt , en el cual puede experimentar varios recorridos libres y mecanismos de *scattering*, y una vez ha transcurrido este tiempo se pasa al siguiente portador, así hasta simularlos todos. Durante el paso temporal Δt , el portador puede sufrir mecanismos de *scattering*, que modifican su energía y trayectoria. Los mecanismos de *scattering* están representados en color gris y se mencionarán más adelante. Una vez se han simulado todos los portadores, se lleva a cabo la inyección de portadores térmicos desde el contacto óhmico hasta alcanzar la neutralidad de carga en su proximidad.

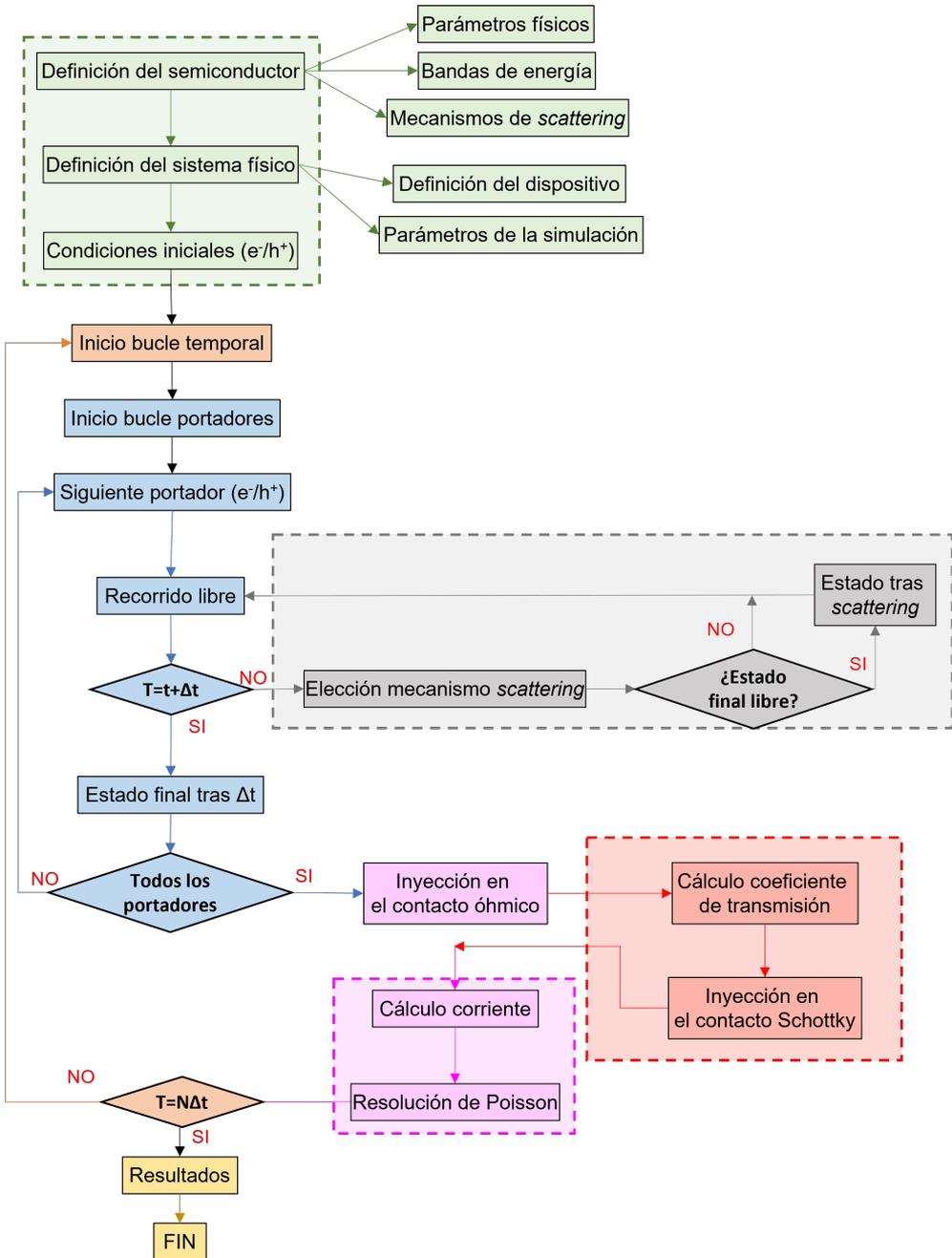


Figura 1.10: Diagrama de flujo del simulador MC bidimensional para los SBDs.

Además, a partir de una determinada iteración, N_{tunnel} , se considera la inyección túnel (color rojo). Para ello se calcula el coeficiente de transmisión T_C y los portadores

que deben ser inyectados, con la distribución espacial y energética adecuada, a través del contacto Schottky. La inyección túnel se explicará de manera detallada en las secciones siguientes. Se calculan las corrientes y se resuelve la ecuación de Poisson, es decir, se actualiza el campo eléctrico (color rosa). El valor del campo eléctrico actualizado se utilizará para simular el siguiente paso temporal, repitiendo todo el proceso hasta alcanzar el tiempo total de simulación, que vendrá dado por el producto del número total de iteraciones (N) y el paso temporal (Δt). Por último, se calculan los resultados medios (color amarillo).

1.3.2. Materiales semiconductores y sistema físico

En esta subsección vamos a presentar los semiconductores utilizados en las simulaciones junto con el modelo físico de los mismos. Para las simulaciones es necesario definir también la geometría y una serie de parámetros físicos, como el dopaje. En cada capítulo se presentará la estructura y características de los diodos simulados. En cuanto a los materiales, se van a simular SBDs con dos semiconductores III-V, GaAs y GaN.

1.3.2.1. Bandas de energía

En el caso del GaAs, emplearemos un modelo para la banda de conducción que consta de tres valles esféricos no parabólicos (un valle Γ , cuatro L equivalentes y tres X equivalentes), cuya relación energía-vector de onda vendrá dada por

$$\varepsilon(k)(1 + \alpha\varepsilon(k)) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (1.27)$$

donde ε es la energía del electrón, k el vector de onda, \hbar la constante de Planck reducida, m^* la masa efectiva (que será isotrópica pero distinta en cada valle) y α el coeficiente de no parabolicidad. De igual modo, para el GaN consideramos un modelo para la banda de conducción de tres valles esféricos no parabólicos, Γ_1 , U (6 equivalentes) y Γ_3 .

Los parámetros utilizados en nuestro modelo MC para la simulación de electrones en los semiconductores se muestran en la Tabla 1.1. Además de los parámetros que definen la banda de conducción, se incluyen otros propios de los mecanismos de *scattering*, que se van a describir en la siguiente subsección.

Como se van a realizar simulaciones con el fenómeno de ionización por impacto, será necesario definir la banda de valencia y los parámetros de los huecos. Para caracterizar adecuadamente los diodos se han realizado simulaciones con dos códigos: el simulador MC 2-D y el MC 1-D. Los parámetros de los electrones son idénticos en ambos. Sin embargo, en el caso del modelo para los huecos, en el simulador MC

2-D la banda de valencia está formada por un sólo valle (hueco único), mientras que en el MC 1-D consta de tres valles (pesados, ligeros y split-off), cuyos parámetros se recogen en la tabla 1.2. Los parámetros de huecos del MC 1-D se han tomado de [72], y se han ajustado ligeramente en el MC 2-D para alcanzar resultados similares con un sólo valle.

| Parámetro | GaN | | | GaAs | | |
|---|----------------------|-------------|----------------------|--------------------|-------------|-------------|
| Densidad (Kg/m ³) | 6150 | | | 5360 | | |
| Velocidad del sonido (m/s) | 6560 | | | 5240 | | |
| Constante dieléctrica óptica | 5.35 | | | 10.92 | | |
| Constante dieléctrica estática | 8.9 | | | 12.9 | | |
| Energía del fonón óptico polar (eV) | 0.09120 | | | 0.03613 | | |
| Energía del fonón óptico no polar (eV) | - | | | 0.0343 | | |
| Gap de energía (eV) | 3.44 | | | 1.424 | | |
| Constante de red (Å) | 5.185 | | | 5.653 | | |
| | Γ_1 (valle 1) | U (valle 2) | Γ_3 (valle 3) | Γ (valle 1) | L (valle 2) | X (valle 3) |
| Masa efectiva (m^*/m_0) | 0.22 | 0.39 | 0.28 | 0.063 | 0.222 | 0.58 |
| No parabolicidad (eV^{-1}) | 0.37 | 0.50 | 0.22 | 0.7 | 0.5 | 0.3 |
| Nivel de energía desde Γ (eV) | 0.0 | 2.2 | 2.4 | 0.0 | 0.32 | 0.522 |
| Potencial de deformación acústico (eV) | 8.3 | 8.3 | 8.3 | 5.0 | 5.0 | 5.0 |
| Potencial de deformación óptico | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 3.0 | 0.0 |
| Potencial de deformación intervalle (10^{10} eV/m) | | | | | | |
| desde valle 1 a | 0 | 10.0 | 10.0 | 0 | 10.0 | 10.0 |
| desde valle 2 a | 10.0 | 10.0 | 10.0 | 10.0 | 10.0 | 5.0 |
| desde valle 3 a | 10.0 | 10.0 | 0.0 | 7.0 | 6.8 | 8.537 |
| Energía del fonón intervalle (eV) | | | | | | |
| desde valle 1 a | 0 | 0.09120 | 0.09120 | 0 | 0.02780 | 0.02930 |
| desde valle 2 a | 0.09120 | 0.09120 | 0.09120 | 0.02780 | 0.02780 | 0.02930 |
| desde valle 3 a | 0.09120 | 0.09120 | 0 | 0.02930 | 0.02930 | 0.02930 |

Tabla 1.1: Parámetros de los electrones para GaN [73] y GaAs [74].

| Parámetro | 1-D | | | 2-D |
|---|---------|---------|-----------|-------------|
| | Pesados | Ligeros | Split-off | Hueco único |
| Masa efectiva (m^*/m_0) | 1.3 | 1.1 | 0.2 | 1.3 |
| No parabolicidad (eV^{-1}) | 0.1 | 0.1 | 0.1 | 0.1 |
| Distancia split-off | 0.0401 | | | - |
| Potencial de deformación óptico (10^{10} eV/m) | 15 | | | 17.32 |
| Potencial de deformación acústico (eV) | 19.5 | | | 25 |

Tabla 1.2: Parámetros de los huecos para GaN [72].

1.3.2.2. Mecanismos de *scattering*

En nuestro simulador MC, tras un tiempo de recorrido libre, los portadores son sometidos a mecanismos de *scattering*, los cuales se eligen de forma aleatoria en función de la probabilidad de cada uno de ellos. Los mecanismos de *scattering* pueden clasificarse en base a distintos criterios [67, 69, 70]. El primero es en función de si se conserva (elástico) o cambia (inelástico) la energía del electrón tras el mecanismo.

El segundo criterio es el momento del electrón antes y después del mecanismo. Serán isotropos cuando la dirección del momento final del electrón no depende de la del momento inicial o anisotropos, cuando sí depende. Y por último, se clasifican en función del origen físico del mecanismo en: *scattering* con defectos, entre portadores o con la red. Siguiendo este último criterio, presentaremos los mecanismos de *scattering* que vamos a considerar en nuestras simulaciones. Los posibles *scattering* con defectos son:

- * *Scattering* con **dislocaciones**. Estos defectos aparecen habitualmente en el crecimiento del GaN (elástico y anisótropo).
- * *Scattering* por interacción con **impurezas ionizadas** (elástico y anisótropo).
- * *Scattering* de **aleación**, se produce únicamente en materiales compuestos [19], y por tanto no será considerado.

Los *scattering* entre portadores no se tendrán en cuenta, ya que incorporarlos en el modelo es muy costoso y son sólo importantes para concentraciones muy altas. En cuanto a los *scattering* con la red, se producen colisiones de los electrones con los fonones, que pueden ser ópticos o acústicos. La interacción con la red se produce bien por un potencial de deformación (*scattering* no polar) o por fuerzas electrostáticas (*scattering* polar o piezoeléctrico para los fonones acústicos). Serán mecanismos intervalle o intravalle dependiendo de si se produce un cambio de valle o no. Los mecanismos considerados en el simulador son:

- * **Intervalle** (inelástico e isotropo).
- * **Acústico** no polar (elástico e isotropo).
- * **Piezoeléctrico** (elástico y anisótropo).
- * **Óptico polar** (inelástico y anisótropo).
- * **Óptico no polar** (inelástico e isotropo), este mecanismo tiene lugar únicamente en los valles L .

Las probabilidades de los mecanismos de *scattering*, así como el estado final del portador, han sido previamente estudiados [18, 20, 65, 67, 75, 76]. Por último, hemos incluido, además de estos mecanismos, el fenómeno de ionización por impacto. La ionización por impacto no es exactamente un mecanismo de *scattering*, pero se ha incluido como tal por sencillez a la hora de introducirlo en el simulador. En la siguiente subsección se explica detalladamente por la importancia que tendrá en los resultados recogidos en esta memoria.

1.3.2.3. Ionización por impacto

En algunas de las simulaciones que se van a presentar en esta tesis no se ha tenido en cuenta la ionización por impacto. No obstante, en dichas simulaciones, aunque se

hubiera incluido este fenómeno, no sería significativo, ya que se consideran voltajes aplicados bajos donde generalmente no han comenzado los procesos de ionización. Sin embargo, cuando se realizan simulaciones para polarizaciones en inversa elevadas ha sido necesario tenerlo en cuenta. Únicamente se han realizado simulaciones que incluyen la ionización por impacto para SBDs de GaN. Para un caso general, las ionizaciones por impacto no son sólo importantes para los electrones, sino también para los huecos generados [77, 78, 79, 80], por lo que se tendrán en cuenta ambas.

La ionización por impacto se ha introducido en el simulador mediante la aproximación de Keldysh [72, 81], estableciendo que la probabilidad por unidad de tiempo de que se produzca una ionización por impacto vendrá dada por la ecuación

$$P(\varepsilon) = S \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_{th}}{\varepsilon_{th}} \right)^2 \quad \text{si } \varepsilon > \varepsilon_{th},$$

$$P(\varepsilon) = 0 \quad \text{si } \varepsilon < \varepsilon_{th},$$
(1.28)

donde ε es la energía cinética de los portadores, ε_{th} la energía umbral de ionización y S un parámetro que controla la intensidad de la ionización. Los parámetros ε_{th} y S generalmente se consideran ajustables. En nuestro caso, los valores utilizados se presentan en la tabla 1.3. La ionización por impacto se produce cuando los electrones que se encuentran en la banda de conducción tienen una energía que supera la energía umbral ε_{th} , generándose un par electrón-hueco. Los portadores generados aparecerán en los valles de menor energía por ser los de ocupación más probable. El electrón que produce la ionización por impacto permanecerá en el valle en que se encuentre, perdiendo una energía equivalente a la suma del gap y la energía térmica cedida al par electrón-hueco.

| Parámetro | Electrones | | | Huecos |
|----------------------------------|------------|-----|------------|--------|
| | Γ_1 | U | Γ_3 | |
| ε_{th} (eV) | 3.0 | 3.0 | 3.0 | 3.0 |
| S (10^{12} s^{-1}) | 5.0 | 5.0 | 5.0 | 25.0 |

Tabla 1.3: Parámetros de ionización para electrones y huecos en GaN (tanto en el simulador 1-D como 2-D).

En el MC 1-D los parámetros de ionización son los mismos que en el MC 2-D tanto para electrones como para huecos, teniendo en cuenta que en el MC 1-D los tres valles de los huecos tienen los mismos valores de energía umbral de ionización ($\varepsilon_{th} = 3.0 \text{ eV}$) y del parámetro S ($S = 25 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$).

1.3.3. Inyección túnel

Como se ha explicado en la sección 1.2.2, los procesos de transporte de corriente más importantes en un diodo Schottky son la emisión termoiónica y la inyección túnel. Para polarizaciones en inversa la inyección túnel tiene mayor relevancia, por lo que debe ser incluida en el simulador MC para modelar correctamente los SBDs. Para tener en cuenta de forma adecuada este mecanismo es imprescindible conocer el perfil de la barrera a lo largo de la estructura. Para el cálculo de la probabilidad de transmisión, se espera un tiempo de simulación determinado (suficientemente grande, ver figura 1.10) hasta que el perfil de potencial en la simulación sea estable.

Para calcular la corriente túnel, vamos a utilizar la expresión general

$$J(\varepsilon)d\varepsilon = -eN(\varepsilon)T_C(\varepsilon)d\varepsilon, \quad (1.29)$$

donde $N(\varepsilon)$ es el número de electrones por unidad de área incidentes en la barrera con una energía ε por unidad de tiempo y energía [82] y $T_C(\varepsilon)$ el coeficiente de transmisión para esa energía. Esta expresión asume que la ocupación de los estados finales es muy pequeña. Para determinar T_C , debemos resolver la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = \varepsilon\psi(x), \quad (1.30)$$

donde $\psi(x)$ es la función de onda que describe el movimiento de una partícula de masa m , $V(x)$ la energía potencial y ε la energía. La resolución de esta ecuación es muy compleja, por lo que se han desarrollado varios métodos para obtener una solución aproximada. Nosotros haremos uso de la aproximación WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin), explicada con más detalle en [83], obteniendo una expresión para T_C igual a [28]

$$T_C(\varepsilon) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m^*(\varepsilon_c(x) - \varepsilon)} dx\right), \quad (1.31)$$

donde x_1 y x_2 son los puntos de retroceso en los cuales la energía incidente es igual al potencial de la barrera.

En nuestro simulador 2-D, se divide el dispositivo en mallas. Como hemos explicado anteriormente, se define una zona en la que se calculará la inyección túnel. En la figura 1.11 se representa la energía en función de la posición para una columna j de mallas desde el contacto Schottky hacia dentro. A cada nodo (l), representado con círculos negros en la figura, le corresponde una energía $\varepsilon_l(j)$. Además, cada malla se divide en un número de subintervalos de energía n_{sb} (4 en la figura, líneas discontinuas naranjas). A cada posición de la malla dividida en subintervalos le corresponderá una energía determinada $\varepsilon_{li}(j)$, donde i es el número de subintervalo, y en cada subintervalo se calculará la carga inyectada por túnel $Q_{li}(j)$. Luego el primer

paso en el simulador es calcular la banda de conducción (BC) a partir del potencial en cada nodo y conociendo la barrera de la unión Schottky. El punto de referencia será el nivel de Fermi del metal, $\varepsilon_{Fm} = 0$ eV. El T_C se va a calcular para cada uno de los valores de energía determinados por los subintervalos. Para ello, se considera una dependencia lineal de la banda entre dos nodos, y se calcula T_C para cada $\varepsilon_{li}(j)$ mediante la ecuación 1.31. Una vez calculados los coeficientes de transmisión, se podrá calcular la carga inyectada por unidad de superficie para un paso temporal como

$$Q_{li}(j) = \Delta t e N(\varepsilon_{li}(j)) T_C(\varepsilon_{li}(j)) \Delta \varepsilon_{li}(j). \quad (1.32)$$

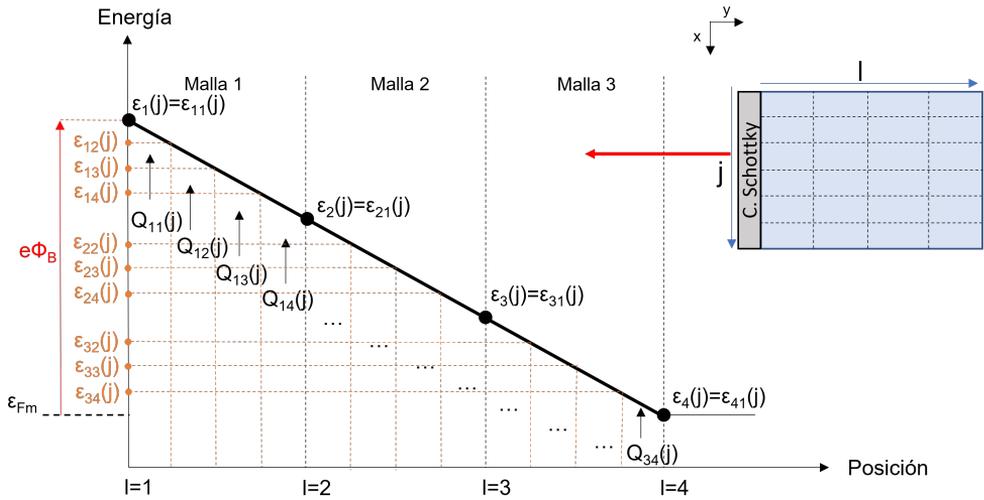


Figura 1.11: Esquema de la división de las mallas en subintervalos de energía para la emisión túnel en el simulador 2-D. La estructura mostrada en el *inset* correspondería a las mallas en las que se va a calcular la emisión túnel.

Es importante mencionar que el cálculo es más preciso con respecto al modelo presentado en trabajos previos [83, 84], ya que para las simulaciones realizadas en esta tesis, el modelo incluye la expresión para $N(\varepsilon)$ exacta (considerando de forma detallada los estados transversales) [82]

$$N(\varepsilon) = \frac{A^*T}{ek_B} \ln \left[1 + \exp \left(-\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T} \right) \right], \quad (1.33)$$

mientras que anteriormente se aplicaba en todos los casos la aproximación

$$N(\varepsilon) \approx \frac{A^*T}{ek_B} \exp \left(-\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T} \right), \quad (1.34)$$

que es válida únicamente cuando las energías cumplen que $\varepsilon - \varepsilon_{Fm} \gg k_B T$.

Con la carga inyectada por unidad de superficie, se puede calcular el número de partículas a inyectar en cada subintervalo en ese Δt

$$N_{pli}(j) = \frac{Q_{li}(j)\Delta y}{e EPE}, \quad (1.35)$$

siendo Δy el tamaño de las mallas en la dirección vertical. Si sumamos las partículas a inyectar en cada intervalo j, l, i tendremos las partículas totales (N_p). Se define la tasa de inyección túnel

$$\Gamma = N_p/\Delta t. \quad (1.36)$$

La inyección de partículas se realiza de forma secuencial durante la duración de un paso temporal Δt . Mientras no concluya el paso temporal, para la inyección de una partícula se genera un número aleatorio (R) y, empleando el método de MC, se calcula su tiempo de inyección a partir de la entrada de la anterior, como

$$t_{iny} = \log(R)/\Gamma. \quad (1.37)$$

Una vez que se determina el tiempo en el que entra una partícula, se debe calcular en qué posición se inyecta. Se genera otro número aleatorio (r) y se multiplica por el número total de partículas N_p . Se van sumando las partículas inyectadas en cada subintervalo de energía (siempre en el mismo orden), hasta que se cumpla la condición

$$\sum_{j=1}^k \sum_{l=1}^s \sum_{i=1}^m N_{pli}(j) < rN_p < \sum_{j=1}^k \sum_{l=1}^s \sum_{i=1}^{m+1} N_{pli}(j). \quad (1.38)$$

Y será en la malla k, s y en el subintervalo de energía m , donde se inyecte la partícula (en la posición que le corresponda). Una vez se ha inyectado la partícula, se simula su dinámica durante el tiempo que reste hasta la conclusión del paso temporal.

Es importante mencionar que en el caso del simulador 1-D, conocida la banda de conducción, se divide en los subintervalos de energía deseados (independientes del mallado) y para cada energía se calcula cuál es la posición correspondiente donde inyectar. El coeficiente de transmisión para cada energía se calcula a partir del perfil de la banda de conducción procedente de la simulación MC. Al calcular T_C de forma independiente al mallado espacial se puede obtener la resolución en energía deseada.

1.3.4. Cálculo de la corriente

El cálculo de la corriente es fundamental a la hora de estudiar un dispositivo y sus características estáticas, por lo que es importante determinarla de manera precisa en los contactos para cada paso temporal de la simulación. Se va a evaluar la corriente de dos formas: a través del Teorema de Ramo-Shockley [85] y contando el número

de partículas que salen o entran en el dispositivo por unidad de tiempo a través del contacto Schottky y del contacto óhmico. El método de Ramo-Shockley calcula la corriente instantánea inducida por el movimiento de cargas en un electrodo y está explicado en varias de las tesis del grupo de investigación [67, 70]. Es interesante conocer también por separado la corriente debida a los electrones y a los huecos en los contactos, especialmente en el contacto Schottky, ya que nos aporta información adicional. Para su cálculo de manera precisa, se contará el número de electrones y huecos por unidad de tiempo, respectivamente, que entran y salen por el contacto Schottky. Para este método, la corriente total será la suma de la corriente de electrones más la de huecos. A su vez, la corriente de electrones por unidad de longitud vendrá dada por la expresión

$$I_{e^-} = \frac{ePE n_{e^-}}{N_{med} \Delta t}, \quad (1.39)$$

donde n_{e^-} es el número de electrones que salen menos los que entran, N_{med} el número de iteraciones en que realizamos las medias, y Δt el paso temporal. Y de la misma manera, para la corriente de los huecos (por unidad de longitud) tendremos

$$I_{h^+} = \frac{ePE n_{h^+}}{N_{med} \Delta t}, \quad (1.40)$$

siendo en este caso n_{h^+} el número de huecos que entran menos los que salen, al contrario que los electrones.

1.3.5. Resolución de la ecuación de Poisson

Al estudiar el transporte de los portadores en el interior de un dispositivo electrónico de un determinado material semiconductor, es necesario tener en cuenta que están sometidos a un campo eléctrico y a las interacciones con la red cristalina [86]. Para determinar el campo eléctrico, se resuelve la ecuación de Poisson

$$\nabla[\kappa_{sc}(r)\nabla\varphi(r)] = -\rho, \quad (1.41)$$

donde φ es el potencial eléctrico en cada punto, ρ la densidad de carga y $\kappa_{sc}(r)$ la permitividad del material o materiales que forman el dispositivo. En nuestro simulador, esta ecuación se resuelve usando el método de diferencias finitas, basado en la discretización de las ecuaciones para cada nodo del mallado. En la simulación, en primer lugar se calcula la densidad de carga en cada nodo [65, 66], que se corresponde con el segundo miembro de la ecuación 1.41. La discretización de la ecuación de Poisson da lugar a una serie de ecuaciones lineales, que se resolverán mediante una descomposición LU [87]. Las condiciones de contorno empleadas para la resolución de Poisson son la de Dirichlet (contactos) y la de von Neumann (resto de fronteras).

Teniendo en cuenta todo esto se obtienen los valores del potencial en los nodos y, a partir de ellos, los del campo eléctrico en las mallas.

En la resolución de la ecuación de Poisson se tienen en cuenta también las cargas superficiales. Estas cargas se encuentran en las interfaces del semiconductor con un dieléctrico (o aire). Hay dos modelos para la simulación de la carga superficial [69]:

- * **Modelo de carga constante (CCM)**: este modelo establece una carga de superficie constante en toda la interfaz. El valor se fija como parámetro de la simulación, y es independiente del voltaje y la posición. El valor constante de la carga de superficie (σ) viene dado por la expresión: $\sigma = \sqrt{2eN_D|V_s|\kappa_{sc}}$, donde V_s es el potencial en la superficie.
- * **Modelo de carga autoconsistente (SCCM)**: este modelo actualiza el valor de la carga de superficie en función de la cantidad de portadores que haya en las proximidades de la frontera. El valor de la carga de superficie se va adaptando a medida que avanza la simulación.

Capítulo 2

Efectos de borde en diodos de barrera Schottky

Los diodos de barrera Schottky (SBDs) son los dispositivos de referencia para la fabricación de detectores, mezcladores y multiplicadores de frecuencia en el rango de ondas milimétricas y submilimétricas. La tecnología más desarrollada en el uso de SBDs es el arseniuro de galio (GaAs) [12, 44, 88], cuya principal limitación es el manejo de potencias elevadas. Por ello, el nitruro de galio (GaN) se convierte en un material prometedor, ya que sus características, entre ellas el gran gap, permiten aumentar la amplitud de excitación y por lo tanto la potencia de salida de los multiplicadores de frecuencia usados en terahercios. Esto puede evitar el uso de diseños complejos basados en técnicas de combinación de potencia con varios diodos en paralelo, necesarios cuando se quiere aumentar la potencia generada y no hay posibilidad de aumentar la amplitud de la entrada. Por ello, en este capítulo se continuará con la línea de investigación desarrollada por el grupo [34] para SBDs de GaAs y se comenzará un estudio paralelo en GaN. En este capítulo se van a presentar simulaciones Monte Carlo (MC) realizadas para diodos con diferentes dopajes y geometrías, y el correspondiente estudio de las capacidades obtenidas. En los SBDs, la no linealidad de las curvas capacidad-voltaje ($C-V$) es uno de los parámetros más importante para optimizar su funcionamiento [33]. El objetivo es desarrollar modelos analíticos, los cuales se utilizarán en los simuladores circuitales para la optimización del diseño de los multiplicadores de frecuencia. En el caso de los multiplicadores usados en alta frecuencia, la superficie del ánodo debe reducirse. Sin embargo, en diodos pequeños, la capacidad se desvía del valor ideal debido a los efectos de borde, por lo que debe hacerse uso de modelos 2-D para obtener valores precisos de la capacidad del SBD

[34]. Uno de los objetivos de este capítulo es estudiar cómo influye en los efectos de borde la presencia de cargas superficiales en la interfaz semiconductor-dieléctrico haciendo uso del simulador *ensemble* MC de dispositivos presentado en el capítulo anterior [34, 89, 90]. Además estudiaremos la influencia de diversos parámetros en dicha capacidad.

2.1. Los dispositivos

Los SBDs estudiados en esta tesis están formados por una estructura de dos capas de semiconductor llamadas: capa n^{++} , la cual se encuentra altamente dopada y la capa n^- con un dopaje menor, a la que también se suele denominar *epilayer*, como se presentó en el capítulo anterior (figura 1.1). El contacto Schottky se sitúa sobre la capa n^- , mientras que el contacto óhmico se situará sobre la capa n^{++} . En el caso de las estructuras 2-D se simulará una capa de material dieléctrico que se usa en el proceso tecnológico con dos objetivos: llevar a cabo la pasivación del diodo y aislar la *epilayer* y el contacto óhmico.

2.1.1. Estructuras simuladas

El diagrama de flujo en el simulador *ensemble* bidimensional MC se ha presentado en el primer capítulo de esta tesis. Para las simulaciones presentadas en este capítulo, consideraremos el contacto Schottky como un límite absorbente perfecto, es decir, todos los portadores que alcancen el contacto metálico abandonarán la estructura y no se inyectarán portadores desde el metal al semiconductor. En cuanto al contacto óhmico, establece la neutralidad de carga en las proximidades del contacto inyectando portadores con la distribución térmica apropiada [91].

Como la resolución de Poisson para la obtención del campo eléctrico se realiza en los nodos, es importante definir el mallado correctamente. El tamaño de las mallas se ha establecido teniendo en cuenta la longitud de Debye, simulando mallas cuadradas de lado 5 nm en toda la estructura, excepto en la interfaz entre la capa n^{++} y la *epilayer*, en la que son rectangulares de 2×5 nm para tener mayor precisión (siendo menor el tamaño en la dirección vertical). El paso temporal Δt , con el cual se actualiza el campo eléctrico, está limitado por la frecuencia de plasma y el tiempo de relajación dieléctrico [92, 93]. En nuestro caso, este parámetro se ha ajustado para optimizar el tiempo de cálculo y se usará un valor de 0.2 fs.

Es importante definir de manera adecuada el número de partículas simuladas inicialmente, que dependen del dopaje de cada malla. Su energía cinética inicial se establece aleatoriamente siguiendo la distribución Maxwell-Boltzmann. El número

de partículas dentro del dispositivo cambia con la entrada y salida de portadores a través de los contactos. Otro punto a destacar es que en las simulaciones, tanto unidimensionales como bidimensionales, no se simulan todos los portadores, ya que el tiempo de cálculo desde el punto de vista computacional sería demasiado grande. Por lo tanto, como se ha explicado ya en el capítulo anterior, se define un parámetro denominado equivalente partícula electrón (EPE) que equivaldría al inverso de la dimensión no simulada. También es importante fijar adecuadamente el tiempo total de simulación T , que viene determinado por el paso temporal (Δt) y el número de iteraciones a simular (N), $T = N \Delta t$.

Inicialmente simularemos dos estructuras denominadas Diodo A y Diodo B. Posteriormente abordaremos una estructura más sofisticada y similar a los diodos fabricados en el Institut d'Électronique de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN), la cual será utilizada para estudiar la influencia del dieléctrico en la capacidad de efectos de borde. En esta sección vamos a presentar la estructura de los Diodos A y B simulados inicialmente. En primer lugar, comenzaremos presentando el Diodo A, el cual es de menor tamaño y está basado en el utilizado en un mezclador de frecuencia [44]. En la figura 2.1(a) se presenta su esquema, utilizado en las simulaciones MC bidimensionales, indicando los valores de los parámetros geométricos.

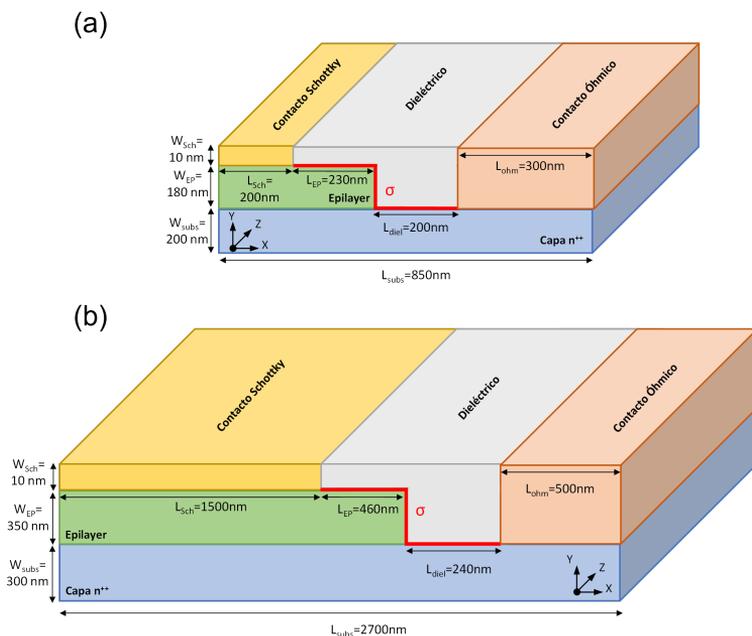


Figura 2.1: Esquema de las estructuras simuladas de (a) el Diodo A y (b) el Diodo B.

La estructura de capas en todos los casos está formada por una capa n^{++} con $N_S = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ y una *epilayer* menos dopada. Para la *epilayer* se han realizado simulaciones para tres valores de dopaje diferentes: $N_D = 10^{17}$, 3×10^{17} y $6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. El contacto óhmico está depositado sobre la capa n^{++} , mientras que el contacto Schottky se encuentra sobre la *epilayer*. Inicialmente se han realizado simulaciones utilizando nitruro de silicio (Si_3N_4) como dieléctrico. Las cargas superficiales (σ) se sitúan en la interfaz semiconductor-dieléctrico y se representan con una línea roja en el esquema de los diodos.

La segunda estructura simulada (Diodo B) está basada en el diodo utilizado en un doblador de frecuencia [44], y la diferencia con respecto al Diodo A son los parámetros geométricos, indicados en la figura 2.1(b).

Como hemos mencionado anteriormente, las simulaciones son bidimensionales, por lo tanto en ambas estructuras Z es la dimensión no simulada. El espesor de la capa n^{++} en ambos casos se ha reducido con respecto a los dispositivos de referencia, teniendo en cuenta en cualquier caso que debe ser suficientemente grande para obtener un perfil de potencial plano. Asimismo, el espesor de la *epilayer* en las estructuras simuladas será suficientemente grande para evitar que la zona de vaciamiento alcance la capa n^{++} para la máxima polarización en inversa utilizada (limitada por el voltaje de ruptura y experimental).

2.2. Voltaje de difusión, $V_{n^{++}-n^-}$

En esta sección se presentará el cálculo de la diferencia de potencial entre los dos contactos que debemos aplicar en las simulaciones MC (V_{MC}) para alcanzar una situación de banda plana. Para ello, es necesario determinar el voltaje de difusión entre la capa n^{++} y la capa n^- (*epilayer*), $V_{n^{++}-n^-}$, así como la caída de potencial en los contactos (V_{Ohm} y V_{Sch}). El voltaje de difusión depende del dopaje y del material, y se puede determinar analíticamente, pero para determinar el valor del voltaje a aplicar en el contacto óhmico es necesario llevar a cabo simulaciones unidimensionales y bidimensionales de los Diodos A y B usando los diferentes dopajes de la *epilayer*. La estructura 1-D simulada se muestra en la figura 2.2(a). En la figura 2.2(b) se muestra el diagrama de las bandas de energía de un SBD en equilibrio, donde $e\phi_B$ es la barrera Schottky, V_B el voltaje de *built-in* y $V_{n^{++}-n^-}$ el voltaje de difusión.

En primer lugar se realizan simulaciones unidimensionales con una frontera con potencial flotante y que se comporta como un límite reflector perfecto, es decir, los portadores que alcancen el final de la estructura se reflejan. Al realizar estas simulaciones se observa una pequeña caída de potencial (del orden de mV) en el contacto óhmico V_{Ohm} inherente al simulador [ver figura 2.3(a)], la cual siempre está presente

incluso definiendo de manera muy precisa el contacto [91]. Además, de esta simulación obtenemos el valor del voltaje de difusión para la estructura unidimensional $V_{n^{++}-n^-}^{1D}$. En segundo lugar, se realizan simulaciones unidimensionales para diferentes polarizaciones, definiendo un contacto Schottky no flotante y comportándose como límite absorbente perfecto. En este caso, si aplicamos una diferencia de potencial entre los contactos igual a la suma de $V_{n^{++}-n^-}^{1D}$ y V_{Ohm} , nos encontramos que no se obtiene una situación de banda plana en la simulación. En la figura 2.3(b) se observa una caída de potencial en el contacto Schottky debida a la no neutralidad de carga producida por electrones que abandonan la estructura y no considerarse inyección desde el metal al semiconductor.

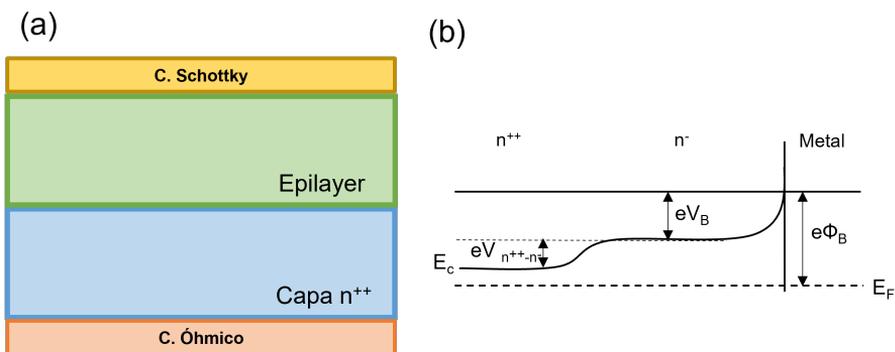


Figura 2.2: (a) Esquema de la estructura unidimensional simulada. (b) Diagrama de bandas del SBD en equilibrio.

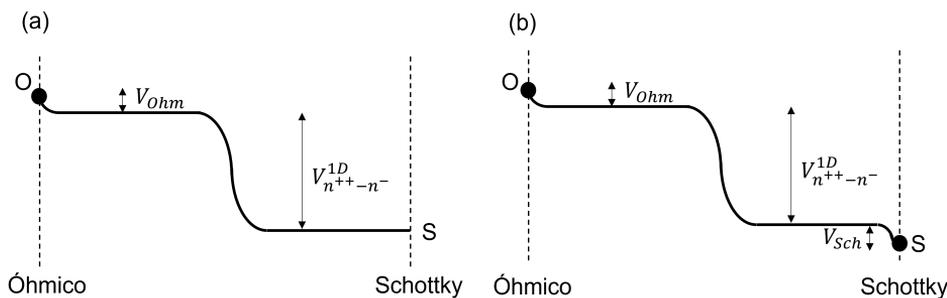


Figura 2.3: Esquema de las estructuras unidimensionales simuladas y del perfil de potencial con (a) una frontera flotante en S y límite reflector perfecto y (b) con un contacto Schottky con límite absorbente perfecto.

No es posible por tanto determinar el voltaje de banda plana, por lo que tenemos que hacer una determinación indirecta a partir de la dependencia de la carga con el

voltaje aplicado. Para ello, se realizan simulaciones para diferentes polarizaciones. A partir de esas simulaciones calculamos la carga total por unidad de longitud asociada a los electrones $Q_{MC}(V)$ que hay en el diodo

$$Q_{MC}(V) = NP e EPE, \quad (2.1)$$

donde NP es el número de partículas, e la carga del electrón y EPE el equivalente partícula electrón. Otra forma de calcularla es a partir de la concentración en cada malla

$$Q_{MC}(V) = \sum_{i=1}^{NM} N_i \Delta x_i \Delta y_i e, \quad (2.2)$$

donde NM es el número total de mallas, N_i la concentración de cada malla, y Δx_i y Δy_i los tamaños de las mallas en horizontal y vertical, respectivamente. Si le restamos a este valor de carga el valor de la carga del caso de la frontera flotante (Q_{MC}^{Id}), tendremos que

$$Q_{MC}(V) - Q_{MC}^{Id} = -L_{Sch} \sqrt{2 \kappa_{SC} e N_D (V - V_{OS}^{1D})}, \quad (2.3)$$

donde L_{Sch} es la longitud del contacto Schottky, κ_{SC} la permitividad dieléctrica del semiconductor y V_{OS}^{1D} el voltaje que habría que aplicar entre los contactos óhmico y Schottky para obtener banda plana (donde debe cumplirse que $Q_{MC}(V_{OS}^{1D}) = Q_{MC}^{Id}$). Representando por lo tanto $Q_{MC}(V) - Q_{MC}^{Id}$ frente al voltaje aplicado V y realizando un ajuste, se puede calcular el valor del voltaje V_{OS}^{1D} . En la figura 2.3(b) se observa que el voltaje V_{OS}^{1D} es igual a la suma de $V_{n^{++}-n^-}^{1D}$, V_{Ohm} y V_{Sch} , de donde se obtiene el voltaje que cae en ambos contactos ($V_{Ohm} + V_{Sch}$).

El problema es que la geometría de las simulaciones 2-D proporciona una diferencia de potencial entre las capas ligeramente diferente a la que se encuentra en las simulaciones 1-D. Por ello, se realiza la simulación del diodo bidimensional con la frontera flotante en la posición del contacto Schottky y considerándose un límite reflector perfecto para obtener el voltaje $V_{n^{++}-n^-}^{2D}$. El voltaje V_{MC} que tendremos que utilizar en las simulaciones posteriores se calculará como

$$V_{MC} = V_{OS}^{2D} = V_{n^{++}-n^-}^{2D} + (V_{Ohm} + V_{Sch}) = V_{n^{++}-n^-}^{2D} + (V_{OS}^{1D} - V_{n^{++}-n^-}^{1D}). \quad (2.4)$$

El voltaje V_{MC} para el GaAs y el GaN en función del dopaje de la *epilayer*, teniendo en cuenta que el dopaje de la capa n^{++} será siempre el mismo e igual a $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, se recoge en la tabla 2.1.

En las simulaciones MC presentadas en este capítulo, al considerarse el contacto Schottky como un límite absorbente perfecto y observar una caída en los contactos, será necesario aplicar en el contacto óhmico un voltaje igual a $V_B + V_{MC}$ y en el contacto Schottky el voltaje V correspondiente a la polarización aplicada.

| | $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ | $N_D = 3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ | $N_D = 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ |
|-------------|---------------------------------|--|--|
| <i>GaAs</i> | 0.218 | 0.161 | 0.143 |
| <i>GaN</i> | 0.137 | 0.110 | 0.094 |

Tabla 2.1: Valores del voltaje V_{MC} para el GaAs y GaN y varios valores del dopaje de la *epilayer*.

2.3. Simulaciones 2-D

En esta sección vamos a presentar los resultados obtenidos con simulaciones bi-dimensionales para el cálculo de la capacidad de efectos de borde, centrándonos en GaAs y GaN. Se analizarán los efectos de borde en la capacidad de la unión en función del voltaje aplicado en inversa. El simulador MC nos permite evaluar la carga total en el diodo Schottky en cada punto de polarización sumando el número de electrones en cada malla. La capacidad en función de la polarización se calcula como la variación de la carga total del dispositivo por unidad de voltaje. Además, este método permite identificar y localizar las zonas del diodo que contribuyen a la capacidad total, que se corresponden a aquellas donde la zona de vaciamiento cambia con el voltaje, siendo posible identificar el origen de los efectos de borde en la capacidad y la influencia de las cargas superficiales.

El valor ideal de la carga (por unidad de longitud en la dimensión no simulada, dada en C/m) en la zona de vaciamiento generada por el contacto Schottky cuando no están presentes los efectos de borde viene dado por la ecuación

$$Q_{Id}(V) = -L_{Sch}eN_DW(V), \quad (2.5)$$

donde $W(V)$ es la anchura de la zona de vaciamiento, que a su vez viene dada por

$$W(V) = \sqrt{2\kappa_{SC}(V_B - V)/eN_D}, \quad (2.6)$$

siendo V_B el voltaje *built-in* del contacto Schottky y V el voltaje aplicado en el ánodo con el contacto óhmico conectado a tierra. En el trabajo previo [34], los resultados de las simulaciones MC evidenciaban la presencia de una carga añadida, identificada por la discrepancia observada entre los valores de carga obtenidos con las simulaciones y la carga de vaciamiento ideal obtenida de la ecuación 2.5, concluyendo que la presencia de una contribución adicional a la carga de vaciamiento es debida a los efectos geométricos bidimensionales (efectos de borde) [33, 94, 95, 96]. En dicho trabajo se confirmó la dependencia de esta contribución con el voltaje aplicado, dando lugar a una expresión de la carga total vaciada en un SBD, $Q(V)$, constituida por la carga

de vaciamiento ideal (ecuación 2.5) más un término añadido proporcional a $V - V_B$

$$Q(V) = Q_{MC}(V) - Q_{MC}(V_{MC}) = Q_{Id}(V) + Q_{EE}(V) = -L_{Sch}\sqrt{2q\kappa_{SC}N_D(V_B - V)} + \beta\kappa_{SC}(V - V_B), \quad (2.7)$$

donde β es un parámetro de efectos de borde adimensional. Esta ecuación está dada en unidades de carga por unidad de longitud, por lo tanto el primer término (carga ideal) es proporcional al área y el segundo término (asociado a los efectos de borde) es proporcional al perímetro e independiente del dopaje de la *epilayer*. Sin embargo, sí depende de la presencia o ausencia de cargas superficiales en la interfaz de la *epilayer* [34]. La capacidad de la unión se puede calcular como $C(V) = dQ(V)/dV$. Incluyendo el término de los efectos de borde bidimensionales de la ecuación 2.7, se obtiene:

$$C(V) = C_{Id}(V) + C_{EE} = L_{Sch}\kappa_{SC}/W(V) + \beta\kappa_{SC}, \quad (2.8)$$

donde $C(V)$, $C_{Id}(V)$, C_{EE} son las capacidades total, ideal y de efectos de borde, respectivamente, por unidad de longitud en la dimensión no simulada (dadas en F/m). La ecuación 2.8 indica que la desviación de la capacidad con respecto al valor ideal debida a la geometría bidimensional del diodo ($C_{EE} = \beta\kappa_{SC}$) es independiente del voltaje, proporcional a la permitividad del semiconductor y caracterizada por β . Por lo tanto, para determinar C_{EE} , es necesario calcular el parámetro β . A partir de los resultados de las simulaciones MC, obtenemos la carga total asociada a los electrones en el diodo $Q_{MC}(V)$ para una determinada polarización, ver ecuación 2.2. El valor de $Q_{MC}(V)$ menos la carga total en el diodo en condiciones de banda plana $Q_{MC}(V_{MC})$ será igual a la carga total vaciada $Q(V)$. Si a $Q(V)$ le restamos la expresión de la carga asociada al vaciamiento ideal, $Q_{Id}(V)$ (ecuación 2.5), se obtiene la contribución de carga de los efectos de borde, $Q_{EE}(V)$

$$Q_{EE}(V) = Q(V) - Q_{Id}(V) = \beta\kappa_{SC}(V - V_B). \quad (2.9)$$

Por lo tanto, representando $Q(V) - Q_{Id}(V)$ frente a $V - V_B$, se puede calcular β a partir de la pendiente. Como se ha mencionado anteriormente, la influencia de la carga superficial es importante. Dentro de esta sección se expondrán los resultados obtenidos en las simulaciones para los dos modelos de carga superficial que han sido utilizados: modelo de carga constante (*constant charge model*, CCM) y modelo de carga autoconsistente (*self-consistent charge model*, SCCM).

2.3.1. Modelo de carga constante (CCM)

En esta subsección se van a presentar los resultados de las simulaciones para las cuales se ha utilizado el modelo CCM. Tal y como se ha explicado en el capítulo 1, el

CCM considera una carga constante en toda la interfaz dieléctrico-semiconductor. El valor de la carga superficial se fija manualmente y es independiente de la polarización o la posición. El valor de la carga superficial (σ) establecido en el simulador MC está relacionado con el potencial en la superficie (V_S) por la ecuación

$$\sigma = -\sqrt{2eN_D|V_S|\kappa_{SC}}. \quad (2.10)$$

Se han realizado simulaciones para diferentes valores del potencial en la superficie, desde 0.0 V (sin carga superficial) hasta el valor correspondiente a la mitad del gap del semiconductor, -0.7 V para el GaAs y -1.7 V para el GaN. Para caracterizar la capacidad asociada a los efectos de borde del diodo bidimensional, se calcula el parámetro β a partir del ajuste lineal de la representación de $Q(V) - Q_{Id}(V)$ frente a $V - V_B$. Se realizan simulaciones para diferentes polarizaciones en inversa hasta -5 V, habiéndose comprobado que para dicha polarización la zona de vaciamiento no alcanza la capa n^{++} , excepto en el caso de la figura 2.4(a).

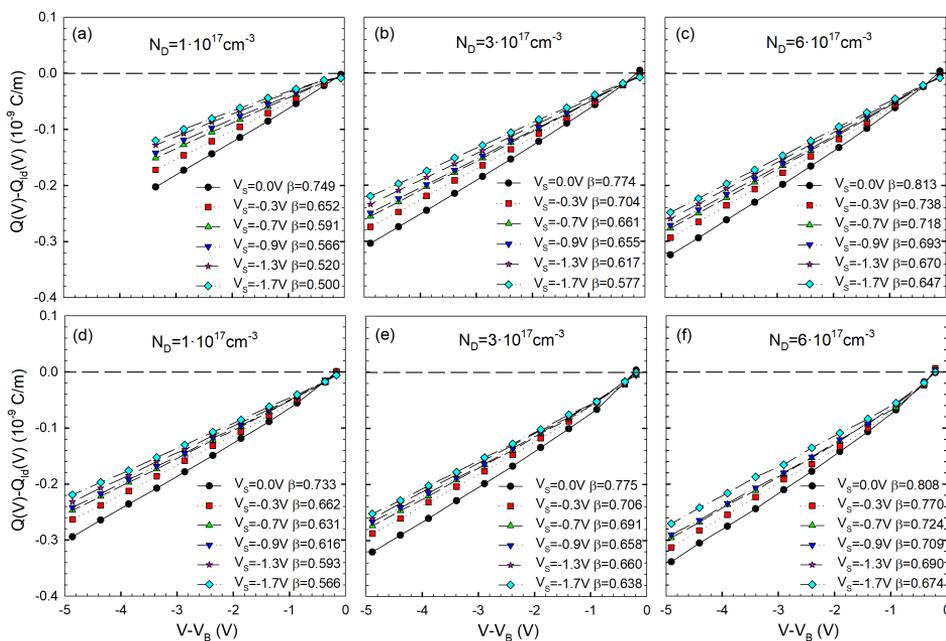


Figura 2.4: Contribución de la carga de efectos de borde $Q_{EE}(V)$ debida a la geometría 2D del diodo Schottky de GaN para (a), (b) y (c) el Diodo A y (d), (e) y (f) el Diodo B con diferentes dopajes utilizando el modelo CCM.

En la figura 2.4 se representa la carga asociada a efectos de borde $Q_{EE}(V)$ para los diodos de GaN en función del voltaje $V - V_B$, de cuya pendiente se obtiene β a través de la ecuación 2.9. Se observa que en dichas representaciones hay un comportamiento

lineal para polarizaciones suficientemente lejos de la condición de banda plana. Para un mismo dopaje se observa que cuando la carga de superficie es nula el valor de β es similar en los Diodos A y B, pero en presencia de cargas superficiales hay diferencias, debido posiblemente a algún parámetro geométrico de los diodos, hecho que se estudiará más adelante. Además, para el mismo diodo pero distinto dopaje, se observa también que β es diferente. En el Diodo A con un dopaje $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ [ver figura 2.4(a)] únicamente se representa $Q_{EE}(V)$ hasta aproximadamente $V - V_B \approx -3.5 \text{ V}$.

Este hecho se aclara con la figura 2.5, donde se representa la contribución de efectos de borde para GaAs por ser más evidente el efecto. Por un lado, $Q_{EE}(V)$, como se puede observar, deja de ser tan lineal a partir de -3.5 V [figura 2.5(a)]. Para el cálculo de β se tienen en cuenta los valores de la carga hasta este voltaje, ya que a pesar de que el vaciamiento todavía no ha alcanzado la capa n^{++} , esta influye en la no linealidad de $Q_{EE}(V)$ con respecto a $V - V_B$.

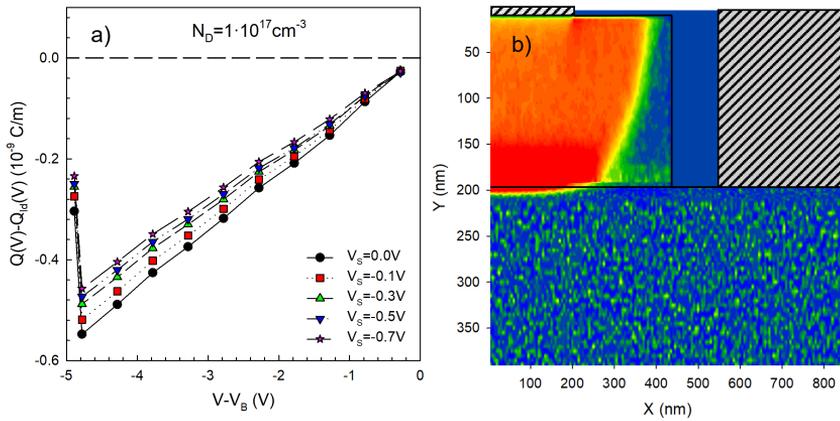


Figura 2.5: Representación para el Diodo A de GaAs con un dopaje $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ de (a) la carga de efectos de borde $Q_{EE}(V)$ debida a la geometría 2D del diodo utilizando el modelo CCM y (b) la contribución local a la capacidad total calculada entre banda plana y una polarización $V - V_B = -5.2 \text{ V}$.

La contribución local a la capacidad total por unidad de longitud se determina mediante la variación de la carga relativa a los electrones calculada entre banda plana y una polarización en inversa, dividido por la diferencia de voltajes. En todos los mapas bidimensionales mostrados en este capítulo, que representan esta contribución, el color rojo indica la región donde la carga de los electrones cambia más con la polarización. En la figura 2.5(b) representamos la contribución local a la capacidad total (cuando no hay carga superficial $V_S = 0.0 \text{ V}$), calculada entre banda plana y una

polarización $V - V_B = -5.2\text{V}$. En esta segunda figura queda demostrado que para estas polarizaciones, en este diodo y con este valor de dopaje, la zona de vaciamiento alcanza la capa n^{++} y por lo tanto no deben tenerse en cuenta a la hora de calcular el parámetro de efectos de borde β .

De acuerdo con los estudios previos llevados a cabo en SBDs de GaAs [34], se podría considerar que el parámetro β , como función del potencial en la superficie, es independiente de las propiedades del semiconductor. Sin embargo, al realizar simulaciones en SBDs de GaN, se ha observado que la expresión para $\beta(V_S)$ recogida en [34]

$$\beta(V_S) = 0.720 + 0.216V_S + 0.105V_S^2, \quad (2.11)$$

no es válida, ya que la zona de vaciamiento originada por la carga de superficie depende no sólo de la constante dieléctrica del material κ_{SC} , sino también del dopaje de la *epilayer* N_D .

Por ello los valores de β para ambos SBDs con diferentes valores de V_S y N_D se han representado en función de la anchura de la zona de vaciamiento impuesta por el potencial en la superficie W_S (ya que permite tener en cuenta la influencia de la constante dieléctrica del material en el tamaño del vaciamiento), que viene dada por

$$W_S = \sqrt{2\kappa_{SC}|V_S|/eN_D}. \quad (2.12)$$

En la figura 2.6 se ha representado β para el Diodo B, tanto para GaAs como para GaN, y diferentes dopajes en función de W_S .

Cabe destacar que β toma valores similares para los distintos dopajes en GaN y GaAs en el rango de W_S mayor que 60 nm. Por el contrario, para valores bajos de carga superficial, β aumenta con el dopaje de la *epilayer*, como se puede observar por ejemplo en el caso de $\sigma = 0$. Esto ocurre debido al acoplamiento del campo eléctrico entre el contacto Schottky y el semiconductor a través del dieléctrico, añadiendo así una contribución extrínseca a la capacidad de efectos de borde que se suma a la contribución intrínseca asociada al acoplamiento a través del semiconductor, véase la figura 2.7.

En la figura 2.6 se observa que esta contribución extrínseca, que depende principalmente de la permitividad del dieléctrico y del espesor del contacto Schottky, se potencia cuando aumenta N_D y, por el contrario, se apantalla cuando se utiliza un valor alto de la carga superficial σ . Se ha comprobado que se trata de un efecto del contacto Schottky, mediante simulaciones con distintos valores del espesor del contacto [W_{Sch} en la figura 2.1(b)]. Se simulan dos estructuras, una con un valor de W_{Sch} grande, y otra con valor cero, comprobándose que al tener un contacto Schottky con cierto espesor se genera una capacidad desde el contacto hasta el semiconductor a través del dieléctrico (véase la figura 2.7).

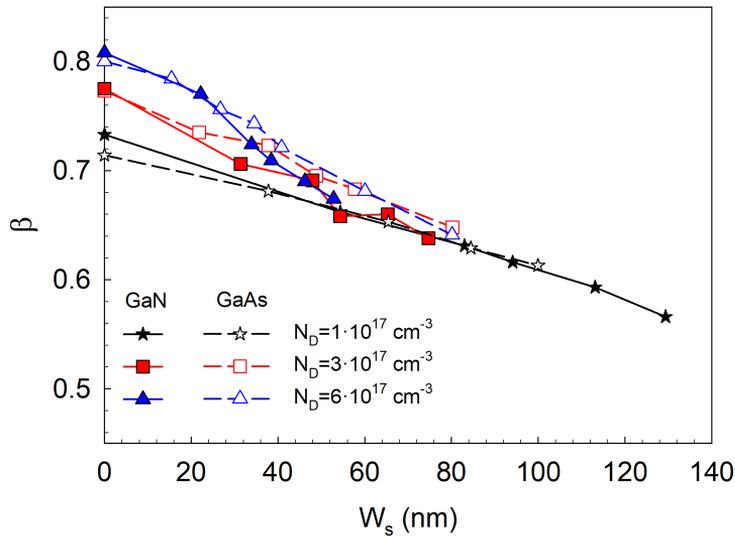


Figura 2.6: Dependencia de β con W_s , haciendo uso del CCM con diferentes valores de V_S para GaAs (líneas discontinuas y símbolos sin relleno) y GaN (líneas continuas y símbolos con relleno).

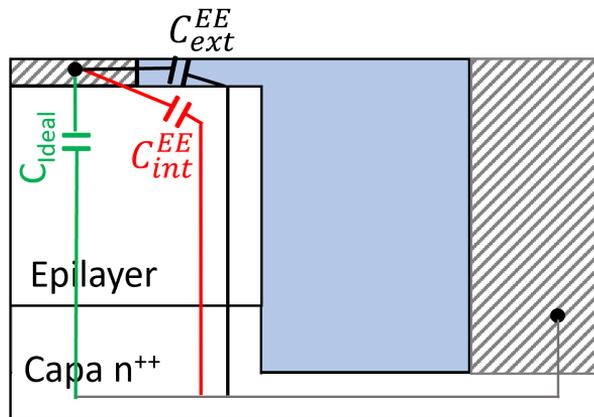


Figura 2.7: Esquema de las contribuciones a la capacidad.

Como se ha mencionado anteriormente, es importante tener en cuenta el voltaje a aplicar en el contacto óhmico en las simulaciones (V_{MC}), por lo tanto una vez hemos calculado β para distintos diodos, materiales y dopajes, y al obtener resultados distintos a los recogidos en el trabajo previo [34], se va a comprobar que el posible error cometido en el cálculo de V_{MC} no es significativo para la determinación de β . En

la figura 2.8 hemos representado el error correspondiente a β para el Diodo B de GaN y los tres dopajes estudiados en el caso de que el voltaje de difusión varíe en ± 0.01 V. A pesar del error cometido, las conclusiones obtenidas anteriormente se mantienen, por lo que tal error no es significativo.

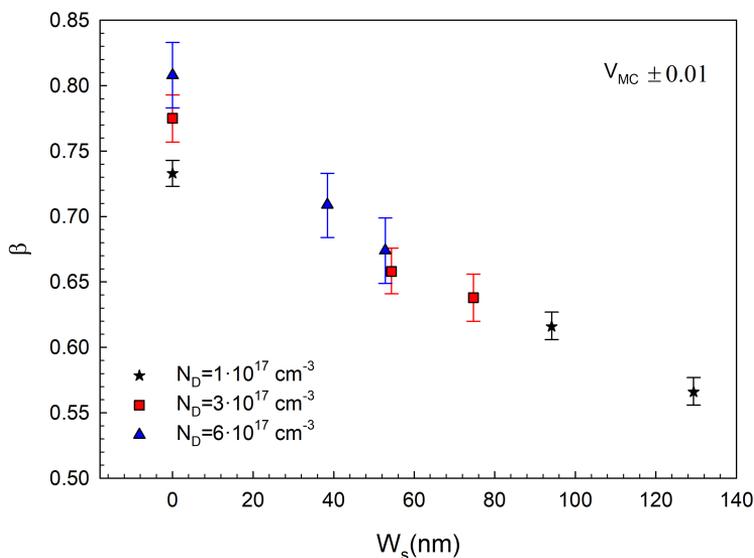


Figura 2.8: β con su correspondiente error en función de W_s , haciendo uso del CCM para GaN.

Como ya hemos comentado (figura 2.4), los parámetros geométricos son importantes en la capacidad debida a los efectos de borde. En el Diodo A de GaN hemos realizado simulaciones cambiando el valor de la extensión lateral de la *epilayer* (L_{EP} , ver figura 2.1). El valor inicial del parámetro L_{EP} es 230 nm y se han realizado simulaciones para valores de 0 nm, 60 nm, 115 nm, 150 nm y 200 nm. Es también interesante ver qué ocurre cuando no se tiene carga superficial ($\sigma = 0$) y para distintos valores de ésta. Se han realizado simulaciones para los dopajes de 3×10^{17} y $6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, pero únicamente se van a presentar los resultados del primero de ellos, ya que las conclusiones que se extraen son las mismas.

En la figura 2.9, donde hemos representado β para distintos valores de L_{EP} , se observa que, cuando no se tiene carga superficial (círculos rojos), si el valor de L_{EP} es suficientemente alto se obtiene un valor de β constante. Además, se representa el valor de β en función de L_{EP} para el caso en que $V_S = -0.7$ V (círculos negros). Como cabe esperar, los efectos de borde disminuyen al disminuir el parámetro geométrico L_{EP} , llegando a alcanzar en algún caso valores negativos de β . En estos casos, la zona de vaciamiento debida a las cargas superficiales de la pared vertical de la *epilayer* reduce

la contribución a la capacidad de una zona estrecha bajo el contacto Schottky. En estas condiciones, la zona de vaciamiento es ligeramente menor que la zona rectangular asociada con un condensador plano-paralelo ideal, dando lugar a un valor negativo de β . Esto significa que los efectos de borde pueden ser tecnológicamente suprimidos, o incluso invertidos ($\beta < 0$), fabricando un dispositivo en el que la *epilayer* esté alineada con el contacto, $L_{EP} = 0$.

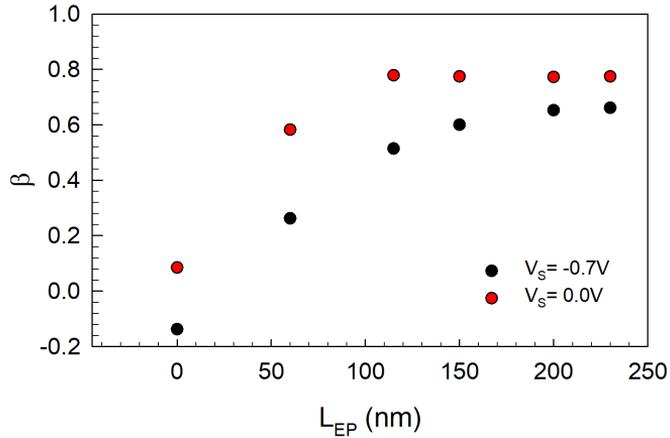


Figura 2.9: β para el Diodo A y un dopaje de $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ con una carga superficial de $V_S = -0.7 \text{V}$ (círculos negros) y sin carga superficial (círculos rojos) en función de L_{EP} .

La contribución local a la capacidad total calculada entre banda plana y una polarización en inversa para una carga superficial correspondiente a $V_S = -0.7 \text{V}$ y distintos valores de L_{EP} , se ha representado en la figura 2.10. En esta figura se observa que para los diodos con valores de L_{EP} pequeños la zona de vaciamiento se extiende lateralmente hacia abajo (comportamiento encontrado únicamente en el CCM, no en el SCCM), proporcionando resultados sin justificación física coherente. Observando este comportamiento se explica por qué, en la figura 2.9, β disminuye hasta tomar valores negativos cuando la extensión lateral de la *epilayer* es muy pequeña, ya que el vaciamiento por debajo del ánodo inducido por la carga de superficie hace que la capacidad que se obtiene sea menor que la ideal.

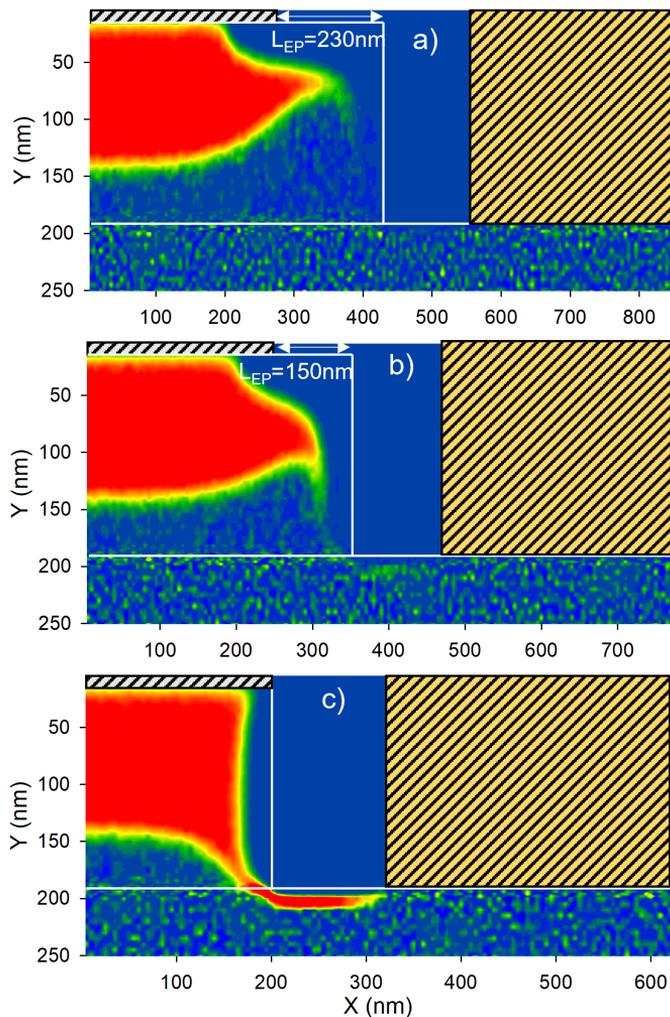


Figura 2.10: Mapas de la contribución local a la capacidad total calculada entre banda plana y un punto de polarización $V - V_B = -5.1 \text{ V}$, para el Diodo A de GaN con $N_D = 3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Los resultados se han obtenido con el modelo CCM y carga superficial correspondiente a $V_S = -0.7 \text{ V}$ para (a) $L_{EP} = 230 \text{ nm}$, (b) $L_{EP} = 150 \text{ nm}$ y (c) $L_{EP} = 0 \text{ nm}$.

2.3.2. Modelo de carga autoconsistente (SCCM)

En esta subsección se van a presentar resultados similares a los recogidos en la subsección 2.3.1 pero calculados con el SCCM, incluyendo la comparativa de ambos modelos de carga superficial. En primer lugar debemos mencionar que, tal y como se ha explicado en el capítulo 1, el SCCM actualiza el valor de σ localmente de acuerdo al número de portadores presentes cerca de la interfaz del semiconductor. Los valores locales de σ son consistentes con la distribución de electrones para cada condición de polarización y adaptados a cada geometría y estructura. La validez de este modelo ha sido contrastada con resultados experimentales en dispositivos donde la carga superficial juega un papel muy importante [97, 98, 99]. Sin embargo, a pesar de que este modelo proporciona resultados más realistas que el CCM (como veremos en esta sección), requiere de un incremento considerable de tiempo de simulación debido al proceso de actualización de σ . Como para el Diodo A se ha comprobado que con el dopaje de $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y para polarizaciones en inversa no demasiado grandes la capa de vaciamiento alcanza la capa n^{++} en el caso de GaAs y está muy próxima para el GaN, en este apartado se van a presentar simulaciones sólo para el Diodo B con los tres dopajes mencionados previamente.

En primer lugar, para poner de manifiesto la notoria desviación de la característica $C-V$ ideal en SBDs reales de GaN y GaAs, la figura 2.11 muestra la comparación entre los valores ideales de $1/C^2$ frente a $V - V_B$ (con la dependencia lineal de la ecuación 2.8) y los valores obtenidos a partir de las simulaciones MC para ambos materiales y un dopaje de $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Tal y como era de esperar, debido a su baja permitividad, la capacidad es menor en el SBD de GaN, y debido a la presencia de los efectos de borde, la capacidad obtenida con las simulaciones MC es mayor que la ideal y $1/C^2$ no tiene dependencia lineal con V .

En el caso del SCCM, la carga en función de la polarización puede tener en cuenta dos contribuciones: la dada por el cambio en el número de electrones y una segunda proporcionada por la variación de la carga de superficie. Esta segunda no está presente en el caso del CCM, ya que para dicho modelo la carga superficial es fija. Vamos a realizar el cálculo de dos parámetros de efectos de borde, β_e y β_T . El parámetro β_e corresponde a la variación de la carga de electrones libres (calculado de la misma forma en la que se obtiene β para el modelo CCM) y β_T corresponde a la variación de la carga total, añadiendo el cambio asociado a las cargas de superficie (ya que al variar el valor de σ , la carga total en el dispositivo cambia, dando lugar a un efecto capacitivo añadido).

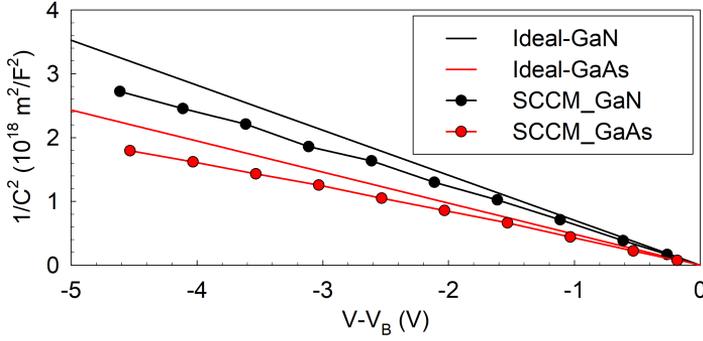


Figura 2.11: Los valores de $1/C^2$ ideales y los obtenidos con simulaciones MC frente a $V - V_B$ en los SBDs de GaN y GaAs con un dopaje de 10^{17} cm^{-3} .

Como hemos mencionado en el apartado anterior, β se calcula de la pendiente de la representación del exceso de carga por unidad de longitud en función de $V - V_B$, véase la figura 2.12. Tanto para el CCM como para el SCCM se obtiene una dependencia lineal siempre y cuando la polarización en inversa esté suficientemente lejos de la condición de banda plana. Nótese que para el CCM el aumento de la zona de vaciamiento inducido por las cargas de superficie (figura 2.14) disminuye el valor (absoluto) de $Q_{EE}(V)$ y por tanto el de β . En el caso del SCCM, hemos representado la carga asociada únicamente a los electrones y la carga total, a partir de las cuales se obtienen los parámetros de efectos de borde β_e y β_T respectivamente. Para entender mejor el significado de estos dos parámetros, se han representado en función del dopaje (ver figura 2.13). Debido a la falta de precisión en el cálculo de la variación de las cargas de superficie, se han realizado varias simulaciones con el objetivo de extraer un valor medio y se han representado además las barras de error. Para el cálculo de las barras de error, se ha aplicado la ecuación de la desviación estándar o típica dada por

$$\delta = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2}{N}}. \quad (2.13)$$

Los parámetros β_T y β_e de la figura 2.13 se pueden asociar a la capacidad esperada cuando operamos a baja (*low frequency*, LF) y a alta frecuencia (*high frequency*, HF), respectivamente. Ello es debido a que la variación de la carga superficial es el resultado de la captura o la liberación de electrones en estados de trampas profundas, un proceso muy lento en comparación con el movimiento de los electrones. Por lo tanto, esta

contribución a la capacidad se espera que esté presente solamente cuando se aplique una señal AC de LF, siendo así β_T el parámetro que caracteriza los efectos de borde a LF.

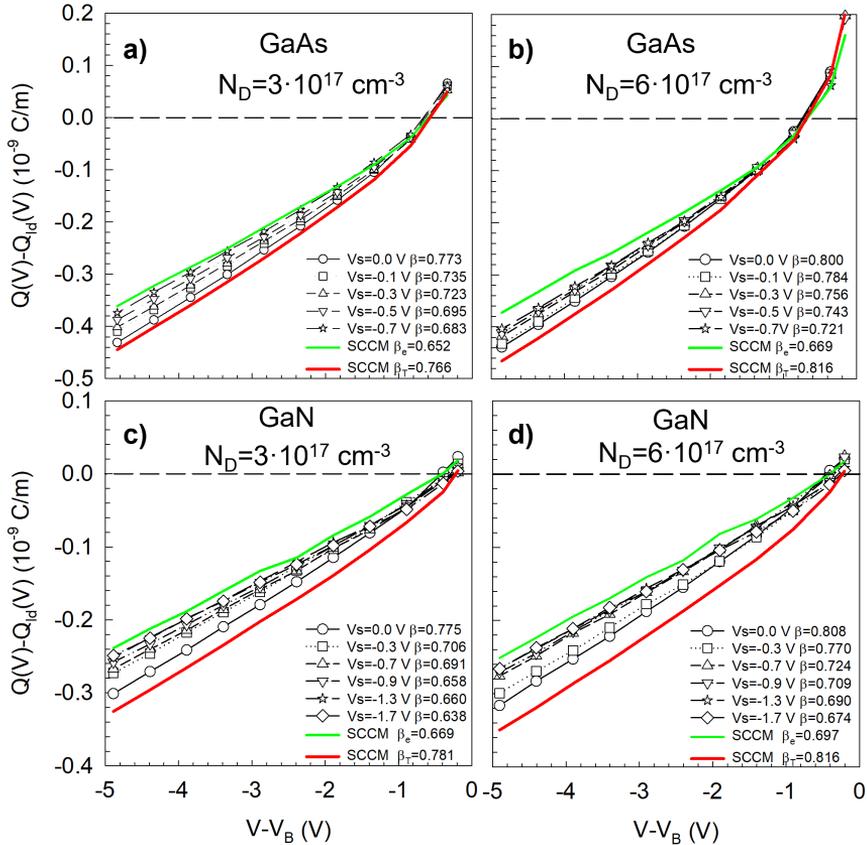


Figura 2.12: Contribución de la carga asociada a efectos de borde del SBD con la geometría B para (a) y (b) GaAs, (c) y (d) GaN, y dopajes (a) y (c) $N_D = 3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (b) y (d) $N_D = 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Los resultados del CCM con diferentes valores de V_S se representan con símbolos, mientras que los obtenidos con el SCCM se representan con líneas continuas (en verde cuando consideramos únicamente la carga de los electrones y en rojo cuando se añade la contribución de las cargas de superficie σ).

Por otro lado, para HF (por encima de MHz), las cargas de superficie no son capaces de seguir la excitación, siendo la única contribución esperable la de los electrones libres, y por tanto la capacidad estará caracterizada por β_e . Ya que los SBDs se emplean (típicamente) en aplicaciones de HF, el valor a tener en cuenta será β_e .

En la figura 2.13(a) se muestran los valores de β_e y β_T , siendo ligeramente superiores para GaN que para GaAs debido a su baja permitividad, lo que implica una mayor influencia del acoplamiento a través del dieléctrico y por lo tanto una mayor contribución extrínseca (mencionada en la sección 2.3.1) a la capacidad de efectos de borde. En la figura 2.13(b) se observa que, a pesar de que los valores de los parámetros de efectos de borde son similares en ambos semiconductores, la capacidad de efectos de borde (C_{EE}), que viene dada por $C_{EE} = \beta \kappa_{SC}$, es mucho menor para GaN debido a que la permitividad del semiconductor es más pequeña.

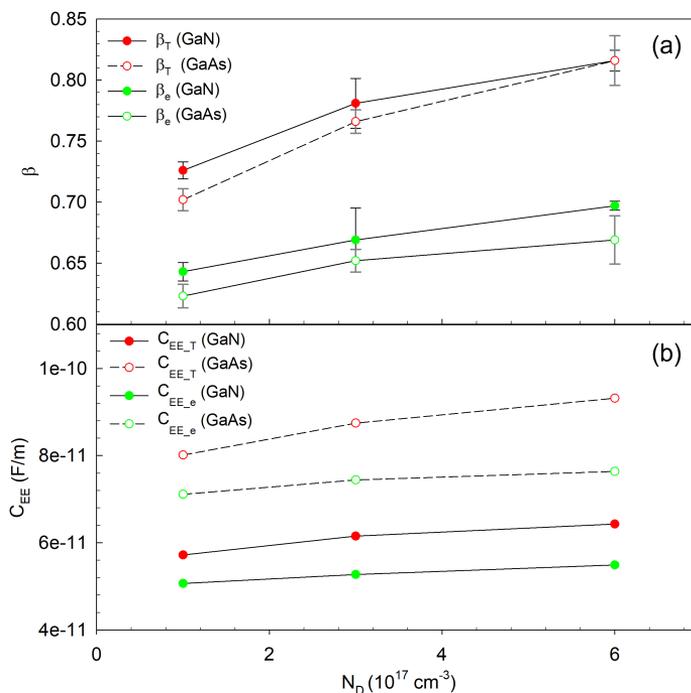


Figura 2.13: (a) Parámetros de efectos de borde β_T y β_e y (b) capacidad de efectos de borde C_{EE} para GaN y GaAs en función del dopaje N_D calculados con el SCCM.

Cabe destacar que los valores de β_T obtenidos con el SCCM son muy similares a los calculados con el CCM cuando $\sigma = 0$. Esto puede explicarse por el hecho de que en el SCCM σ desaparece en la interfaz en contacto con la zona de vaciamiento. Centrándonos en β_e , la cual ignora las variaciones de σ , su valor es bastante menor que el de β_T , encontrándose en el rango de los obtenidos con el CCM para valores de W_S de alrededor de 70-90 nm. Sin embargo, esto no es coherente con los valores bajos de W_S obtenidos con el SCCM, que se encuentran aproximadamente entre 12 nm (para GaN con $N_D = 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) y 45 nm (para GaAs con $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$),

lo que pone de manifiesto que la distribución del campo eléctrico y/o la forma de la zona de vaciamiento deben ser distintas en ambos casos. Para entender este efecto, la figura 2.14 muestra los mapas con la contribución local de electrones de las diferentes regiones de un SBD de GaN ($N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) a la capacidad total. Se muestra la posición del dieléctrico, la *epilayer* y los contactos Schottky y óhmico. La zona del rectángulo negro con línea discontinua representa la zona de vaciamiento ideal, por tanto los efectos de borde se visualizan como la parte de la zona vaciada fuera de esa área. Las figuras de la columna de la derecha muestran una ampliación de la zona de los efectos de borde entre el contacto Schottky y el dieléctrico, representada por los rectángulos amarillos con línea continua en las figuras de la izquierda.

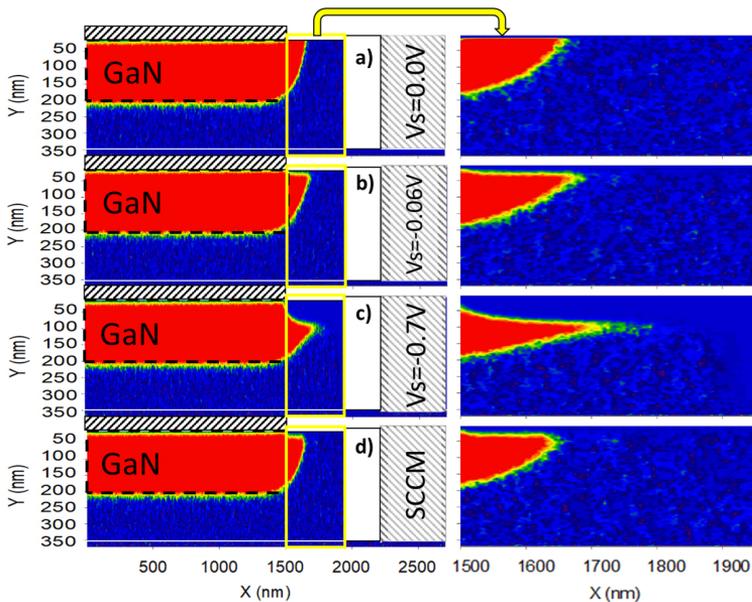


Figura 2.14: Mapas de la contribución local a la capacidad total (calculada entre banda plana y un punto de polarización $V - V_B = -4.1 \text{ V}$) para un SBD de GaN con $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Los resultados son para el CCM con (a) $V_S = 0 \text{ V}$, (b) $V_S = -0.06 \text{ V}$, (c) $V_S = -0.7 \text{ V}$, y (d) para el SCCM.

La diferencia en la estimación de los efectos de borde asociados a la concentración de electrones para el CCM y el SCCM es evidente al comparar la figura 2.14(c), obtenida con el CCM usando un valor de $V_S = -0.7 \text{ V}$ (que corresponde a un valor de W_S de aproximadamente 80 nm) y la figura 2.14(d), obtenida con el SCCM (equivalente a un W_S de alrededor de 20 nm), encontrándose en estos dos casos particulares un valor similar de β_e . La forma de la zona de vaciamiento a la derecha del contacto Schottky es completamente distinta: en el CCM la extensión lateral es mayor que en el SCCM

pero con la misma superficie (la cual corresponde a la carga de los electrones y por tanto a β_e en el SCCM), sin embargo σ debe ser mayor que el valor resultante del SCCM. Esta forma distinta de la zona de vaciamiento se debe al hecho de que en el SCCM σ es cero en la interfaz que está en contacto con la zona vaciada, haciendo que la extensión lateral sea menor y siendo por tanto similar al caso en el que usamos el CCM con $\sigma = 0$, ver figura 2.14(a). Incluso en el caso en el que usamos el CCM con un valor de σ que proporciona un vaciamiento de 20 nm [el correspondiente a $V_S = -0.06$ V, ver figura 2.14(b)], el mismo que se obtiene con el SCCM, existen diferencias entre ambos modelos. La extensión lateral de la zona de vaciamiento es mayor para el CCM debido a la presencia de un valor bajo de cargas superficiales, por lo que β_e es ligeramente mayor. Nótese que β_T se calcula como la suma de β_e (asociada a las cargas representadas en la figura 2.14(d), las cuales tienen la misma forma que en (a), pero sin la contribución de la región cerca de la interfaz de la zona superior) más la variación de los valores de σ . Esta segunda contribución coincide con la contribución al CCM de la región superior (esta zona no fue vaciada con $\sigma = 0$), donde se aprecia un vaciamiento con el SCCM en condiciones de banda plana.

Los resultados previos son válidos siempre que la extensión lateral de la *epilayer* L_{EP} sea suficientemente grande para que la interfaz vertical no influya en la zona de vaciamiento generada alrededor del borde del contacto Schottky. Para analizar la influencia de este parámetro, al igual que se hizo con el CCM en la sección anterior, se han realizado simulaciones para distintos valores de L_{EP} . En la figura 2.15 se ha representado la contribución local a la capacidad para SBDs de GaAs y GaN con $L_{EP} = 460, 230, \text{ y } 50$ nm (manteniendo el valor de L_{diel} constante e igual a 240 nm).

Como se observa, cuando decrece el valor de L_{EP} , el CCM proporciona resultados sin sentido físico, dando lugar a una curvatura hacia abajo de la zona de vaciamiento [ver figuras 2.15(d) y (g)]. Se pone así de manifiesto que deben usarse métodos más exhaustivos como el SCCM para tener en cuenta de manera adecuada los efectos de superficie en dispositivos pequeños. Como cabía esperar, debido a su mayor permitividad, la zona de vaciamiento es mayor para el GaAs, luego el efecto descrito aparece para L_{EP} mayores comparado con GaN. Se ha comprobado que β_e , y por lo tanto C_{EE} , son independientes de la polarización siempre que L_{EP} sea suficientemente grande. Sin embargo, esto deja de ser válido en el momento en el que L_{EP} es pequeño, debido a que la interfaz vertical de la *epilayer* comienza a influir al aumentar el voltaje aplicado, produciendo una disminución de β_e y por lo tanto de C_{EE} . Centrándonos ahora en los resultados obtenidos con el SCCM para distintos valores de L_{EP} , la figura 2.15 muestra que los efectos de borde se reducen cuando la extensión lateral de la *epilayer* disminuye (L_{EP}). Además, cuando se alcanza el límite $L_{EP} = 0$, los efectos de borde se han eliminado completamente [ver figuras 2.15(h) e (i)].

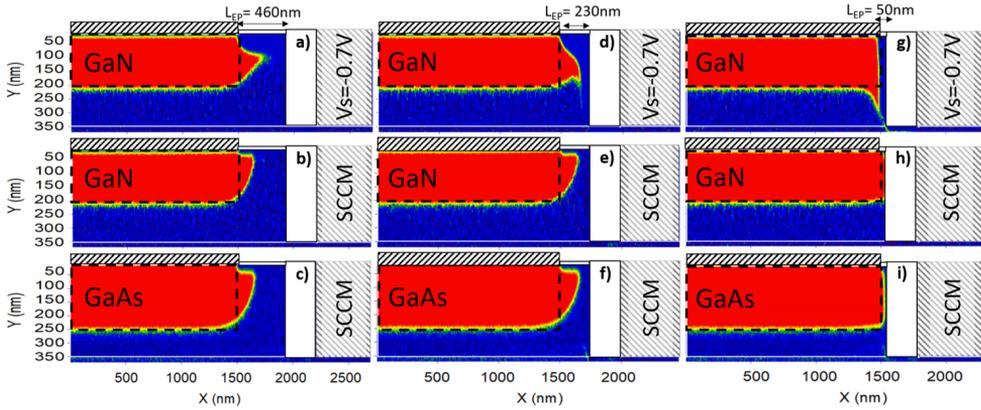


Figura 2.15: Mapa de la contribución local a la capacidad total calculada entre banda plana y un punto de polarización $V - V_B = -4.1 \text{ V}$ para diodos de (a), (b), (d), (e), (g), y (h) GaN y (c), (f), e (i) GaAs con $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y diferentes valores de L_{EP} : (a)-(c) $L_{EP} = 460 \text{ nm}$, (d)-(f) $L_{EP} = 230 \text{ nm}$, y (g)-(i) $L_{EP} = 50 \text{ nm}$; calculados con (a), (d) y (g) el CCM y $V_S = -0.7 \text{ V}$ y (b), (c), (e), (f), (h), e (i) el SCCM.

Los valores de β_e en función de L_{EP} calculados con el SCCM se muestran en la figura 2.16, tanto para el SBD de GaAs como para el de GaN con diferentes valores de N_D .

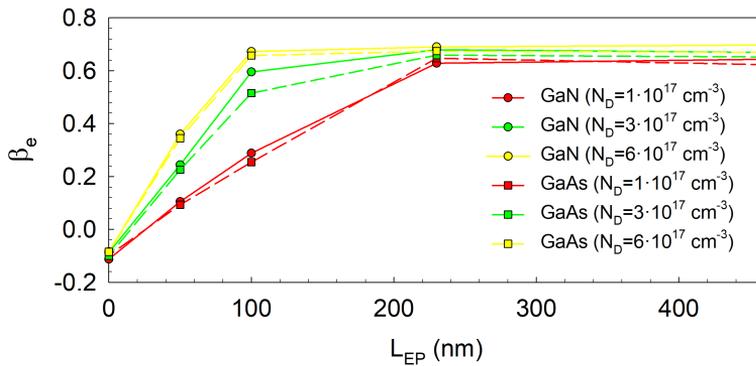


Figura 2.16: β_e calculada considerando el SCCM para SBDs de GaAs y GaN con diferente N_D en función de L_{EP} .

β_e toma un valor en torno a 0.6 en ambos diodos (GaAs y GaN) siendo prácticamente independiente de N_D para valores grandes de L_{EP} y para valores pequeños, el parámetro β_e disminuye drásticamente. Este límite geométrico depende del dopaje, para $N_D = 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ está por debajo de 100 nm y alrededor de 200 nm para

$N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. En el caso en el que $L_{EP} = 0$, la zona de vaciamiento se reduce, llegando a ser menor que la zona de vaciamiento ideal. En estas condiciones, se obtiene un valor negativo de β_e , lo que indica que los efectos de borde serían suprimidos o invertidos. El valor de β_e es habitualmente menor para GaAs que para GaN.

2.4. Efecto del dieléctrico

En esta sección vamos a presentar y analizar los resultados de las simulaciones realizadas para estudiar la influencia de la pasivación en los efectos de borde. La pasivación en dispositivos de GaN es necesaria para mejorar su funcionamiento, ya que previene la oxidación y el deterioro electrónico y/o químico [100, 101]. Sin embargo, la presencia de un dieléctrico puede aumentar considerablemente la capacidad de efectos de borde. Por otro lado, la brusca caída de potencial en los bordes del contacto Schottky puede suavizarse con la presencia de la pasivación dieléctrica, lo cual puede ser beneficioso para el aumento del voltaje de ruptura de los diodos. Para el estudio de este efecto hemos utilizado una estructura más realista, teniendo en cuenta el rango de los parámetros geométricos tecnológicamente factible, proporcionado por el IEMN.

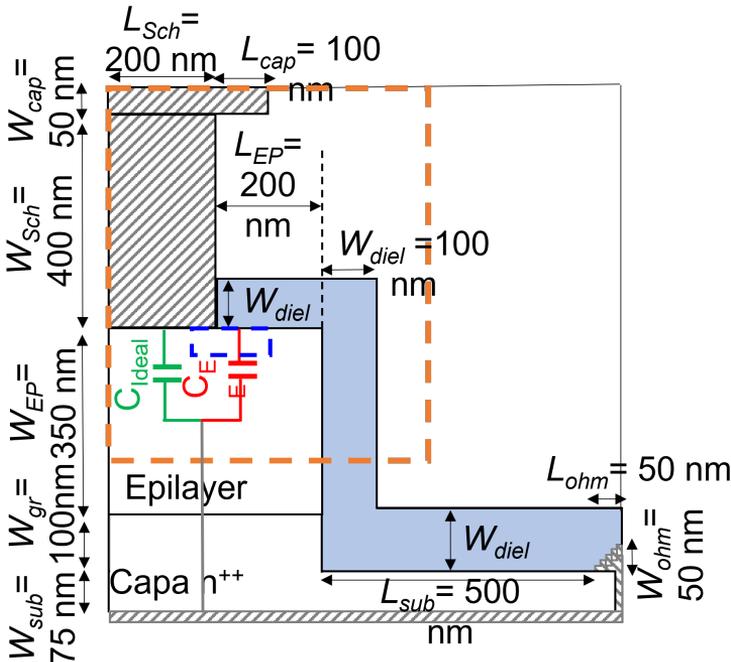


Figura 2.17: Esquema 2-D del SBD simulado incluyendo los valores de los parámetros que caracterizan la geometría.

En esta sección se presentarán sólo simulaciones realizadas con el SCCM, que es el modelo que proporciona resultados más realistas, como ya hemos demostrado. En la figura 2.17 se presenta la geometría del diodo con el que se van a realizar las simulaciones para estudiar la influencia del dieléctrico, que denominaremos Diodo C. De esta geometría es importante destacar varios aspectos que han sido optimizados con dos objetivos principales: simular una estructura lo más parecida posible a los SBDs fabricados y reducir el tiempo de simulación. En primer lugar el contacto óhmico se ha colocado tanto a la derecha como debajo de la capa n^{++} , con el objetivo de evitar caídas de potencial debidas a la disminución del espesor de dicha capa (W_{sub}). Además el contacto óhmico tiene una forma escalonada, con el objetivo de conseguir la geometría más realista posible. Al igual que se ha reducido la capa n^{++} , se ha reducido el espesor de la *epilayer* (W_{EP}), comprobando que los resultados obtenidos no se ven afectados para voltajes bajos. Al reducir W_{EP} es importante asegurarse de que la zona de vaciamiento no alcanza la capa n^{++} . Se ha estudiado también como afectaría que $L_{cap} = 0$, obteniéndose que no influye en los efectos de borde, por lo que se decide mantener un valor de $L_{cap} = 100$ nm, realista desde el punto de vista tecnológico. Se comprueba también que aumentando el tamaño del contacto óhmico, L_{ohm} y W_{ohm} , el parámetro de efectos de borde tampoco varía. Y por último se han realizado simulaciones para distintas longitudes del contacto Schottky (L_{Sch}).

Mediante el modelo CCM sin carga superficial se estudia la influencia del parámetro L_{sch} en la capacidad. Como se muestra en la figura 2.18, la capacidad total del diodo cambia con L_{Sch} , ya que, según la expresión de la capacidad total (ver ecuación 2.8), la capacidad ideal (C_{Id}) es proporcional al tamaño del contacto Schottky. Sin embargo, al ampliar en la representación de la contribución local a la capacidad total la zona a la derecha del contacto Schottky (contribución debida a los efectos de borde), vemos que apenas cambia con L_{Sch} , obteniéndose prácticamente el mismo valor de β . Esto indica que, como cabe esperar, los efectos de borde se ven afectados principalmente por las características del diodo al lado derecho del contacto Schottky.

Una vez decidida la geometría, la estructura de capas será igual a la presentada en los apartados anteriores, en este caso la *epilayer* dopada con un valor de $N_D = 3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y la capa n^{++} con $N_S = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (véase figura 2.17). Nos vamos a centrar en la optimización de los parámetros geométricos asociados a la pasivación, como son la extensión lateral del dieléctrico (L_{diel}), el espesor del dieléctrico (W_{diel}) o la constante dieléctrica (κ_{pas}). Los materiales dieléctricos considerados en las simulaciones son aire, óxido de silicio (SiO_2), nitruro de silicio (Si_3N_4) y un dieléctrico de alta permitividad [v. g. Óxido de Circonio (ZrO_2)], cuyas permitividades son 1.0, 3.9, 7.5 y 25.0, respectivamente. La carga superficial σ simulada en la interfaz

semiconductor-dieléctrico se va a determinar con el SCCM, como hemos mencionado al principio de esta sección.

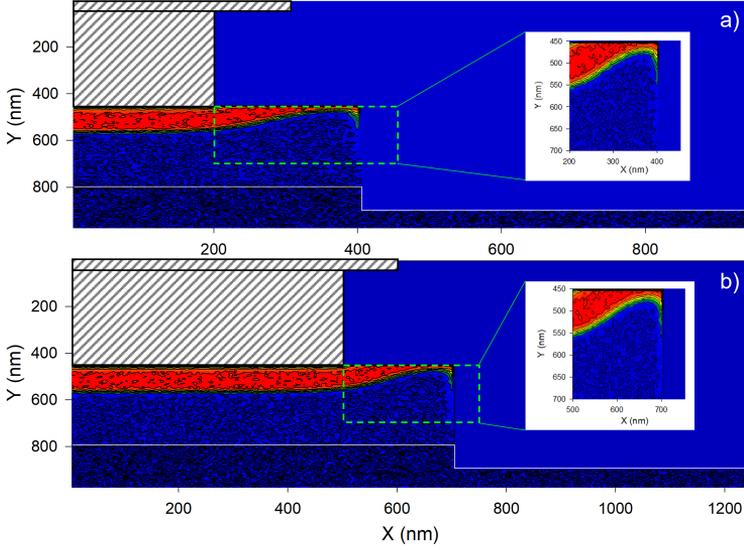


Figura 2.18: Comparación de los mapas de la contribución local a la capacidad total calculada entre banda plana y $V - V_B = -4.1$ V con el modelo CCM y $\sigma = 0$, para (a) $L_{Sch} = 200$ nm y (b) $L_{Sch} = 500$ nm.

Para las simulaciones vamos a considerar aire (κ_{aire}) por encima de la zona de dieléctrico (en azul en la figura 2.17) hasta los límites del dominio de simulación. Como en los casos anteriores, para identificar el origen físico de la capacidad, en la figura 2.19 representamos la contribución local a la capacidad total (por unidad de longitud). En dicha figura se presentan no solo los mapas de la contribución local a la capacidad, sino también los mapas del potencial para los cuatro materiales dieléctricos que vamos a estudiar. Se aprecia una clara influencia de la pasivación en ambos: en la zona de vaciamiento y en el perfil de potencial en la región a la derecha del contacto Schottky, observándose que los efectos de borde son más importantes cuanto mayor es κ_{pas} .

Los valores de la capacidad de efectos de borde a HF ($C_{EE} = \beta_e \kappa_{SC}$) para los casos representados en la figura 2.19 se presentan en la tabla 2.2. Además, estos valores se comparan con la capacidad ideal a polarización cero, $C_{Id}(0)$, para cuyo cálculo se ha considerado un valor típico del voltaje *built-in* del contacto Schottky, $V_B = 0.8$ V, obteniéndose que su valor es igual a 307 pF/m. A la vista de estos resultados, se puede concluir que la capacidad asociada a los efectos de borde es significativa incluso en el caso de menor constante dieléctrica (aire).

| | Aire | SiO ₂ | Si ₃ N ₄ | High-k |
|--------------------|------|------------------|--------------------------------|--------|
| C_{EE} (pF/m) | 48.2 | 65.1 | 87.4 | 123.0 |
| $C_{EE}/C_{Id}(0)$ | 0.16 | 0.21 | 0.28 | 0.40 |

Tabla 2.2: Valores de la capacidad de efectos de borde a alta frecuencia y contribución relativa con respecto a la capacidad ideal para la polarización cero en el Diodo C, considerando diferentes dieléctricos de pasivación.

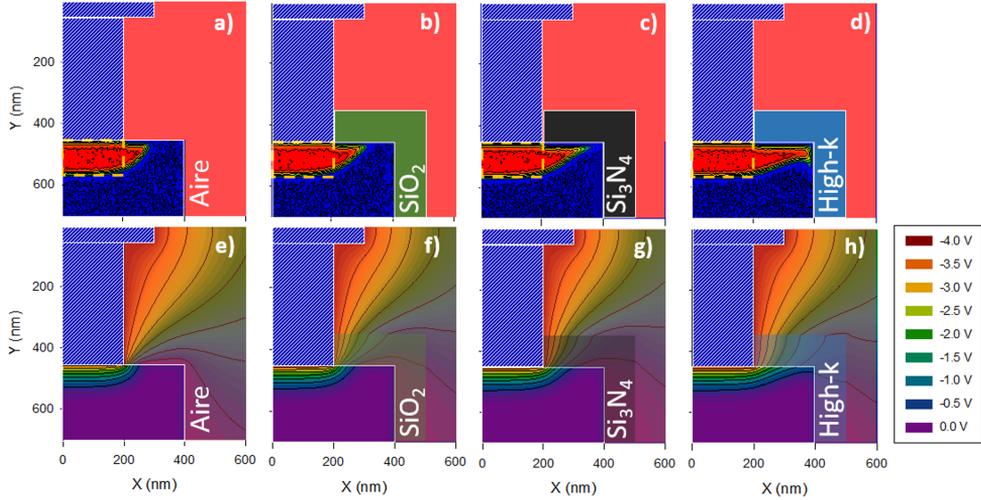


Figura 2.19: (a)-(d) Mapas de la contribución local a la capacidad total para el Diodo C, y (e)-(h) perfiles de potencial (para $V - V_B = -4.1$ V) para distintos materiales dieléctricos utilizados en la pasivación: (a), (e) aire (sin pasivar), (b), (f) SiO₂, (c), (g) Si₃N₄, y (d), (h) un dieléctrico de alta permitividad. Se representa únicamente la zona de mayor interés, delimitada por el rectángulo de líneas discontinuas naranjas de la figura 2.17. El rectángulo discontinuo en (a)-(d) indica la zona de vaciamiento ideal bajo el contacto Schottky, de forma que los efectos de borde se pueden considerar asociados principalmente a la parte de la zona de vaciamiento que se encuentra fuera de esta área.

Los mapas de potencial de la figura 2.19(e)-(h) corresponden a un voltaje aplicado igual a $V - V_B = -4.1$ V, y muestran los cambios que experimenta el potencial entre distintos valores de κ_{pas} tanto en la zona del material dieléctrico como en la extensión lateral de la *epilayer* a la derecha del contacto Schottky. El cambio en la pendiente de las líneas equipotenciales en la interfaz aire-dieléctrico se puede observar claramente en la figura 2.19 (f)-(h). Un valor mayor de κ_{pas} permite una mayor penetración del campo eléctrico en la extensión lateral de la *epilayer*, provocando un alargamiento del vaciamiento desde la esquina derecha del contacto Schottky, ver figura 2.19(a)-(d).

Este alargamiento de la zona de vaciamiento provoca que el parámetro de efectos de borde β_e sea mayor.

Hemos realizado un estudio de los cuatro parámetros geométricos relacionados con la presencia del material dieléctrico para la pasivación: tipo de dieléctrico (constante dieléctrica, κ_{pas}), espesor del dieléctrico (W_{diel}), separación entre el contacto óhmico y la mesa (L_{sub}) y extensión lateral de la *epilayer* (L_{EP}). En primer lugar se ha analizado la influencia de W_{diel} .

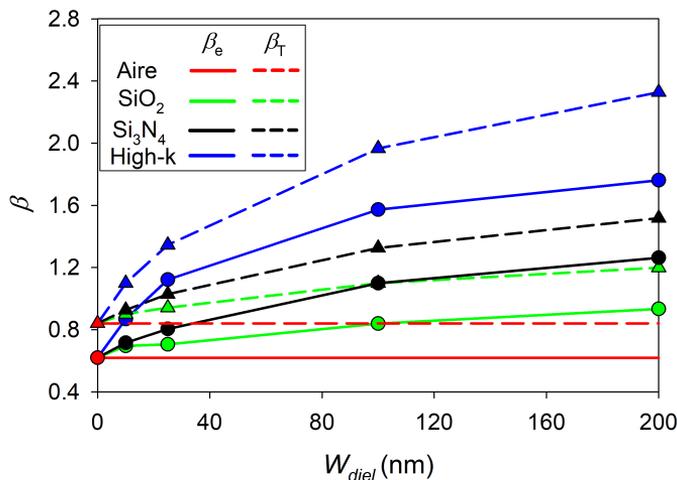


Figura 2.20: β_e y β_T en función de W_{diel} para un valor de la distancia entre el contacto óhmico y la mesa igual a 200 nm y distintos materiales dieléctricos.

En la figura 2.20, β_e y β_T se representan en función de W_{diel} (para valores entre 0 y 200 nm) para los cuatro dieléctricos considerados en el estudio. Por supuesto, en el caso del aire el valor de ambos es independiente de W_{diel} , y coincide con los valores correspondientes al resto de dieléctricos cuando $W_{diel} = 0$ nm. Como cabía esperar, los efectos de borde aumentan con W_{diel} y κ_{pas} . Una capa de pasivación más gruesa, o un incremento de la constante dieléctrica, ayudan a la penetración del campo eléctrico en el semiconductor, dando lugar a un aumento del vaciamiento lateral y un incremento de la capacidad de efectos de borde. La dependencia tanto de β_e como de β_T con W_{diel} es muy similar, siendo los valores de β_T mayores en todos los casos debido a la contribución adicional asociada a las cargas de superficie. Esto se debe a que las variaciones de voltaje no alcanzan completamente el semiconductor, ya que se ven apantalladas por el cambio en la carga superficial, dando lugar a que la capacidad de efectos de borde se pueda dividir en dos contribuciones, una asociada a los electrones libres y otra a la carga de superficie. A continuación se analizó el parámetro L_{sub} ,

encontrándose que los efectos de borde son independientes del valor de este parámetro geométrico.

El siguiente parámetro bajo estudio es la extensión lateral de la *epilayer* L_{EP} . En la figura 2.21 se muestran los parámetros β_e y β_T en función de L_{EP} para los distintos dieléctricos. Como se ha recogido en los resultados del apartado 2.3, donde la estructura era menos realista, β_e se mantiene casi constante para valores suficientemente grandes de L_{EP} . Sin embargo, a partir de un determinado valor de L_{EP} (suficientemente pequeño), β_e comienza a disminuir significativamente. Para β_T se obtiene un comportamiento similar. Este comportamiento se explica por la influencia de la pared vertical de la *epilayer* (donde existen cargas superficiales), que toma mayor importancia al reducir la extensión lateral de la *epilayer*. Además, es interesante destacar que el valor de L_{EP} para el cual β comienza a disminuir depende del dieléctrico. Cuanto mayor es κ_{pas} , mayor es el valor de L_{EP} a partir del cual β disminuye, siendo aproximadamente 100 nm para el caso del aire y alrededor de 400 nm para el dieléctrico de alta permitividad. Cuando se alcanza el límite en el que $L_{EP} = 0$ nm, la capacidad de efectos de borde se reduce a un determinado valor, que de nuevo depende del dieléctrico, siendo β_e y β_T todavía distintos por la presencia de cargas superficiales en la pared vertical de la *epilayer*. Para los dieléctricos con menor κ_{pas} , β_e toma valores negativos, lo que indica que los efectos de borde se han eliminado por completo, o bien se han invertido.

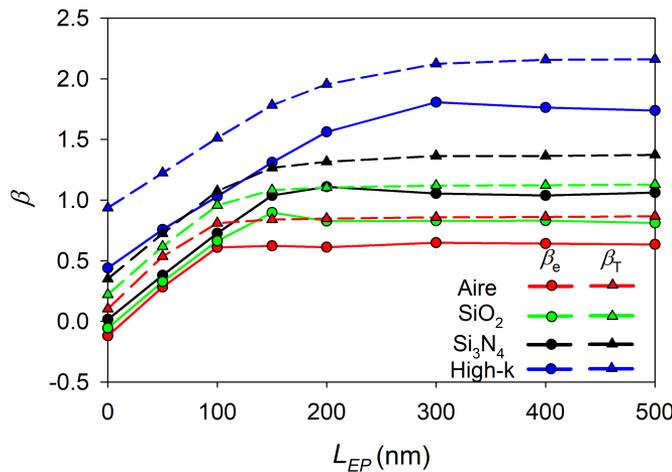


Figura 2.21: β_e y β_T en función de L_{EP} para un valor de W_{diel} igual a 100 nm para los distintos materiales dieléctricos.

Para mostrar con más detalle la influencia del dieléctrico en las cargas responsables de la capacidad de efectos de borde, en la figura 2.22 se muestran los perfiles de la

concentración de electrones y el potencial en la dirección horizontal a una distancia de 25 nm bajo el contacto Schottky, y la carga de superficie situada en la interfaz dieléctrico-semiconductor desde el contacto Schottky hasta la esquina de la *epilayer*.

La concentración de electrones y el potencial se representan a una profundidad más allá del vaciamiento producido por la carga de superficie, en el caso de que la haya. Como se había observado anteriormente en la figura 2.19, cuanto mayor es κ_{pas} , mayor es la penetración del campo eléctrico en la zona de extensión lateral de la *epilayer*, y, por lo tanto, mayor es la zona vaciada.

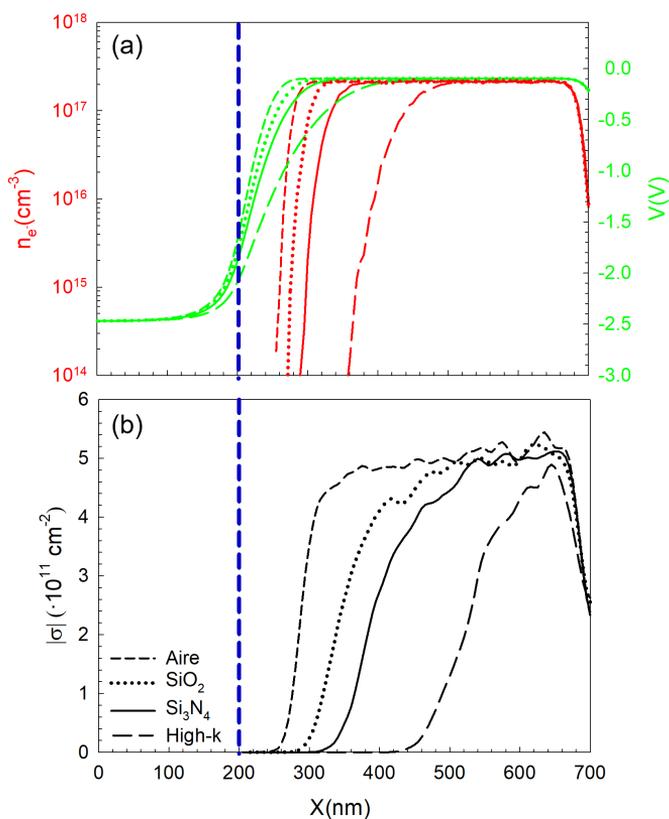


Figura 2.22: Perfiles horizontales de (a) potencial y concentración de portadores 25 nm por debajo del contacto Schottky y (b) carga superficial en la interfaz dieléctrico-semiconductor, representados desde el contacto Schottky hasta la esquina de la *epilayer*, con $V - V_B = -4.1$ V, para aire, SiO_2 , Si_3N_4 , y un dieléctrico de alta permitividad. La extensión lateral de la *epilayer*, L_{EP} , es igual a 500 nm. La línea azul discontinua indica el límite donde acaba el contacto Schottky.

Los estados superficiales, cuya ocupación se calcula de manera autoconsistente con la concentración de portadores en las proximidades de la interfaz con el dieléctrico, están vacíos en la región cercana a la zona de vaciamiento y son ocupados a medida que nos alejamos del contacto Schottky. Para un L_{EP} suficientemente grande, como en el caso de la figura, la carga de superficie alcanza valores similares para los cuatro dieléctricos cerca de la esquina de la *epilayer*. Sin embargo, según nos acercamos al contacto Schottky, comienza a ser distinta debido a las diferencias en el vaciamiento lateral. El dieléctrico de alta permitividad muestra una zona mayor en la cual $\sigma = 0$ [ver figura 2.22(b)] al compararlo con un dieléctrico con menor κ_{pas} . Todos estos resultados permiten concluir que cuanto mayor es κ_{pas} , mayores son los efectos de borde debido al vaciamiento de la *epilayer* (caracterizado por β_e) y la liberación de electrones de los estados superficiales (contribución adicional incluida en β_T). Para el caso considerado en esta figura, la relación entre la capacidad de efectos de borde a HF y la capacidad ideal a polarización cero es 0.16 para el aire, 0.21 para el SiO_2 , 0.27 para el Si_3N_4 y 0.45 para el dieléctrico de alta permitividad.

A pesar de que el uso de un dieléctrico con mayor κ_{pas} tiene un efecto negativo al aumentar la capacidad de efectos de borde, puede ser beneficioso para mejorar el voltaje de ruptura (*breakdown voltage*) del diodo Schottky. Si observamos los mapas del campo eléctrico mostrados en la figura 2.23, donde se representa la región de mayor interés (a la derecha del contacto Schottky), en el caso en el que κ_{pas} es mayor, se obtiene una mayor extensión de la zona de alto campo, una variación más suave de su valor y lo más destacable, un valor máximo del campo en el borde del contacto menor. Este hecho se asocia con que la extensión lateral de la zona de vaciamiento sea mayor, como ya se ha observado en las figuras 2.19 y 2.22.

Los valores de la capacidad que hemos presentado son los correspondientes al análisis bidimensional de la mitad de un Schottky rectangular, en el que hemos asumido que es homogéneo en la dimensión no simulada. Además, se dan por unidad de longitud, normalizados por el ancho del diodo. Sin embargo, cuando se reduce el tamaño del contacto Schottky para aumentar la frecuencia de operación, se utilizan otras geometrías, como por ejemplo la circular. En este caso el valor absoluto de la capacidad del diodo viene dada por $C_T(V) = C_{Id}^T(V) + C_{EE}^T = A \kappa_{SC}/W(V) + L_{Contour} \beta \kappa_{SC}$ [34], donde el valor ideal de la capacidad $C_{Id}^T(V)$ es proporcional al área del ánodo A y la contribución absoluta de efectos de borde C_{EE}^T a la longitud del contorno $L_{Contour}$. En la expresión anterior hemos despreciado una corrección de segundo orden asociada a los efectos de borde, independiente de la geometría, que tiene en cuenta la forma no rectangular del ánodo [33, 34]. En el caso de un diodo de ánodo circular $A = \pi r^2$ y $L_{Contour} = 2\pi r$, donde r es el radio, que equivaldría al valor de L_{Sch} en nuestras

simulaciones, teniendo en cuenta que el dominio de la figura 2.17 corresponde a la mitad del diodo.

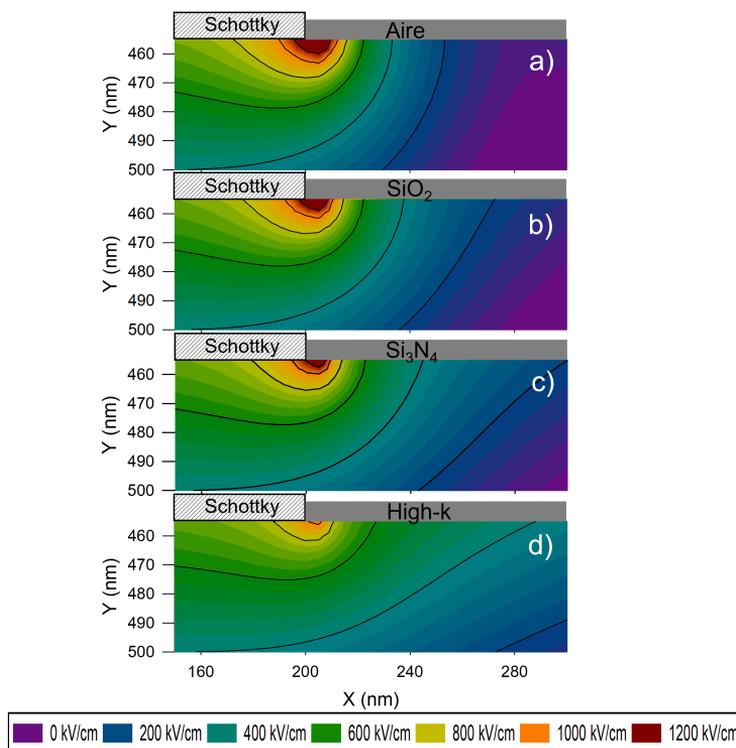


Figura 2.23: Mapas del módulo del campo eléctrico (en kV/cm) para el Diodo C y diferentes materiales dieléctricos de pasivación: (a) aire, (b) SiO₂, (c) Si₃N₄ y (d) un dieléctrico de alta permitividad (para $V_{VB} = -4.1$ V). Únicamente se muestra la región del semiconductor cercana al borde del contacto Schottky, representada por el rectángulo azul discontinuo de la figura 2.17.

En la figura 2.24 se ha representado la capacidad ideal para polarización cero $C_{Id}^T(0)$ y C_{EE}^T en función del radio del ánodo considerando el diodo de la figura 2.17 como circular. En la Tabla 2.3 se presenta la relación $C_{EE}^T/C_{Id}^T(0)$, donde se ha usado β_e para el cálculo de C_{EE}^T , de modo que se tiene en cuenta solo la contribución de HF para la capacidad de efectos de borde. La contribución de efectos de borde es bastante significativa al compararla con la ideal, especialmente en diodos pequeños pasivados con materiales de alta permitividad, donde C_{EE}^T puede llegar a ser la contribución dominante, ya que la relación $C_{EE}^T/C_{Id}^T(0)$ aumenta linealmente con $1/r$. Por ejemplo, para $r = 100$ nm, los efectos de borde aumentan en un 63 % la capacidad en un diodo

sin pasivar, que aumentaría en un 114% pasivando el diodo con una capa de Si_3N_4 con un espesor de 100 nm.

| r (nm) | Aire | SiO_2 | Si_3N_4 | High-k |
|----------|------|----------------|-------------------------|--------|
| 100 | 0.63 | 0.85 | 1.14 | 1.60 |
| 200 | 0.31 | 0.42 | 0.57 | 0.80 |
| 400 | 0.16 | 0.21 | 0.28 | 0.40 |

Tabla 2.3: Valores de la relación entre la capacidad de efectos de borde a alta frecuencia y la capacidad ideal en 0 V para diferentes radios del ánodo y varios dieléctricos considerando como circular el diodo de la figura 2.17.

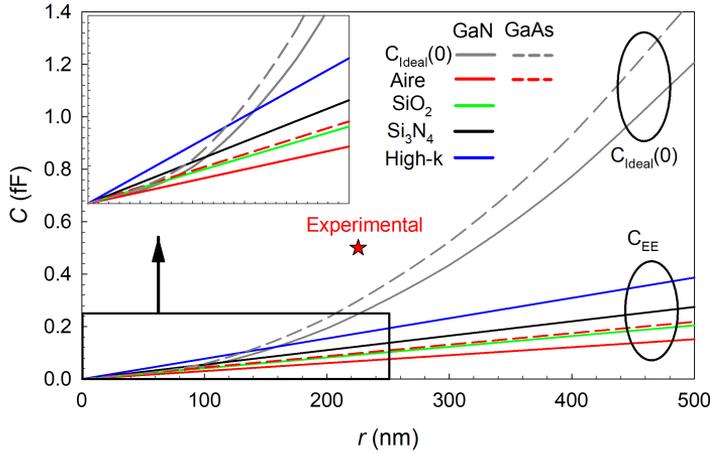


Figura 2.24: $C_{Id}^T(0)$ y C_{EE}^T para los cuatro dieléctricos en función del radio r del ánodo considerando que el diodo de la figura 2.17 es circular. Las líneas discontinuas representan la capacidad para el GaAs y el punto es el valor experimental para la capacidad total del diodo presentado en [102]. El *inset* representa el rango de r desde 0 hasta 250 nm.

Para comparar las capacidades de efectos de borde en SBDs de GaN con la tecnología estándar (GaAs), los valores obtenidos de las simulaciones MC del mismo diodo de GaAs sin pasivar se muestran también en la figura 2.24. Los resultados de las simulaciones son coherentes con las medidas de la capacidad para un SBD de GaAs de $0.16 \mu\text{m}^2$, utilizados para la fabricación de un mezclador de frecuencia de 1.2 THz [102]. Nótese que las capacidades ideal y de efectos de borde se deben sumar para poder comparar con el resultado experimental. Nuestras simulaciones dan lugar

a valores ligeramente menores que el experimental, 0.5 fF, ya que en nuestro caso no consideramos capacidades parásitas.

En la figura 2.24 también se observa que, al comparar las tecnologías de GaN y GaAs, la menor constante dieléctrica del GaN ayuda a reducir el valor de la capacidad total, lo que permite usar diodos más grandes que para el caso del GaAs para las mismas frecuencias de operación. Por otro lado, el peso de los efectos de borde en la capacidad total es el mismo en ambas tecnologías, ya que las capacidades son proporcionales a la constante dieléctrica del semiconductor.

Tras realizar el análisis de la influencia en la capacidad de efectos de borde del material dieléctrico usado para la pasivación de un SBD de GaN, se puede concluir que los efectos de borde pueden reducirse mediante el uso de una pasivación con baja permitividad (κ_{pas}), así como reduciendo el espesor de la capa de pasivación (W_{diel}). Además, reduciendo L_{EP} también disminuyen los efectos de borde, llegándose incluso a suprimir para el caso límite $L_{EP} = 0$. Por lo tanto, la permitividad, el espesor del material dieléctrico de pasivación y la extensión lateral de la *epilayer* son parámetros geométricos clave para reducir los efectos de borde.

Las simulaciones realizadas equivalen a la mitad de un diodo circular, lo que nos permite reducir el tiempo de cálculo. En los SBDs generalmente se fabrica un puente en el contacto Schottky para disminuir la capacidad. Por lo que para finalizar este capítulo, se va a presentar una figura del vaciamiento obtenido en la simulación de un diodo completo (incluyendo parte del puente) usando el CCM sin carga superficial. En este caso se simula un diodo con $W_{EP} = 600$ nm y $L_{Sch} = 1500$ nm. En la figura 2.25(a) se muestra un mapa de la contribución local a la capacidad total que nos permite identificar de manera cualitativa como sería la zona de vaciamiento en el diodo. En el lado izquierdo se ha simulado parte del puente del ánodo (*air-bridge*) y en el lado derecho se sitúa el contacto óhmico, representado en color marrón y con forma escalonada. Nótese que existe una ligera asimetría en la zona de vaciamiento asociada a los efectos de borde en el lado del *air-bridge*. En la figura 2.25(b) se representa el potencial y se observa que el contacto del puente modifica ligeramente el perfil de potencial con respecto al lado derecho. Además, en la figura 2.25(c) se muestra una imagen SEM de un diodo real fabricado en el IEMN.

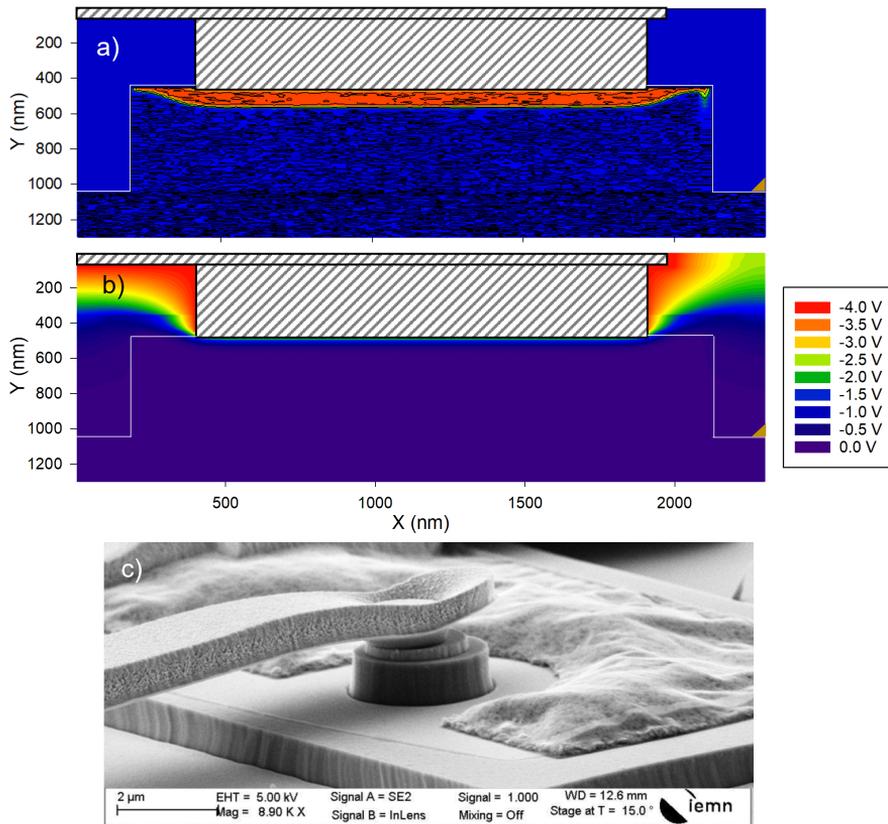


Figura 2.25: (a) Mapa de la contribución local a la capacidad total para el diodo completo, calculada entre banda plana y $V - V_B = -4.1$ V. (b) Mapa del potencial para un voltaje aplicado $V - V_B = -4.1$ V. (c) Imagen SEM del diodo real en que se basa la estructura simulada.

Capítulo 3

Diodos de barrera Schottky: Comportamiento en DC

Los defectos en el nitruro de galio (GaN) producen una alta corriente de pérdidas en inversa (*reverse leakage current*), que degrada el voltaje de ruptura y la fiabilidad del dispositivo, lo que hasta ahora ha impedido el uso generalizado de diodos de barrera Schottky (SBDs) de GaN para distintas aplicaciones [103]. Modelar el transporte de portadores a través del contacto rectificador metal-semiconductor es fundamental para identificar el origen de los problemas tecnológicos y encontrar soluciones para la explotación de los SBDs de GaN en aplicaciones electrónicas modernas. Además, el conocimiento de esos contactos es necesario para entender otros dispositivos semiconductores, como transistores de efecto campo, donde actúan como terminal de puerta, controlando el funcionamiento eléctrico de los dispositivos. En este capítulo, el objetivo principal es analizar la corriente de pérdidas en inversa mediante la comparación de la corriente obtenida de la caracterización de dispositivos y la estimada con un modelo teórico analítico, y posteriormente estudiar el voltaje de ruptura.

En primer lugar se van a presentar los dispositivos en oblea disponibles para estudiar los defectos de este material y los problemas tecnológicos. Los SBDs de GaN se han fabricado en el IEMN (Lille, Francia) y se proporcionan los detalles de las capas de semiconductor así como sus dimensiones. En la siguiente sección se explican los montajes experimentales utilizados para la obtención de las medidas de este capítulo. A continuación, se muestran los resultados en DC para 300 K, describiendo cómo calcular los parámetros característicos del diodo Schottky y analizando qué obleas son las que presentan un mejor funcionamiento para posteriormente medirlas a diferentes temperaturas. Además se analizan las curvas capacidad-voltaje (C - V) y

se explica cómo calcular el dopaje de la *epilayer* a partir de ellas. La extracción de todos estos parámetros es necesaria para usarlos en el modelo teórico presentado en la sección 3.4. Este modelo se desarrolla para calcular la corriente ideal en inversa, cuya comparación con las medidas experimentales permite determinar el exceso de corriente de pérdidas y sus posibles causas. A continuación, seleccionando los diodos que presentan un mejor funcionamiento a temperatura ambiente, se realiza un estudio de su comportamiento en función de la temperatura, presentado en la sección 3.5. El aumento de la corriente en inversa afecta directamente al voltaje de ruptura. Como ya se ha mencionado en este trabajo, el voltaje de ruptura es un parámetro fundamental en los SBDs, por lo que se realizan simulaciones que nos permiten estudiar qué ocurre en condiciones de fuerte polarización en inversa. Por ello, en la sección 3.6 se estudian de manera cualitativa tanto el voltaje de ruptura como el efecto de la ionización por impacto, mecanismo fundamental a tener en cuenta en el análisis de la ruptura (*breakdown*). Para ello se realizan simulaciones Monte Carlo (MC) donde es importante que la forma de la barrera y la inyección de electrones por túnel sea autoconsistente con la concentración de portadores en el semiconductor. En primer lugar se simulan estructuras 1-D para estudiar la inyección túnel y los efectos de los procesos de ionización por impacto, y a continuación se consideran los efectos bidimensionales mediante simulaciones de estructuras 2-D. En el caso de las simulaciones 2-D se comienza realizando simulaciones donde los procesos de ionización por impacto no se consideran, hecho que nos permite comprobar que la inyección túnel se simula correctamente y el efecto del uso de dieléctricos en la corriente. Por último, se consideran las ionizaciones por impacto, estimando el voltaje de ruptura para diodos con diferente espesor de la *epilayer*, dopaje o material dieléctrico.

3.1. Dispositivos

Los dispositivos que vamos a caracterizar son SBDs de GaN crecidos sobre distintos sustratos. Inicialmente, en el que denominaremos Run 1, se ha dispuesto de varias obleas cuyo crecimiento de capas ha sido realizado por diferentes proveedores (CRHEA¹, EpiGaN, Enkris e IAF²), ver tabla 3.1. En el caso de dispositivos de GaN, los sustratos utilizados habitualmente son silicio (Si), carburo de silicio (SiC), zafiro (Al₂O₃) e incluso GaN [104]. El zafiro proporciona un crecimiento epitaxial de alta calidad, pero tiene el inconveniente de una baja conductividad térmica y de que la diferencia de su constante de red con respecto al GaN es del 13 %, generando un mayor número de dislocaciones. Por otro lado, el Si es mucho más barato. El SiC sin

¹Centre de Recherche sur l'Hétéro-Epitaxie et ses Applications.

²Fraunhofer Institute for Applied Solid State Physics.

embargo es caro, pero tiene una alta conductividad térmica y el desajuste entre las constantes de red es pequeño (3.5%). Existen datos publicados para SBDs verticales de GaN con distintos sustratos y el impacto del sustrato en el funcionamiento de los dispositivos [105].

| Run | Proveedor | Sustrato | Capa n^- | | Capa n^{++} | |
|-----|-----------|-------------------------|--------------------|-----------------------------|--------------------|-----------------------------|
| | | | Espesor (nm) | Dopaje (cm^{-3}) | Espesor (nm) | Dopaje (cm^{-3}) |
| 1 | CRHEA | SiC | 590 | 6.6×10^{16} | 650 | 2×10^{19} |
| | | EpiGaN | Si | 500 | 1×10^{17} | 500 |
| | SiC | | 500 | 1×10^{17} | 500 | 5×10^{18} |
| | Enkris | SiC | 500 | 5×10^{16} | 500 | 1×10^{19} |
| | | SiC | 500 | 1×10^{17} | 500 | 1×10^{19} |
| | | Al_2O_3 | 650 | 5×10^{16} | 3000 | 1×10^{19} |
| IAF | SiC | 500 | 1×10^{17} | 500 | 1×10^{19} | |
| 2 | Enkris | Al_2O_3 | 600 | 5×10^{16} | 750 | 1×10^{19} |

Tabla 3.1: Obleas disponibles (Run 1 y Run 2) de diferentes proveedores y sustratos, cuyos dispositivos han sido fabricados en el IEMN. Se indican los valores de dopaje y espesores de las capas.

En el que denominaremos Run 2, se han fabricado SBDs de GaN sobre zafiro, siendo Enkris el proveedor. Como se ve en la tabla 3.1, la oblea del Run 2 es muy similar a una de las obleas del Run 1, pero ha sido fabricada con un proceso optimizado. Además, se ha reducido en 50 nm el espesor de la *epilayer* y el espesor de la capa altamente dopada ha pasado de $3 \mu\text{m}$ a 750 nm. Esta segunda tanda de dispositivos consta de una *epilayer* (n^-) con un dopaje de $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ y una capa altamente dopada (n^{++}) cuyo dopaje es 10^{19} cm^{-3} , mismos valores que en el Run 1. También es importante destacar que en la oblea de Enkris sobre zafiro del Run 1 se hicieron tres tratamientos distintos de la superficie con HCl, HF y KOH.

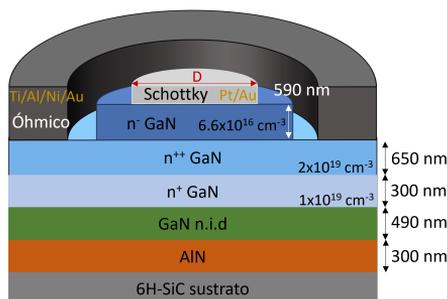


Figura 3.1: Esquema del SBD y la estructura de capas para la oblea crecida por CRHEA con las dimensiones y dopajes.

En el caso de la oblea crecida por CRHEA (en la cual se hará el estudio completo en DC para todo el rango de temperatura), la estructura de capas se muestra en la figura 3.1. El crecimiento de capas de la oblea de CRHEA se ha realizado por deposición de vapor mediante procesos químicos organometálicos (MOCVD, *metal organic chemical vapor deposition*) sobre un sustrato de carburo de Silicio (6H-SiC).

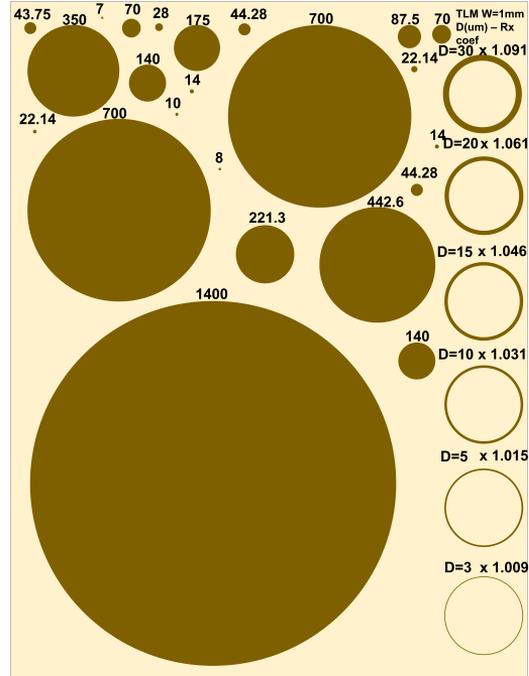


Figura 3.2: Diseño de una retícula de las obleas del Run 1, donde se sitúan los diodos de barrera Schottky circulares sin accesos de RF y distintos tamaños. Los números indican el diámetro de los diodos y a la derecha se dispone de TLMs (*transfer length method*) circulares.

La definición de la mesa se hace mediante grabado seco ICP (*inductively coupled plasma*), utilizando una máscara de SiO₂, depositando 250 nm mediante PECVD (*plasma-enhanced chemical vapor deposition*). Después de realizar el grabado de la mesa, se mantiene la máscara de SiO₂ sobre el contacto Schottky para proteger la superficie de daños y contaminación en las siguientes etapas de fabricación. A continuación se realiza una limpieza BOE (*buffered oxide etch*) para depositar el contacto óhmico (Ti/Al/Ni/Au) sobre la capa n⁺⁺ con una evaporadora. Después se realiza un RTA (*rapid thermal annealing*) a 850°C durante 30 s en un ambiente de N₂. Antes de la deposición del contacto Schottky, se vuelve a realizar un tratamiento BOE para eliminar la capa de SiO₂ y al mismo tiempo eliminar contaminantes y restos de oxidación. Tras este tratamiento la muestra debe introducirse rápidamente en la eva-

poradora para evitar una reoxidación y se depositan los metales Pt/Au sobre la capa n^- para hacer el contacto Schottky. En la oblea de CRHEA hay SBDs con accesos de radiofrecuencia (RF) y SBDs de mayor tamaño y sin accesos RF. Estos últimos van a ser los que caracterizaremos en DC, ya que al ser mayores tendremos menos efectos de borde y por lo tanto serán más ideales, ver figura 3.2.

Tras realizar una optimización del proceso de fabricación, se dispone también de una oblea con dispositivos mejorados (e igual diseño que los anteriores) cuyo proveedor es Enkris y cuyo sustrato es zafiro (Run 2). Una vez presentados los diodos de los que se dispone para realizar la caracterización es importante describir las condiciones de medida, presentando los equipos utilizados.

3.2. Montajes experimentales

En esta sección se van a explicar los montajes experimentales utilizados para la caracterización en DC (tanto curvas corriente-voltaje ($I-V$) como $C-V$) a temperatura ambiente y en todo el rango de temperaturas. En las instalaciones del Grupo de Investigación de Dispositivos Nanoelectrónicos de Alta Frecuencia de la Universidad de Salamanca se dispone de dos mesas de puntas, como se observa en la figura 3.3, la primera es una mesa de puntas Cascade Microtech M150 para la realización de medidas a temperatura ambiente, y la segunda es una mesa de puntas criogénica LakeShore CRX-VF utilizada para las medidas a diferentes temperaturas, desde 8 K hasta 500 K.

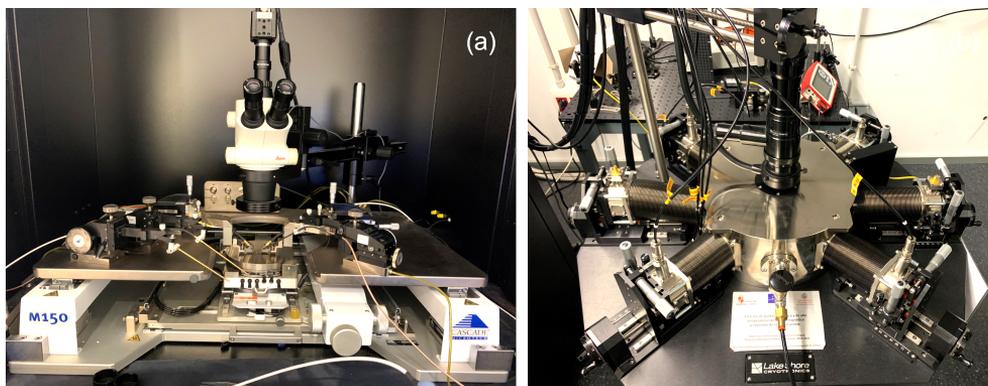


Figura 3.3: Imágenes de las mesas de puntas (a) Cascade Microtech M150 y (b) criogénica LakeShore CRX-VF.

La mesa de puntas de alto rendimiento Cascade M150 permite la realización de medidas eléctricas precisas desde DC hasta alta frecuencia, RF. El sistema permite medir

oleas de hasta 150 mm, que son sujetadas mediante un sistema de vacío. Dispone de un microscopio óptico para facilitar la colocación de las puntas. Los posicionadores permanecen fijos mediante un sistema de vacío y tienen tres ejes de movimiento, lo que permite la ubicación precisa de las puntas sobre los dispositivos. Se dispone de cuatro posicionadores con puntas de DC y dos con puntas de RF, como se puede ver en la figura 3.4.

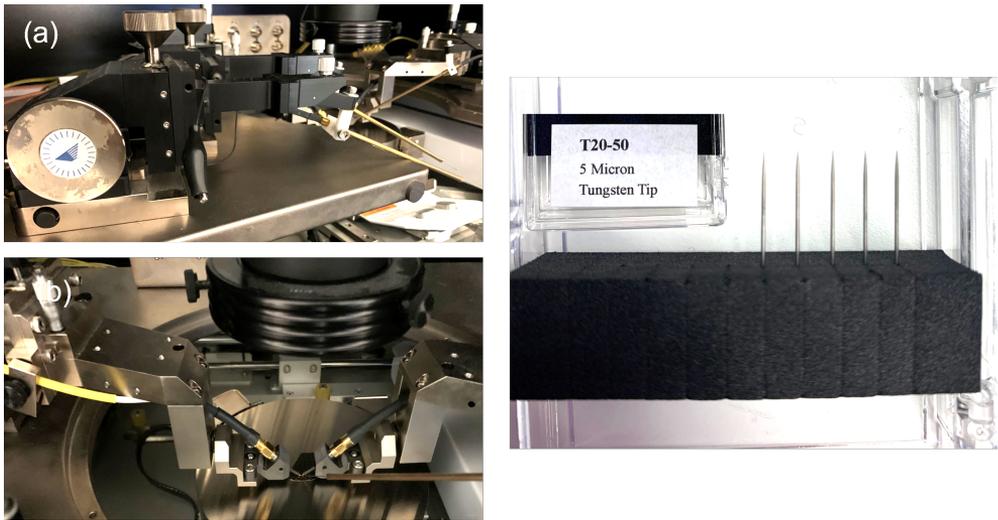


Figura 3.4: Imágenes de (a) los posicionadores de DC, (b) los posicionadores de RF y (c) las puntas utilizadas para las medidas de DC en la mesa Cascade M150.

La mesa LakeShore CRX-VF dispone de seis microposicionadores (4 de DC y 2 de RF), cada uno con un control exacto de la posición de la punta para situarla en los *pads* del dispositivo. A diferencia de la anterior, esta mesa de puntas permite cambiar la temperatura de operación del dispositivo en un amplio rango, desde 8 K hasta 500 K. Además, está equipada con un imán superconductor de campo vertical, que es capaz de generar un campo máximo de 2.5 T para temperaturas menores de 10 K, 2 T para temperaturas entre 10 K y 400 K, y 1 T para temperaturas entre 400 K y 500 K. La mesa dispone del software 8400 series HMS para la realización de medidas Hall. Gracias a las puntas disponibles, pueden llevarse a cabo tanto medidas DC como RF en función de la temperatura. Las puntas de DC utilizadas son de $25\ \mu\text{m}$ de radio (de tungsteno) y su referencia es *ZN50R-CVT-25-W*, ver figura 3.5. La característica principal de estas puntas es su adaptación automática a la dilatación térmica, lo que mejora su rendimiento y permite realizar medidas en un amplio rango de temperatura sin necesidad de levantar las puntas del dispositivo.

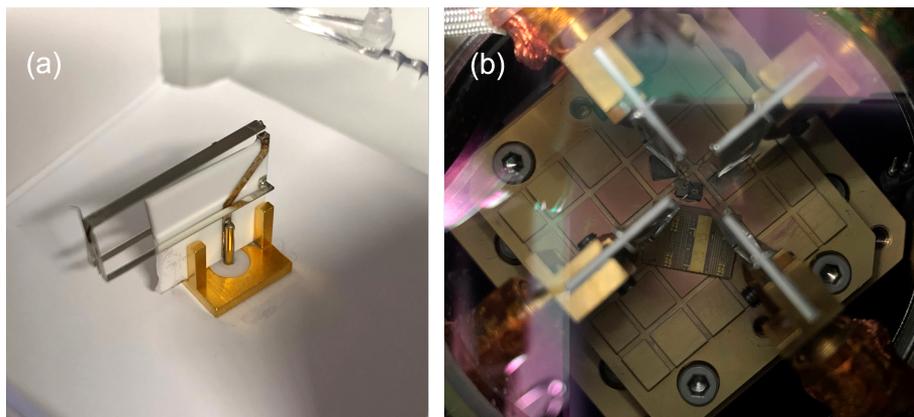


Figura 3.5: Imágenes de (a) las puntas de DC utilizadas en la mesa criogénica LakeShore y (b) la cámara de vacío, donde se observan las cuatros puntas de DC y los fragmentos de oblea.

Uno de los parámetros necesarios en el modelo, que explicaremos más adelante, es el dopaje de la *epilayer* (N_D), el cual se obtiene de la característica $C-V$ del dispositivo. Para la realización de las medidas $C-V$ se ha utilizado un analizador de impedancias Agilent E4980A. Este medidor LCR ofrece una óptima combinación de precisión, velocidad y versatilidad para un amplio rango de medidas de componentes. El rango de frecuencias de operación de este equipo va desde de 20 Hz hasta 2 MHz. A la hora de realizar las medidas, el analizador de impedancias nos permite llevar a cabo una calibración *open-short-load*. Además, el grupo ha desarrollado un programa de LabView con el fin de automatizar las medidas, que controla el analizador de impedancias para modificar tanto la frecuencia como las condiciones de operación de DC. El montaje experimental utilizado para estas medidas $C-V$ a temperatura ambiente se muestra en la figura 3.6. En el caso de las medidas $C-V$ en todo el rango de temperatura, el montaje experimental es el mismo que el de la figura 3.6, pero en lugar de la mesa de puntas Cascade M150 se utiliza la mesa criogénica LakeShore.

El segundo montaje experimental que hemos utilizado es para medir las características $I-V$, tanto en directa como en inversa. En este caso se ha utilizado un analizador de semiconductores, un Keithley 4200-SCS (ver figura 3.7), el cual dispone de: (i) tres unidades de fuente/medida (SMUs), dos de ellas para potencias medias (210 V, 105 mA y 2 W) y la otra para potencias altas (210 V, 1.05 A y 22 W), conectadas con cables negros en la imagen; (ii) una unidad de medidas pulsadas o PMU con dos canales, conectada con cables blancos en la imagen; y (iii) una unidad de $C-V$ para caracterización de impedancias, conectada con cables rojos en la imagen. Se dispone también de dos amplificadores remotos RPM-4225, que permiten conmutar entre los

distintos tipos de medidas (DC, pulsada o $C-V$). La ventaja de incluir las RPMs en el montaje experimental es no sólo ampliar el nivel de baja corriente y reducir la capacidad asociada a los cables, sino también la conmutación automática entre diferentes medidas sin tener que mover las puntas después de cada una.

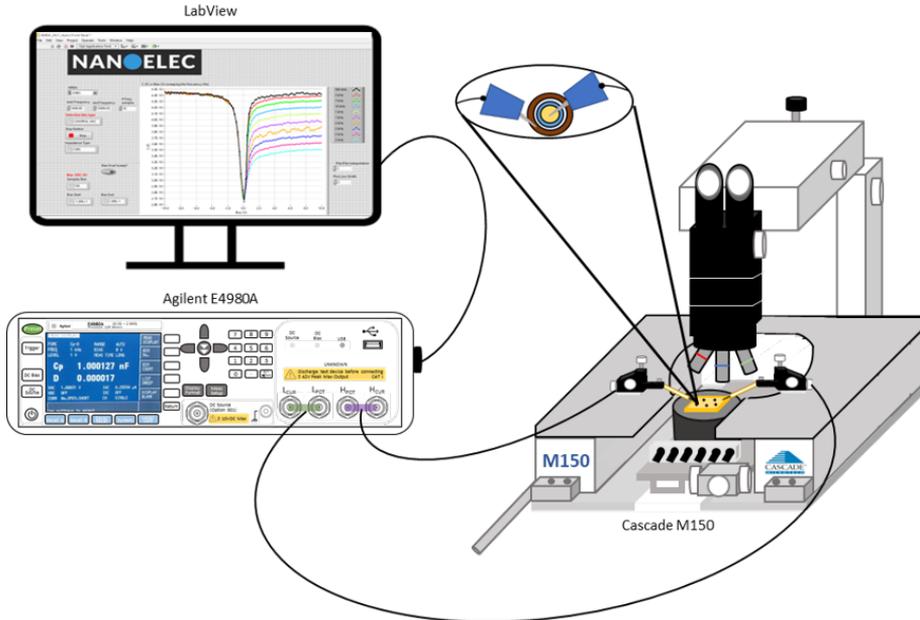


Figura 3.6: Montaje experimental para las medidas de las características $C-V$ en los SBDs a temperatura ambiente, haciendo uso del analizador de impedancias Agilent E4980A.

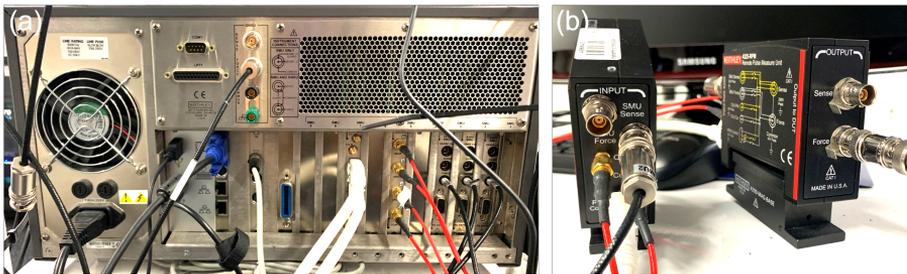


Figura 3.7: Imágenes de (a) la parte trasera del analizador de semiconductores Keithley 4200-SCS y (b) los amplificadores remotos RPM-4225.

En el caso del montaje experimental para las medidas de las curvas $I-V$ a temperatura ambiente no se han usado los amplificadores remotos, ya que se reduce el número de cables utilizados. En la figura 3.8 se muestra el montaje experimental completo

con la mesa de puntas Cascade M150 haciendo uso de cuatro posicionadores de DC para medidas de cuatro puntas: tres de ellos conectados a las SMUs del analizador de semiconductores y el cuarto a la tierra. En alguna de las obleas también se han hecho medidas únicamente con dos posicionadores conectados a dos de las SMUs.

Por otro lado, en el caso de las medidas en la mesa criogénica LakeShore, se puede realizar el mismo montaje que el de la figura 3.8, con dos o cuatro posicionadores en función de si se quiere realizar medidas con dos o cuatro puntas. En la figura 3.9 se muestra el montaje más completo posible, utilizando cuatro puntas de DC y los amplificadores remotos RPM-4225, que nos van a permitir realizar medidas DC, $C-V$ y pulsadas sin la necesidad de levantar las puntas del dispositivo.

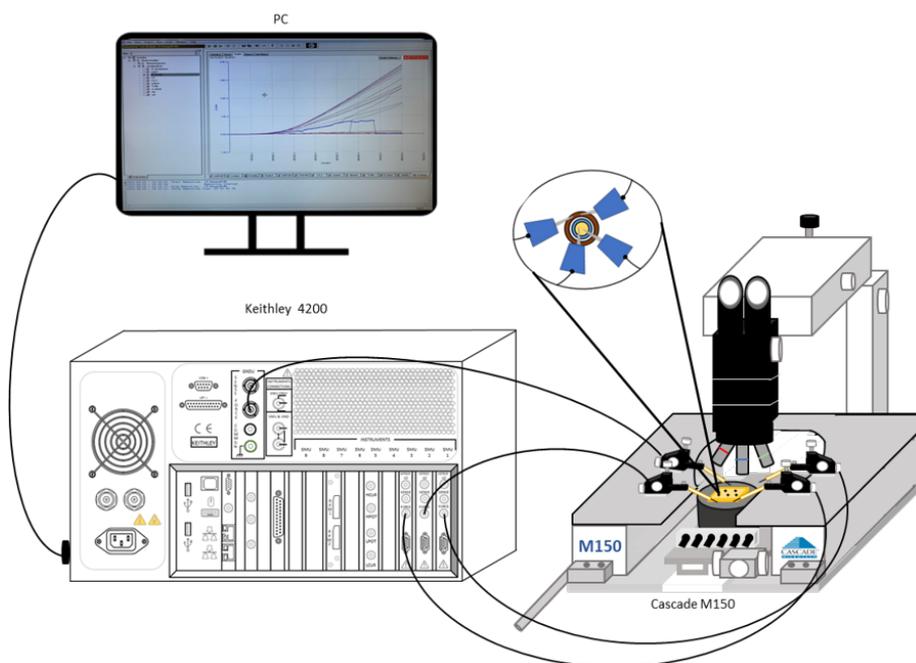


Figura 3.8: Montaje experimental para las medidas de las características $I-V$ en los SBDs a temperatura ambiente, haciendo uso del analizador de semiconductores Keithley 4200-SCS.

Como se ha mencionado al comienzo del capítulo, primero se realizará una caracterización preliminar a temperatura ambiente, para decidir qué diodos presentan un comportamiento más adecuado y extender su caracterización a todo el rango de temperatura. A continuación explicaremos cómo se extraen los parámetros característicos de los diodos Schottky, los cuales nos ayudan a conocer los diodos que funcionan adecuadamente. Además estos parámetros son necesarios para el modelo teórico que se presentará más adelante.

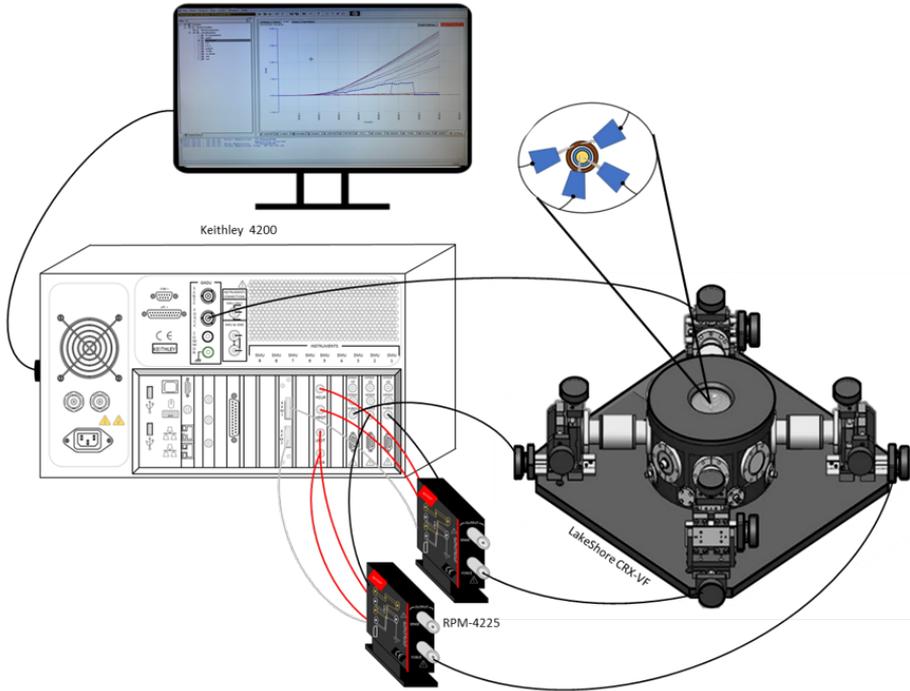


Figura 3.9: Montaje experimental para las medidas de las características $I-V$ en los SBDs en función de la temperatura en la mesa criogénica LakeShore, haciendo uso del analizador de semiconductores Keithley 4200-SCS y los controladores remotos RPM-4225.

3.3. Temperatura ambiente

En esta sección se van a presentar los resultados obtenidos a temperatura ambiente de los dispositivos descritos en la sección 3.1. Como se ha mencionado en el primer capítulo de la tesis, existen una serie de parámetros que caracterizan los diodos Schottky, como son la resistencia serie (R_s), el factor de idealidad (η) y la altura de la barrera (ϕ_B). Además, tal y como hemos visto en el capítulo anterior, las características $C-V$ son también importantes, por lo que se medirán para así extraer el dopaje de la *epilayer* (N_D) y también ϕ_B . De cara a estudiar estos parámetros, nos vamos a centrar por lo tanto en medidas DC de curvas $I-V$ y $C-V$ para la geometría de diodos circulares de mayor tamaño (como los mostrados en la figura 3.2). En esta sección vamos a analizar el funcionamiento de los diodos tanto del Run 1 como del Run 2 a temperatura ambiente.

3.3.1. Características I - V

En esta subsección se van a presentar los resultados de las características I - V de los SBDs de GaN medidos utilizando el montaje experimental de la figura 3.8. Y a partir de ellas se extraerán los parámetros característicos de los SBDs. Para ello es necesario recordar que en los diodos Schottky la característica I - V debida a la emisión termoiónica viene dada por

$$I(V) = I_0 \left[\exp \frac{e(V - IR_s)}{\eta k_B T} - 1 \right], \quad (3.1)$$

donde I_0 es la corriente inversa de saturación

$$I_0 = A^* S T^2 \exp \left[-\frac{e\phi_B}{k_B T} \right], \quad (3.2)$$

siendo S la superficie del diodo y A^* la constante de Richardson

$$A^* = \frac{4\pi m^* k_B^2 e}{h^3}. \quad (3.3)$$

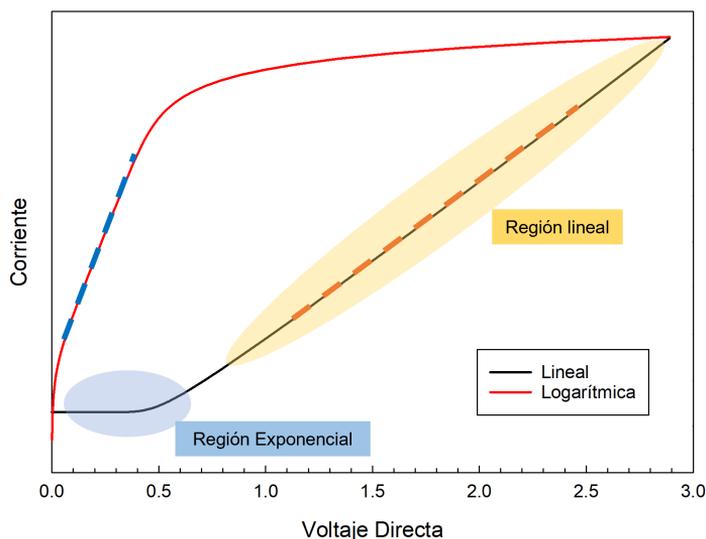


Figura 3.10: Característica I - V en directa típica de un diodo Schottky, representando la corriente tanto en escala lineal (negro) como logarítmica (rojo).

La característica I - V típica de un diodo Schottky en directa será por tanto como la mostrada en la figura 3.10. En dicha característica hay dos zonas bien diferenciadas: una zona lineal para voltajes altos en la que predomina la resistencia serie del diodo, que se obtendrá mediante un ajuste lineal de la curva I - V en esa zona, y una región

exponencial para los voltajes más bajos, por lo que mediante un ajuste exponencial se podrá obtener tanto el factor de idealidad como la altura de la barrera.

Run 1

Se han realizado medidas de todas las obleas disponibles del Run 1, sin embargo, no todas las obleas contienen dispositivos con un buen comportamiento. Las obleas en las que se descartó una caracterización más completa son la de EpiGaN sobre SiC, las dos de Enkris sobre SiC y la de IAF sobre SiC. Como ejemplo de un comportamiento deficiente, en la figura 3.11 se presentan curvas $I-V$ de SBDs de distintos tamaños de la oblea de Enkris sobre SiC y $N_D=10^{17} \text{ cm}^{-3}$. La alta corriente medida en inversa desde voltajes bajos indica que el funcionamiento de estos diodos no es satisfactorio. En directa también se observa un comportamiento no repetitivo y no lineal en la zona de R_s , debido probablemente a algún problema en los contactos metálicos del diodo.

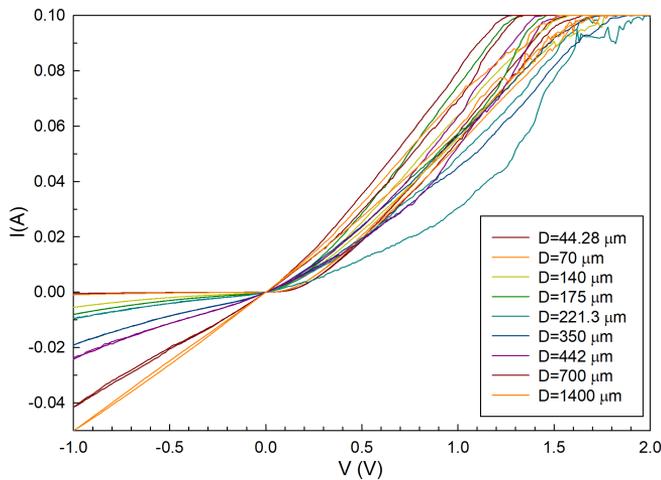


Figura 3.11: Características $I-V$ a 300K medidas en SBDs de distintos diámetros en la oblea del Run 1 de Enkris sobre SiC con un dopaje de la *epilayer* de 10^{17} cm^{-3} .

Todas las obleas cuyos dispositivos tienen un comportamiento aceptable han sido medidas. En la figura 3.12 se muestran las características $I-V$ para una selección de diodos con distintos diámetros de las tres obleas que presentan un mejor comportamiento. En el caso de la figura 3.12(a) se representan varios dispositivos de la oblea de Enkris sobre zafiro cuya superficie ha sido tratada con HF, en (b) tenemos la oblea de EpiGaN sobre Si y en (c) la oblea de CRHEA sobre SiC. En las dos primeras, para el diodo de mayor diámetro ($D = 1400 \mu\text{m}$) se observa un comportamiento extraño. En

el primero de ellos se encuentra una corriente muy alta (casi del orden de mA) para voltajes bajos en inversa, lo que nos indica que presenta un funcionamiento deficiente. Se ha observado que, en general, los diodos de este tamaño presentan algún problema.

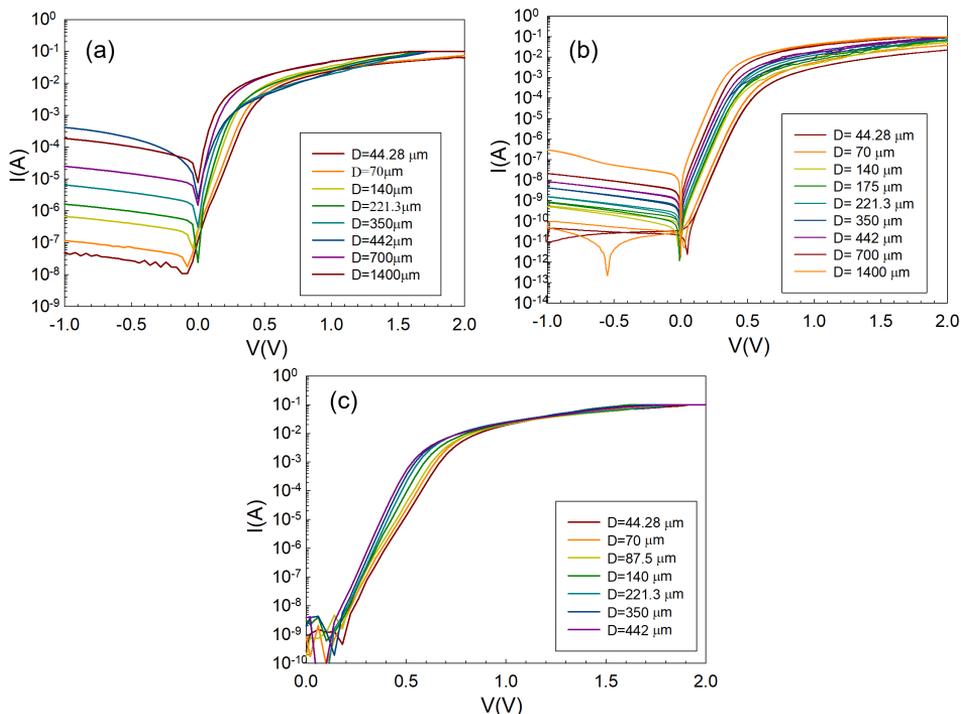


Figura 3.12: Características I - V a 300K medidas en SBDs de distintos diámetros en las obleas del Run 1: (a) de Enkris sobre zafiro, (b) de EpiGaN sobre Si y (c) de CRHEA sobre SiC.

Sobre la oblea de CRHEA se va a realizar el estudio completo del comportamiento en DC en todo el rango de temperatura, como se verá más adelante. Es importante mencionar que en la oblea de Enkris sobre zafiro se dispone de dispositivos que funcionan correctamente, pero hay una serie de retículas en las cuales los diodos presentan un desalineamiento considerable. En estas tres obleas la corriente escala con la superficie, salvo algún diodo concreto. Sin embargo, la resistencia serie prácticamente no depende del tamaño del ánodo, debido a que en estos diodos está fundamentalmente asociada a los cables del montaje experimental.

En estas características se observa el comportamiento típico de un diodo Schottky. Centrándonos en un diodo, por ejemplo el de diámetro $70 \mu\text{m}$ de la oblea de EpiGaN sobre Si, vamos a explicar la extracción de los parámetros basándonos en la teoría

de la emisión termiónica, mediante el método que denominaremos *Th*. En la figura 3.13(a), la medida de la curva $I-V$ se representa en color naranja y la línea discontinua azul representa el ajuste lineal en la zona donde R_s predomina. R_s en este caso tiene un valor de aproximadamente $25\ \Omega$. Una vez se ha calculado R_s , es posible determinar el voltaje real que hay entre extremos del diodo (V_d) como $V_d = V - IR_s$. En la gráfica se representa la curva $I-V_d$ mediante la línea negra continua. En el caso de la figura 3.13(b), representamos, en escala logarítmica, la medida y la curva $I-V$ corrigiendo el voltaje V_d . La línea roja discontinua representa el ajuste con la ecuación 3.1 en la zona exponencial, del cual obtenemos los parámetros: el factor de idealidad η , que es igual a 1.2, y altura de la barrera ϕ_B , que vale 0.74 eV.

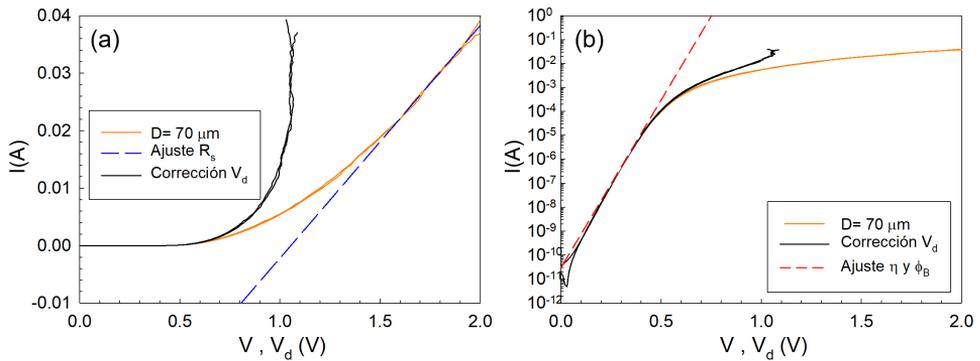


Figura 3.13: Característica $I-V$ en directa del diodo de diámetro $70\ \mu\text{m}$ de la oblea de EpiGaN sobre Si, donde se muestra la medida experimental (línea continua naranja) y la corrección del voltaje real que hay entre extremos del diodo (línea continua negra), junto con los ajustes para la obtención de los parámetros: (a) de R_s (línea discontinua azul) y (b) de η y ϕ_B (línea discontinua roja).

En el caso de la oblea de CRHEA crecida sobre un sustrato de SiC, los valores de los parámetros característicos del diodo Schottky obtenidos para todos los diodos de una de las retículas disponibles (la misma en la que se hará el estudio para diferentes temperaturas) son los mostrados en la tabla 3.2. Tal y como se observa, hay dos diodos (los más grandes) que no están funcionando correctamente, lo que se refleja en los valores del factor de idealidad y la altura de la barrera, muy diferentes con respecto al resto de diodos. En este caso las medidas fueron realizadas únicamente con dos puntas, lo que explica que los valores de la resistencia serie sean similares independientemente del tamaño de los diodos.

| D(μm) | R_s (Ω) | ϕ_B (eV) | η |
|--------------------|--------------------|---------------|--------|
| 44.28 | 11.8 | 0.807 | 1.40 |
| 44.28 | 10.3 | 0.779 | 1.46 |
| 70 | 12.0 | 0.813 | 1.37 |
| 70 | 15.6 | 0.789 | 1.43 |
| 87.5 | 13.5 | 0.807 | 1.39 |
| 140 | 19.2 | 0.849 | 1.26 |
| 140 | 7.8 | 0.849 | 1.25 |
| 175 | 6.9 | 0.837 | 1.28 |
| 221.3 | 13.9 | 0.896 | 1.13 |
| 442 | 9.7 | 0.898 | 1.14 |
| 700 | 9.3 | 0.908 | 1.11 |
| 700 | 9.0 | 0.505 | 6.27 |
| 1400 | 17.3 | 0.505 | 8.93 |

Tabla 3.2: Valores de R_s , ϕ_B y η para los SBDs de la retícula 4 de la oblea de CRHEA, obtenidos de las medidas I - V .

Run 2

Para la caracterización a temperatura ambiente de la oblea de GaN sobre zafiro del Run 2, se utilizó el montaje experimental de la figura 3.8, en este caso con cuatro puntas de DC para así eliminar la resistencia de los cables. Las medidas I - V de una selección de diodos de distinto tamaño se presentan en la figura 3.14, representadas tanto en escala lineal como logarítmica. Fijándonos en la figura 3.12(a), que muestra medidas realizadas sobre una oblea similar del Run 1, y comparándolas con las del Run 2, vemos que las características han mejorado notablemente, no sólo en la zona lineal de la curva, sino también en la zona exponencial, debido principalmente a la optimización del proceso de fabricación. Al igual que con el Run 1, se han hecho medidas de múltiples dispositivos.

Para el cálculo preciso de la resistencia serie existen diferentes métodos optimizados con respecto al proceso sencillo (método Th) indicado en la figura 3.13. A continuación vamos a presentar un segundo método desarrollado a partir de la teoría de la emisión termoiónica [106]. A partir de la ecuación 3.1, despejando V se obtiene que

$$V = R_s S J + \eta \phi_B + \frac{\eta}{\beta} \ln\left(\frac{J}{A^* T^2}\right), \quad (3.4)$$

siendo $\beta = e/k_B T$. Derivando esta ecuación con respecto al logaritmo neperiano de la densidad de corriente J , tenemos la expresión

$$\frac{dV}{d \ln(J)} = \frac{dV}{dJ} \frac{1}{d \ln(J)/dJ} = \frac{dV}{dJ} J = R_s S J + \frac{\eta}{\beta}. \quad (3.5)$$

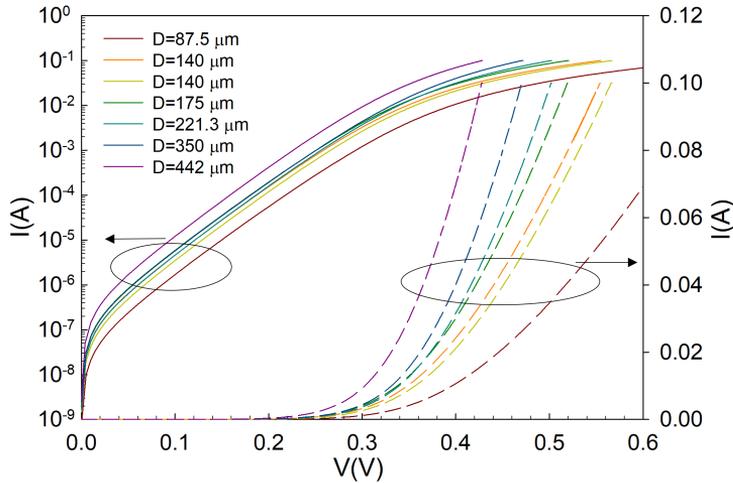


Figura 3.14: Características I - V de varios diodos de distinto diámetro de la oblea de Enkris sobre zafiro del Run 2 (tanto en escala lineal como en escala logarítmica).

Realizando la representación de $dV/d \ln(J)$ frente a J (método de Cheung), se obtiene una dependencia lineal, como se puede ver en la figura 3.15, de la cual se puede extraer el valor de la resistencia serie fácilmente a partir de la pendiente.

A partir de la pendiente de la representación de la figura 3.15, se obtuvo un valor de $R_s = 0.91 \Omega$. Se puede obtener también el factor de idealidad η (en este caso en torno a 1.3), el cual varía en función del rango donde se realice el ajuste, por lo que este parámetro se obtendrá con más fiabilidad a partir del ajuste de la zona exponencial de las curvas I - V .

En la figura 3.16 se muestra como ejemplo el diodo de $221.3 \mu\text{m}$ de diámetro (mismo diodo que en la figura 3.15). En la figura 3.16(a), la medida de la curva I - V (realizada con cuatro puntas) se representa en color naranja y la línea discontinua azul corresponde al ajuste lineal en la zona donde R_s predomina (método Th). R_s en este caso tiene un valor de aproximadamente 1.3Ω . Una vez se ha calculado R_s por ambos métodos, se observa que el valor de R_s es significativamente distinto, siendo más correcto el calculado a través del método de Cheung, ya que el valor obtenido para el potencial entre extremos del diodo V_d , representado en la figura 3.16(b), aumenta de forma monótona, mientras que para el método Th se mantiene constante para voltajes

altos. En dicha figura, además de la medida original y las curvas $I-V_d$ obtenidas con ambos modelos, se incluye el ajuste con la ecuación 3.1 en la zona exponencial (línea roja discontinua), del cual obtenemos los parámetros: el factor de idealidad η , que en este caso es igual a 1.13, y la altura de la barrera ϕ_B , que vale 0.58 eV. En la tabla 3.3

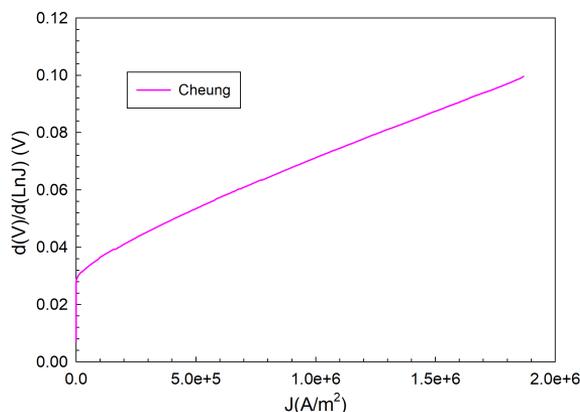


Figura 3.15: Representación de $d(V)/d(\ln(J))$ frente a J para calcular la resistencia serie por el método de Cheung.

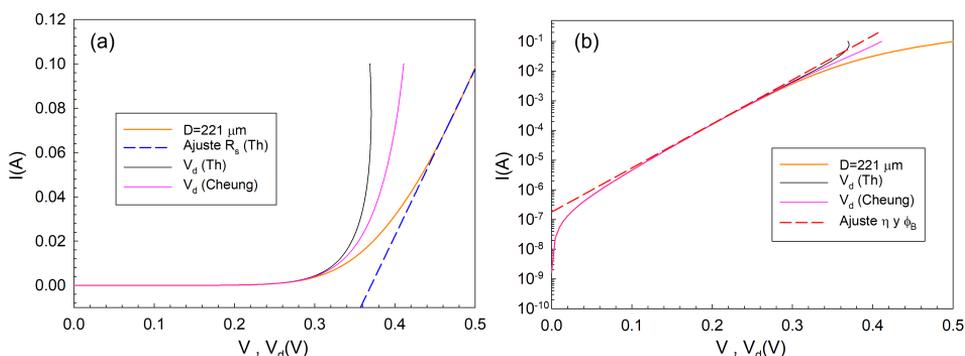


Figura 3.16: Característica $I-V$ del diodo de diámetro $221.3 \mu\text{m}$ de la oblea del Run 2 de Enkris sobre zafiro donde se muestra la medida experimental (línea continua naranja) y dos correcciones para tener en cuenta V_d , la obtenida con el método *Th* (línea continua negra) y la calculada con el método de Cheung (línea continua rosa). Se muestran también los ajustes para la obtención de los parámetros: (a) de R_s (línea discontinua azul) y (b) de η y ϕ_B (línea discontinua roja), calculados con el método *Th*.

se recogen los parámetros característicos de una serie de diodos Schottky de distinto tamaño de la oblea del Run 2. En este caso, al haber realizado las medidas con cuatro

posicionadores, se obtiene un valor mucho menor de la resistencia serie. El valor del factor de idealidad es muy parecido en todos los diodos y el valor de la barrera fluctúa entre 0.55 y 0.60 eV. En esta oblea también se ha realizado el estudio para diferentes temperaturas y se presentará en este capítulo.

| D(μm) | R_s (Ω) | ϕ_B (eV) | η |
|--------------------|--------------------|---------------|--------|
| 87.5 | 1.59 | 0.55 | 1.16 |
| 140 | 1.32 | 0.55 | 1.15 |
| 140 | 1.48 | 0.57 | 1.14 |
| 175 | 1.04 | 0.56 | 1.15 |
| 221.3 | 0.91 | 0.58 | 1.13 |
| 350 | 0.60 | 0.60 | 1.15 |
| 442 | 0.53 | 0.59 | 1.13 |

Tabla 3.3: Valores de R_s (método de Cheung), ϕ_B y η para los SBDs de la oblea del Run 2 de una de las retículas, obtenidos de las medidas I - V .

3.3.2. Características C - V

En esta subsección se van a presentar los resultados de las curvas C - V de los SBDs de GaN medidas utilizando el montaje experimental de la figura 3.6, así como el cálculo del dopaje de la *epilayer* N_D . Como ya hemos visto en el capítulo 2, la capacidad ideal de un diodo Schottky viene dada por

$$C_{Id}(V) = S \sqrt{\frac{eN_D \kappa_{SC}}{2(V_B - V)}}, \quad (3.6)$$

de donde se obtiene la expresión

$$\frac{1}{C_{Id}(V)^2} = \frac{2(V_B - V)}{S^2 e N_D \kappa_{SC}}. \quad (3.7)$$

Por lo tanto, representando el inverso de la capacidad al cuadrado frente al voltaje aplicado se tendrá una característica lineal. Realizando un ajuste con la ecuación 3.7 se calcularán tanto el valor del dopaje de la *epilayer* a partir de la pendiente como el potencial de contacto con la ordenada en el origen.

En la figura 3.17 se muestran las características C - V para diodos de distinto tamaño medidas en la oblea del Run 1 de EpiGaN sobre SiC, que presentaban un comportamiento deficiente, como se observó mediante las medidas de las curvas I - V . Se observa que los resultados no son coherentes con el comportamiento ideal de la curva C - V de los SBDs, obteniendo incluso en algunos casos capacidades negativas.

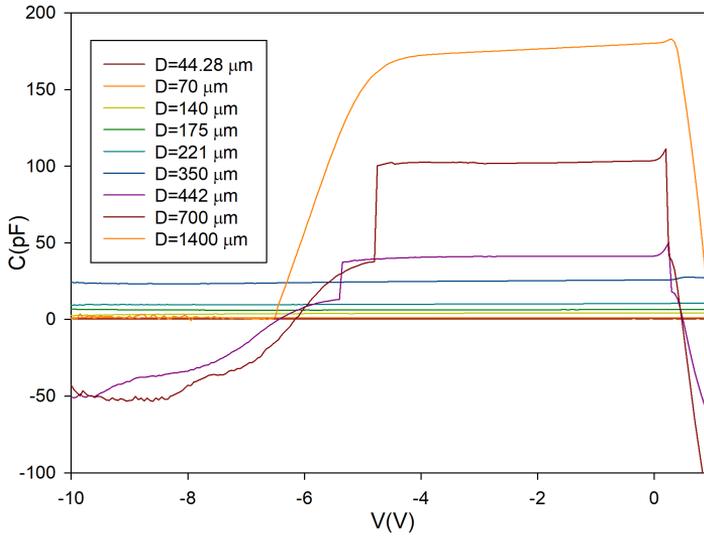


Figura 3.17: Característica C - V de varios diodos de la oblea de EpiGaN sobre SiC.

Como ejemplo de los diodos que funcionan correctamente, en la figura 3.18(a) se muestran resultados obtenidos a 500 kHz para un diodo de diámetro 350 μm de la oblea del Run 1 de Enkris crecida sobre zafiro, cuya superficie ha sido tratada con HF. Se observa una dependencia lineal en la representación del inverso de la capacitancia al cuadrado frente al voltaje. El valor del potencial de contacto obtenido del ajuste es 0.51 V, y el dopaje $4.95 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, que, fijándonos en la tabla 3.1, es un valor muy cercano al valor nominal que proporciona el proveedor. En la figura 3.18(b) se realiza la misma representación pero para un rango de frecuencias desde 100 kHz hasta 2 MHz, observándose que en general todas ellas tienen el mismo comportamiento y, como se puede apreciar en el *inset*, el valor de la capacitancia prácticamente no cambia con la frecuencia en este rango.

En la figura 3.19 se muestran las curvas C^{-2} - V , donde la capacitancia está normalizada por la superficie, para $f = 500 \text{ kHz}$. En el *inset* de la figura se puede ver que algunas de las medidas no son buenas debido a un funcionamiento incorrecto del diodo, como por ejemplo en el caso del de diámetro 1400 μm . Además, en la representación de C^{-2} se observa que los diodos de menor tamaño comienzan a desviarse del comportamiento ideal, mostrando cierta curvatura para los voltajes más en inversa. Este hecho puede deberse a la influencia de la capacitancia de efectos de borde (estudiada en el capítulo anterior), más significativa en los diodos más pequeños al tener una capacitancia menor.

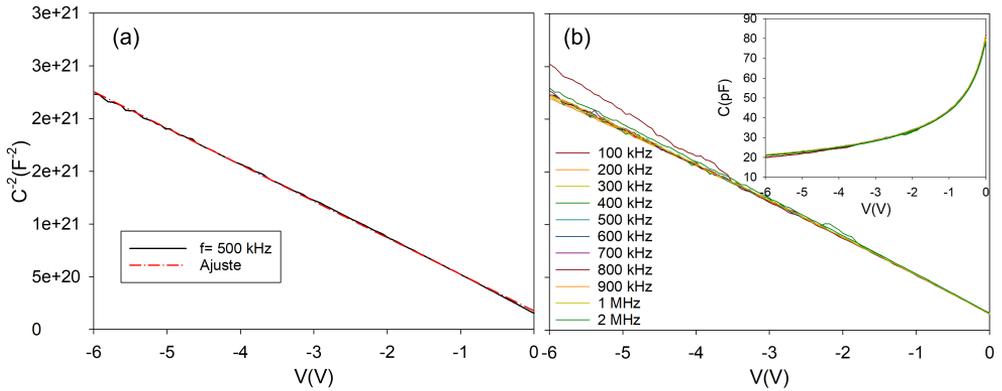


Figura 3.18: (a) Característica C^{-2} frente a V para $f=500$ kHz (línea negra continua) y ajuste (línea roja discontinua) en un diodo de $350 \mu\text{m}$ de diámetro de la oblea del Run 1 sobre zafiro. (b) Representación C^{-2} - V para distintas frecuencias desde 100 kHz hasta 2 MHz. En el *inset* se presenta la curva C - V para todas las frecuencias.

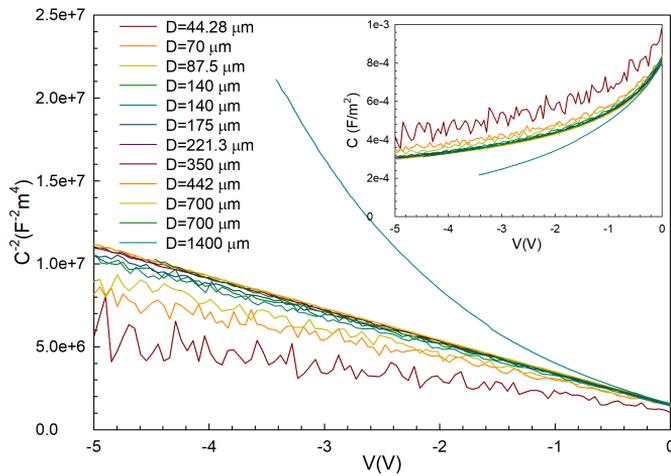


Figura 3.19: C^{-2} (normalizada por la superficie) frente a V medida a una frecuencia de 500 kHz en diodos de diferente tamaño (retícula 2) de la oblea del Run 1 crecida por CRHEA sobre SiC. En el *inset* se representa la capacidad.

Los valores de dopaje, potencial de contacto y capacidad para polarización cero normalizada obtenidos para los diodos representados en la figura 3.19 se recogen en la tabla 3.4. Los valores del dopaje calculados se encuentran en el rango de $8\text{-}10 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ para los distintos diodos, los cuales son ligeramente mayores que el valor nominal que el proveedor proporciona ($N_D = 6.6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), ver tabla 3.1. Se ha

calculado también el voltaje de *built-in*, que varía aproximadamente entre 0.8 y 1 V. Y por último se obtiene que el valor de C_{j0}^n es prácticamente el mismo en todos los casos, a excepción de los diodos de menor tamaño (lo que indica posiblemente la presencia de efectos de borde).

| D(μm) | N_D ($\times 10^{16} \text{cm}^{-3}$) | V_B (V) | C_{j0}^n ($\times 10^{-4} \text{F/m}^2$) |
|--------------------|---|-----------|--|
| 44.28 | 14.3 | 1.04 | 9.69 |
| 70 | 10.4 | 0.94 | 8.40 |
| 87.5 | 9.78 | 0.90 | 8.29 |
| 140 | 8.60 | 0.81 | 8.18 |
| 140 | 8.76 | 0.80 | 8.33 |
| 175 | 8.58 | 0.81 | 8.20 |
| 221.3 | 8.24 | 0.80 | 8.04 |
| 350 | 8.31 | 0.79 | 8.12 |
| 442 | 8.18 | 0.80 | 8.02 |
| 700 | 8.20 | 0.79 | 8.11 |
| 700 | 8.42 | 0.82 | 8.08 |

Tabla 3.4: Valores de N_D , V_B y C_{j0}^n para los SBDs de la oblea de CRHEA del Run 1 de una de las retículas, obtenidos de las medidas C - V .

Hemos realizado el mismo estudio para el caso de la oblea de GaN sobre zafiro del Run 2. En la figura 3.20(a) se representa el inverso de la capacidad al cuadrado normalizado por la superficie, cuyo comportamiento lineal permitirá realizar un ajuste para la extracción tanto de N_D como de V_B . Además, se aprecia que los diodos no escalan completamente, cuya explicación puede estar relacionada con el tamaño del diámetro utilizado en el cálculo de la superficie, ya que se ha tomado su valor nominal. En el *inset* se muestran las curvas C - V sin normalizar en escala logarítmica, lo que permite observar los valores de la capacidad en función del tamaño del diodo. Para comprobarlo, en la figura 3.20(b) se representa C^{-2} normalizado por la superficie considerando el diámetro nominal más $3 \mu\text{m}$, obteniéndose un buen escalado de la capacidad con la superficie. Esto parece indicar que el valor nominal del diámetro no es, probablemente, el valor real en los diodos. Al igual que se observó en la figura 3.19, las medidas en los diodos más pequeños presentan cierta curvatura, que de nuevo se asocia a una capacidad añadida, originada por los efectos de borde.

Los valores de los parámetros obtenidos para los diodos representados en la figura 3.20, considerando el diámetro nominal, son los mostrados en la tabla 3.5. En este caso también se ha incluido la capacidad para la polarización cero (C_{j0}) sin normalizar, siendo el valor normalizado por la superficie (C_{j0}^n) prácticamente el mismo para todos los diodos. El valor del dopaje obtenido es similar pero ligeramente inferior al

proporcionado por el proveedor ($5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), ver tabla 3.1, y está en el rango de $4\text{-}5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. En cuanto al valor del potencial de contacto, varía entre 0.6 y 0.7 V.

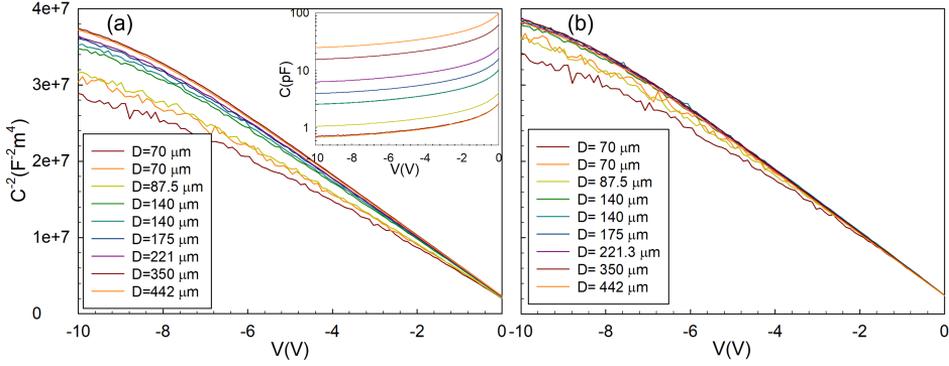


Figura 3.20: Representación, para diferentes diodos de la oblea del Run 2, de C^{-2} (medida a una frecuencia de 1 MHz) frente a V normalizada por la superficie utilizando el diámetro: (a) nominal y (b) nominal más $3 \mu\text{m}$. En el *inset* se representa la característica C - V sin normalizar de los mismos diodos en escala logarítmica.

| $D(\mu\text{m})$ | $N_D (\times 10^{16} \text{ cm}^{-3})$ | V_B (V) | C_{j0} (pF) | $C_{j0}^n (\times 10^{-4} \text{ F/m}^2)$ |
|------------------|--|-----------|---------------|---|
| 70 | 4.96 | 0.70 | 2.7 | 7.05 |
| 70 | 4.67 | 0.65 | 2.7 | 6.99 |
| 87.5 | 4.61 | 0.66 | 4.1 | 6.89 |
| 140 | 4.24 | 0.61 | 10.3 | 6.74 |
| 140 | 4.17 | 0.61 | 10.3 | 6.69 |
| 175 | 4.11 | 0.59 | 16.0 | 6.66 |
| 221.3 | 4.09 | 0.60 | 25.4 | 6.62 |
| 350 | 3.99 | 0.59 | 62.9 | 6.54 |
| 442 | 4.02 | 0.59 | 100 | 6.56 |

Tabla 3.5: Valores de N_D , V_B , C_{j0} y C_{j0}^n para los SBDs de la oblea del Run 2 de una de las retículas, obtenidos de las medidas C - V .

Una vez que hemos caracterizado los diodos a temperatura ambiente y se ha seleccionado uno del Run 1 y otro del Run 2, a continuación se va a presentar el modelo teórico que se utilizará para calcular la corriente ideal en inversa y analizar la corriente de pérdidas mediante la comparación con las medidas experimentales en un amplio rango de temperatura desde 33 hasta 475 K.

3.4. Modelo corriente ideal en inversa

En esta sección se va a presentar el modelo teórico analítico que nos permite realizar una comparación con las medidas experimentales para estudiar las características $I-V$, determinar la corriente de pérdidas y los mecanismos que la producen. El modelo predice la corriente total en un SBD ideal, la cual está formada por dos contribuciones: la emisión termoiónica, J_{th} , y la túnel, J_{tunnel} . En este apartado vamos a explicar el modelo desarrollado para calcular estas dos componentes de la corriente. Es importante recordar que al polarizar en directa (siempre que la *epilayer* tenga un dopaje moderado) la corriente viene dada por la emisión termoiónica y la corriente túnel puede ser despreciada. Sin embargo, al polarizar en inversa, dependiendo del voltaje aplicado V , deben considerarse ambas contribuciones. En nuestro modelo vamos a considerar las componentes de la corriente mostradas en la figura 3.21, la emisión termoiónica de electrones desde el semiconductor al metal $J_{th}^{s \rightarrow m}$, del metal al semiconductor $J_{th}^{m \rightarrow s}$ y el túnel de electrones desde el metal al semiconductor $J_{tunnel}^{m \rightarrow s}$.

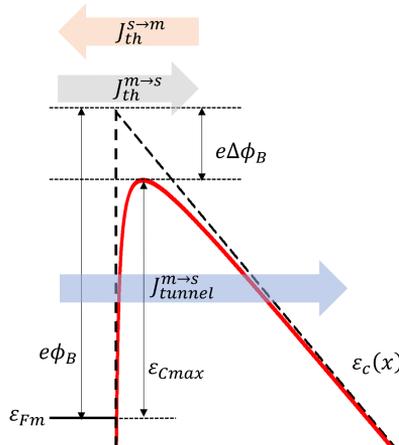


Figura 3.21: Esquema de la barrera de energía con y sin las correcciones de la carga imagen, y contribuciones de la corriente consideradas en el modelo. Las flechas indican el movimiento de los electrones, y por lo tanto el flujo de corriente es en el sentido opuesto.

Los valores de estas componentes de corriente para un determinado V dependen de la altura y la forma de la barrera de energía. En nuestro modelo consideramos que el nivel de Fermi del metal ε_{Fm} es la referencia cero en energía. Se ha incluido la influencia de la carga imagen y el dopaje de la capa activa N_D , con lo cual la expresión para la energía potencial en la *epilayer* a una distancia x de la interfaz con el metal

del contacto Schottky viene dada por [107, 108]

$$\varepsilon_C(x) = e\phi_B - e\left[\frac{2eN_D}{\kappa_{SC}}(V_B - V)\right]^{1/2}x + \frac{e^2N_Dx^2}{2\kappa_{SC}} - \frac{e^2}{16\pi\kappa_{SC}x}, \quad (3.8)$$

donde ϕ_B es la altura barrera, V_B el voltaje de *built-in* y κ_{SC} la permitividad del semiconductor. En esta expresión, el segundo término corresponde a $-eEx$, siendo E el campo eléctrico en la interfaz metal-semiconductor, el tercer término tiene en cuenta la influencia del dopaje, y el último la disminución de la altura de la barrera debido al efecto de la carga imagen.

A la hora de calcular las corrientes emplearemos un formalismo general para ambos tipos, túnel y termoiónica. La corriente inyectada desde un lado de la unión al otro en el rango $d\varepsilon$ alrededor de la energía ε normal a la barrera se puede expresar como

$$J(\varepsilon)d\varepsilon = -eN(\varepsilon)T_C(\varepsilon)d\varepsilon, \quad (3.9)$$

donde

$$N(\varepsilon) = \frac{A^*T}{ek_B} \ln[1 + \exp(-\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T})], \quad (3.10)$$

es el número de electrones por unidad de área que inciden en la barrera con una energía normal ε por unidad de tiempo y por unidad de energía en el lado (metal o semiconductor) desde el cual son inyectados [82] y T_C es el coeficiente de transmisión correspondiente a esa energía. ε_F es la energía de Fermi en el lado del metal o del semiconductor dependiendo de cuál de ellos se inyectan los electrones. T es la temperatura absoluta y $A^* = 4\pi m^* k_B^2 e/h^3$ la constante de Richardson efectiva. Vamos a utilizar una única masa efectiva tanto para el cálculo de la constante de Richardson como para la transmisión túnel [107, 109].

La ecuación 3.9 asume una ocupación despreciable de los estados con energía ε en el lado en el que los electrones son inyectados, como se espera en el caso de las contribuciones termoiónica (siempre que la barrera sea suficientemente alta) y túnel desde el metal al semiconductor para polarizaciones en inversa.

El coeficiente de transmisión, $T_C(\varepsilon)$, es igual a uno para energías por encima de la barrera $\varepsilon > \varepsilon_{Cmax}$, rango que corresponde a los procesos de emisión termoiónica, mientras que para $\varepsilon < \varepsilon_{Cmax}$, que corresponde a procesos túnel, el coeficiente de transmisión se calcula utilizando la aproximación Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) para la evaluación de la probabilidad túnel como [28]

$$T_C(\varepsilon) = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m^*(\varepsilon_C(x) - \varepsilon)} dx\right], \quad (3.11)$$

donde x_1 y x_2 son los puntos para los cuales $\varepsilon_C(x) = \varepsilon$.

Como se muestra en la figura 3.21, $\varepsilon_{Cmax} = e(\phi_B - \Delta\phi)$, donde $\Delta\phi = \sqrt{eE/4\pi\kappa_{SC}}$ es la disminución de la barrera por la carga imagen (calculada despreciando la influencia de N_D , el tercer término de la ecuación 3.8). Si el efecto de la carga imagen no se tiene en cuenta, entonces $\varepsilon_{Cmax} = e\phi_B$. La corriente asociada a los electrones inyectados desde el metal al semiconductor se calcula como [107]

$$\begin{aligned} J^{m \rightarrow s} &= -e \int_{\varepsilon_{min}}^{\infty} N_m(\varepsilon) T_C(\varepsilon) d\varepsilon = -e \int_{\varepsilon_{min}}^{\varepsilon_{Cmax}} N_m(\varepsilon) T_C(\varepsilon) d\varepsilon - e \int_{\varepsilon_{Cmax}}^{\infty} N_m(\varepsilon) d\varepsilon \\ &= J_{tunnel}^{m \rightarrow s} + J_{th}^{m \rightarrow s}, \end{aligned}$$

donde ε_{min} es la energía mínima en el metal para la cual el túnel al semiconductor es posible (debe haber estados disponibles en la banda de conducción del semiconductor a la misma energía). Para obtener una mayor precisión en el cálculo de $J_{tunnel}^{m \rightarrow s}$, se realiza de forma numérica, ya que no hay una expresión analítica simple para $T_C(\varepsilon)$ cuando se incluyen las correcciones de la carga imagen en la altura de la barrera, a pesar de que se han publicado aproximaciones trapezoidales [109, 110]. En el caso de la corriente $J_{th}^{m \rightarrow s}$, debido a que las energías típicamente cumplen que $\varepsilon - \varepsilon_{Fm} \gg k_B T$, es posible aproximar

$$N_m(\varepsilon) \approx \frac{A^* T}{ek_B} \exp\left(-\frac{\varepsilon - \varepsilon_{Fm}}{k_B T}\right), \quad (3.12)$$

permitiendo evaluar $J_{th}^{m \rightarrow s}$ analíticamente como

$$J_{th}^{m \rightarrow s} = -A^* T^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_{Cmax}}{k_B T}\right). \quad (3.13)$$

Como se ha explicado anteriormente, la corriente asociada a los electrones inyectados desde el semiconductor al metal es considerada únicamente debida a la emisión termiónica. Asumiendo que no se producen colisiones de electrones en la zona de vaciamiento, siendo esto coherente con la alta movilidad del GaN en nuestro caso, la corriente viene dada por

$$J^{s \rightarrow m} = J_{th}^{s \rightarrow m} = e \int_{\varepsilon_{Cmax}}^{\infty} N_s(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.14)$$

De nuevo, debido a que las energías típicamente cumplen que $\varepsilon - \varepsilon_{Fs} \gg k_B T$, se puede aproximar

$$N_s(\varepsilon) \approx \frac{A^* T}{ek_B} \exp\left(-\frac{\varepsilon - \varepsilon_{Fs}}{k_B T}\right). \quad (3.15)$$

Teniendo en cuenta que $\varepsilon_{Fs} = \varepsilon_{Fm} + eV$, se llega a la siguiente expresión

$$J_{th}^{s \rightarrow m} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_{Cmax}}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right). \quad (3.16)$$

Por lo tanto la corriente termoiónica total vendrá dada por

$$J_{th} = J_{th}^{s \rightarrow m} + J_{th}^{m \rightarrow s} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_{Cmax}}{k_B T}\right) \left[\exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1\right] = J_0 \left[\exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1\right]. \quad (3.17)$$

En un caso general en el cual se incluyen los efectos de la carga imagen, la corriente inversa de saturación J_0 es igual a $A^* T^2 \exp\left[-\frac{e(\phi_B - \Delta\phi_B)}{k_B T}\right]$, que depende del voltaje aplicado, a través de $\Delta\phi_B$.

Esta expresión ideal de J_{th} debe ser modificada para tener en cuenta efectos reales, como la influencia de la resistencia serie R_s y el factor de idealidad η , de la siguiente manera

$$J_{th}(V) = J_0 \left[\exp\left(\frac{e(V - J_{th} S R_s)}{\eta k_B T}\right) - 1\right], \quad (3.18)$$

donde S es la superficie del contacto Schottky. La introducción de estos dos parámetros en la expresión, externos al modelo ideal, es necesaria para lograr un buen ajuste de las curvas $I-V$ en directa, esencial para determinar ϕ_B . El parámetro η indica hasta qué punto las suposiciones realizadas con el cálculo anterior son válidas.

El objetivo final del modelo es estimar las características $I-V$ ideales de los SBDs en inversa tanto a temperatura ambiente como en función de la temperatura. El modelo necesita seis parámetros fundamentales: ϕ_B , N_D , κ_{SC} , m^* , R_s y η . κ_{SC} y m^* se obtienen de la literatura [73]: $8.9\kappa_0$ y $0.22m_0$ (siendo por tanto $A^* = 26.4 \text{ Acm}^{-2} \text{ K}^{-2}$) para el caso del GaN. Utilizamos la permitividad de baja frecuencia tanto para el campo eléctrico superficial como para el término de carga imagen. El valor de N_D se extraerá de las medidas de las curvas $C-V$ en inversa, como explicaremos más adelante. Y finalmente ϕ_B , R_s y η se van a determinar mediante el ajuste de la ecuación 3.18 a las curvas $I-V$ experimentales medidas en directa. Una vez que se determinan estos parámetros, se utilizan en el modelo para predecir las características $I-V$ en inversa, incluyendo las corrientes termoiónica y túnel mediante la siguiente ecuación

$$J_{reverse}(V) = J_{th}(V) + J_{tunnel}^{m \rightarrow s}(V), \quad (3.19)$$

sin necesidad de ningún otro ajuste.

3.5. Medidas a diferentes temperaturas

Los dispositivos de microondas capaces de operar a alta temperatura (evitando así la necesidad de un sistema de enfriamiento externo) pueden favorecer el desarrollo de aplicaciones de bajo coste, alta potencia y alta frecuencia. El GaN, gracias a

propiedades como su alta conductividad térmica, es un buen candidato para ello. Por otro lado, los SBDs de GaN tienen un gran potencial de uso en sistemas para aplicaciones espaciales (principalmente en multiplicadores y mezcladores para detectores heterodinos a frecuencias de THz), por lo que también es importante estudiar dichos dispositivos a temperaturas criogénicas.

3.5.1. Run 1

En este apartado se van a presentar los resultados del estudio en todo el rango de temperatura, desde 33 K hasta 475 K, para un SBD de diámetro $221.3 \mu\text{m}$ de la oblea de CRHEA sobre SiC del Run 1. Se han realizado medidas en dispositivos con distinto diámetro, obteniéndose resultados similares.

3.5.1.1. Características $C-V-T$

Tal y como se ha explicado en la sección 3.4, uno de los parámetros necesarios para el modelo es el dopaje de la *epilayer*. Para determinarlo, se han realizado medidas de la curva $C-V$ en función de la temperatura, a una frecuencia de 500 kHz, utilizando el montaje de la figura 3.6, pero con la mesa de puntas criogénica. En la figura 3.22 se muestran las curvas $C-V$ para temperaturas desde 33 hasta 475 K, donde se tiene el comportamiento típico de un SBD. Para polarización cero, en la curva $C-V$ se observa una capacidad en el rango 32-35 pF (véase también figura 3.23).

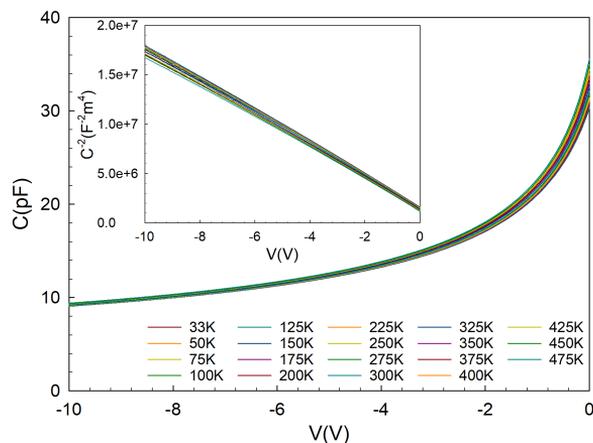


Figura 3.22: Curvas $C-V-T$ medidas a una frecuencia de 500 kHz. En el *inset* se representa la característica $C^{-2}-V$ del diodo de diámetro $221.3 \mu\text{m}$ para todas las temperaturas.

En el *inset* se ha incluido la representación de C^{-2} normalizada por la superficie frente a V , que muestra un comportamiento lineal para todas las temperaturas, lo

cual permite realizar un ajuste para obtener el valor del dopaje, de la capacidad para polarización cero y de la altura de la barrera, representados en la figura 3.23. Como se observa, el valor del dopaje de la *epilayer* es prácticamente independiente de la temperatura y toma valores próximos a 10^{17} cm^{-3} , ligeramente mayor que el nominal ($6.6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). En el caso del modelo se usará un valor de $1.05 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ por ser el que nos proporciona un mejor ajuste con las medidas experimentales. En esta misma figura se ha representado además el valor de ϕ_B calculado a partir de N_D y V_B (los cuales se obtienen mediante las curvas $C-V$), mediante la ecuación

$$\phi_B = V_B - \frac{k_B T}{e} \ln \frac{N_D}{N_C}, \quad (3.20)$$

siendo $N_C = 2\left(\frac{2\pi m^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2}$ la densidad equivalente de estados de la banda de conducción. El valor de ϕ_B es prácticamente constante, fluctúa en el rango 0.97-1.06 eV. En la siguiente subsección, se comparará con el valor de ϕ_B obtenido de las curvas $I-V$.

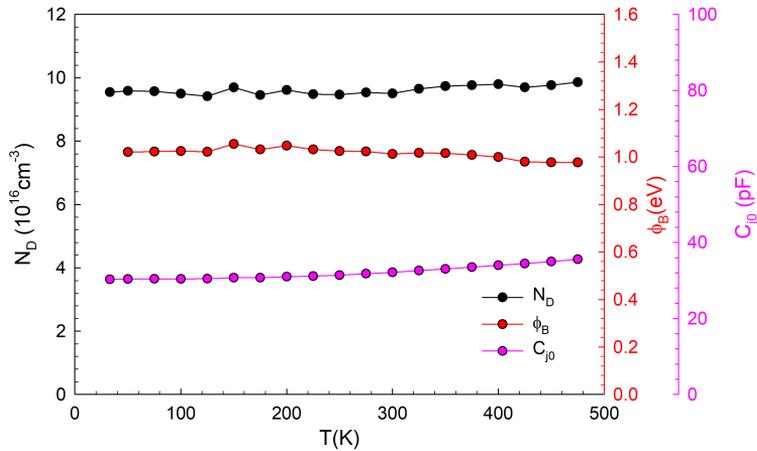


Figura 3.23: N_D , ϕ_B y C_{j0} en función de la temperatura obtenidos a partir de las curvas $C-V$ representadas en la figura 3.22.

3.5.1.2. Características $I-V-T$

En esta subsección se van a comparar las curvas $I-V$ del modelo y las medidas experimentales, realizadas con dos puntas mediante el montaje de la figura 3.9. Es posible conseguir un buen ajuste en directa teniendo en cuenta el efecto de la carga imagen, pero también sin tener este efecto en cuenta, lo que puede llevar a pensar, erróneamente, que las curvas $I-V$ en inversa pueden predecirse correctamente en ambos casos.

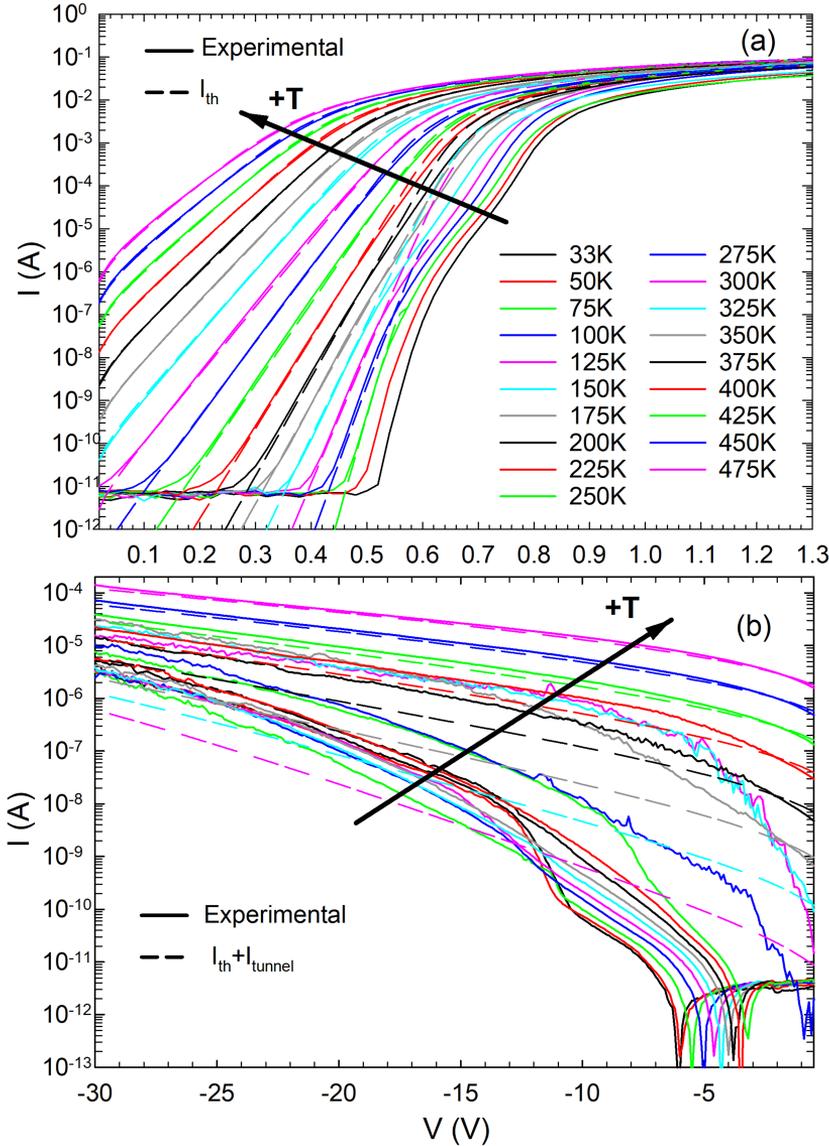


Figura 3.24: Curvas I - V - T medidas (líneas continuas) y obtenidas con el modelo (líneas discontinuas) en (a) directa y (b) inversa. El modelo incluye la emisión termioiónica y la corriente túnel (esta segunda solo en inversa) con la influencia de la carga imagen y R_s .

Del ajuste de la curva I - V sin considerar el efecto de la carga imagen se obtendrá un valor efectivo de la altura de la barrera ϕ_B^{eff} (menor que los valores de ϕ_B extraídos considerando el efecto de la carga imagen) y su correspondiente η^{eff} . Los cálculos de la curva I - V en inversa con el modelo completo (*full model*, FM), que incluye la carga

imagen y considera $\varepsilon_{Cmax} = e(\phi_B - \Delta\phi)$, se van a comparar con los que no tienen en cuenta la carga imagen (suprimiendo el último término de la ecuación 3.8) y usan los parámetros efectivos ($\varepsilon_{Cmax} = e\phi_B^{eff}$), pudiendo así determinar cuál es el modelo que mejor se ajusta a las curvas experimentales.

Las medidas $I-V-T$ se han realizado desde 33 hasta 475 K, como se muestra en la figura 3.24 para (a) directa y (b) inversa. Nótese que el límite inferior de las medidas es del orden de 10^{-11} A.

Se observa el comportamiento esperado, un aumento de la corriente con la temperatura, que nuestro modelo reproduce casi a la perfección. A partir del ajuste de las curvas $I-V$ en directa se han determinado los valores de ϕ_B , η y R_s para cada temperatura, ver figura 3.25, obteniéndose valores muy razonables, acordes con los encontrados en la literatura [111, 112, 113].

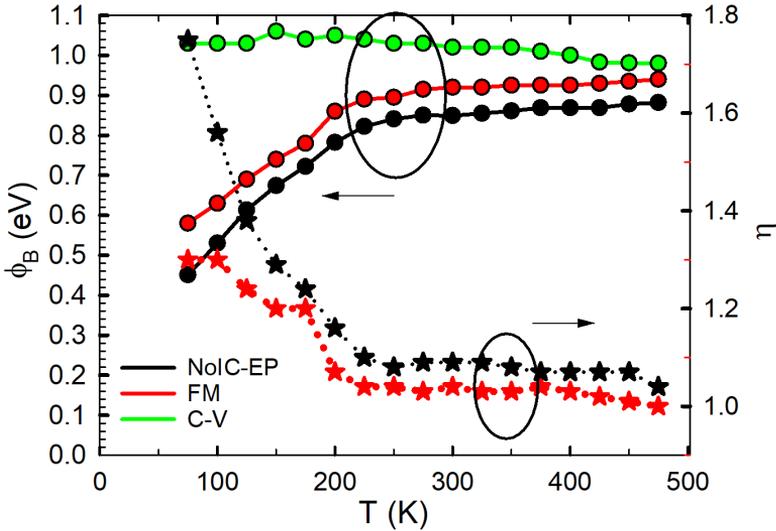


Figura 3.25: Parámetros obtenidos de las curvas $I-V-T$ mediante ajustes con distintos modelos: ϕ_B y η extraídos del ajuste de las medidas experimentales con el modelo completo (FM) en directa, valores de los parámetros efectivos extraídos de las curvas $I-V$ en directa en ausencia del efecto de la carga imagen (NoIC-EP) y altura de la barrera extraída de las curvas $C-V$.

Incluir R_s , que toma valores en torno a 10Ω para todas las temperaturas, es fundamental para ajustar los valores experimentales de corriente por encima de 10^{-4} A. Debido a que las resistencias asociadas a la *epilayer*, sustrato y contacto óhmico son del orden de décimas de Ω para el tamaño del diodo usado aquí, este valor de R_s corresponde esencialmente a la contribución de los cables y puntas usadas en el montaje

experimental, que se espera que sean prácticamente independientes de la temperatura. Los valores de ϕ_B y η extraídos de los ajustes se muestran en la figura 3.25 en función de la temperatura, observándose dos comportamientos claros, uno por encima de 200 K y otro por debajo. Para $T > 200$ K, los valores obtenidos para ϕ_B se encuentran en el rango de 0.92-0.94 eV, mientras que el factor de idealidad es siempre menor que 1.05 (cerca de 1 para las temperaturas altas), indicando la buena calidad de los diodos. En el rango de $T < 200$ K, se observa un descenso de ϕ_B y un aumento de η con la disminución de T , comportamiento encontrado habitualmente en la literatura, que se suele asociar a la influencia de inhomogeneidades en la interfaz metal-semiconductor [114].

Una vez que se han fijado los parámetros del modelo a partir del ajuste de las curvas $I-V$ en directa, se pueden usar para predecir el comportamiento ideal de los diodos en inversa, donde, además de la emisión termoiónica, se incluye la contribución túnel, calculadas como se explica en la sección 3.4.

Como se observa en la figura 3.24(b), para las temperaturas más altas los resultados del modelo prácticamente coinciden con las medidas experimentales, confirmando la validez de nuestro enfoque y el comportamiento casi ideal de los diodos. Sin embargo, para temperaturas por debajo de 425 K, los valores de corriente se desvían de la suma de estas dos contribuciones ideales. Son significativamente mayores, lo que significa que existen mecanismos adicionales no ideales de corriente de pérdidas. Cabe destacar que para $T < 300$ K la suma de estas dos contribuciones ideales es despreciable frente al exceso de corriente, por lo que ya no tiene sentido calcular las corrientes ideales con el modelo.

Si se ignora la influencia de la carga imagen en el modelo, se puede obtener un ajuste excelente (no mostrado) de la curvas $I-V$ en directa, similar al observado en la figura 3.24(a), obteniéndose valores de la altura de la barrera y el factor de idealidad diferentes, ϕ_B^{eff} y η^{eff} respectivamente, expresados como parámetros efectivos [mostrados en la figura 3.25 como el caso NoIC-EP (sin carga imagen y con los parámetros efectivos)]. Como cabe esperar, ϕ_B^{eff} es sistemáticamente menor que ϕ_B para alcanzar el mismo nivel de corriente en ausencia del descenso de la altura de la barrera por la carga imagen. Por otro lado, η^{eff} , en el rango de $T > 200$ K, fluctúa entre 1.05-1.10, mostrando una desviación ligeramente mayor de la idealidad que cuando se considera la carga imagen. Finalmente, en la figura 3.25 también se ha representado para su comparación la altura de la barrera obtenida de las curvas $C-V$. Los valores son mayores que los obtenidos con las curvas $I-V$, como se ha encontrado en varias tecnologías [111, 112], incluyendo GaN [113], y típicamente es atribuido a interfaces no ideales (inhomogeneidades, cargas en la interfaz, etc.) [111].

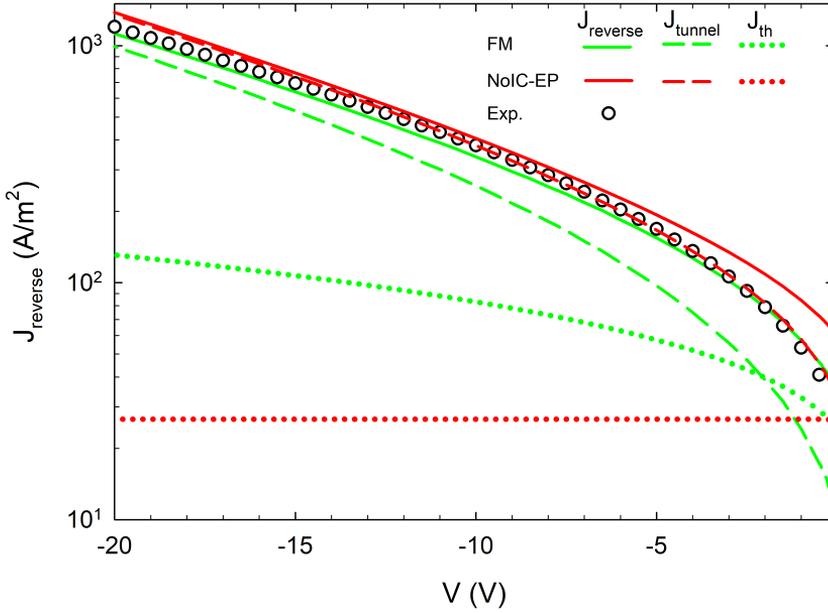


Figura 3.26: Densidad de corriente en inversa obtenida con el modelo incluyendo carga imagen (FM, líneas verdes) y sin carga imagen usando los parámetros efectivos (NoIC-EP, líneas rojas) comparada con las medidas experimentales (círculos). Se representan las dos contribuciones ideales, corriente túnel (líneas discontinuas) y emisión termoiónica (líneas punteadas), así como la corriente total en inversa (líneas continuas). $T=475$ K.

A pesar del excelente ajuste obtenido en directa para ambos, el modelo completo (denotado como FM) y el caso que ignora los efectos de carga imagen pero usa los parámetros efectivos (denotado como NoIC-EP), únicamente el modelo completo es capaz de reproducir el comportamiento del diodo en inversa, especialmente a voltajes bajos, como se muestra en la figura 3.26. Para comparar ambos, se han llevado a cabo los cálculos a 475 K, temperatura a la cual ya se ha demostrado que el comportamiento del diodo es prácticamente ideal y que el FM es capaz de reproducir los valores medidos. En la figura, las medidas se comparan con la corriente total en inversa ($J_{reverse}$) obtenida con ambos modelos. Se muestran también las contribuciones termoiónica (J_{th}) y túnel (J_{tunnel}). En ausencia de carga imagen, el caso NoIC-EP proporciona el comportamiento esperado para J_{th} , independiente de la polarización, cuyo valor es despreciable frente a J_{tunnel} en todo el rango de voltaje. En el caso del FM, J_{th} , además de ser mayor debido a la bajada de la altura de la barrera, aumenta con el voltaje en inversa, como corresponde a un mayor campo eléctrico en la superficie. Por otro lado, J_{th} es comparable o incluso mayor que J_{tunnel} para voltajes bajos. En cuanto a la corriente J_{tunnel} , es considerablemente mayor en el caso NoIC-EP, principalmente

a valores bajos de voltaje en inversa debido a que la barrera de energía es más estrecha [ver figura 3.27(b)]. La diferencia disminuye a medida que se aumenta el voltaje debido a que tiene lugar una inyección más significativa de electrones a energías más bajas no tan cerca del máximo de la barrera. Como resultado de estas diferencias, la corriente total se sobrestima en el caso NoIC-EP, principalmente a voltajes bajos. Se puede concluir que es necesario utilizar el FM incluyendo la carga imagen para reproducir de manera correcta la corriente en inversa.

Para entender el papel fundamental que juega la bajada de la altura de la barrera asociada al efecto de la carga imagen, y explotar el modelo para proporcionar un estudio preciso de los procesos de inyección en inversa, en la figura 3.27 hemos comparado, para una temperatura de 475 K y una polarización de -20 V, los detalles de la inyección de electrones en función de la energía y la posición para tres casos: (i) incluyendo los efectos de carga imagen (FM); (ii) sin incluir carga imagen pero usando los mismos parámetros que en el caso FM (caso NoIC); y (iii) sin incluir carga imagen pero usando los parámetros efectivos (caso NoIC-EP). Mientras que los casos (i) y (iii) proporcionan resultados similares para la corriente total en inversa (1.12×10^3 y 1.38×10^3 A/m², respectivamente (figura 3.26), el caso (ii), al considerar una barrera demasiado alta, lógicamente subestima la corriente (0.34×10^3 A/m²).

La figura 3.27(b) muestra la forma de la banda de conducción para cada uno de los casos estudiados. A esta temperatura, $e\phi_B=0.940$ eV y $e\phi_B^{eff}=0.882$ eV, y para un voltaje de -20 V, $e\Delta\phi_B=0.123$ eV. Por lo tanto, el máximo de la barrera ε_{Cmax} en el caso del FM es $e(\phi_B - \Delta\phi_B)=0.817$ eV. Como se esperaba, $e\phi_B^{eff}$ toma un valor intermedio entre $e\phi_B$ y $e(\phi_B - \Delta\phi_B)$. La figura 3.27(a) muestra la corriente inyectada por unidad de energía $J(\varepsilon)$, junto con el coeficiente de transmisión $T_C(\varepsilon)$ y la tasa temporal de electrones incidentes $N_m(\varepsilon)$. Para las energías mayores que ε_{Cmax} , $T_C = 1$, correspondiendo con el rango de emisión termoiónica, donde, como se espera, $J(\varepsilon)$ coincide en los tres casos. Para esta polarización, la inyección túnel tiene lugar principalmente a energías que cumplen que $\varepsilon - \varepsilon_{Fm} \gg k_B T$, por lo que $N_m(\varepsilon)$ (línea verde) muestra un comportamiento exponencial acorde a la ecuación 3.12. Es destacable que la energía de los electrones inyectados por túnel es mayor en el FM, hecho que puede ser importante para el cálculo preciso del voltaje de ruptura (energías mayores generan antes la ionización por impacto y la avalancha). Finalmente, en la figura 3.27(c) se han representado el coeficiente de transmisión y la corriente túnel por unidad de longitud en función de la distancia a la interfaz metal-semiconductor. El coeficiente de transmisión de los dos casos sin carga imagen es exactamente el mismo, ya que la barrera, desde el punto de vista de los portadores inyectados en una posición dada, es exactamente la misma en ambos casos. Como se observa, para este voltaje aplicado la inyección túnel tiene lugar fundamentalmente a lo largo de los primeros

5-6 nm desde la interfaz, siendo ligeramente más próxima al metal en el caso en el que se considera la carga imagen.

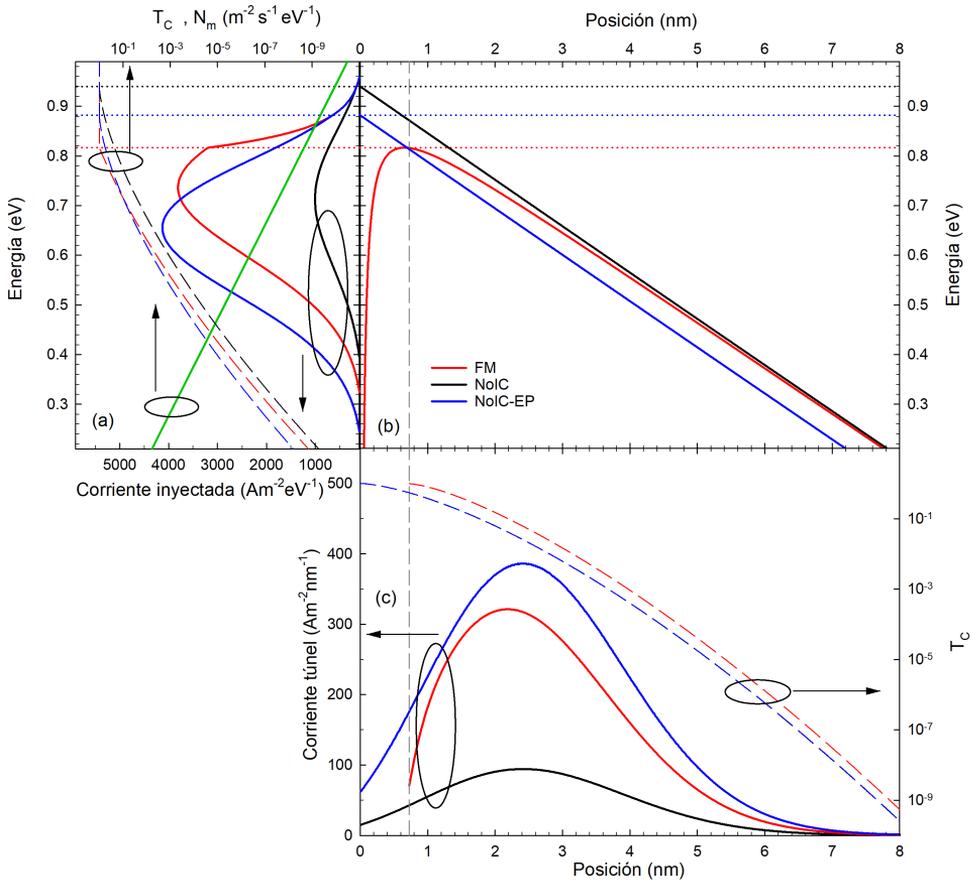


Figura 3.27: Comparación de los tres casos estudiados para $T=475\text{ K}$ y $V=-20\text{ V}$: (i) incluyendo carga imagen (FM, líneas rojas), (ii) sin carga imagen y usando los mismos parámetros que en el FM (NoIC, líneas negras) y (iii) sin carga imagen pero usando los parámetros efectivos (NoIC-EP, líneas azules). (a) Corriente inyectada (líneas continuas), coeficiente de transmisión (líneas discontinuas) y tasa temporal de electrones incidentes en la barrera (ecuación 3.12, línea verde) en función de la energía; (b) banda de conducción y (c) corriente túnel (líneas continuas) y coeficiente de transmisión (líneas discontinuas) en función de la distancia desde la interfaz metal-semiconductor. Las líneas punteadas horizontales en (a) y (b) indican el máximo de la barrera en cada caso, es decir, la energía que separa la inyección túnel y termoiónica. La línea discontinua vertical en (b) y (c) indica la posición del máximo de la barrera en el caso del FM.

Otro test para verificar nuestro modelo es la comparación con los modelos analíticos existentes, cuya validez está restringida a distintos rangos del campo eléctrico superficial, como por ejemplo el de Murphy y Good [51] y el de Padovani y Stratton [52]. Ninguno de estos modelos coincide exactamente con nuestro modelo FM, debido a que Padovani y Stratton ignoran los efectos de carga imagen (su modelo se corresponde con nuestro caso NoIC-EP) y Murphy y Good ignora el efecto del dopaje (tercer término de la ecuación 3.8). Nuestro modelo, considerando los términos apropiados, reproduce de manera correcta los resultados de ambos cálculos analíticos, como se muestra en la figura 3.28 para el caso del de Murphy y Good a 300 y 475 K.

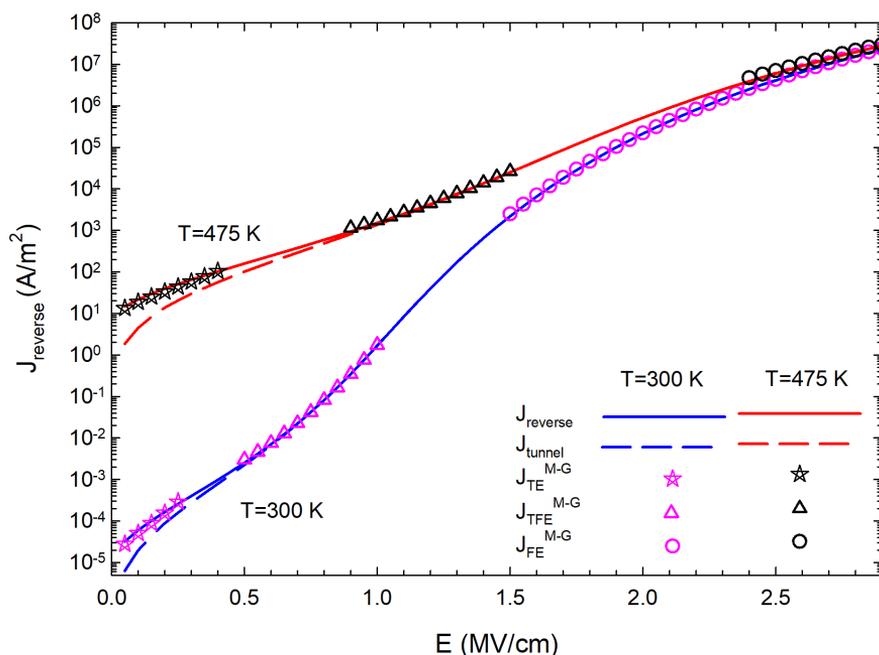


Figura 3.28: Densidad de corriente en función del campo eléctrico en la superficie obtenida con nuestro modelo numérico (líneas continuas, corriente total; líneas discontinuas, corriente túnel) y por el modelo analítico de Murphy y Good (símbolos) para dos temperaturas, $T=300\text{ K}$ (azul) y $T=475\text{ K}$ (rojo). Los resultados del modelo de Murphy y Good se han representado en el rango de validez correspondiente a los diferentes regímenes de corriente: emisión termiónica (TE, estrellas), emisión termiónica por campo (TFE, triángulos) y emisión por campo (FE, círculos).

Representamos la corriente total y la túnel calculadas con nuestro modelo excluyendo la influencia del dopaje (que podrá ser importante para SBDs altamente dopados orientados a aplicaciones de ultra alta potencia). Para los valores más bajos

del campo eléctrico, la corriente de emisión termoiónica de Murphy y Good (J_{TE}^{M-G}), la cual a pesar de su nombre incluye también la contribución túnel, es reproducida correctamente por la corriente total obtenida con nuestro modelo. Para campos eléctricos intermedios, nuestro modelo coincide con la corriente de emisión termoiónica por campo de Murphy y Good (J_{TFE}^{M-G}). Por último, para los campos eléctricos altos, cuando la inyección de electrones tiene lugar principalmente cerca del nivel de Fermi del metal, nuestro modelo ajusta la corriente analítica de emisión por campo (J_{FE}^{M-G}). Como se observa, cuanto menor es la temperatura, menores son los campos eléctricos para los cuales la TFE y la TE son dominantes.

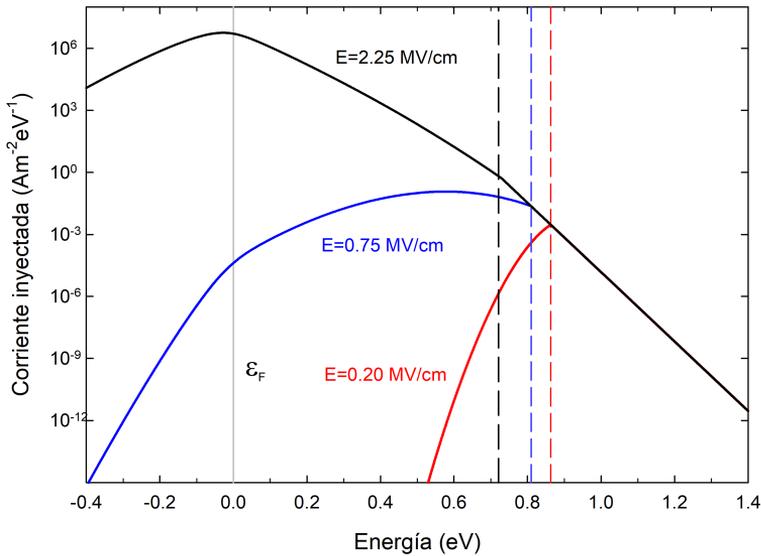


Figura 3.29: Corriente inyectada en función de la energía para tres campos eléctricos de superficie distintos a 300 K. La línea vertical punteada de color gris indica el nivel de Fermi y las líneas discontinuas la energía correspondiente al máximo de la barrera para cada caso.

Para confirmar que la inyección túnel se produce en las regiones de energía esperadas cuando se consigue un buen acuerdo entre nuestro modelo y el de Murphy y Good, en la figura 3.29 se muestra la corriente inyectada en función de la energía a $T=300$ K para campos eléctricos de superficie de 0.20, 0.75 y 2.25 MV/cm, correspondientes a las regiones de ajuste con las corrientes TE, TFE y FE, respectivamente. Como se puede observar, para 0.20 MV/cm, incluso teniendo algo de inyección túnel, la contribución principal a la corriente es la emisión termoiónica por encima de la barrera, como se espera en el régimen TE; para 0.75 MV/cm, el túnel ya es dominante y la inyección se produce cerca del máximo de la barrera, como corresponde con el

régimen TFE; y para 2.25 MV/cm está localizada en torno al nivel de Fermi, como ocurre en el régimen FE.

Una vez que hemos realizado este estudio para validar nuestro modelo, podremos estimar la corriente ideal en inversa debida a las dos contribuciones mencionadas, emisión termoiónica y túnel. El exceso de corriente medido con respecto a la corriente ideal esperada en inversa que se observa en la figura 3.24(b) para temperaturas por debajo de 425 K, indica la presencia de otros mecanismos de corriente de pérdidas. En dicha figura se representan únicamente las curvas del modelo (líneas discontinuas) hasta 300 K, ya que en este diodo por debajo de esta temperatura la corriente ideal es mucho menor que la experimental y por tanto puede considerarse despreciable. De esta manera, podremos estimar la corriente debida a otros mecanismos. Para $T > 300$ K se calcula como la diferencia entre la corriente experimental y las dos contribuciones ideales a la corriente calculadas con nuestro modelo, emisión termoiónica y túnel, $J_{Exp} - J_{th} - J_{tunnel}$. Mientras que para $T < 300$ K las corrientes ideales son despreciables y se considera que la corriente asociada a mecanismos no ideales es la corriente experimental, J_{Exp} .

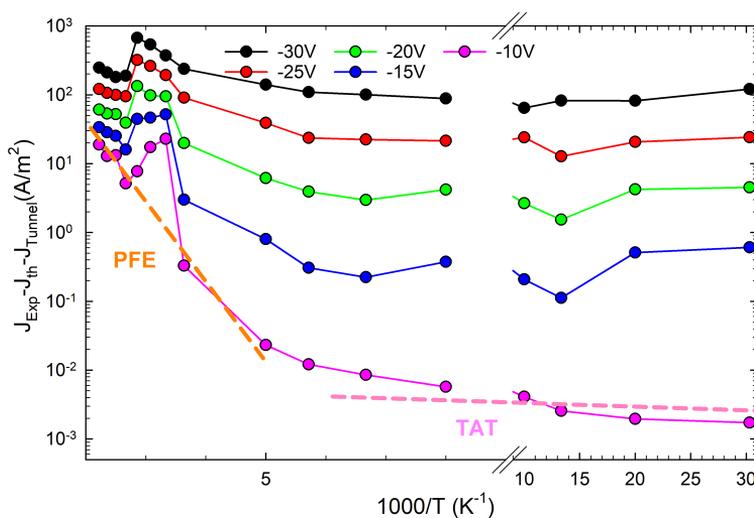


Figura 3.30: Exceso de densidad de corriente en inversa con respecto las contribuciones ideales en función de $1/T$ (para todas las temperaturas, menos $T=475$ K) para diferentes valores de voltaje en inversa.

En la figura 3.30 se muestra la corriente no ideal frente a $1/T$ para todo el rango de temperatura (excepto $T=475$ K, ya que como se ha mostrado en la figura 3.24 exhibe un comportamiento ideal), y para diferentes valores de voltaje (desde -10 V hasta -30 V). El exceso de corriente aumenta con la polarización en inversa. Además, se

observan dos comportamientos diferenciados con la temperatura: para temperaturas altas, el exceso de corriente presenta una dependencia lineal con T , mientras que a temperaturas bajas se obtiene un valor constante, independiente de T .

En primer lugar, centrándonos en el rango de altas temperaturas, por el tipo de dependencia con T , este exceso se podría asociar a la emisión Poole-Frenkel (PFE) desde un estado dentro del gap, cuya corriente viene dada por la siguiente expresión [38]

$$J_{PFE} \propto E \exp\left(\frac{-e(\phi_t - \sqrt{qE/\pi\kappa_{SC}})}{k_B T}\right), \quad (3.21)$$

donde ϕ_t es la energía del estado y E el campo eléctrico superficial. Nótese que con un ajuste lineal (a E constante) de $\ln J$ frente a $1/T$ se puede obtener ϕ_t a partir de la pendiente. En este caso se ha realizado este ajuste para dos voltajes distintos, -10 V y -25 V, ver figura 3.31. La energía del estado ϕ_t obtenida es similar, 0.21 y 0.26 eV, respectivamente.

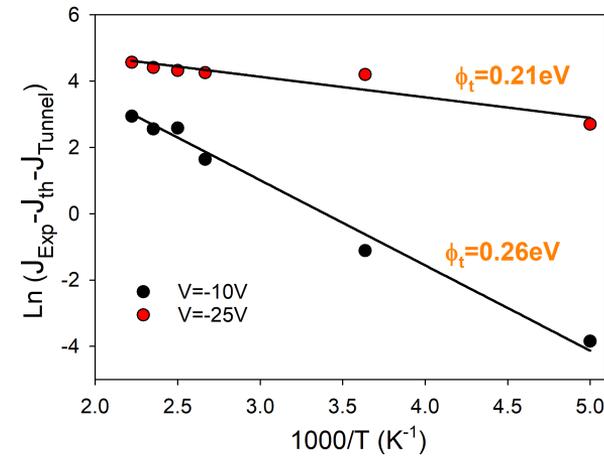


Figura 3.31: Logaritmo neperiano del exceso de densidad de corriente en inversa con respecto las contribuciones ideales en función de $1/T$ para dos valores de voltaje, -10 V y -25 V, así como ajustes correspondientes para la emisión de Poole-Frenkel (ver ecuación 3.21).

Volviendo a la figura 3.30, hay un rango de temperaturas intermedias donde se observa una cierta dispersión, una posible explicación sería la presencia de defectos en la interfaz.

Por último, en el rango de temperaturas bajas, como hemos mencionado, el exceso de corriente es independiente de T , lo que indica que predomina un mecanismo distinto. En este caso se va a estudiar la presencia de trampas que favorecen el túnel.

La corriente asociada al mecanismo de túnel asistido por trampas (TAT) viene dada por la ecuación [38]

$$J_{TAT} \propto \exp\left(\frac{-4\sqrt{2em^*}\phi_t^{3/2}}{3\hbar E}\right). \quad (3.22)$$

Para el TAT representamos el logaritmo del exceso de densidad de corriente frente al inverso del campo, como se muestra en la figura 3.32(a) para dos temperaturas, 100 K y 200 K, observando una dependencia lineal. Esta dependencia indica que el mecanismo que genera este exceso de corriente puede ser el túnel asistido por trampas (ver ecuación 3.22). De la pendiente de dicha representación podemos identificar la energía del nivel de la trampa, ϕ_t , el cual se ha representado en función de la temperatura en la figura 3.32(b). Se observa que los valores obtenidos para diferentes temperaturas son prácticamente iguales, en torno a 0.65 eV.

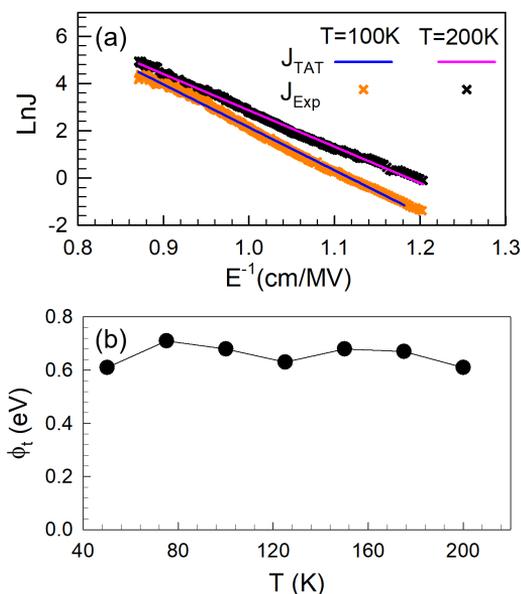


Figura 3.32: (a) Logaritmo neperiano del exceso de densidad de corriente en inversa con respecto a las contribuciones ideales en función de $1/E$ para 100 K (símbolos naranjas) y 200 K (símbolos negros). (b) Energía del nivel de la trampa calculada en función de la temperatura.

3.5.2. Run 2

En esta sección se va a presentar un estudio similar al llevado a cabo en la oblea de CRHEA del Run 1, pero en la oblea del Run 2. A diferencia de la anterior, esta oblea se ha crecido sobre zafiro. Se han medido tanto las características $I-V$ como las curvas $C-V$ en función de la temperatura, desde 33 hasta 475 K, en dispositivos con distinto diámetro. Analizamos el de $221.3 \mu\text{m}$, al igual que para el Run 1. Por último se han realizado algunas medidas pulsadas, principalmente a bajas temperaturas, como se mostrará al final de esta sección.

3.5.2.1. Características $C-V-T$

En primer lugar es necesario medir las características $C-V-T$ para poder extraer el dopaje de la *epilayer* N_D y el potencial de contacto V_B . El montaje experimental utilizado es el mostrado en la figura 3.6, pero haciendo uso de la mesa criogénica CRX-VF, en vez de la mesa Cascade M-150. Otro parámetro que es interesante conocer en los diodos Schottky es la capacidad normalizada (por la superficie) para polarización cero (valor utilizado típicamente para la comparación de estos diodos [115]).

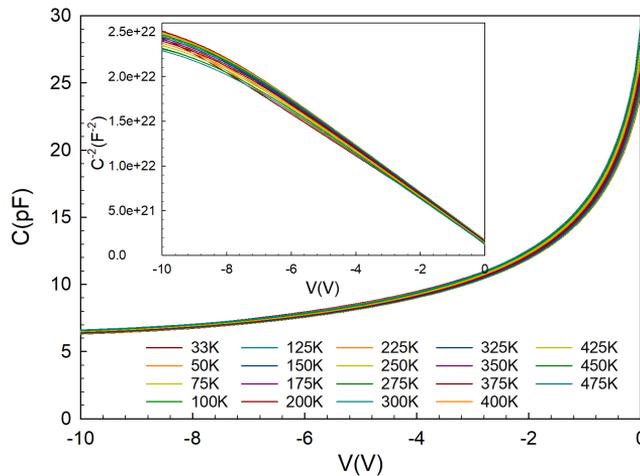


Figura 3.33: Características $C-V$ medidas para temperaturas desde 33 hasta 475 K en un diodo de $221 \mu\text{m}$ de diámetro sobre la oblea del Run 2. *Inset:* Representación del inverso de la capacidad al cuadrado en función del voltaje para todas las temperaturas, usada para el cálculo de N_D y V_B .

En la figura 3.33 se muestra la capacidad en función del voltaje para cada una de las temperaturas. Como cabía esperar, no existe mucha dispersión. En el *inset* se ha representado el inverso de la capacidad (normalizada por la superficie) al cuadrado

frente al voltaje, representación que ha sido usada para realizar los ajustes lineales y extraer el dopaje de la *epilayer* y el potencial de contacto, a partir de los cuales podemos calcular la altura de la barrera. Para este ajuste nos quedamos con la zona más lineal, ya que a partir de -8 V las líneas comienzan a curvarse ligeramente, lo que puede indicar que la amplitud de la señal establecida para las medidas no es la más adecuada. Se ha descartado que ese hecho se deba al vaciamiento completo de la *epilayer*, lo cual ocurría para voltajes ligeramente más elevados (en torno a -14 V).

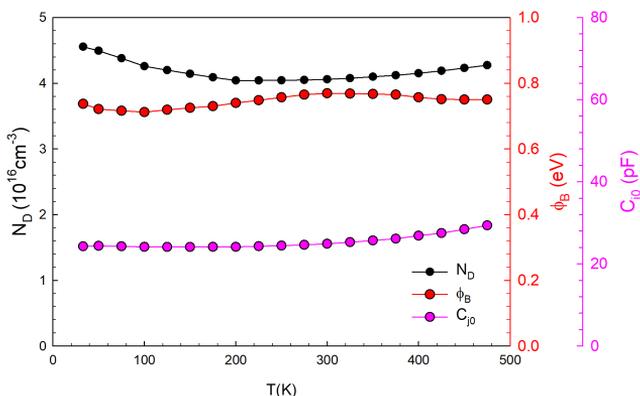


Figura 3.34: Valores de la capacidad obtenidos para la polarización cero (C_{j0}), del dopaje de la *epilayer* (N_D) y de la altura de la barrera (ϕ_B) en función de la temperatura.

En la figura 3.34 se muestran, en función de la temperatura, los valores de la capacidad para polarización cero (círculos rosas), altura de la barrera (círculos rojos) y del dopaje (círculos negros). Fijándonos en el dopaje, cabe resaltar que los valores obtenidos (ligeramente menores que el valor nominal $5 \times 10^{16}\text{ cm}^{-3}$) apenas varían con la temperatura, sin embargo se produce un cambio de tendencia para bajas temperaturas, desde 200 K, lo cual es repetitivo y se ha observado en otros dispositivos de distinto tamaño de la misma oblea. La temperatura de 200 K es clave en este dispositivo, como veremos en las características $I-V$. Este comportamiento parece indicar que para temperaturas por encima de 200 K se produce un aumento del valor estimado del dopaje debido a la ionización de impurezas. Por debajo de 200 K el valor del dopaje obtenido de las curvas $C-V$ aumenta al disminuir la temperatura, al contrario de lo que cabe esperar este comportamiento podría asociarse a la activación/ocupación de estados en la interfaz metal-semiconductor presentes en los diodos (como veremos a continuación) y no al dopaje en volumen. Además, los valores de C_{j0} (en torno a 30 pF) y ϕ_B se mantienen prácticamente constantes con la temperatura.

3.5.2.2. Características I - V - T

Las características I - V medidas (líneas continuas) para diferentes temperaturas, en el rango de 33 hasta 475 K, y realizando un doble barrido, muestran un aumento de la corriente con la temperatura (figura 3.35).

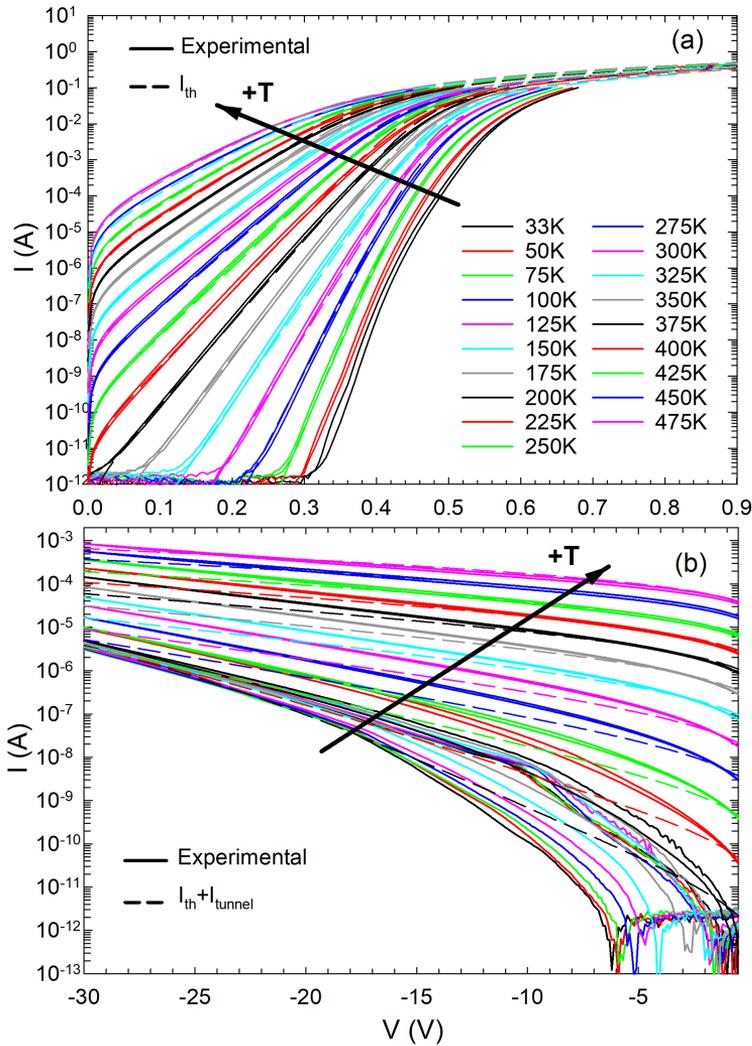


Figura 3.35: Curvas I - V para diferentes temperaturas (desde 33 hasta 475 K) medidas experimentalmente (líneas continuas) y obtenidas con el modelo (líneas discontinuas) en (a) directa y (b) inversa. El modelo incluye la emisión termoiónica y la corriente túnel (esta segunda solo en inversa) con la influencia de la carga imagen y R_s .

Junto a las medidas experimentales se ha representado la corriente ideal calculada con nuestro modelo (líneas discontinuas), tanto para (a) directa como para (b) inversa. La corriente mínima que se puede medir con el montaje experimental de la figura 3.9 es del orden de 10^{-11} A. Al igual que en el caso del diodo del Run 1, la corriente en directa calculada con nuestro modelo únicamente considera la contribución de la emisión termoiónica (J_{th}), incluyéndose la disminución de la barrera por los efectos de la carga imagen. Para las curvas $I-V$ en directa y temperaturas bajas, el Run 1 presentaba dos pendientes, mientras que el Run 2 muestra una única pendiente a excepción de la temperatura más baja, donde se puede intuir una doble pendiente. El modelo es capaz de reproducir perfectamente las curvas experimentales, obteniéndose para cada temperatura los valores de ϕ_B , η y R_s .

A diferencia del Run 1, donde las medidas se realizaron con dos puntas (incluía las resistencias de los cables), en el Run 2 se han realizado con cuatro puntas, eliminando así la influencia de los cables, y se obtiene un valor de R_s en torno a $1\ \Omega$, ver figura 3.36. En esta figura se muestran también los valores de ϕ_B y η en función de la temperatura. Como vemos, para la temperatura de 200 K, el factor de idealidad comienza a aumentar y la altura de la barrera a disminuir de forma rápida. Para las temperaturas altas se han obtenido valores de ϕ_B en el rango de 0.7-0.8 eV, mientras que el factor de idealidad es siempre menor que 1.05, indicando la buena calidad de los diodos. Para bajas temperaturas se observa un comportamiento similar al del diodo anterior, un aumento de ϕ_B y un descenso de η con el aumento de T , que habíamos comentado que se debe a la influencia de inhomogeneidades [114].

En la figura 3.36 se muestran los parámetros del caso NoIC-EP (sin carga imagen), sin embargo, como ya se ha explicado, el modelo más completo y adecuado es el que considera el efecto de la carga imagen. Por último, se han representado los valores de la barrera obtenidos a partir de las curvas $C-V$, siendo para casi todas las temperaturas mayores que los obtenidos de las curvas $I-V$. A diferencia del valor de ϕ_B extraído de las curvas $I-V$, este se mantiene prácticamente constante con T .

En la figura 3.37 se muestran las curvas experimentales sólo para temperaturas bajas, $T < 200$ K. En esta figura se observa que al realizar un doble barrido (la ida desde 0 hasta -30 V y la vuelta al contrario), aparece una histéresis que analizaremos más adelante con mayor profundidad.

Como se observa en la figura 3.35(b), para las temperaturas más altas los resultados del modelo prácticamente coinciden con las medidas experimentales y muestran un comportamiento casi ideal de los diodos (además, no hay histéresis, coinciden el trayecto de ida y de vuelta). Al haber optimizado el proceso de fabricación, en este diodo se obtienen características más ideales hasta 200 K, temperatura a partir de la cual comenzamos a observar los efectos de histéresis.

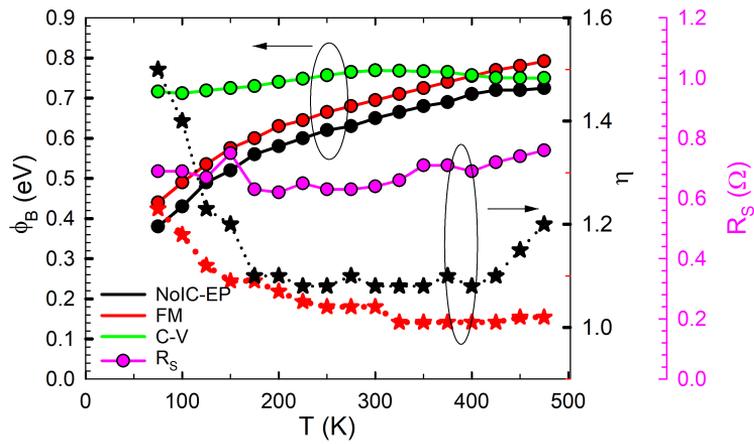


Figura 3.36: ϕ_B y η extraídas del ajuste de las medidas experimentales con el modelo completo (FM) en directa. También se muestran los valores de los parámetros efectivos extraídos de las curvas I - V en directa en ausencia del efecto de la carga imagen (NoIC-EP) y la altura de la barrera extraída de las curvas C - V . Además se representa el valor de la resistencia serie R_s (círculos rosas).

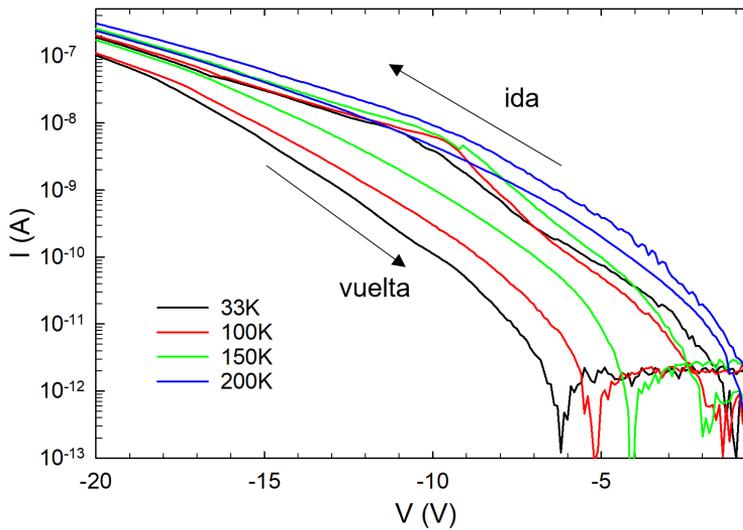


Figura 3.37: Fenómeno de histéresis presente en las curvas I - V medidas a bajas temperaturas (desde 33 hasta 200 K).

En la figura 3.38 se muestra el exceso de corriente (diferencia entre la medida experimental y la corriente ideal calculada con el modelo) en función del inverso de la temperatura para distintos valores de voltaje, tanto para el barrido de ida (círculos)

como el de vuelta (estrellas). Las temperaturas más altas, a partir de 400 K, no se representan, ya que los valores experimentales corresponden a un comportamiento prácticamente ideal del diodo. Se observan dos comportamientos claros: para valores altos de T se aprecia una dependencia con la temperatura, y para valores bajos de T el exceso de corriente es independiente de la temperatura. Además, el exceso de corriente aumenta cuando la polarización en inversa es mayor. Para bajas temperaturas, como ya hemos mencionado, se observa una histéresis, que se va reduciendo a medida que se aumenta la polarización hasta obtener valores de corriente similares en -30 V.

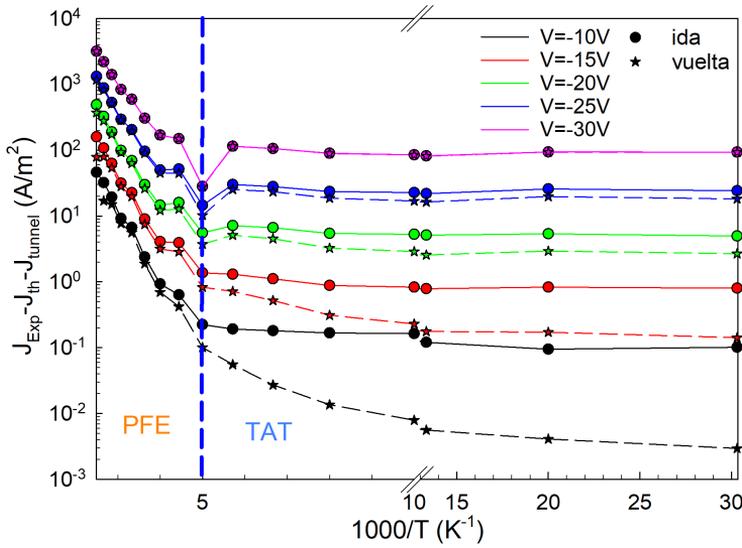


Figura 3.38: Exceso de densidad de corriente en inversa con respecto a las contribuciones ideales en función de $1/T$ (para temperaturas hasta 400 K) correspondientes a diferentes valores de voltaje en inversa, tanto a la ida (círculos) como a la vuelta (estrellas) del barrido en voltaje.

A continuación se van a estudiar los posibles mecanismos de pérdidas presentes en estos diodos. Comenzamos con las temperaturas altas, donde el exceso de corriente presenta una dependencia con la temperatura. Como se observa en la figura 3.39, la representación muestra un comportamiento lineal de $\ln J$ frente a $1/T$, por lo que el mecanismo dominante sería la emisión de Poole-Frenkel. Como a dichas temperaturas no existe una histéresis, el exceso de corriente es el mismo para la ida y la vuelta. Realizando un ajuste con la ecuación 3.21, se calcula el nivel de energía ϕ_t con respecto a la banda de conducción de la trampa a través de la cual se produce este mecanismo.

En la figura se incluyen los valores obtenidos del ajuste, que varían entre 0.17 y 0.22 eV según el voltaje V aplicado.

Por otro lado, para las temperaturas bajas, donde el exceso de corriente es constante y por lo tanto independiente de la temperatura, se va a estudiar el mecanismo de túnel asistido por trampas. Nótese, que partiendo de una situación donde la muestra ha sido iluminada, en el ciclo de histéresis la corriente a la ida es mayor que a la vuelta, véase la figura 3.37.

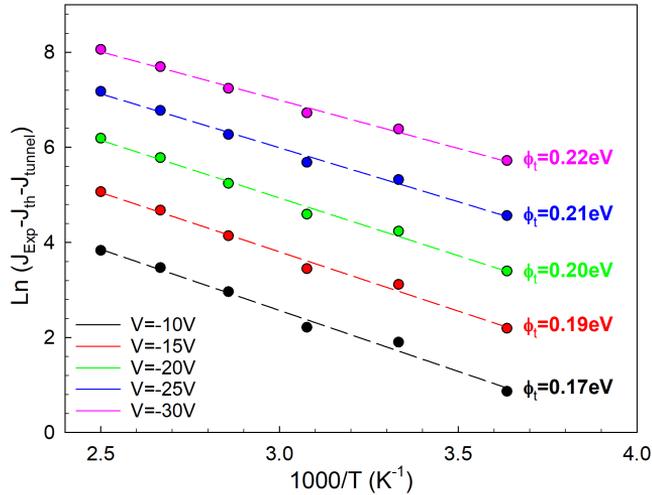


Figura 3.39: Logaritmo neperiano del exceso de densidad de corriente en inversa con respecto a las contribuciones ideales en función de $1/T$ para distintos valores de voltaje (círculos), desde -10 V hasta -30 V, así como ajustes correspondientes a la emisión de Poole-Frenkel (líneas, ver ecuación 3.21).

Vamos a representar el logaritmo neperiano del exceso de corriente frente al inverso del campo eléctrico para comprobar si su dependencia es lineal. En la figura 3.40 se muestra la curva experimental en color negro para (a) 33 K y (b) 100 K, donde se observan dos pendientes bien diferenciadas, una para voltajes bajos en el barrido de ida y otra en el de vuelta. Este hecho nos indica la presencia de trampas con dos niveles energéticos diferentes respecto a la banda de conducción de aproximadamente 0.20 eV y 0.47 eV. Estos niveles de energía se obtienen mediante el ajuste de la ecuación 3.22. La primera trampa (color rojo) domina a voltajes bajos en el trayecto de ida, y a medida que se aumenta el voltaje, al estrechar la barrera, comienza a influir la segunda trampa (color azul), modificando la pendiente. A medida que nos desplazamos a voltajes más en inversa los estados comienzan a ocuparse. En el trayecto de vuelta domina la trampa 2, debido al llenado de estados de la trampa 1 producido en la ida.

Este hecho parece indicar que el efecto de la ocupación de la trampa 1 en la corriente es mucho más importante que el de la trampa 2 [116]. Si nos fijamos en la energía de la trampa 1 (0.2 eV), vemos que es la misma que la obtenida para el mecanismo de PFE, lo que indica que probablemente ambos mecanismos suceden a través de los mismos estados. En el caso de las temperaturas elevadas, debido al campo eléctrico y la energía térmica, los electrones son capaces de inyectarse por PFE, y para bajas temperaturas se inyectan por TAT, que es el mecanismo dominante. Todo ello conduce a pensar que para las temperaturas altas los estados están siempre llenos (produciéndose la emisión por Poole-Frenkel), mientras que a temperaturas bajas se van llenando por túnel a medida que se aplican voltajes más altos en inversa.

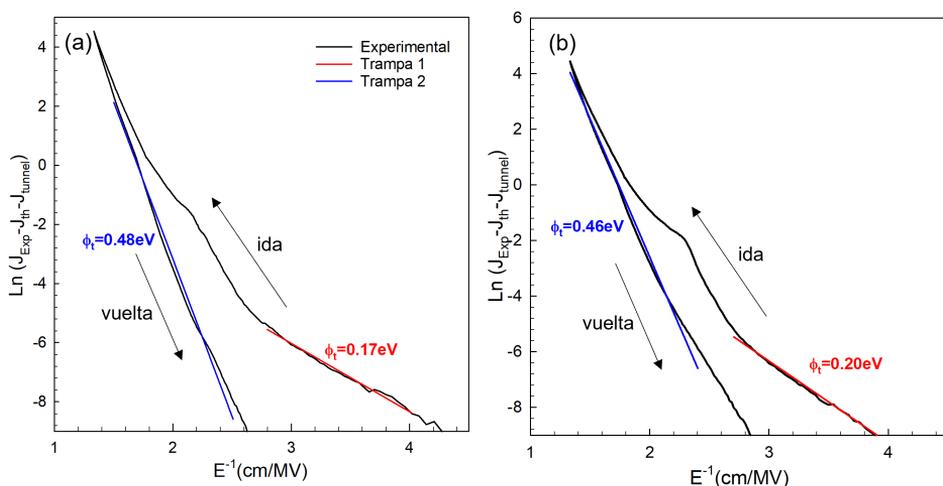


Figura 3.40: Logaritmo neperiano del exceso de densidad de corriente en inversa con respecto las contribuciones ideales en función de $1/E$ para (a) 33 K y (b) 100 K, así como ajustes correspondientes al túnel asistido por trampas (ver ecuación 3.22).

Tras el análisis de los mecanismos no ideales presentes en el diodo, se han realizado algunas medidas pulsadas para explicar el comportamiento de las trampas a bajas temperaturas. En la figura 3.41 se presenta el esquema de los pulsos aplicados. Antes de cada pulso se aplica un voltaje de base. El período del ciclo utilizado es 1 s, mientras que la anchura del pulso son 10 ms. Se ha empleado por tanto un *duty cycle* del 1%.

En la figura 3.42 se muestran las medidas DC (líneas azules) junto con las medidas pulsadas (realizándose únicamente el barrido de ida) para tres voltajes de base distintos, 0 V (líneas negras), -20 V (líneas rojas) y -30 V (líneas verdes), y $T=50$ K.

Como se observa en dicha figura, a medida que el valor del voltaje de base aumenta, la corriente disminuye, lo cual indica que las trampas se ocupan cada vez más. Para

las medidas pulsadas, el límite de precisión es 10^{-7} A. En el caso de las medidas DC, el barrido a la ida (de 0 a -30 V) muestra una corriente mayor que el barrido en DC a la vuelta (de -30 a 0 V), reflejando el mismo comportamiento.

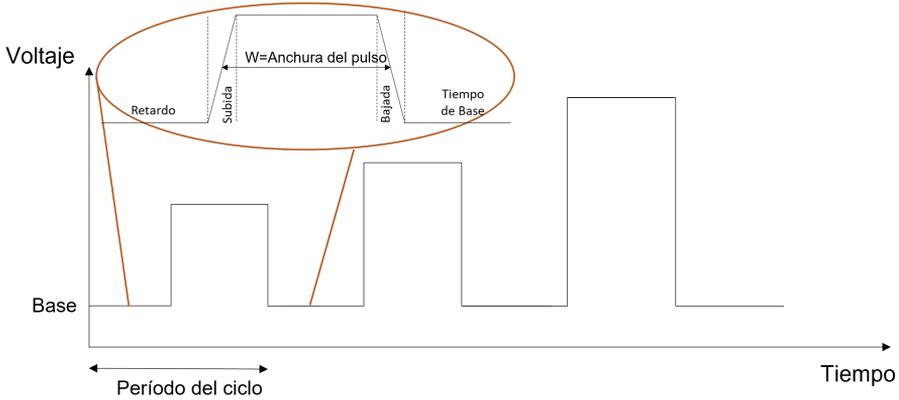


Figura 3.41: Esquema de las medidas pulsadas indicando los distintos parámetros.

Además, en las medidas de DC se han realizado diferentes pruebas. Se ha comprobado que al realizar una medida en inversa inmediatamente después de la primera, la histéresis desaparece y tanto el barrido de la ida como el de la vuelta dan la misma corriente, e igual a la corriente en la vuelta de la primera medida. Sin embargo, al iluminar la muestra con la luz del microscopio durante un tiempo suficientemente largo, se recupera la medida inicial, lo que indica que es capaz de liberar las trampas que se habían ocupado y volver al estado inicial. Además se han medido diodos con distinto diámetro, obteniéndose un comportamiento similar al presentado.

Todos los mecanismos no ideales analizados en esta sección provocan un aumento de la corriente en inversa, lo cual habitualmente da lugar a una ruptura prematura del diodo. En nuestro caso se han caracterizado los diodos hasta voltajes moderados en inversa (-30 V). Para estudiar el voltaje de ruptura, que es un parámetro clave en los diodos Schottky de GaN, se debe aplicar un voltaje en inversa elevado. Por ello, a continuación presentaremos resultados obtenidos con el simulador MC para el estudio de la ruptura, siendo fundamental la inyección túnel y los mecanismos de ionización por impacto.

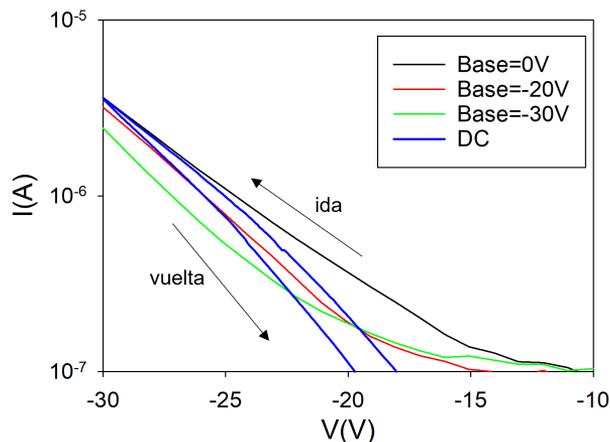


Figura 3.42: Comparativa de la medida de las curvas I - V en DC y medidas pulsadas (sólo ida) aplicando un voltaje distinto de base (0, -20 y -30V) para 50 K.

3.6. Análisis MC en condiciones de fuerte polarización en inversa

En esta sección vamos a presentar los resultados de simulaciones MC tanto 1-D como 2-D en las que se ha considerado la ionización por impacto (II), tanto para electrones como para huecos, con el objetivo de analizar el voltaje de ruptura. Por simplicidad, vamos a comenzar presentando los resultados de las simulaciones 1-D, modelo que incluye el efecto de la carga imagen. A continuación se presentarán resultados del modelo MC 2-D (sin carga imagen) sin considerar la presencia de II, para poder así estudiar la influencia del dieléctrico en la inyección túnel. Y por último, se considerarán los procesos de II en el modelo 2-D para analizar el voltaje de ruptura. En el cálculo de las corrientes para determinar la ruptura se distingue entre dos componentes, la corriente de huecos y la corriente túnel (electrones inyectados a través del contacto Schottky). Estas corrientes se calculan a partir del número de electrones que se inyectan en el contacto Schottky y el número de huecos que abandonan la estructura por dicho contacto, generados por los procesos de II.

3.6.1. Modelo 1-D

En esta sección se van a presentar los resultados de simulaciones MC en las cuales se considera o no la inyección túnel y/o los procesos de II para compararlos con la corriente ideal en inversa obtenida numéricamente usando el perfil de la barrera calculado con el modelo FD (*full depletion*). La inyección túnel utilizada en el simulador

MC 1-D se calcula con el modelo explicado en la sección 3.4 salvo que en lugar del perfil de la barrera del modelo FD se considera el perfil de la banda de conducción procedente de las simulaciones MC.

Se han realizado simulaciones para dos SBDs de GaN, formados por un semiconductor homogéneo tipo n, el contacto óhmico (a la izquierda) y el contacto Schottky (a la derecha). El primer diodo (Diodo 1) se ha analizado a $T=450$ K, tiene una longitud de $2.5 \mu\text{m}$, un dopaje de 10^{17}cm^{-3} y una barrera de 0.935eV . Estos parámetros son los correspondientes al diodo analizado del Run 1 (presentado anteriormente en este capítulo) cuando muestra un comportamiento ideal. El segundo diodo (Diodo 2) se ha analizado a $T=300$ K, tiene una longitud de $1 \mu\text{m}$, un dopaje de $4 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ y una barrera de 0.6eV . En cuanto a los parámetros de la simulación, se ha usado un paso temporal de 2.5fs y mallas de tamaño subnanométrico cerca del contacto Schottky.

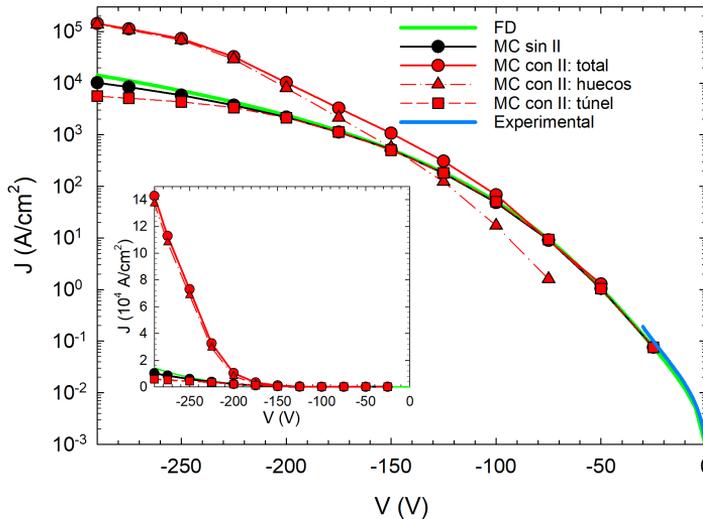


Figura 3.43: Característica $I-V$ en inversa para el Diodo 1 a 450K calculada con tres modelos: modelo FD, MC sin y MC con procesos de II. Para el modelo MC considerando la presencia de II, se representan las contribuciones túnel (electrones) y de huecos calculadas en el contacto Schottky. Además se muestra la medida experimental del diodo del Run 1. El *inset* muestra los mismos resultados pero en escala lineal para mostrar el evidente aumento de corriente.

En la figura 3.43 se muestra la curva $I-V$ simulada para el Diodo 1, a 450K , junto con la medida experimental del diodo de diámetro $221 \mu\text{m}$ del Run 1. El modelo FD asume vaciamiento total en la región próxima al metal para determinar el perfil de la barrera a través de la cual se inyectan electrones por túnel [52]. Este modelo es válido

siempre y cuando la corriente túnel tome valores relativamente bajos, de forma que la concentración de portadores en la zona de vaciamiento debida a la inyección túnel sea despreciable respecto a la concentración de impurezas. Por ello, para voltajes por debajo de -100 V todos los modelos coinciden. Para voltajes entre -100 y -175 V , a pesar de que la inyección túnel (cuadrados) coincide con el modelo FD, la corriente total (círculos) es mayor que la estimada con el modelo FD, debido al aumento de la contribución a la corriente asociada a los portadores generados por procesos de II (triángulos). Esta contribución es la dominante a partir de -175 V . Para los voltajes más altos, a pesar de que la corriente túnel es menor que la esperada con el modelo FD, la generación de electrones y huecos por la presencia de II hace que la corriente total aumente de forma pronunciada (ver el *inset*), lo cual acabaría produciendo la ruptura del diodo.

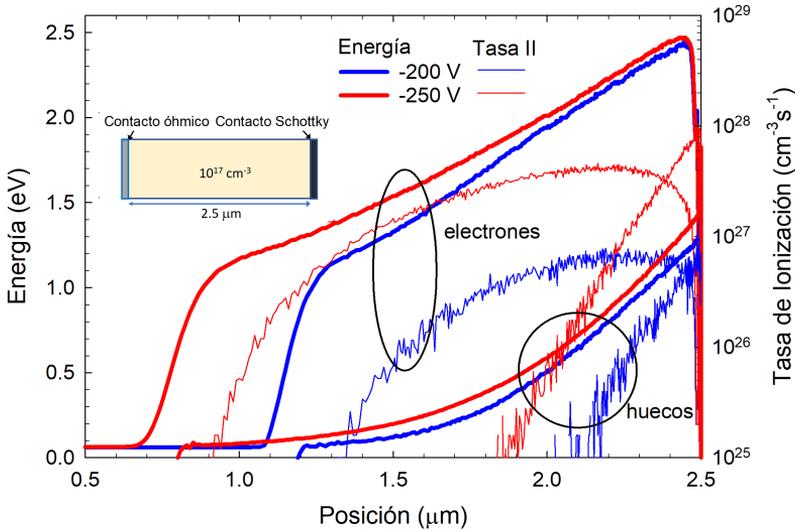


Figura 3.44: Perfiles de la energía media y tasa de II para electrones y huecos en el Diodo 1 para dos polarizaciones diferentes, -200 y -250 V . En el *inset* se muestra la estructura del diodo, indicando la posición del contacto óhmico ($x=0\ \mu\text{m}$) y del contacto Schottky ($x=2.5\ \mu\text{m}$).

La figura 3.44 muestra que para voltajes suficientemente altos los electrones inyectados por túnel a través del contacto Schottky ganan energía por el alto campo eléctrico que encuentran en el interior del dispositivo, de forma que dan lugar a procesos de II a medida que se desplazan hacia el contacto óhmico. Al aumentar el voltaje, los procesos de II son más frecuentes y se extienden sobre una región mayor. Los huecos generados ganan energía al moverse hacia el contacto Schottky para también

dar lugar a procesos de II. Nótese que la tasa de II para huecos excede la de electrones en las proximidades del contacto Schottky para los voltajes más altos (ver en la figura 3.44 las líneas rojas, correspondientes a -250 V).

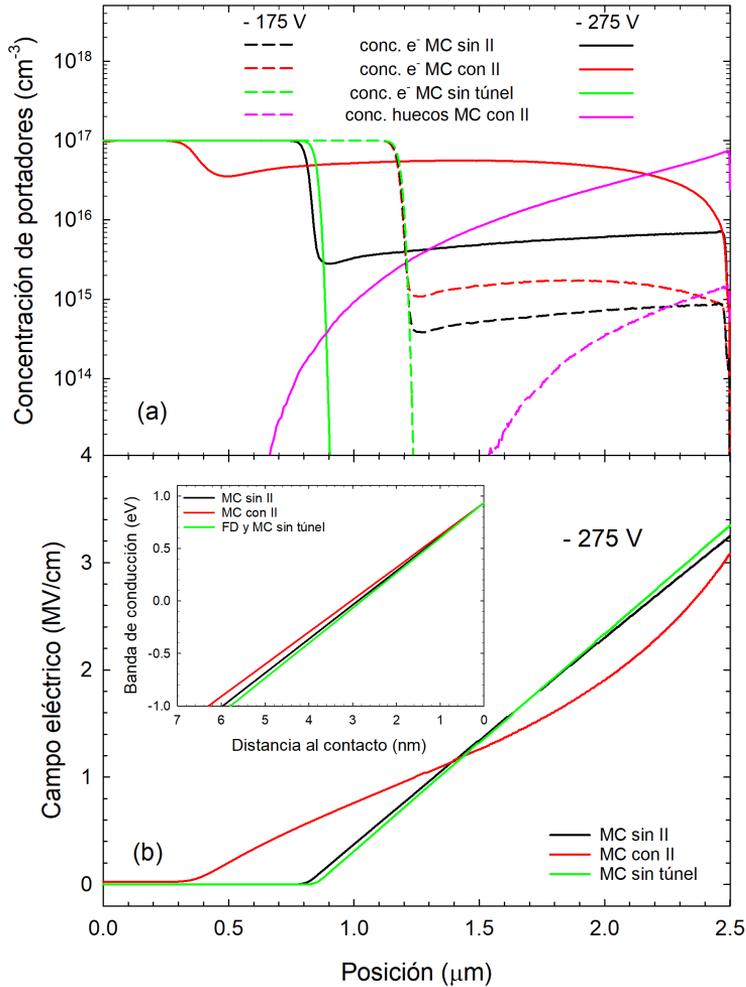


Figura 3.45: (a) Perfiles de concentración en el Diodo 1 para -175 V (líneas discontinuas) y -275 V (líneas continuas) para electrones y huecos (considerando procesos de II). Se muestran los resultados de las simulaciones con y sin procesos de II, y sin inyección túnel. (b) Perfiles del campo eléctrico para -275 V . En el *inset* en (b) se muestra la banda de conducción para los casos MC con y sin procesos de II comparado con el modelo FD, que coincide exactamente con el caso del MC sin inyección túnel.

En la figura 3.45(a) se muestran los perfiles de concentración para dos voltajes. En primer lugar, para -175 V (líneas discontinuas), se observa que la concentración

de huecos originada por procesos de II es comparable con la concentración de electrones cerca del contacto Schottky, contribuyendo así al aumento de la corriente, pero siendo ambas todavía bajas como para modificar la forma de la barrera. Sin embargo, para -275 V (líneas continuas), la concentración de electrones y huecos en la región de vaciamiento ideal es elevada, llegando a ser incluso del mismo orden que la impurificación. En la figura 3.45(b), se observa que el perfil del campo eléctrico y la barrera (ver *inset*) cambian. La barrera se hace más ancha con respecto a la del modelo FD, como corresponde a un valor más bajo del campo máximo en el contacto, y por lo tanto tiene sentido que la inyección túnel sea menor que la esperada por el modelo FD (ver figura 3.43).

La concentración de electrones calculada sin inyección túnel [líneas verdes en la figura 3.45(a)] muestra un brusco descenso en el borde de la zona de vaciamiento, que coincide con el obtenido por el modelo FD. En la misma figura, para voltajes bajos, el ancho de la zona de vaciamiento no se ve modificado ni por la inyección túnel ni por la presencia de II (líneas discontinuas), sin embargo aumenta con respecto al modelo FD para voltajes más altos (líneas continuas), cuando la concentración de portadores es tan grande que la caída de potencial deja de ser cuadrática (línea roja en la figura 3.45).

Si el voltaje en inversa continúa aumentando, se producirán más procesos de II, y el aumento de la densidad de portadores llevará a la ruptura por avalancha. Por ello, es fundamental determinar correctamente y de forma autoconsistente la inyección túnel y la concentración de portadores en la zona de vaciamiento.

En la figura 3.46 se presentan los valores de E , el campo eléctrico en la interfaz del contacto Schottky, en función del voltaje. Se observa que para voltajes por encima de -200 V el campo máximo se separa de la estimación del modelo FD. En el rango de voltaje simulado no se alcanza el campo eléctrico crítico del GaN (3.4 MV/cm) [80]. Fijándonos en los voltajes más altos del caso MC sin procesos de II, en la curva I - V (figura 3.43, círculos negros) la corriente es ligeramente menor que la del modelo FD, ya que el aumento de la concentración de portadores en la zona de vaciamiento [asociado a una mayor inyección túnel, ver líneas negras en la figura 3.45(a)] conlleva una barrera ligeramente más ancha y por lo tanto un E más pequeño. Por otro lado, en el caso en que consideramos los procesos de II, a pesar de que la corriente total es mucho mayor que la del modelo FD (ver figura 3.43) debido a la contribución de portadores generados por la presencia de II, la corriente túnel es incluso más pequeña que la del caso MC sin procesos de II, al presentar un campo máximo menor. Esto se debe a la influencia del aumento de la carga negativa asociada a los electrones generados por la presencia de II, que no es compensada por la presencia de huecos cerca del contacto Schottky.

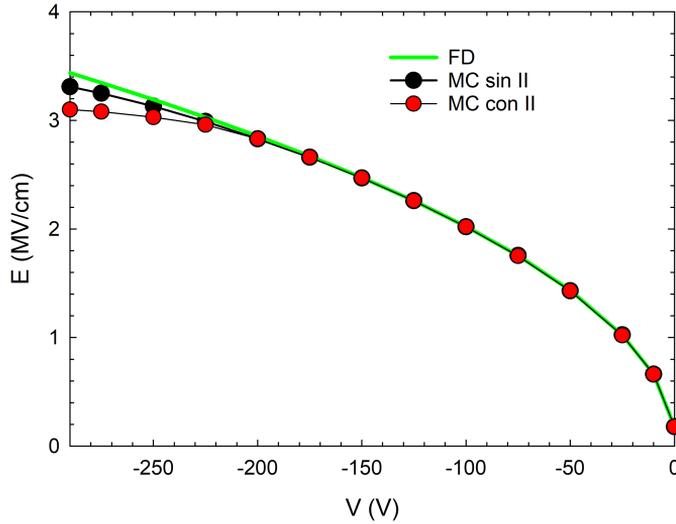


Figura 3.46: Campo eléctrico máximo (en la interfaz metal-semiconductor) en función del voltaje para el Diodo 1 para los casos MC con y sin procesos de II, y el modelo FD.

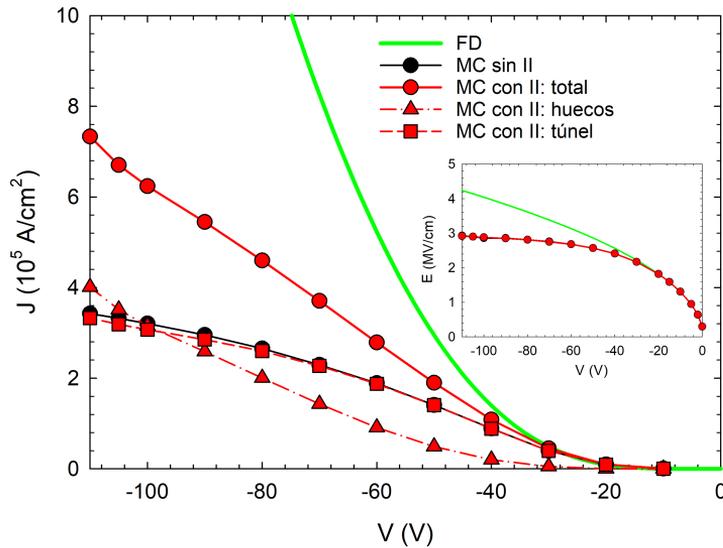


Figura 3.47: Característica I - V en inversa para el Diodo 2, calculada con tres modelos: FD, MC sin procesos de II y MC con procesos de II. Para el modelo MC con procesos de II se representan las contribuciones túnel y de huecos calculadas en el contacto Schottky. El *inset* muestra los valores máximos del campo eléctrico (en la interfaz metal-semiconductor) obtenidos con y sin procesos de II (que coinciden) comparados con los del modelo FD.

Ahora vamos a presentar el caso del Diodo 2, que corresponde a una situación física diferente. Este diodo tiene un dopaje mayor y una barrera menor, lo que desemboca en una fuerte inyección túnel (asociada a un mayor E) para voltajes menores que en el Diodo 1, por lo que se espera que los procesos de II sean menos frecuentes. Las curvas I - V simuladas se muestran en la figura 3.47. La primera diferencia con respecto al diodo anterior es que a partir de -30 V la corriente del caso MC sin procesos de II (círculos negros) es significativamente menor que la del modelo FD.

Como se muestra en los perfiles de la figura 3.48(a), correspondientes a un voltaje de -90 V, incluso para el caso MC sin procesos de II, la concentración de electrones en la zona de vaciamiento es tan alta que la barrera se ensancha con respecto al caso del modelo FD (menor E) y la corriente túnel disminuye.

La inclusión de los procesos de II, con el correspondiente aumento de la concentración de portadores, produce un cambio en el perfil del campo eléctrico a medida que se aumenta el voltaje. Sin embargo, el ancho de la barrera y E no varían, ver figura 3.48(b) y el *inset*. Nótese que, al contrario que para el Diodo 1, a pesar de aumentar la contribución a la corriente asociada a los portadores generados por los procesos de II (triángulos rojos en la figura 3.47), en ningún caso la corriente total (círculos rojos) supera la del modelo FD y no se observa una tendencia a la ruptura. Además, para los voltajes más altos, E alcanza un valor de saturación menor que el campo crítico y considerablemente menor que el del modelo FD (ver *inset* de la figura 3.47).

Cabe destacar que un factor determinante para calcular la concentración de huecos es su velocidad a alto campo (encontrándose diferentes valores en la literatura [72, 117]), puesto que cuanto más rápidos sean menor concentración habrá y por lo tanto menor será su influencia en los fenómenos observados y cambiará el rango de voltaje en el que ocurren dichos fenómenos.

Una vez se ha analizado la corriente en inversa para una estructura unidimensional, se simulan estructuras bidimensionales más realistas. En primer lugar, es importante comprobar que la inyección túnel en el modelo 2-D es consistente. Por ello se empieza con simulaciones sin considerar los procesos de II, para posteriormente incluir este mecanismo. A diferencia del modelo MC 1-D que considera que la banda de valencia está compuesta por tres valles, el modelo 2-D considera únicamente un valle por simplicidad.

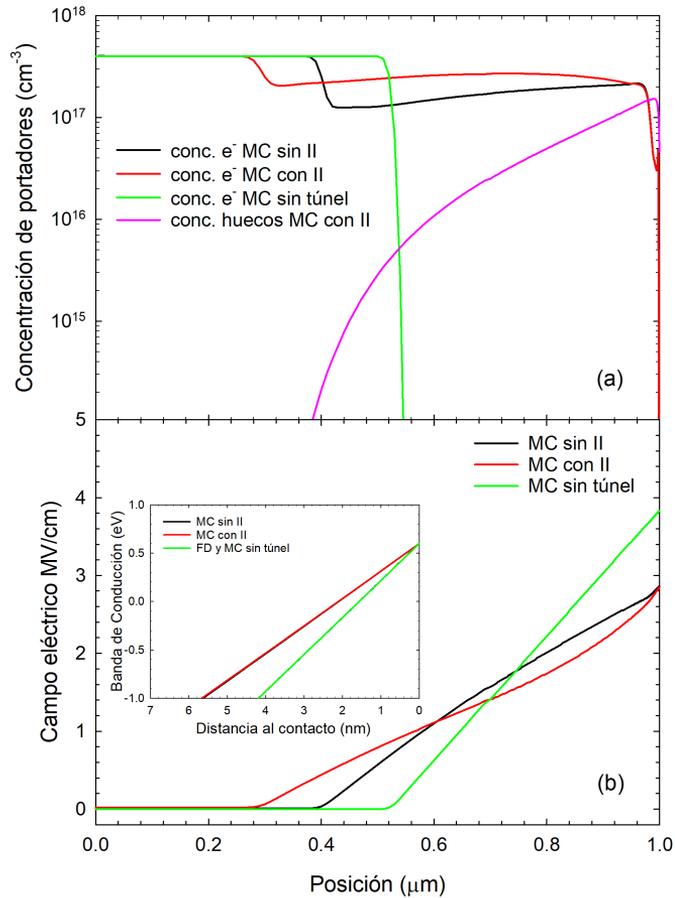


Figura 3.48: (a) Perfiles de concentración en el Diodo 2 para -90 V , para electrones y huecos (en el caso que considera II). Se muestran los resultados de las simulaciones con y sin procesos de II y sin inyección túnel. (b) Perfiles del campo eléctrico para el mismo voltaje. En el *inset* de (b) se muestra la banda de conducción para los mismos casos, donde el modelo FD coincide con el del MC sin inyección túnel.

3.6.2. Modelo 2-D sin procesos de II

Tras analizar las dos estructuras (unidimensionales) anteriores, se simula una geometría 2-D de tamaño reducido, ya que en diodos pequeños los efectos de borde son importantes. El objetivo es analizar la influencia de los efectos 2-D en el voltaje de ruptura y la importancia de la autoconsistencia entre la inyección túnel y la concentración de portadores.

Se analiza la misma estructura que en el capítulo 2, sección 2.4, usando en todos los casos el modelo de carga autoconsistente (SCCM). En todas las simulaciones se considera una barrera de 0.5 eV. Como se explico en la sección 1.3.3 del capítulo 1, en el caso del simulador MC 2-D para determinar la inyección túnel en cada valor de energía es necesario dividir las mallas en un número de subintervalos n_{sb} a partir de los cuales se calculará la energía correspondiente a cada posición. Para determinar el número de subintervalos adecuado se han realizado simulaciones hasta alcanzar un valor de la corriente constante y consistente con el modelo 1-D, estableciéndose un valor $n_{sb}=50$.

Al margen del simulador MC, se han utilizado una serie de programas adicionales para determinar la consistencia de la inyección túnel. El que denominaremos Túnel 1-D permite calcular la corriente (total, termoiónica y túnel) para un voltaje determinado mediante las ecuaciones teóricas presentadas anteriormente en la sección 3.4, considerando el modelo FD y una estructura unidimensional (homogénea en la dirección transversal). El que denominaremos Túnel 2-D, tomando como entrada un perfil de potencial de una estructura bidimensional obtenido previamente mediante una simulación MC, proporciona también la corriente.

En la figura 3.49 se muestran las curvas $I-V$ obtenidas con estos programas en un caso en el que el diodo no se ha pasivado, y por lo tanto se considera el aire como dieléctrico. La corriente obtenida con el simulador MC 2-D (en presencia de inyección túnel) es la corriente calculada con el método de Ramo-Shockley (negro); el simulador también hace un cálculo teórico de la corriente túnel (rojo). La corriente obtenida con el programa Túnel 1-D es menor que las obtenidas con el simulador MC. Sin embargo, para voltajes suficientemente altos, la inyección túnel es tan grande que los efectos 2-D dejan de ser importantes. Al utilizar el perfil de potencial obtenido con la simulación MC considerando inyección túnel, en el programa Túnel 2-D se obtiene, como era de esperar, una corriente igual a la de Ramo-Shockley. Por último, si utilizamos el perfil de potencial obtenido de la simulación MC sin túnel en el programa Túnel 2-D, se obtiene una corriente mayor que en el resto de los casos, lo cual indica que cuando se considera la inyección túnel, los electrones inyectados a través del contacto modifican la barrera, haciéndola más ancha. Esto evidencia la importancia de la autoconsistencia

entre la inyección túnel (determinada por el perfil de la barrera) y la concentración de portadores.

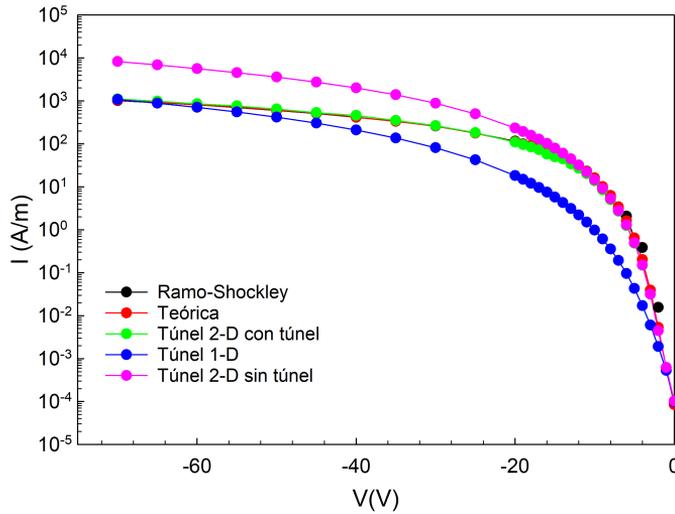


Figura 3.49: Curvas I - V simuladas sin considerar la presencia de II para varios casos. En primer lugar se representan las corrientes obtenidas de las simulaciones MC 2-D, Ramo-Shockley (negro) y el valor teórico de la corriente túnel (rojo). En azul se representa la corriente asociada a un modelo 1-D y los colores verde y rosa representan las corrientes obtenidas mediante un programa al que se le proporciona el perfil 2-D del potencial obtenido mediante las simulaciones MC 2-D considerando y sin considerar el túnel, respectivamente.

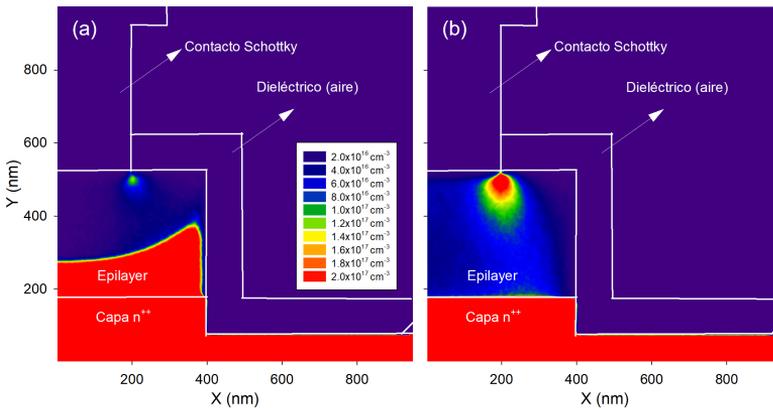


Figura 3.50: Mapas de la concentración de electrones cuando se tiene aire como dieléctrico para (a) -20 V y (b) -40 V.

En la figura 3.50 se muestran mapas de color de la concentración de electrones, siendo aire el dieléctrico simulado, para dos voltajes aplicados distintos: (a) -20 V y (b) -40 V . El color rojo indica una mayor concentración de electrones. Se observa que la inyección más significativa se produce en la zona próxima al borde del contacto Schottky, donde el campo eléctrico es mayor [35, 118, 119]. Para un voltaje aplicado de -20 V , se comienza a apreciar la inyección túnel a través del contacto cerca del borde. Para la polarización de -40 V la inyección es mucho más significativa y se extiende a la región alrededor del borde del contacto. Además, para este voltaje se vacía completamente la *epilayer*.

Se han realizado simulaciones en las que se consideran distintos dieléctricos en la pasivación, ya que, como se ha mostrado anteriormente (capítulo 2), cuanto mayor es la permitividad del dieléctrico, menor es el campo eléctrico en el borde del contacto Schottky.

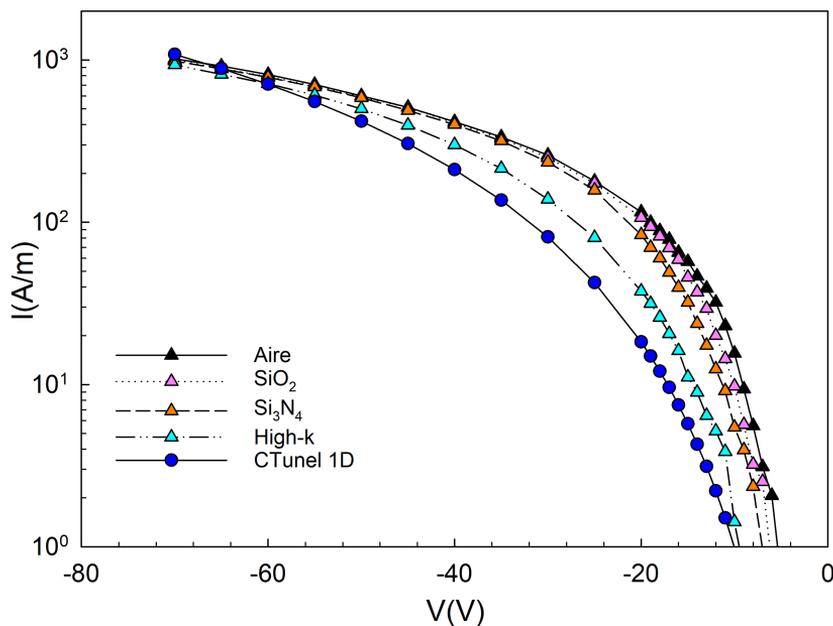


Figura 3.51: Curvas I - V simuladas con el simulador MC 2-D sin considerar los procesos de II para varios dieléctricos. Los círculos azules representan la corriente calculada con el programa Túnel 1-D.

En la figura 3.51 se muestran las curvas I - V obtenidas con el simulador MC 2-D comparadas con el programa Túnel 1-D. Para voltajes por debajo de -25 V , la corriente disminuye a medida que se aumenta la permitividad del dieléctrico. Entre -30 y -50 V , para aire, SiO_2 y Si_3N_4 se obtienen corrientes similares, lo que indica que

los efectos 2-D dejan de ser significativos, el campo es similar para los tres dieléctricos y la inyección es prácticamente igual. Por otro lado, el dieléctrico de alta permitividad aún presenta una corriente menor. Una vez que los voltajes son suficientemente altos, la *epilayer* se ha vaciado completamente, como veremos más adelante, y la inyección es mucho mayor, por lo que deja de observarse la influencia del dieléctrico, obteniéndose una corriente similar para todos ellos.

En la figura 3.52 se representa el perfil vertical del campo eléctrico en el borde del contacto Schottky ($x=200$ nm) para los cuatro dieléctricos y tres voltajes distintos: (a) -20 V, (b) -40 V y (c) -70 V. En esta gráfica observamos lo explicado anteriormente. Para el voltaje de -20 V, el perfil del campo en el borde es distinto para cada dieléctrico, y por lo tanto la corriente túnel también (ver figura 3.51). El valor del campo eléctrico en el borde disminuye (y también la corriente) a medida que aumenta la permitividad del dieléctrico (aire, SiO_2 , Si_3N_4 , high-k). En la figura 3.52(b) los tres dieléctricos de permitividad más baja dan lugar prácticamente al mismo perfil del campo en el borde, mientras que el dieléctrico de alta permitividad aún presenta valores de campo más bajos. Y, por último, para un voltaje elevado de -70 V, el campo eléctrico en la superficie es similar para los distintos tipos de pasivación, lo que supone que la inyección túnel, y por lo tanto la corriente, sean parecidas en todos los casos (véase la figura 3.51).

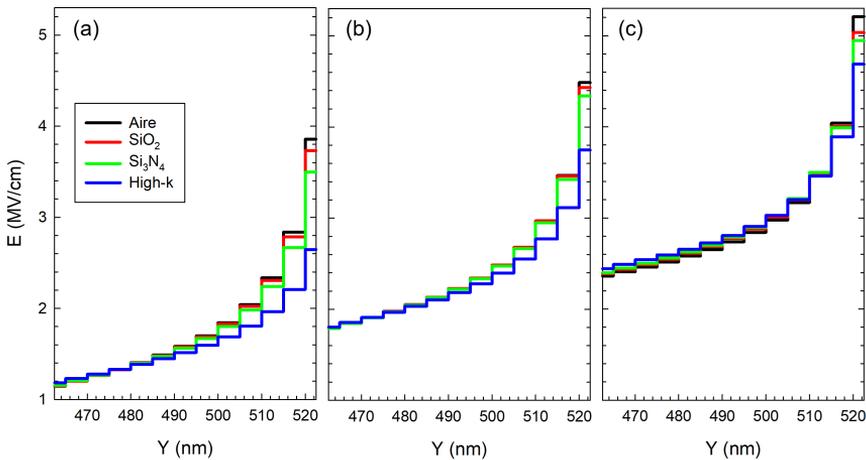


Figura 3.52: Perfiles del campo eléctrico en el borde del contacto Schottky utilizando varios dieléctricos para tres voltajes: (a) -20 V, (b) -40 V y (c) -70 V.

En la figura 3.53 se han representado los mapas de colores de la concentración de electrones para un voltaje de -30 V y los cuatro dieléctricos estudiados: (a) aire, (b) SiO_2 , (c) Si_3N_4 y (d) dieléctrico de alta permitividad. De nuevo observamos que la

inyección túnel más significativa se produce en la zona cerca del borde del contacto Schottky. A medida que aumentamos la permitividad del dieléctrico, el campo eléctrico en el borde del contacto disminuye, y por lo tanto la inyección túnel se reduce. En este caso, fijándonos en la curva $I-V$ de la figura 3.51, se ve que la corriente para los tres primeros dieléctricos es muy similar, siendo menor para el de alta permitividad. Por ello, los mapas de colores de las figuras 3.53(a), (b) y (c) son parecidos, mientras que para la figura 3.53(d) se observa una clara reducción de la inyección túnel.

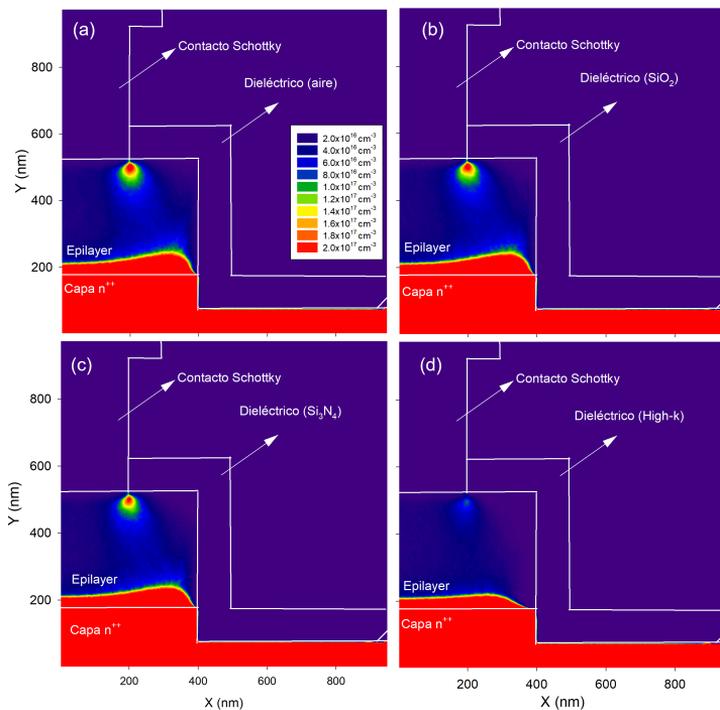


Figura 3.53: Mapas de la concentración de electrones para un voltaje de -30 V utilizando como dieléctrico (a) aire, (b) SiO_2 , (c) Si_3N_4 y (d) high-k.

3.6.3. Modelo 2-D con procesos de II

En esta sección se presentan los resultados de las simulaciones realizadas con el código MC 2-D considerando los procesos de II. Recordemos que en este caso, el modelo de la banda de valencia está formado por un único valle. En este caso, una vez se han incluido los procesos de II, únicamente se han realizado simulaciones para los casos extremos de permitividad de la capa de pasivación: dieléctrico de alta permitividad y aire (sin pasivación).

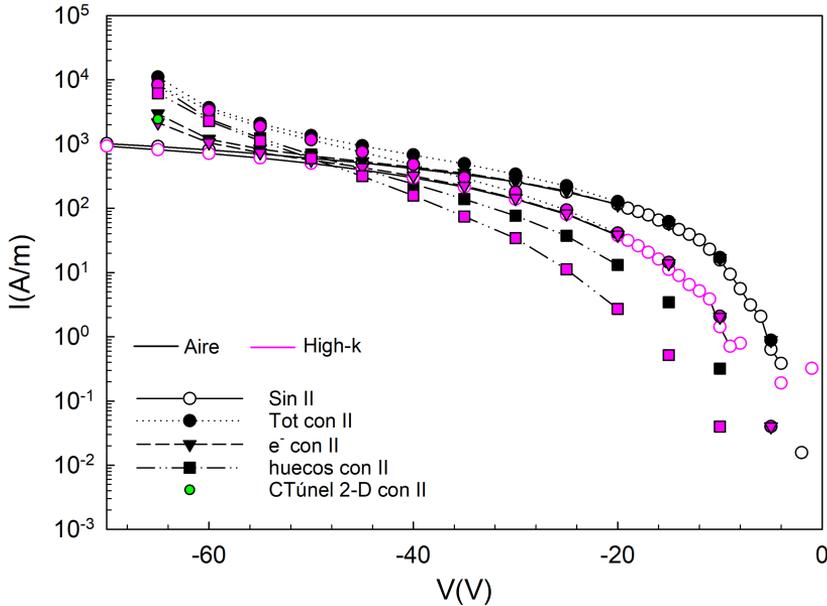


Figura 3.54: Curvas I - V obtenidas con el simulador MC 2-D con (círculos rellenos) y sin (círculos sin relleno) procesos de II para aire (negro) y el dieléctrico de alta permitividad (rosa). Se representan también las contribuciones de electrones (triángulos) y huecos (cuadrados) en el contacto Schottky. Se ha incluido un valor de la corriente calculado con el programa Túnel 2-D (círculo verde) utilizando el perfil de potencial obtenido con el código MC 2-D incluyendo procesos de II en el lado del aire que coincide exactamente con la corriente túnel usando aire como dieléctrico.

En la figura 3.54 se representan las curvas I - V obtenidas con las simulaciones MC 2-D con ionización (círculos rellenos) y sin ionización (círculos sin relleno). Se observa que la diferencia en la corriente total entre los dos dieléctricos se va reduciendo a medida que se aumenta el voltaje aplicado, hecho ya explicado en la figura 3.51. La corriente sin considerar los procesos de II tiende a saturar, mientras que considerando la presencia de II aumenta de manera pronunciada, llevando a la ruptura, la cual se identifica por la imposibilidad de alcanzar una situación estacionaria debido a un aumento indefinido del número de portadores y consecuentemente de la corriente. Para voltajes menores de -50 V la corriente de huecos es despreciable, pero para los voltajes más altos se convierte en la contribución dominante (mismo comportamiento que habíamos observado en el Diodo 1 con las simulaciones MC 1-D). Se ha comprobado que utilizando el perfil de potencial obtenido con la simulación MC 2-D en presencia de II para aire en el programa Túnel 2-D se obtiene la misma corriente túnel que con el simulador (círculo verde). Para voltajes por encima de -50 V, el aumento de los

portadores en las proximidades del contacto Schottky, especialmente de los huecos, conlleva un aumento del campo eléctrico en el borde del contacto, produciéndose una mayor inyección de electrones y por tanto mayor número de procesos de II, culminando con la ruptura del diodo.

En la figura 3.55 se han representado mapas de concentración de electrones y huecos en un diodo sin pasivar y en otro pasivado con un dieléctrico de alta permitividad para una polarización intermedia de -35 V . La inyección está localizada cerca del borde del ánodo y es claramente más significativa sin pasivación, ya que el campo eléctrico es mayor. Del mismo modo, las figuras (b) y (d) muestran que los huecos se concentran en una zona aún más pequeña, justo al borde del contacto Schottky (al ser atraídos por este). La contribución a la corriente de los huecos (cuadrados en la figura 3.54) es menor para el dieléctrico de alta permitividad como consecuencia de la menor inyección de electrones y el menor número de procesos de II.

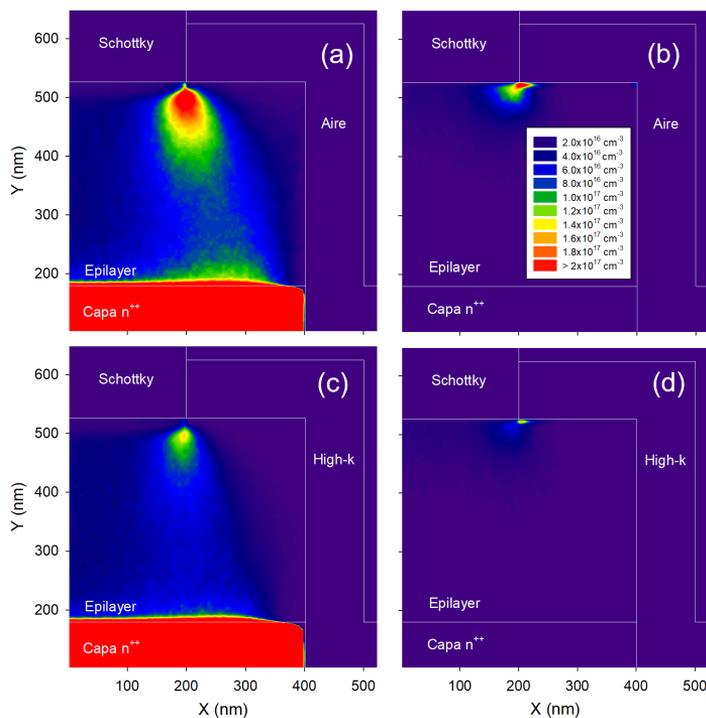


Figura 3.55: Mapas de concentración de (a) y (c) electrones y (b) y (d) huecos para una polarización en inversa de -35 V y dos dieléctricos diferentes en la capa de pasivación: (a) y (b) aire y (c) y (d) dieléctrico de alta permitividad.

Volviendo a la figura 3.54, se observa que para voltajes cercanos a la ruptura la corriente es muy similar para ambos dieléctricos, por lo que nos centraremos en el caso en el cual se utiliza aire como dieléctrico (no hay pasivación). Cerca del voltaje de ruptura aparece un aumento más pronunciado de las contribuciones de electrones y huecos a la corriente.

En la figura 3.56 se representan las tasas de II de electrones y huecos para dos polarizaciones, una intermedia de -35 V y una próxima a la ruptura de -66 V . Las tasas de II de electrones indican que hay un aumento significativo de electrones inyectados por túnel y los procesos de II de electrones aumentan. Por este motivo, la tasa de II de huecos [ver figuras (b) para -35 V y (d) para -66 V] muestra el mismo comportamiento, siendo de manera global menor que la tasa de II de electrones en ambos casos. En este diodo la *epilayer* se vacía completamente en torno a -40 V , lo que genera un campo eléctrico alto, que va a desembocar en la ruptura del diodo.

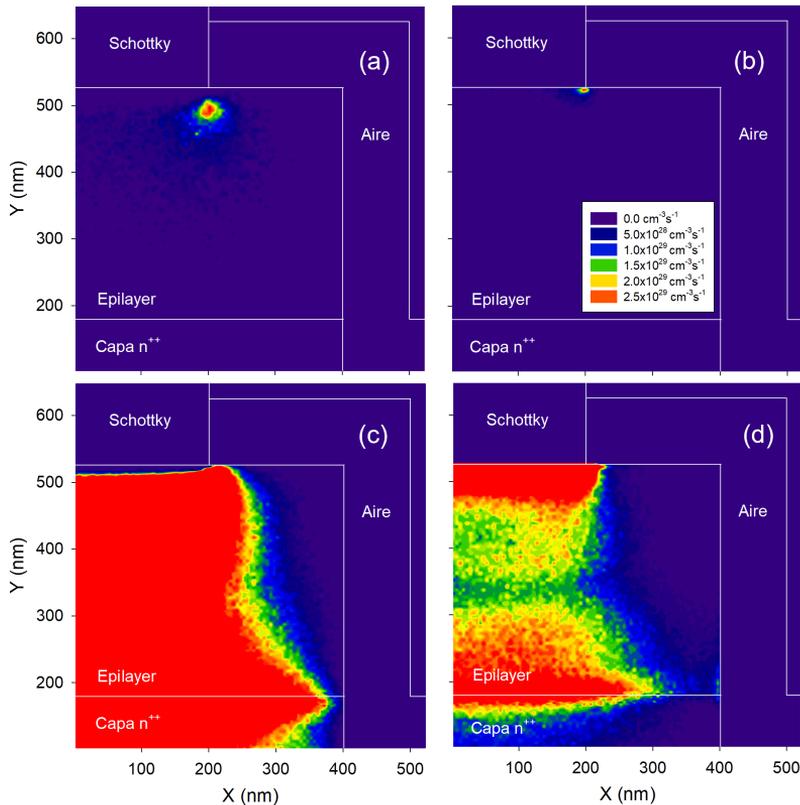


Figura 3.56: Mapas de la tasa de II sin pasivación de (a) y (c) electrones y (b) y (d) huecos para dos polarizaciones en inversa: (a) y (b) -35 V y (c) y (d) -66 V .

Por último se han realizado simulaciones para diodos sin pasivar con distintos tamaños de la *epilayer* (350 nm, 1 μm y 2 μm) y distintos dopajes (10^{17} , 3×10^{17} y $6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) con el objetivo de estudiar su influencia en el voltaje de ruptura. En la figura 3.57 se muestran las curvas I - V obtenidas mediante simulaciones realizadas con el modelo MC 2-D cuando no hay pasivación para un diodo con un espesor de la *epilayer* de 350 nm. La corriente total está representada mediante círculos, la contribución de electrones inyectados por túnel mediante triángulos y la contribución de los huecos con cuadrados. Se ha simulado el diodo para tres dopajes distintos de la *epilayer* y la ruptura se produce en voltajes en torno a 60-70 V. El voltaje de ruptura disminuye ligeramente al aumentar el de mayor dopaje, ya que el campo es mayor y por lo tanto también la inyección de electrones. Para una corriente de 10^4 A/m próxima a la ruptura, los voltajes son aproximadamente -60, -65 y -69 V, para los dopajes de 6×10^{17} , 3×10^{17} y 10^{17} cm^{-3} respectivamente. Para una *epilayer* de 350 nm se puede concluir que el voltaje de ruptura aumenta ligeramente al disminuir el dopaje. Esta geometría no es adecuada para alcanzar voltajes de ruptura elevados, ya que la *epilayer* se vacía por completo antes de que se produzca la ruptura. Cabe esperar que se puedan obtener voltajes de ruptura mayores alargando la *epilayer*, puesto que los campos eléctricos alcanzados serán menores al no vaciarse ésta por completo.

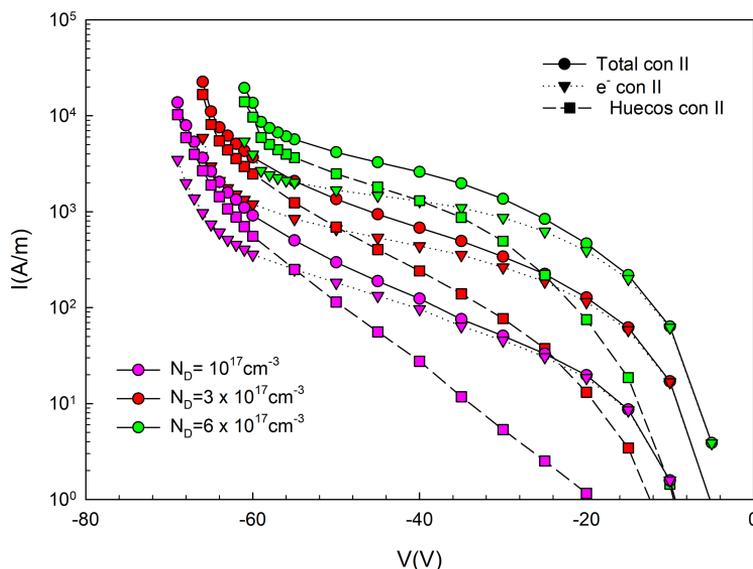


Figura 3.57: Curvas I - V obtenidas con el simulador MC 2-D con procesos de II para un diodo (sin pasivar) de 350 nm de *epilayer* y diferentes dopajes. Se han incluido también las contribuciones de electrones (triángulos) y huecos (cuadrados).

Por ello, se han simulado diodos con una *epilayer* mayor. En la figura 3.58 se muestran las curvas I - V para diodos con el mismo dopaje y distinto espesor de la *epilayer* y para un diodo con un dopaje distinto ($N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) y el mayor espesor de la *epilayer* ($W_{EP}=2 \mu\text{m}$). Comparando los diodos de mayor tamaño se observa que, reduciendo el dopaje se alcanza incluso voltajes de ruptura mayores al ser menores los campos eléctricos y haber menos procesos de II. Para un mismo dopaje, el tamaño del diodo es fundamental en el voltaje de ruptura. A medida que aumenta el espesor de la *epilayer*, el voltaje de ruptura es mayor. El diodo de mayor tamaño, como cabe esperar, tiene un voltaje de ruptura más alto y llama la atención que la corriente cerca de dicho voltaje no aumenta de manera tan pronunciada como en los más cortos.

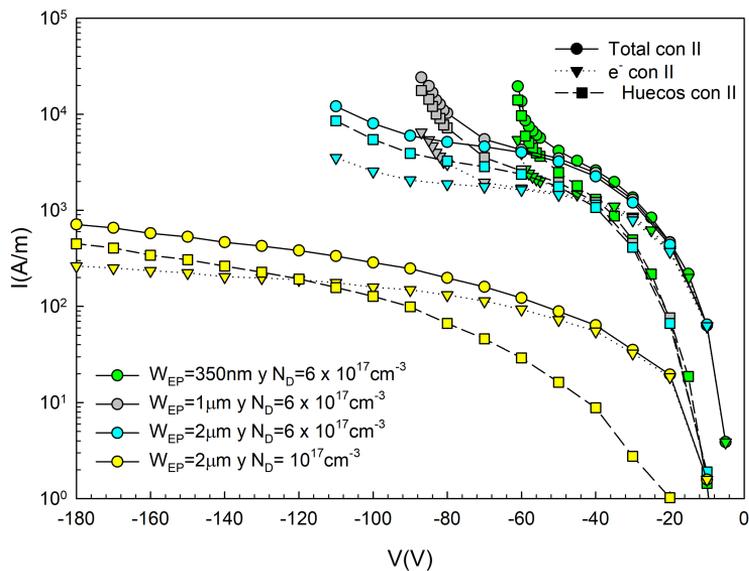


Figura 3.58: Curvas I - V obtenidas con el simulador MC 2-D con procesos de II para un diodo (sin pasivar) con distintos espesores de la *epilayer* y diferentes dopajes.

Estudiaremos en mayor profundidad los diodos de espesor 350 nm y $2 \mu\text{m}$ con el mismo dopaje ($N_D = 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). En la figura 3.59(a) se muestran los perfiles de concentración de electrones (líneas continuas finas) y huecos (líneas discontinuas) en el borde del contacto Schottky para el diodo con un espesor de la *epilayer* de 350 nm en tres puntos de polarización, -30 V (color verde), -50 V (color rojo) y -61 V (color azul). En -30 V, hay una pequeña concentración de huecos cerca del contacto que aumenta en -50 V y también para -61 V, llegando a acumularse incluso en la capa n^{++} . Por otro lado, la concentración de electrones muestra que para la polarización de -30 V no se llega a vaciar toda la *epilayer*, y la inyección de electrones por túnel hace que el vaciamiento en esa zona no sea completo. En -50 V ya se ha vaciado completamente,

pero la inyección túnel hace que la concentración de portadores aumente en toda la *epilayer*. Finalmente, en -61 V llega incluso a vaciarse parte de la capa n^{++} y la presencia de huecos cerca del contacto Schottky es muy elevada, lo que aumenta el campo en la interfaz y provoca una mayor inyección túnel que finalmente, junto con los procesos de II, desemboca en la ruptura del diodo.

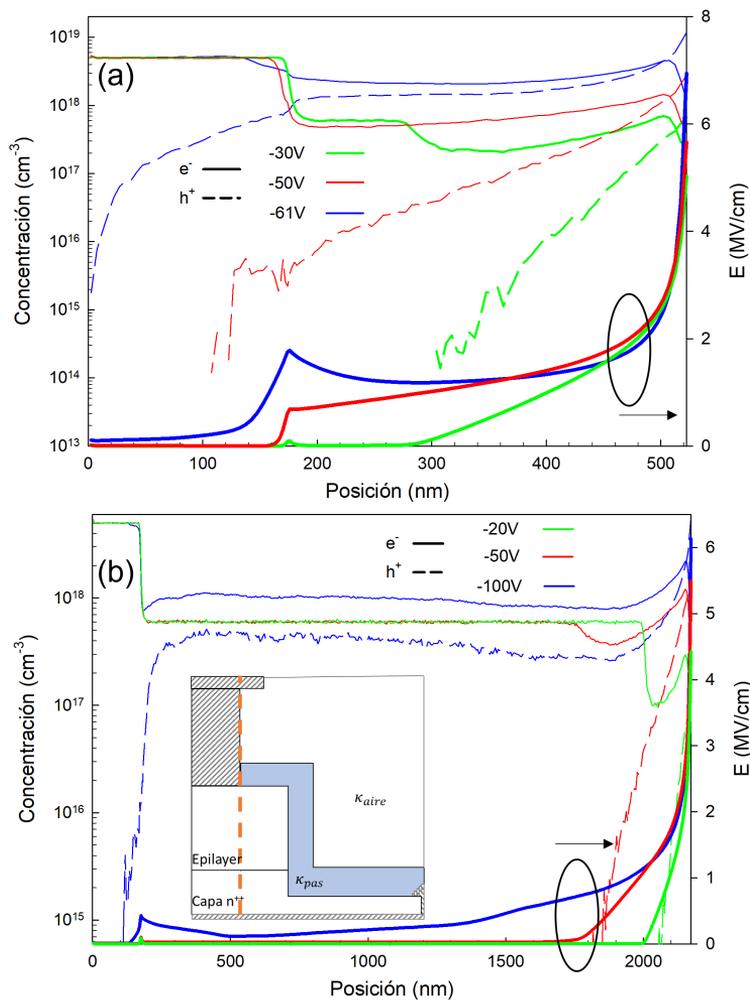


Figura 3.59: Perfiles de concentración de electrones (líneas continuas finas) y huecos (líneas discontinuas) representados junto con el campo eléctrico (líneas continuas gruesas) en el borde del contacto Schottky para una polarización baja (color verde), una intermedia (color rojo) y una cerca del voltaje de ruptura (color azul), siendo W_{EP} igual a (a) 350 nm y (b) $2\text{ }\mu\text{m}$. Se incluye una representación del diodo donde la línea discontinua naranja indica el corte donde se están representando todas las magnitudes.

Es interesante entonces ver cómo cambia el campo eléctrico con la posición (líneas gruesas en la figura 3.59) en el borde del contacto. Para el voltaje más bajo, el campo eléctrico va disminuyendo a medida que nos alejamos del contacto Schottky. Una vez se ha vaciado la *epilayer*, se observa un campo eléctrico que también disminuye con la posición, pero en la interfaz entre la capa n^{++} y la *epilayer* se localiza un valor alto del campo eléctrico debido a que comienza a vaciarse parte de la capa n^{++} .

Y por último, cuando el voltaje es próximo a la ruptura además de aumentar significativamente cerca del contacto Schottky como se ha explicado antes, también aumenta en la interfaz entre las capas n^{++} y la *epilayer*. Para el diodo más grande y la polarización de -50 V los perfiles de concentración de electrones y huecos son similares a los del caso anterior. Se muestra un voltaje bajo (-20 V, en color verde), donde la región vaciada es más pequeña y la concentración es menor en comparación con la polarización intermedia de -50 V, debido a una inyección de electrones más baja. Por último, para una polarización cercana a la ruptura (-100 V), la concentración de electrones y huecos es muy elevada, llegando la primera de ellas a superar el dopaje de la *epilayer*.

En cuanto al campo eléctrico, únicamente para la polarización más alta se observa un aumento con la posición en la zona cercana a la interfaz entre las dos capas del diodo. Todo esto indica que en el caso del diodo pequeño la *epilayer* se vacía completamente para voltajes no muy elevados, y un aumento pronunciado del campo y la inyección de portadores provoca la ruptura. En cambio, en el diodo grande son los procesos de II distribuidos en una amplia zona de la *epilayer* los que provocan la ruptura.

En la figuras 3.60(a) y (b) se representan la tasa de II y la energía de electrones y huecos para los diodos de la figura 3.59, $W_{EP} = 350 \text{ nm}$ y $W_{EP} = 2 \mu\text{m}$, y $N_D = 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. En ambos diodos se observa que los electrones inyectados ganan energía al entrar en el semiconductor (debido al alto campo en el interior del dispositivo) y generan procesos de II, que aumentan con el voltaje aplicado produciéndose en una región más extensa. En el diodo pequeño [ver figura 3.60(a)], la tasa de II de electrones y huecos para un voltaje cercano a la ruptura del diodo (-61 V) muestra la presencia de II incluso en la capa n^{++} , debido al aumento del campo eléctrico en esa zona [ver figura 3.59(a)]. En el diodo grande se observa que para el voltaje alto se producen procesos de II de electrones a lo largo de toda la *epilayer* (siendo mucho más significativos cerca del contacto).

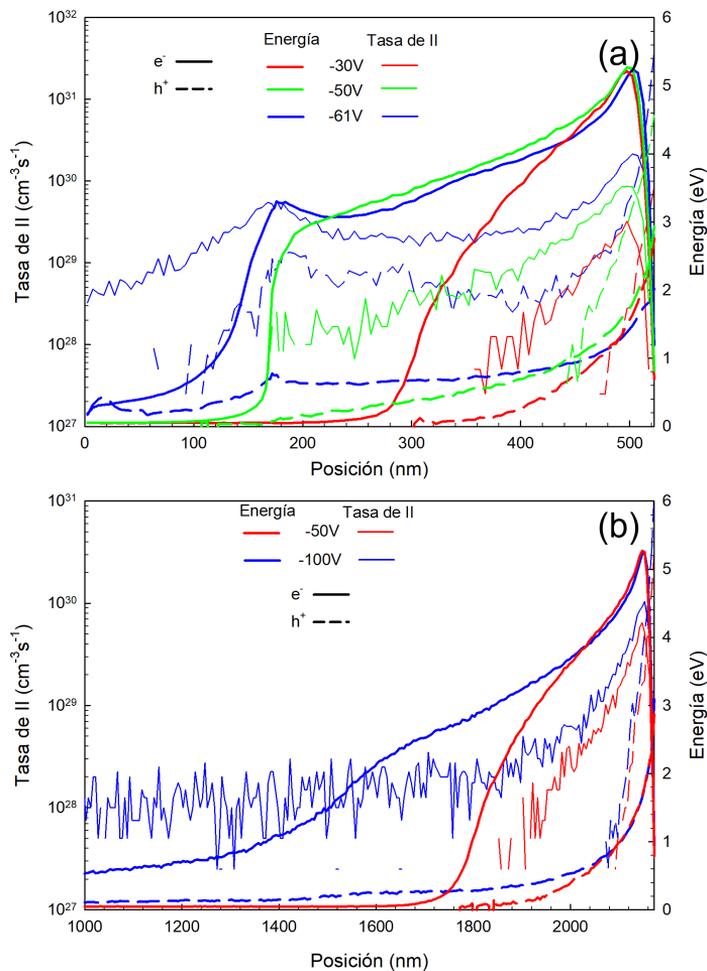


Figura 3.60: Perfiles de la tasa de II y energía de electrones (líneas continuas) y huecos (líneas discontinuas) en el borde del contacto Schottky para una polarización baja (color verde), una intermedia (color rojo) y una cerca del voltaje de ruptura (color azul), siendo W_{EP} igual a (a) 350 nm y (b) 2 μm .

Es interesante ver el comportamiento del campo eléctrico en la superficie con el voltaje aplicado para los dos diodos, representado en la figura 3.61. Se muestra para tres posiciones, al principio, en el medio y al final del contacto Schottky, encontrándose un campo eléctrico similar para las dos primeras y un valor mucho más elevado en el borde del contacto. En el diodo de espesor $2\ \mu\text{m}$ el valor del campo eléctrico permanece prácticamente constante para voltajes mayores de $-40\ \text{V}$. Sin embargo, para el diodo pequeño ($W_{EP} = 350\ \text{nm}$, símbolos rellenos) hay un aumento brusco del campo eléctrico en las polarizaciones próximas al voltaje de ruptura, originado por la elevada concentración de huecos en la proximidad del contacto.

Toda esta información nos permite afirmar que el diodo con una *epilayer* de $350\ \text{nm}$ de espesor estaría mal diseñado, ya que, al ser tan pequeño, el vaciamiento llega a la capa n^{++} para voltajes relativamente bajos, provocando la ruptura. Es decir, no se aprovecha completamente la capacidad del GaN para trabajar a altas potencias. Este estudio pone de manifiesto que la elección del espesor en función del dopaje es importante para optimizar el diseño de SBDs de GaN.

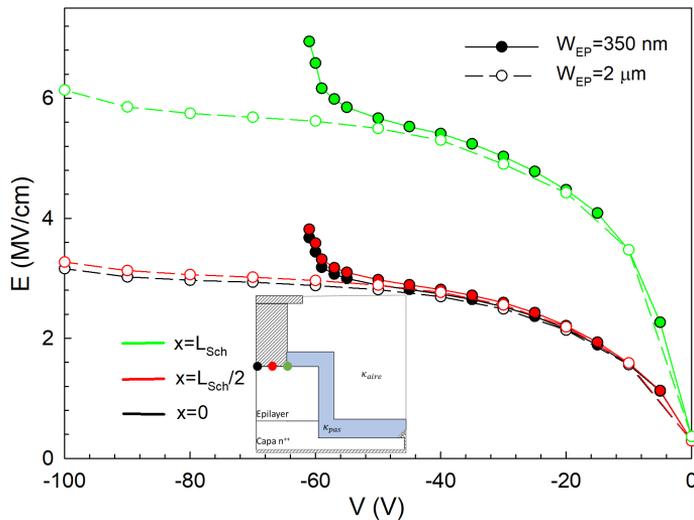


Figura 3.61: Campo eléctrico en la superficie en función de V para los dos diodos, W_{EP} igual a $350\ \text{nm}$ (círculos con relleno) y $2\ \mu\text{m}$ (círculos sin relleno) en tres posiciones distintas: el borde izquierdo (color negro), el medio (color rojo) y el borde derecho (color verde) del contacto Schottky. Se incluye un esquema del diodo con los puntos donde se representa el campo eléctrico.

Capítulo 4

Diodos de barrera Schottky: comportamiento en AC

En el capítulo anterior hemos estudiado el comportamiento de los diodos de nitruro de galio (GaN) en DC, a temperatura ambiente y en todo el rango de temperatura, desde 33 a 475 K. Sin embargo, estos diodos son prometedores para aplicaciones de alta frecuencia y alta potencia, por lo que es importante estudiar su comportamiento en AC. En este capítulo vamos a estudiar el circuito equivalente de pequeña señal (SSEC) en diodos de arseniuro de galio (GaAs) y de GaN. Además se van a presentar resultados de medidas de detección en ambos materiales.

4.1. Montajes experimentales

En esta sección se describen los montajes para la obtención de las características de alta frecuencia de los diodos. En nuestro caso queremos obtener el circuito equivalente de pequeña señal de los diodos de barrera Schottky (SBDs). Para ello se van a medir los parámetros S , también conocidos como parámetros de dispersión o de *scattering*, que son una representación matricial del comportamiento del dispositivo cuando sobre él inciden ondas electromagnéticas guiadas. En nuestro caso vamos a colocarlo en un circuito con dos puertos, siendo la representación de los parámetros S como la mostrada en el esquema de la figura 4.1.

La matriz de parámetros S viene dada por lo tanto por [120, 121]

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

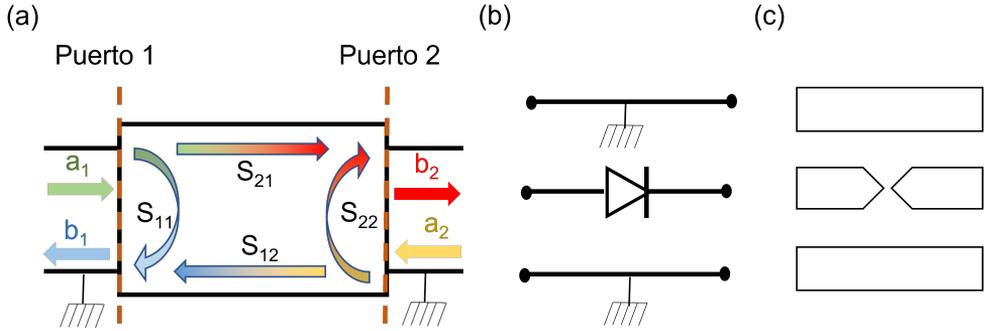


Figura 4.1: Representación de (a) los parámetros S para una configuración de dos puertos, (b) el circuito y (c) el esquema de la geometría del diodo (accesos coplanares).

Los parámetros S_{11} y S_{22} representan los coeficientes de reflexión en los puertos 1 y 2, respectivamente. Los otros dos parámetros se corresponden con los coeficientes de transmisión desde el puerto 2 al puerto 1 (S_{12}) y desde el puerto 1 al puerto 2 (S_{21}). Además, en la figura 4.1, a_1 y a_2 son las señales incidentes en los puertos 1 y 2, y b_1 y b_2 son las señales salientes en dichos puertos. Las líneas discontinuas indican los planos de referencia de los dos puertos. Los parámetros S y las señales incidentes y salientes están relacionadas de la siguiente manera

$$S_{11} = \frac{b_1}{a_1} \Big|_{a_2=0}; \quad S_{12} = \frac{b_1}{a_2} \Big|_{a_1=0}; \quad S_{21} = \frac{b_2}{a_1} \Big|_{a_2=0}; \quad S_{22} = \frac{b_2}{a_2} \Big|_{a_1=0}. \quad (4.2)$$

Dado que nuestro circuito (figura 4.5) es pasivo, se cumple que $S_{11} = S_{22}$ y $S_{21} = S_{12}$, ya que como cabe esperar el diodo refleja o transmite señales alternas de la misma forma en ambas direcciones. Los parámetros S toman valores complejos que dependen de la frecuencia y la polarización. El coeficiente de reflexión (Γ) en una cierta discontinuidad del circuito o línea de transmisión (en un cierto plano de referencia) puede ser calculado a partir de las impedancias a ambos lados del plano. Cuando lo que tenemos es la conexión de una guía de ondas cuya impedancia característica es Z_0 conectada a un dispositivo con impedancia Z , viene dado por

$$\Gamma = \frac{Z - Z_0}{Z + Z_0} = \frac{\bar{Z} - 1}{\bar{Z} + 1}, \quad (4.3)$$

donde \bar{Z} es la impedancia normalizada. Por ejemplo, (i) cuando la impedancia normalizada es cero lo que indica un cortocircuito $\Gamma = -1$, la señal se refleja completamente con desfase 180° ; (ii) si la impedancia normalizada es igual a uno indica una adaptación perfecta, sin ninguna reflexión de potencia, $\Gamma = 0$; y (iii) cuando la impedancia normalizada es infinita, indica un circuito abierto y una reflexión completa con desfase cero, $\Gamma = 1$.

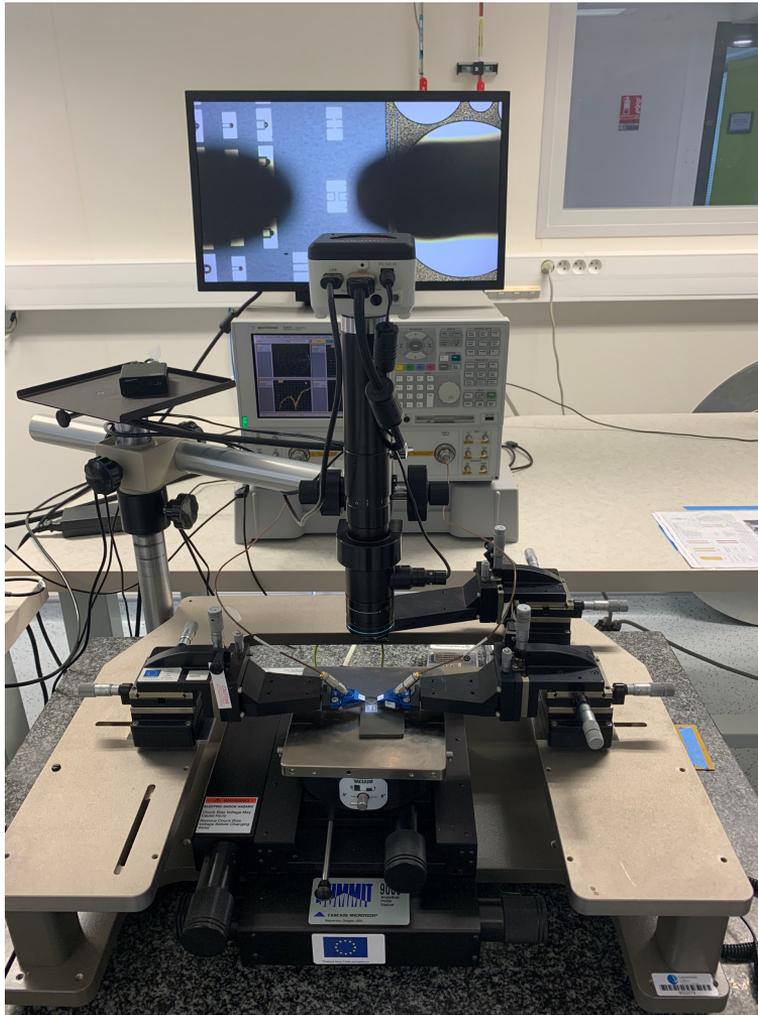


Figura 4.2: Fotografía de la mesa de puntas y del VNA utilizados en el montaje experimental para la medida de parámetros S en el IEMN.

Las medidas de los parámetros S se realizaron en el laboratorio del IEMN (Lille, Francia), utilizando un analizador de redes vectorial (VNA). El modelo utilizado es el VNA Agilent E8361A PNA, cuyo rango de medida en frecuencia va desde 10 MHz hasta 67 GHz. Este instrumento proporciona directamente los valores de los parámetros S al inyectar potencia RF por sus puertos y detectar la proporción que se refleja o se transmite. La mesa de puntas, junto con los posicionadores de radiofrecuencia (RF) se muestran en la figura 4.2.

Además, para la medida de los parámetros S se ha hecho uso de una fuente de DC, que nos permite controlar el voltaje aplicado en ambos puertos por medio de

una *bias tee* (interna al VNA) que superpone la polarización DC y la señal de RF. El montaje experimental completo para la medida de parámetros S se muestra en la figura 4.3.

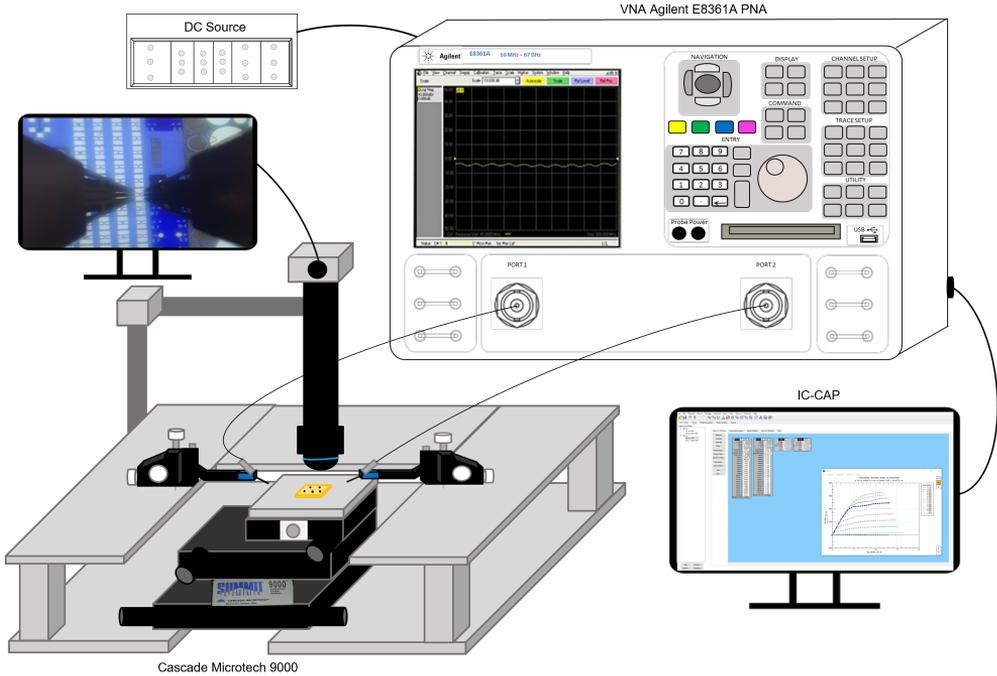


Figura 4.3: Montaje experimental utilizado para la medida de parámetros S en el IEMN.

Por último, es necesario realizar una calibración previa a las medidas, para eliminar los efectos de los cables, las puntas de RF y las conexiones. El tipo de calibración realizada es *line-reflect-reflect-match* (LRRM). Para realizar esta calibración se dispone de un sustrato de calibración estándar que cuenta con estructuras de este tipo.

Las medidas de detección han sido realizadas en las instalaciones de la Universidad de Salamanca, utilizando un montaje experimental como el mostrado en la figura 4.4. Las medidas se han llevado a cabo a temperatura ambiente en la mesa de puntas Cascade M150. La unidad de fuente/medida (SMU) nos permite fijar una corriente (o un voltaje) y medir el voltaje (o la corriente) DC entre extremos del diodo mientras se aplica una señal de RF (también usando la *bias tee* interna del VNA). Por otro lado, el VNA Agilent N5244A es el equipo utilizado para aplicar la señal de RF, cuyo rango de frecuencias va desde 10 MHz hasta 43.5 GHz. Se han utilizado las puntas de RF, cuya configuración es tierra-signal-tierra para ambas medidas.

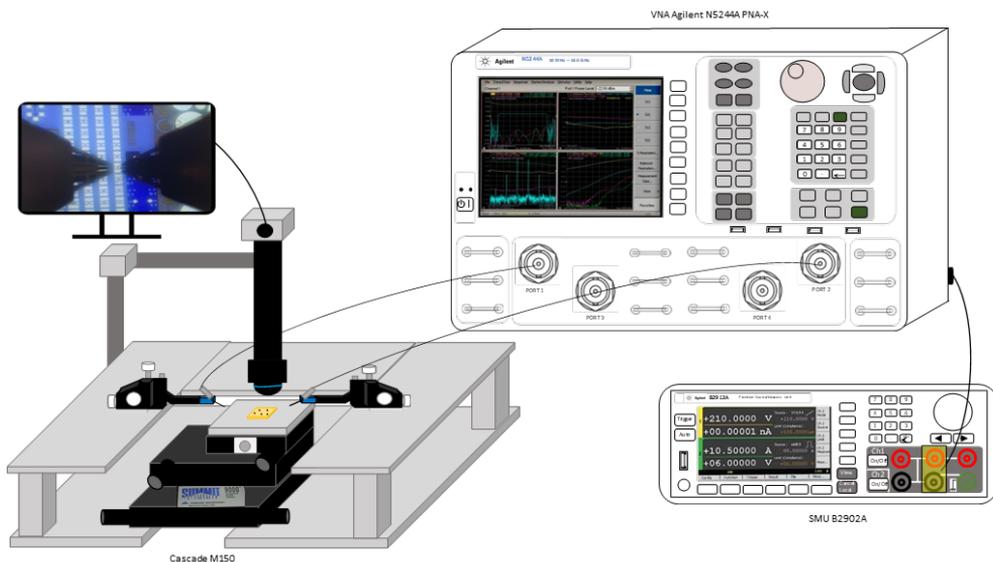


Figura 4.4: Montaje experimental utilizado para las medidas de la detección en la Universidad de Salamanca.

4.2. Circuito equivalente de pequeña señal

En esta sección vamos a presentar las medidas de los parámetros S desde 250 MHz hasta 67 GHz, en SBDs de GaAs y GaN para el cálculo de su circuito equivalente y la extracción tanto de los parámetros extrínsecos como intrínsecos. En ambos casos se dispone de estructuras *open* y *short* en la oblea, conocidas como estructuras para *de-embedding* o *dummies*, con las mismas dimensiones que los diodos, para poder así eliminar los parámetros asociados a los accesos coplanares (*pads*), como se presentará a continuación. En la presente tesis el cálculo de parámetros se va a realizar considerando el modelo de circuito equivalente de pequeña señal para nuestros SBDs mostrado en la figura 4.5. En dicha figura se muestran los componentes extrínsecos del circuito equivalente, que serían la autoinducción L_f asociada al puente del contacto Schottky y una capacidad C_{fp} asociada a la pasivación, y también los parámetros intrínsecos asociados a nuestro diodo, representados dentro del rectángulo rojo. La parte intrínseca la componen una capacidad C_j y una resistencia R_j en paralelo, que dependen de la polarización, conectadas en serie con la resistencia serie R_s de nuestro diodo [86]. En este esquema no están incluidos los elementos relacionados con los *pads*.

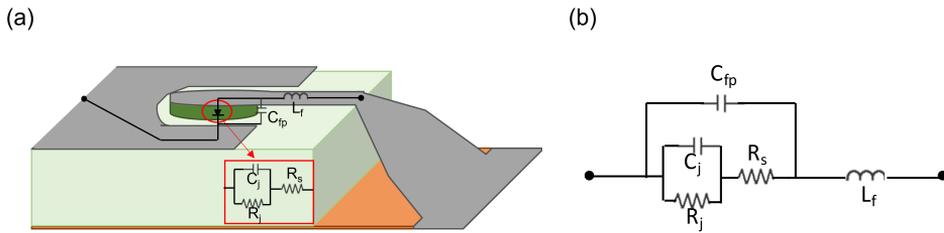


Figura 4.5: (a) Esquema de la estructura del diodo y (b) el circuito equivalente de pequeña señal.

4.2.1. *De-embedding*

Para las medidas de los parámetros S se ha hecho uso del software IC-CAP de Keysight. Se comenzó con la calibración previa midiendo las estructuras para *de-embedding*, *open* y *short*, con *pads* de las mismas dimensiones que en el diodo. En las figuras 4.6(a) y (b) se muestra un esquema de la geometría tanto del *short* como del *open* de los que se dispone en la oblea para poder determinar los elementos asociados a los *pads* en cada caso.

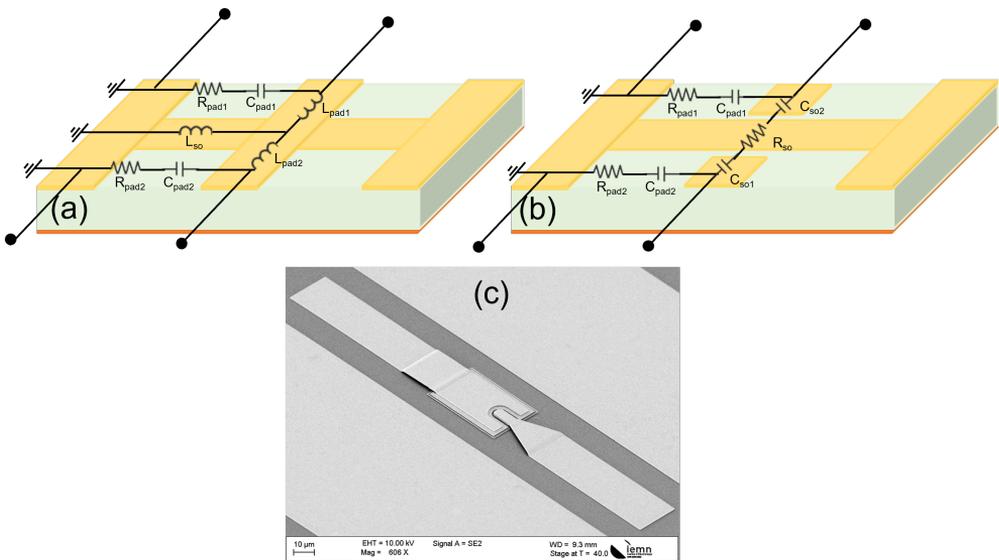


Figura 4.6: Esquema de las estructuras *de-embedding* y los elementos asociados a cada una: (a) *short* y (b) *open*. (c) Imagen SEM de un SBD de GaAs fabricado en el IEMN.

Como se puede observar en la figura, se han incluido los circuitos equivalentes lo más simplificados posibles para el *short* y el *open*. En la estructura *short*, las capacidades C_{pad1} y C_{pad2} , y las resistencias R_{pad1} y R_{pad2} , representan el acoplamiento entre los contactos de ánodo y cátodo (unidos a ambos lados a las líneas metálicas centrales de señal) y las líneas de tierra laterales. Las autoinducciones L_{pad1} y L_{pad2} se usan para representar la línea entre contactos y L_{so} la línea entre los contactos y la tierra. En la estructura *open* se tienen los mismos parámetros de acoplamiento entre los contactos y las tierras (C_{pad1} , C_{pad2} , R_{pad1} y R_{pad2}) y el acoplamiento entre los dos contactos se tiene en cuenta mediante C_{so} (se representan las capacidades C_{so1} y C_{so2} mediante una única capacidad) y R_{so} . Debido a la topología del circuito, en el caso del *open* se estudiarán los parámetros de admitancia (Y) y en el *short* los parámetros de impedancia (Z) [71]. Para pasar de parámetros S a admitancias o impedancias, se utilizan las bien conocidas relaciones entre ellos [122]. Mediante el software libre *Qucs* (*quite universal circuit simulator*), podemos simular el circuito y obtener sus parámetros S (o Y o Z) para compararlos con nuestras medidas de parámetros S (o convertidos en parámetros Y o Z).

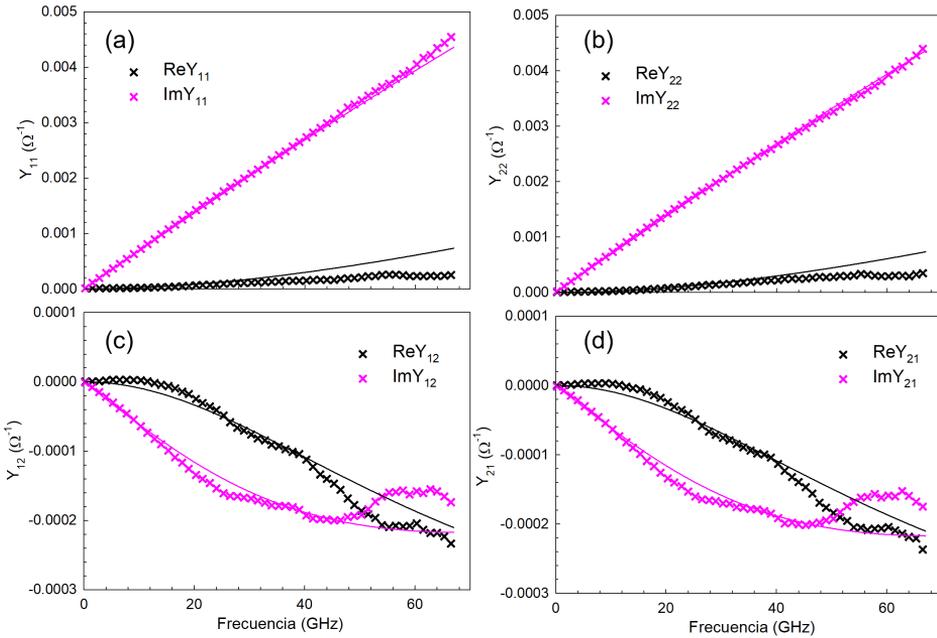


Figura 4.7: Parámetros Y para la estructura *open* en la oblea de GaN. Los símbolos corresponden a los valores experimentales y las líneas a los obtenidos con el modelo de circuito equivalente mostrado en la figura 4.6(b).

Comenzando con la estructura *open*, en la figura 4.7 se han representado los valores de admitancia experimentales (símbolos) para la oblea de GaN y los valores obtenidos con el circuito equivalente propuesto (líneas continuas). En color negro se representa la parte real y en color rosa la parte imaginaria. La simetría en la estructura hace que exista una simetría en el circuito equivalente con respecto a los dos puertos, dando lugar a valores muy similares para Y_{11} e Y_{22} , ver figuras 4.7(a) y (b). Del mismo modo, y esto es una propiedad general de las redes pasivas, se cumple la reciprocidad $Y_{12} = Y_{21}$, ver figuras 4.7(c) y (d). Como vemos, el modelo reproduce de manera adecuada los parámetros Y a excepción de Y_{12} (y por lo tanto Y_{21}), para el que a frecuencias mayores de 50 GHz se desvía ligeramente de las medidas experimentales.

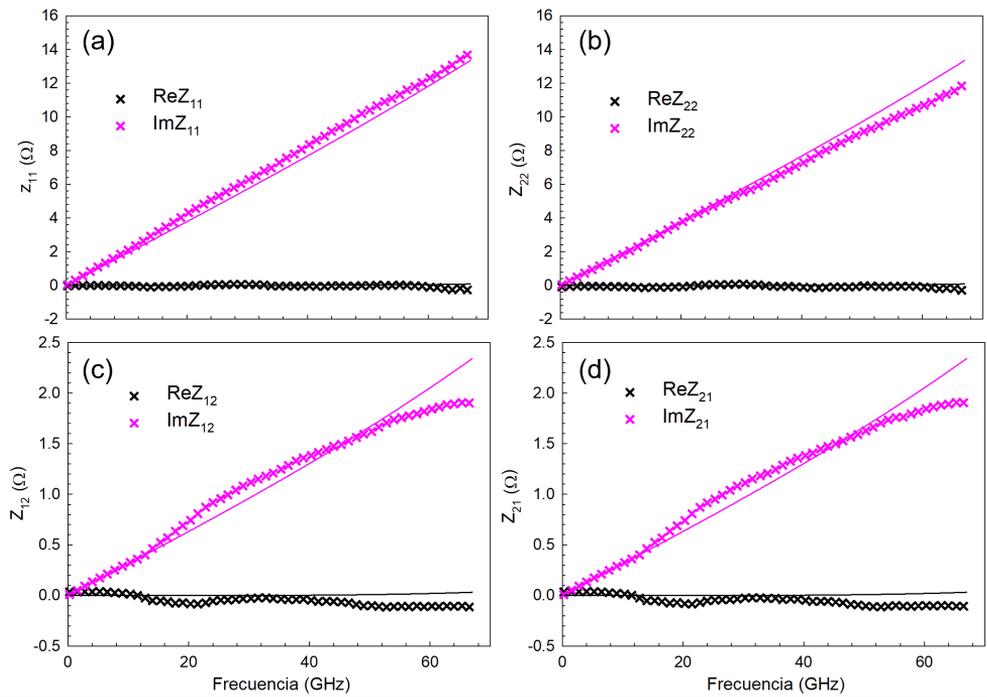


Figura 4.8: Parámetros Z para la estructura *short* en la oblea de GaN. Los símbolos corresponden a los valores experimentales y las líneas sólidas a los obtenidos con el modelo de circuito equivalente mostrado en la figura 4.6(a).

En el caso de la estructura *short*, los valores de los elementos del circuito relativos a los *pads*, C_{pad1} , R_{pad1} , C_{pad2} y R_{pad2} , no cambian. En la figura 4.8 se muestran los valores experimentales de impedancia (símbolos) para la oblea de GaN y los obtenidos con el circuito de la figura 4.6(a) (líneas continuas). La estructura es también simétrica, por lo que los valores de Z_{11} y Z_{22} son muy similares. De nuevo el modelo

es capaz de reproducir los resultados experimentales para todos los parámetros de impedancia: Z_{11} , Z_{22} , Z_{12} y Z_{21} , ver figura 4.8(a), (b), (c) y (d), respectivamente.

Se realiza el mismo proceso en la oblea de GaAs. Los valores de los elementos del circuito obtenidos tanto para la oblea de GaN como de GaAs son los mostrados en la tabla 4.1. Debido a la simetría los coeficientes de reflexión son similares en las dos direcciones.

| Parámetro | GaN | GaAs |
|-------------------------|------|------|
| C_{pad1} (fF) | 10 | 10.5 |
| C_{pad2} (fF) | 10 | 10.5 |
| C_{so} (fF) | 1 | 0.2 |
| R_{pad1} (Ω) | 30 | 10 |
| R_{pad2} (Ω) | 30 | 10 |
| R_{so} (Ω) | 2300 | 2000 |
| L_{pad1} (pH) | 25 | 35 |
| L_{pad2} (pH) | 25 | 35 |

Tabla 4.1: Parámetros obtenidos de las estructuras *open* y *short* para GaN y GaAs.

Hay que tener en cuenta que los circuitos utilizados son circuitos simplificados. Sin embargo, son capaces de reproducir de manera bastante correcta los resultados experimentales, permitiéndonos conocer qué elementos externos al diodo se tendrán que considerar. En nuestro caso, al utilizar el software IC-CAP de Keysight podemos realizar un *de-embedding* directo, es decir, eliminar estas contribuciones de los *pads* directamente de los parámetros S medidos en el diodo. Para ello, el primer paso es medir los parámetros relativos al *open* y *short* y transformarlos en parámetros Y , Y_{open} e Y_{short} , para a continuación programar el cálculo de los parámetros del diodo haciendo el *de-embedding* mediante la ecuación [123]

$$Y_{DUT}^{De-embedded} = ((Y_{DUT} - Y_{open})^{-1} - (Y_{short} - Y_{open})^{-1})^{-1}, \quad (4.4)$$

donde Y_{DUT} es la admitancia medida del dispositivo completo.

4.2.2. SBDs de GaAs

En esta sección vamos a presentar el proceso para la obtención del circuito equivalente de un diodo de GaAs cuya fabricación y caracterización se realizó en el IEMN. En la figura 4.6(c) se puede ver una imagen SEM (*scanning electron microscope*) de uno de los diodos. La oblea de GaAs se ha crecido sobre un sustrato de GaAs semi-aislante, sobre el cual se han depositado las siguientes capas: 50 nm de GaAs (*buffer*),

20 nm de $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ (no dopado), 200 nm de GaAs y 20 nm de $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ con un dopaje de 10^{19} cm^{-3} , 20 nm de GaAs con $N_S = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, y por último la *epi-layer*, que tiene 350 nm de espesor y un dopaje $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Se presentan los resultados de un dispositivo que no es circular, cuya superficie es de $75 \mu\text{m}^2$, y con una distancia entre la mesa del contacto Schottky y el contacto óhmico de $0.7 \mu\text{m}$. Las medidas se han realizado en el rango de frecuencia de 250 MHz hasta 67 GHz, y para polarizaciones desde 1 V hasta -10 V.

Una vez que ya hemos eliminado los elementos asociados a los *pads*, tomamos como circuito equivalente del diodo el mostrado en la figura 4.5(b). Se obtendrán los valores mediante el software *Qucs* y presentaremos la comparación de la capacidad del diodo extraída con el modelo y la obtenida a partir de las curvas capacidad-voltaje ($C-V$) medidas experimentalmente en un diodo circular grande.

Estudiaremos los parámetros de admitancia (Y), calculados a partir de la medida de parámetros S . En primer lugar se van a determinar la capacidad C_{fp} , la autoinducción L_f y la resistencia R_s , los cuales no varían con la polarización. Y así una vez obtenidos, se podrán calcular R_j y C_j .

Extracción de C_{fp} , R_s y L_f

Para estimar los valores de estos parámetros es necesario realizar una serie de consideraciones. En primer lugar es importante conocer que en este tipo de diodos los valores de las capacidades son del orden de uno hasta decenas de femtofaradios, mientras que las autoinducciones se encuentran en el rango de decenas de picohenrios. Se comienza con la extracción de C_{fp} . Para ello, se va a considerar que a frecuencias bajas en el rango de los GHz, las autoinducciones podrían despreciarse frente a las capacidades, las cuales son dominantes [124]. Además, la segunda consideración es que para una polarización en inversa suficiente se puede suponer que en el circuito equivalente de la figura 4.5(b) la resistencia R_s es despreciable frente a R_j y por lo tanto nos quedaría un circuito con tres elementos en paralelo (R_j , C_j y C_{fp}), cuya matriz de parámetros Y sería

$$Y = \frac{1}{R_j(V)} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} + jw \begin{pmatrix} C_j + C_{fp} & -(C_j + C_{fp}) \\ -(C_j + C_{fp}) & C_j + C_{fp} \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Por lo tanto, de una polarización suficientemente en inversa se extrae la suma de la capacidad de la unión y la capacidad parásita C_{fp} a partir de cualquier parámetro Y , ya que $Y_{11} = -Y_{12} = -Y_{21} = Y_{22}$. Si utilizamos por ejemplo el parámetro Y_{12} , se tiene que

$$C_{Tot} = C_j + C_{fp} = \frac{Im[-Y_{12}]}{w}, \quad (4.6)$$

de donde se obtiene el valor de la capacidad total que es la suma de C_{fp} y C_j , véase la figura 4.9(a). Para poder desacoplar estas dos capacidades y determinar el valor de C_{fp} hay que estudiar una polarización en directa suficientemente baja (donde R_j no sea demasiado grande y tampoco despreciable con respecto a R_s). De esta manera se extrae el valor de C_{fp} , que es independiente de la polarización e igual a 2 fF.

El siguiente parámetro a extraer es la resistencia R_s . Para ello, partiremos de una polarización en directa, donde se asume que $C_j(V)$ es despreciable. Considerando por tanto C_j y L_f despreciables, el circuito estaría formado por dos resistencias, R_j y R_s , en serie, y en paralelo con la capacidad C_{fp} . Para este circuito, la resistencia total se calcula a partir de la parte real del parámetro Y mediante la ecuación

$$R_{Tot} = R_j + R_s = \frac{1}{Re[Y_{12}]}. \quad (4.7)$$

Si la polarización en directa es suficientemente alta, se puede considerar que la resistencia R_j es despreciable y se obtiene R_s , ver figura 4.9(b).

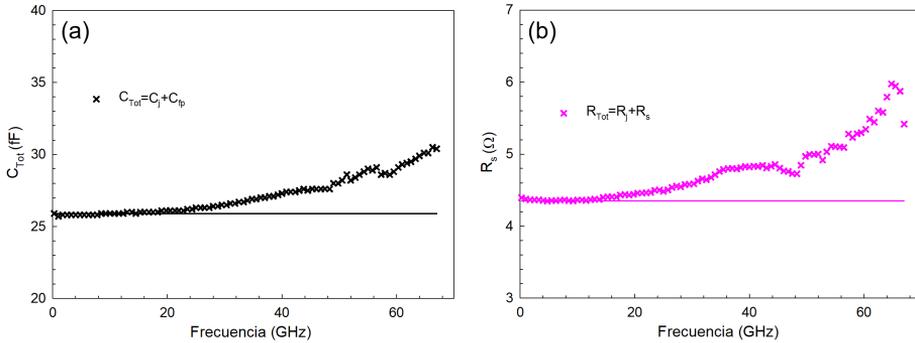


Figura 4.9: Representación en función de la frecuencia de : (a) la capacidad total, calculada a partir del parámetro Y_{12} mediante la ecuación 4.6 para un voltaje de -10 V y (b) la resistencia total calculada con la ecuación 4.7 para un voltaje en directa de 1 V.

Nótese que, en la figura 4.9(a), tenemos un valor de la capacidad total prácticamente constante para frecuencias por debajo de 30 GHz; sin embargo para frecuencias mayores el valor de la capacidad muestra una dependencia con la frecuencia, lo que nos indica que para estas frecuencias la consideración de que las autoinducciones serían despreciables frente a las capacidades no sería correcta.

Por otro lado, la resistencia total obtenida mediante la ecuación 4.7 se extrae para un voltaje aplicado en directa, ver la figura 4.9(b). En dicha figura tenemos un comportamiento similar al de la capacidad total, un valor de la resistencia constante para bajas frecuencias y un aumento de la resistencia para las frecuencias más altas debido a la consideración de las autoinducciones como despreciables. En este caso, se puede asumir que al ser una polarización en directa suficientemente alta, la resistencia de la unión (R_j) es despreciable y por lo tanto $R_{Tot} = R_s$. Del valor para frecuencias bajas se obtiene cuánto vale R_s , en nuestro caso aproximadamente 4.3Ω .

Por último, una vez se tienen los valores de R_s y C_{fp} y se ha comprobado que la consideración de las autoinducciones como despreciables no es correcta, es necesario calcular el valor de L_f . Para ello, fijándonos en la dependencia con la frecuencia de las curvas anteriores, se determina el valor de la autoinducción L_f comparando los parámetros extraídos de las medidas con los del circuito. El valor de L_f obtenido es 6 pH .

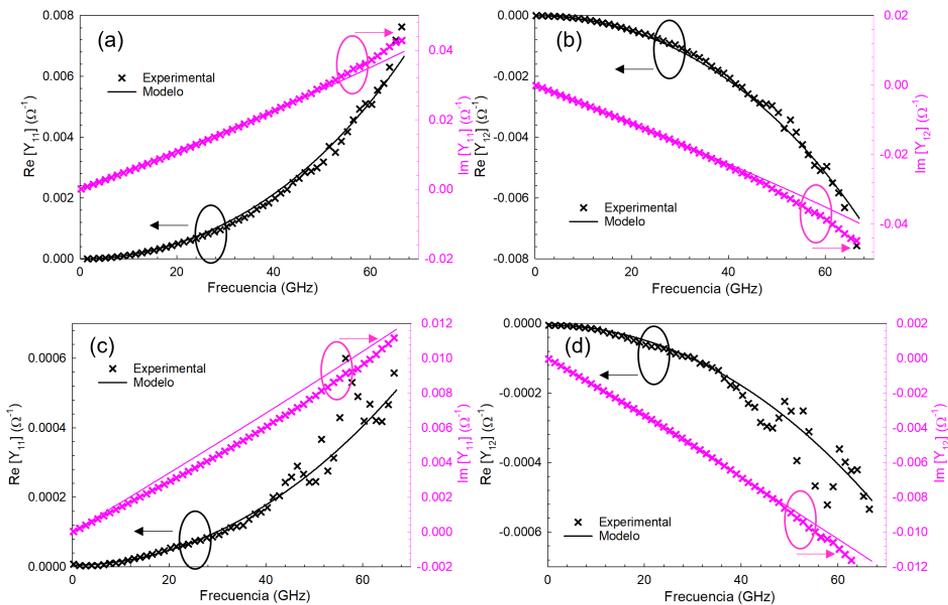


Figura 4.10: Representación de los parámetros (a) y (c) Y_{11} y (b) y (d) Y_{12} para un voltaje aplicado de (a) y (b) 0 V y (c) y (d) -10 V . Los símbolos representan los valores experimentales y las líneas sólidas los valores obtenidos con el modelo de circuito equivalente mostrado en la figura 4.5(b). En color negro se representa la parte real de los parámetros y en color rosa la parte imaginaria.

Extracción de R_j y C_j

Una vez extraídos los parámetros C_{fp} , L_f y R_s , mediante la comparación de los parámetros Y obtenidos mediante el software *Qucs* y los medidos, se determinan los parámetros dependientes de la polarización, que son la capacidad C_j y la resistencia R_j .

En la figura 4.10 se representan los parámetros Y_{11} e Y_{12} de las medidas experimentales (símbolos) comparados con los obtenidos mediante el circuito equivalente (líneas continuas) para dos polarizaciones, 0 V y -10 V. Como se observa en dicha figura, los parámetros Y obtenidos mediante *Qucs* para este circuito equivalente reproducen satisfactoriamente las medidas experimentales para distintas polarizaciones.

En la figura 4.11(a) se muestra la representación de los parámetros C_j y R_j , extraídos a partir del circuito equivalente de pequeña señal con *Qucs*, en función del voltaje aplicado. Fijándonos en los valores de la capacidad (normalizados por la superficie), efectivamente se obtiene el comportamiento esperado, la capacidad va disminuyendo como $1/\sqrt{V_B - V}$ a medida que aumentamos la polarización en inversa. La capacidad de la unión para polarización cero, C_{j0} , es 86 fF. Además, se han representado los valores de las curvas C - V medidas en un diodo circular grande de diámetro 350 μm fabricado en la misma oblea. Se puede observar que los valores son similares, pero C_{j0} es más grande (1.15×10^{-3} para el SSEC y 1.22×10^{-3} F/m² para la curva C - V). Por otro lado, en color azul se ha representado la resistencia total, es decir, la suma de la resistencia de la unión (R_j) y la resistencia serie (R_s). En directa predomina la resistencia serie (siempre que sea un voltaje suficientemente alto), mientras que en inversa se observa que el valor de la resistencia de la unión es muy grande (del orden de M Ω), y por lo tanto R_s es despreciable.

En la figura 4.11(b) se ha representado el inverso al cuadrado de los valores de la capacidad de la unión frente al voltaje para: C_j obtenidos con el modelo de circuito equivalente y C medida experimentalmente para el diodo de 350 μm de diámetro. En dicha figura es interesante observar la curva rosa, ya que nos indica que para un valor de aproximadamente -6 V hemos vaciado toda la *epilayer*, y estaríamos llegando a la capa n^{++} . Mediante la ecuación $C_{Id} = S\sqrt{\kappa_{sc}eN_D/2(V_B - V)}$, representando C^{-2} frente a V podemos extraer el dopaje de la *epilayer* N_D . En la figura, la línea continua roja representa el ajuste de esta ecuación con los valores obtenidos de la capacidad C_j mediante el modelo, proporcionando un valor para N_D de 8.5×10^{16} cm⁻³, ligeramente distinto al obtenido con las medidas C - V en el diodo grande ($d = 350 \mu\text{m}$), que es igual a 9.8×10^{16} cm⁻³. Ambos valores son similares al valor teórico del proveedor, 10^{17} cm⁻³.

Se ha determinado el SSEC para distintos diodos, todos ellos con la misma superficie ($S = 75 \mu\text{m}^2$) pero distinta geometría y distinta distancia entre la mesa del contacto Schottky y el contacto óhmico (D). Hemos obtenido que, al tener la misma superficie, la capacidad C_j es prácticamente la misma que en el diodo presentado. Sin embargo, en el caso de R_s , encontramos que aumenta ligeramente al incrementar el valor de la distancia D . En cuanto a los elementos parásitos, la capacidad C_{fp} no varía, mientras que la autoinducción aumenta debido a la geometría.

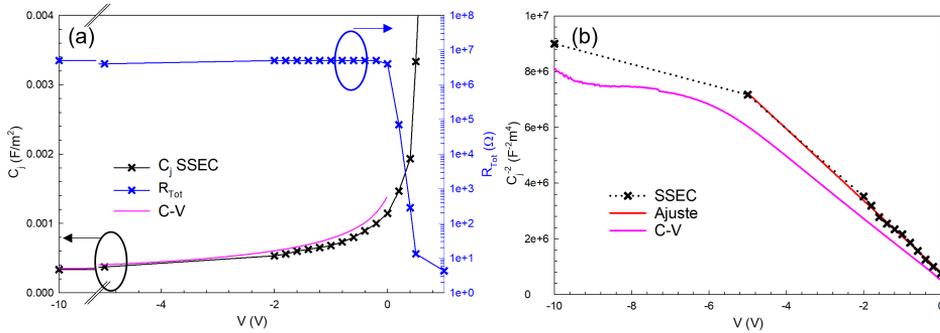


Figura 4.11: Representación de (a) la capacidad de la unión C_j a partir del SSEC (negro), la capacidad medida (con el montaje experimental de la figura 3.6) en un diodo grande (rosa) y la resistencia total (azul) en función del voltaje aplicado. (b) Inverso de la capacidad de la unión al cuadrado obtenida mediante el modelo (símbolos) y medida en un diodo de diámetro $350 \mu\text{m}$ (línea rosa) frente al voltaje y ajuste correspondiente a los datos del modelo (línea roja).

4.2.3. SBDs de GaN

Del mismo modo, vamos a estudiar el circuito equivalente [consideraremos el mismo que el de la figura 4.5(b)] de un diodo circular de GaN con un diámetro de $30 \mu\text{m}$ (de la oblea del Run 2). Las medidas de los parámetros S se han realizado en el rango de frecuencias de 250 MHz hasta 50 GHz, y para polarizaciones desde 2 V en directa hasta -20 V en inversa.

Siguiendo el proceso de extracción de los parámetros explicado en el caso anterior, se obtienen primero la capacidad C_{fp} , la resistencia R_s y la autoinducción L_f . En la figura 4.12(a) se muestra la capacidad total, calculada con las medidas del parámetro Y_{12} (para -20 V) mediante la ecuación 4.6, frente a la frecuencia. De aquí se obtiene el valor total de la capacidad, y mediante un voltaje en directa se extrae el valor de C_{fp} . En la figura (b) se representa la resistencia total calculada mediante la ecuación 4.7

para un voltaje aplicado en directa de 2 V. Nótese que, en la figura (a), el valor de la capacidad es prácticamente constante con la frecuencia hasta 50 GHz. La capacidad no muestra una dependencia con la frecuencia (al contrario que en el diodo de GaAs), lo que nos indica que para este diodo la autoinducción no será muy grande, y no tiene mucha influencia frente a las capacidades. El valor de la capacidad C_{fp} es 10 fF.

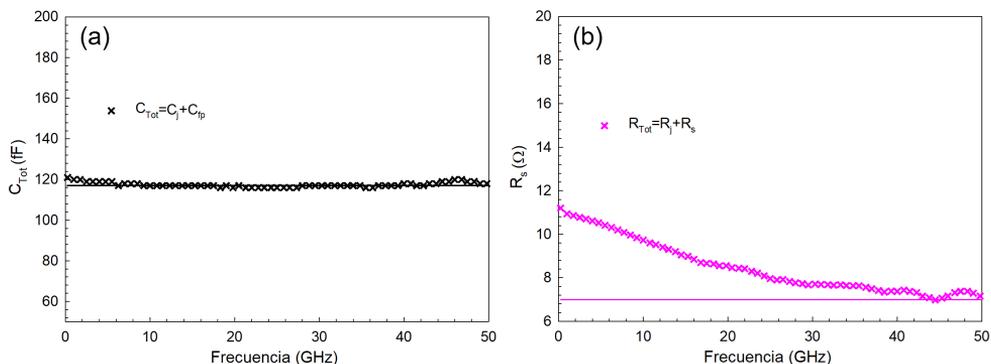


Figura 4.12: Representación frente a la frecuencia de (a) la capacidad total para un voltaje aplicado de -20 V y (b) la resistencia total para una polarización en directa de 2 V. La línea continua negra representa el valor constante obtenido para C_{Tot} y la línea continua rosa el valor de R_s .

En cuanto a la figura 4.12(b), la resistencia total mostrada se ha calculado para un voltaje aplicado en directa. Exhibe un comportamiento diferente al caso del diodo de GaAs. Para ajustar correctamente las medidas es necesario considerar un valor de la resistencia de la unión de 4Ω , y el valor de la resistencia R_s sería aproximadamente de 7Ω . Este valor de R_j podría indicarnos que al realizar el *de-embedding* alguno de los elementos parásitos no se elimina correctamente y en realidad esa resistencia estaría asociada a un elemento extrínseco. Además mediante estas curvas se determina con *Qucs* el valor de la autoinducción L_f , igual a 3 pH.

En la figura 4.13 se muestran los parámetros Y_{11} e Y_{12} para un voltaje de 0 V y -20 V obtenidos tanto de las medidas experimentales (símbolos) como del circuito equivalente de la figura 4.5(b) mediante el software *Qucs* (líneas continuas). Como se puede observar, el modelo es capaz de reproducir los resultados experimentales para todo el rango de frecuencia.

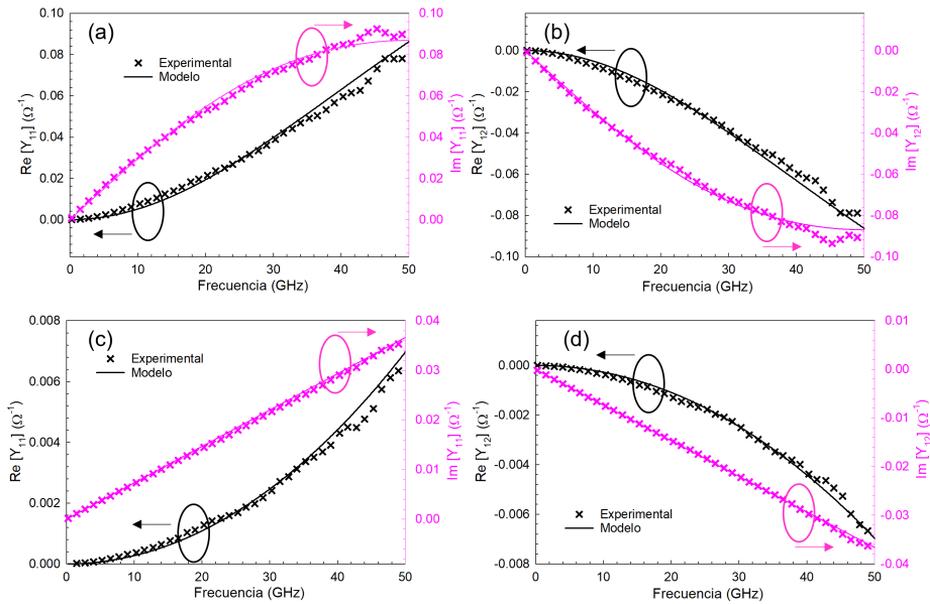


Figura 4.13: Representación en función de la frecuencia de los parámetros (a) y (c) Y_{11} y (b) y (d) Y_{12} para un valor de polarización de (a) y (b) 0 V y (c) y (d) -20 V. Los valores experimentales se representan mediante símbolos y los obtenidos a partir del modelo con líneas. Se representa la parte real (negro) y la parte imaginaria (rosa) de los parámetros.

Los valores de los elementos del circuito equivalente C_j y R_j se representan frente al voltaje en la figura 4.14. En el panel (a), en color azul se ha representado la resistencia total, es decir la suma de R_j y R_s , siendo el valor de $R_{Tot} = 11 \Omega$ para polarizaciones en directa. Para polarizaciones en inversa tenemos valores muy grandes de R_j (del orden de $M\Omega$). La capacidad C_j presenta el comportamiento esperado, como se puede observar en el panel (b): una dependencia lineal cuando se representa el inverso de la capacidad al cuadrado frente al voltaje. Al igual que en el diodo de GaAs, se han comparado los valores de la capacidad obtenidos con el modelo y los medidos en un diodo grande cuyo diámetro es $350 \mu\text{m}$. Ambas son muy similares. En el panel (b) se muestra también el ajuste a partir del cual se obtiene el valor del dopaje de la *epilayer*, N_D . El valor teórico proporcionado por el proveedor para esta oblea era $5 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$. Con el SSEC se ha obtenido un valor muy próximo al teórico, de aproximadamente $4.4 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$, y con las medidas C - V del diodo grande ($d = 350 \mu\text{m}$) es $4.46 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$.

Todo el estudio anterior nos permite concluir que en caso de no disponer de diodos grandes para medir las características C - V , con este modelo podemos eliminar los parásitos de un diodo pequeño y obtener el valor del dopaje.

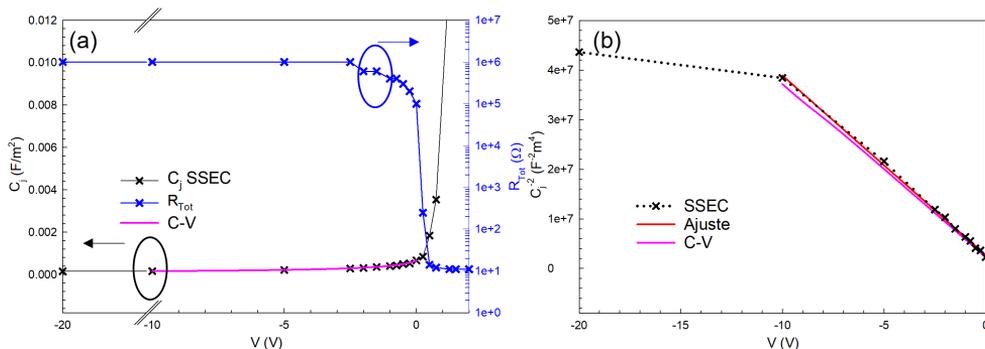


Figura 4.14: Representación en función de la polarización de (a) la capacidad (negro) y la resistencia total (azul) de la unión obtenidas mediante el modelo, y la capacidad medida en un diodo grande de diámetro $350 \mu\text{m}$ (rosa), y (b) el inverso de C_j al cuadrado junto con el ajuste lineal para el modelo y el diodo grande.

4.3. Detección de potencia RF

En esta sección, con el objetivo de analizar las capacidades de los SBDs para su uso como detectores, vamos a presentar las medidas experimentales de detección realizadas para dos diodos, uno de GaAs y otro de GaN. El SBD de GaAs es un diodo con un sólo puerto (véase figura 4.15) y una superficie de $75 \mu\text{m}^2$; en GaN se ha medido un diodo con dos puertos [ver figura 4.6(c)] y una superficie aproximada de $18 \mu\text{m}^2$ de la oblea del Run 2. El montaje experimental utilizado para estas medidas es el mostrado en la figura 4.4.

Cuando se aplica una señal de RF, el punto de operación del diodo se desplaza (más a mayor potencia RF inyectada) con respecto a la situación en la que no se aplica dicha señal. Se define el parámetro β (responsividad) para caracterizar la capacidad de detección de un dispositivo como [125]

$$\beta_V = \frac{\Delta V}{P_{in}} = \frac{V_{ON} - V_{OFF}}{P_{in}}, \quad (4.8)$$

$$\beta_I = \frac{\Delta I}{P_{in}} = \frac{I_{ON} - I_{OFF}}{P_{in}}, \quad (4.9)$$

donde β_V es la responsividad en voltaje (a corriente constante), β_I es la responsividad en corriente (a voltaje constante) y P_{in} es la potencia RF de la señal de entrada,

considerándose la compensación de las pérdidas hasta la entrada asociadas a los cables, las puntas, etc. ΔV es el desplazamiento que existe entre el voltaje cuando se aplica la señal RF (V_{ON}) y cuando no se aplica (V_{OFF}), y lo mismo para la corriente ($\Delta I = I_{ON} - I_{OFF}$). La no linealidad de la característica corriente-voltaje ($I-V$) del diodo es la clave para la detección y está directamente relacionada con la responsividad. Para caracterizar la curvatura de la característica $I-V$ del diodo se utiliza el parámetro γ , dado por [126]

$$\gamma = \frac{\delta^2 I}{\delta V^2} / \frac{\delta I}{\delta V} = R \frac{\delta^2 I}{\delta V^2}, \quad (4.10)$$

con R la resistencia, que puede calcularse a partir de la curva $I-V$ como

$$R = \frac{\delta V}{\delta I}. \quad (4.11)$$

Veremos más tarde que la responsividad del diodo puede obtenerse en función de estos dos parámetros.

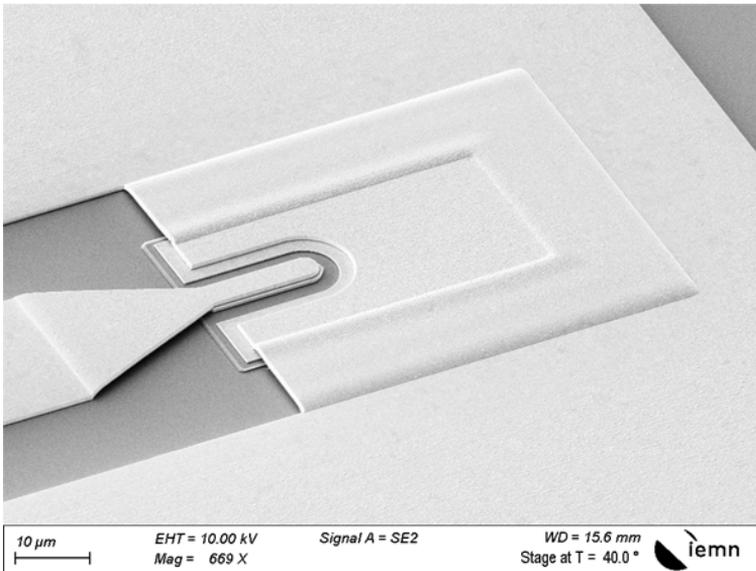


Figura 4.15: Imagen SEM de un SBD de GaAs con una estructura de un sólo puerto fabricado en el IEMN.

Los detectores generalmente se diseñan para trabajar en polarización cero para minimizar el ruido en exceso, pero en nuestro caso, debido a la desadaptación del diodo, no somos capaces de realizar medidas precisas en dicho punto. En la figura 4.16 se comparan las características de salida aplicando o no la señal de RF, para a partir de ellas determinar el punto óptimo de polarización donde realizar las medidas de detección. Esta figura muestra las curvas $I-V$ medidas aplicando un voltaje, (a) y

(c), o una corriente, (b) y (d), en DC, y superponiendo (ON) o no (OFF) una señal de RF aplicada de frecuencia 1 GHz y potencia -20 dBm, junto con la responsividad β . Las figuras (a) y (b) corresponden al diodo de GaAs, y la (c) y la (d) al de GaN. En las figuras (a) y (c), cuando la señal de RF está en ON la curva se desplaza hacia arriba, luego la corriente detectada $\Delta I = I_{ON} - I_{OFF}$ es positiva, mientras que en las figuras (b) y (d) la curva se desplaza hacia la abajo, y el voltaje detectado $\Delta V = V_{ON} - V_{OFF}$ es negativo. Al representar β podemos estimar el valor del voltaje (o la corriente) para el cual la corriente detectada (o el voltaje) será máxima.

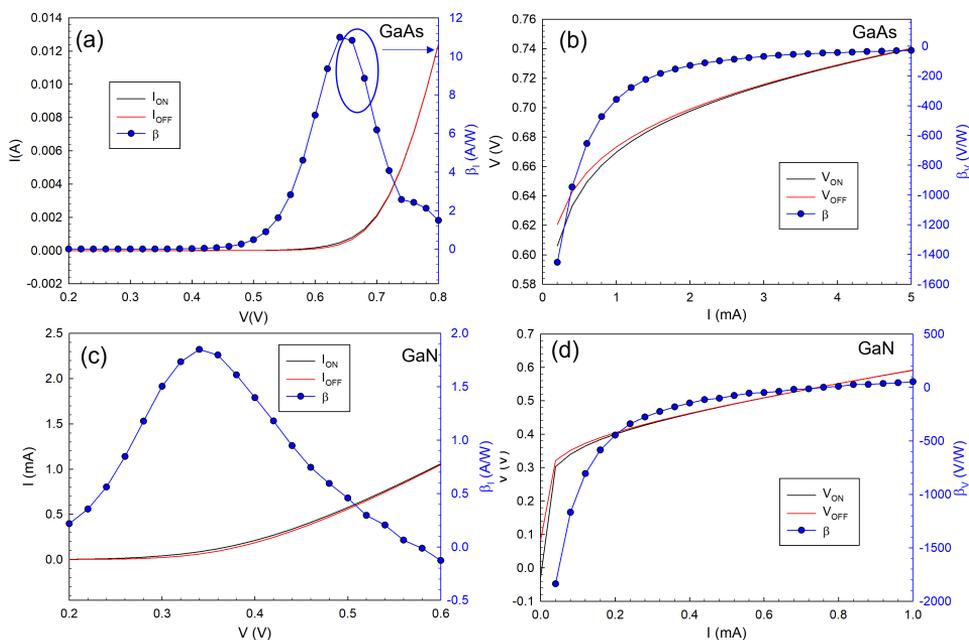


Figura 4.16: Curvas I - V medidas con (negro) y sin (rojo) una señal de RF aplicada de 1 GHz y -20 dBm. En color azul se representa la responsividad β . (a) y (b) detección en corriente y voltaje para el diodo de GaAs, respectivamente; (c) y (d) detección en corriente y voltaje para el diodo de GaN, respectivamente.

Comenzando con el diodo de GaAs, en la figura 4.16(a) se observa que β_I es máxima en torno a un rango de voltaje de 0.6-0.7 V. Representando β_I frente a la potencia se obtiene la figura 4.17(a), que nos permite establecer cuál es el rango de potencia más adecuado para detectar en este diodo, desde -25 hasta -10 dBm (rango dinámico de 15 dB), donde la responsividad es constante, característica que debe poseer un detector de ley cuadrática [127]. En el rango de potencias entre -30 y -40 dBm se produce un cambio de signo, lo que indicaría que se ha alcanzado el nivel de ruido. Por otro lado, para la detección en corriente del diodo de GaN, se observa el

máximo en la figura 4.16 entre 0.3-0.4 V (debido al menor valor de V_B). En la figura 4.17(c) se representa la responsividad en corriente en función de la potencia para varios voltajes en ese rango. A partir de esta representación se determina el rango de potencia para el cual la responsividad se mantiene constante (desde -30 dBm hasta -10 dBm aproximadamente).

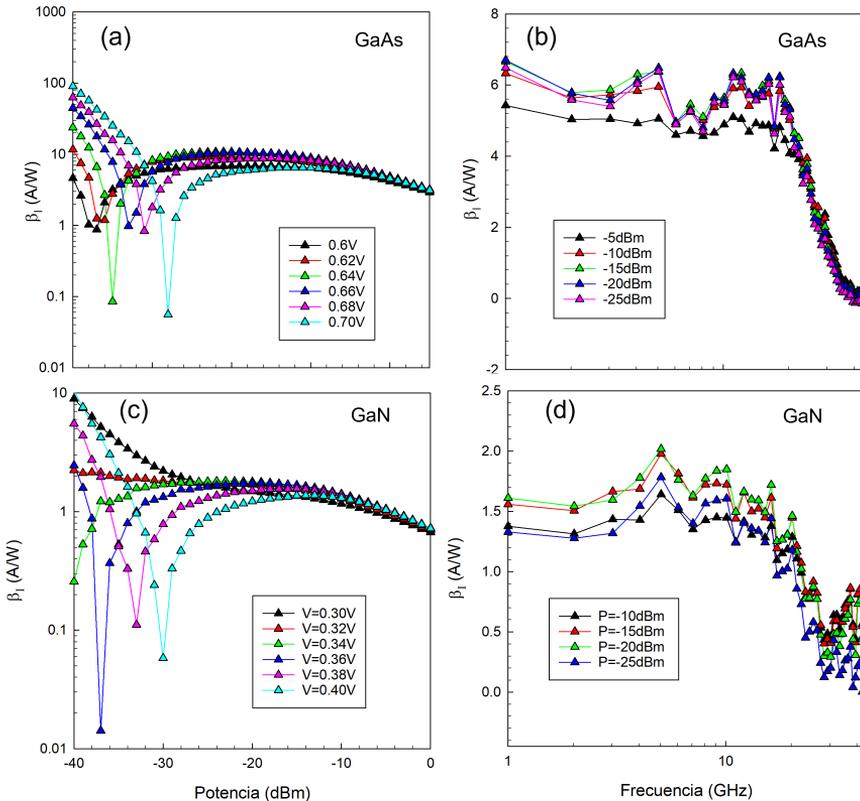


Figura 4.17: Responsividad en corriente β_I en función de la potencia para una señal de 1 GHz y distintos puntos de polarización para (a) el diodo de GaAs y (c) el diodo de GaN. β_I frente a la frecuencia para distintos valores de potencia y una polarización de (b) 0.6 V en GaAs y (d) 0.34 V en GaN.

Para un voltaje de 0.6 V, en la figura 4.17(b) se representa la dependencia con la frecuencia de la responsividad en corriente para el rango de valores de potencia determinados previamente. En dicha figura se observa una responsividad en corriente constante de aproximadamente 5-6 A/W, y prácticamente independiente de la potencia hasta una frecuencia de corte (medida a -3 dB) de unos 25 GHz, a partir de la cual la responsividad comienza a disminuir. Para el diodo de GaN, en la figura 4.17(d)

se muestra la responsividad en corriente para todo el rango de frecuencias y varias potencias en un punto de polarización igual a 0.34 V, donde se ha observado que la responsividad era máxima. En este caso, para el punto de polarización representado se observa una detección constante (en torno a 1.5 A/W) con la frecuencia y con la potencia hasta alcanzar una frecuencia de corte de unos 20 GHz. Las frecuencias de corte de ambos diodos son muy similares a pesar de la diferencia de tamaño.

A continuación se va a realizar el mismo estudio pero fijando la corriente y midiendo el voltaje detectado. Como ya hemos mencionado, el voltaje detectado será negativo y por lo tanto también la responsividad en voltaje, sin embargo representaremos el valor absoluto en todos los casos. En la figura 4.16 se observa que la responsividad en voltaje es máxima para valores de la corriente pequeños.

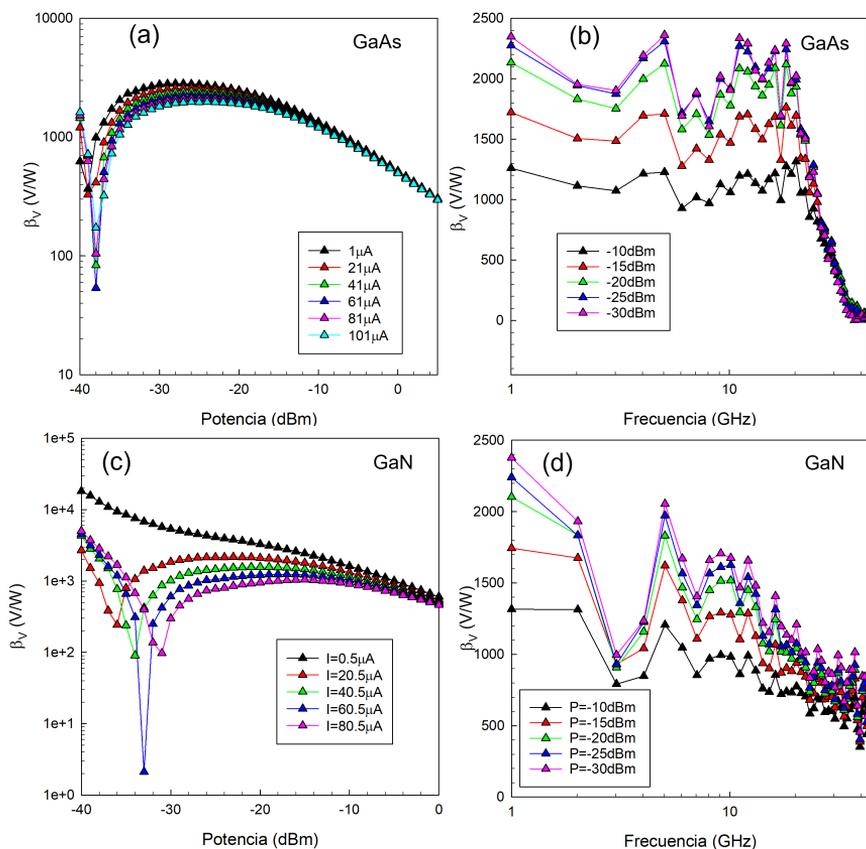


Figura 4.18: (a) Responsividad en voltaje en función de la potencia para una señal de 1 GHz y distintos valores de corriente para (a) el diodo de GaAs y (c) el diodo de GaN. β_V frente a la frecuencia para distintos valores de potencia y una corriente de (b) 50 μA en GaAs y (d) 20.5 μA en GaN.

De nuevo, comenzamos por el diodo de GaAs. En la figura 4.18(a) se muestra que el rango de frecuencia donde la responsividad es constante está entre -30 y -20 dBm, hecho que se puede observar en la figura 4.18(b), donde se representa la responsividad para una corriente de $50 \mu\text{A}$. El valor de la responsividad en este punto es aproximadamente 2000 V/W e independiente de la potencia en el rango mencionado previamente, ya que, para potencias suficientemente altas, -10 y -15 dBm, disminuye. La frecuencia de corte de nuevo es 25 GHz.

Para el diodo de GaN, en la figura 4.18(c) se ha representado la responsividad en función de la potencia para distintos valores de corriente y se observa que el rango de potencia donde se mantiene constante es mayor comparado con el de GaAs. Por ejemplo, para una corriente de $20.5 \mu\text{A}$, se observa que la responsividad es más alta y constante en un rango de potencia de -30 a -10 dBm. En la figura 4.18(d) se muestra la responsividad en dicho rango de potencia en función de la frecuencia para una corriente de $20.5 \mu\text{A}$ y se obtiene una responsividad prácticamente constante en torno a 1500 V/W (menor que la obtenida en el diodo de GaAs) hasta una frecuencia de corte también en torno a 20 GHz. Sin embargo, sería necesario realizar un estudio en un rango de frecuencia más amplio, ya que la responsividad no cae a cero.

El parámetro por excelencia para caracterizar la detección es la potencia equivalente de ruido (NEP). La NEP indica la potencia mínima que puede ser detectada sobre el nivel de ruido por raíz cuadrada de ancho de banda. Cuanto menor sea la NEP, más sensible será el detector. Para cualquier semiconductor en equilibrio siempre aparece un ruido conocido como Johnson-Nyquist o ruido térmico, que está asociado a la agitación térmica de los portadores. Este voltaje/corriente de ruido viene dado por [128]

$$V_N = \sqrt{4k_B T R \Delta f}, I_N = \sqrt{4k_B T \Delta f / R}, \quad (4.12)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, T la temperatura, R la resistencia y Δf el ancho de banda. Fuera de equilibrio, generalmente se observa otro ruido conocido como ruido $1/f$, llamado así por su dependencia con la frecuencia [129], pero no lo tendremos en cuenta, ya que nos podemos deshacer de él haciendo un muestreo suficientemente rápido de la señal de salida. En los diodos Schottky el ruido *shot* (o de disparo) también puede ser importante [130, 131]. Ignorando estas fuentes de ruido, a partir del ruido térmico la NEP se calcula como

$$NEP = \frac{\sqrt{4k_B T R}}{\beta_V} = \frac{\sqrt{4k_B T}}{\sqrt{R}\beta_I}. \quad (4.13)$$

En la figura 4.19 se han representado la curva I - V , la resistencia (calculada mediante la ecuación 4.11), la responsividad en corriente y la NEP para una señal de 1 GHz y -20 dBm. El comportamiento es cualitativamente similar en ambos diodos

(a) GaAs y (b) GaN. La responsividad en corriente (en azul) muestra un máximo que coincide con el fin de la zona exponencial de la curva I - V (en rosa). La resistencia tiene el comportamiento esperado, parte de valores muy altos del orden de $M\Omega$ para voltajes bajos hasta alcanzar unos pocos Ω para GaAs y centenas de Ω para GaN una vez polarizado bien en directa; esta diferencia es debida fundamentalmente al tamaño de los diodos. La NEP (en rojo) depende tanto de la resistencia como de la responsividad, obteniéndose su valor mínimo ligeramente desplazado hacia la izquierda en voltaje con respecto al máximo de la responsividad. El valor mínimo de la NEP se encuentra en torno a $1 \text{ pW/Hz}^{1/2}$ para GaAs y $2 \text{ pW/Hz}^{1/2}$ para GaN, mejor como cabe esperar en GaAs dada su menor R .

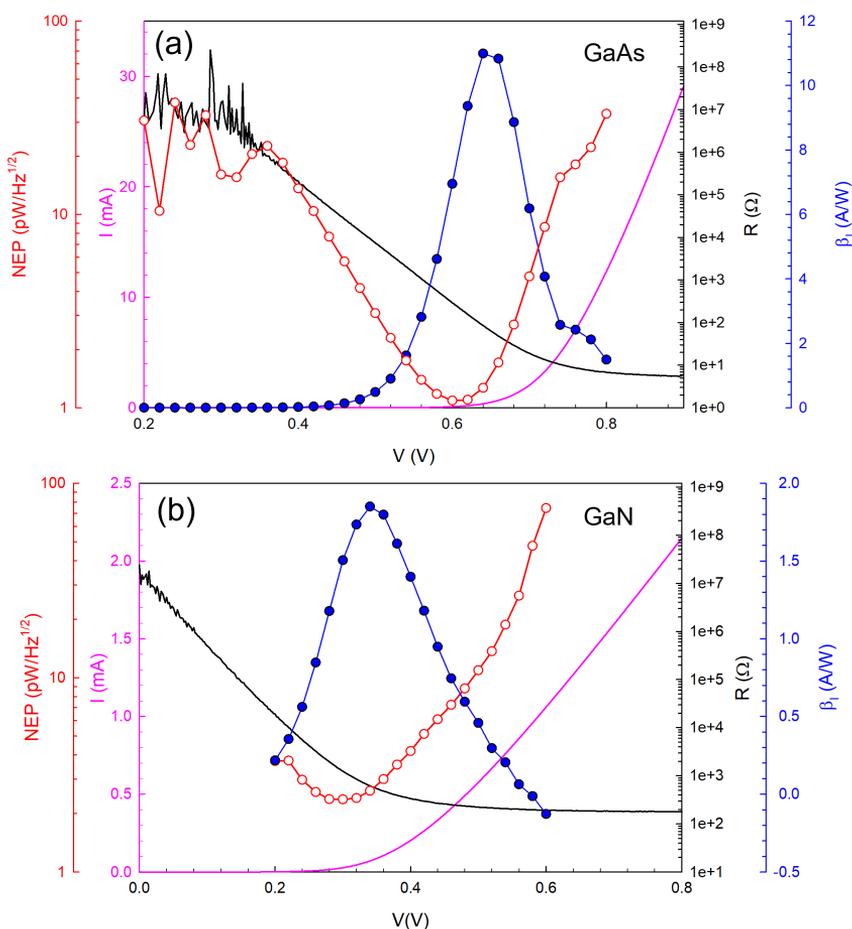


Figura 4.19: Corriente (rosa), resistencia (negro), responsividad en corriente (azul) y NEP (rojo) en función del voltaje para el diodo de (a) GaAs y (b) GaN.

En el caso del GaAs, se han medido otros dos diodos con la misma geometría pero distinta superficie, uno de $55 \mu\text{m}^2$ y otro de $95 \mu\text{m}^2$. Se ha comprobado el rango en el que la detección es independiente de la potencia, se ha aplicado una señal de -20 dBm y se ha polarizado en el punto donde la responsividad es máxima en cada caso (muy similar en los tres, en torno a 0.66 V). En la figura 4.20 se representa la responsividad en corriente medida en función de la frecuencia para los tres diodos. Para bajas frecuencias se obtiene prácticamente el mismo valor de responsividad, sin embargo, la frecuencia de corte cambia ligeramente. La frecuencia de corte del diodo viene dada por la ecuación [132]

$$f_c = \frac{1}{2\pi C_j R}, \quad (4.14)$$

donde C_j es la capacidad del diodo, la cual escala con la superficie y se puede extraer mediante el circuito equivalente. En condiciones de polarización directa, $R \approx R_s$. Se ha calculado la resistencia serie para los tres casos y se obtiene un valor muy similar de aproximadamente 5Ω . La frecuencia de corte muestra el comportamiento esperado, disminuye al aumentar la superficie, aunque no escala exactamente con esta, siendo los valores aproximados de 22, 26 y 30 GHz para los diodos de superficie 95, 75 y $55 \mu\text{m}^2$, respectivamente.

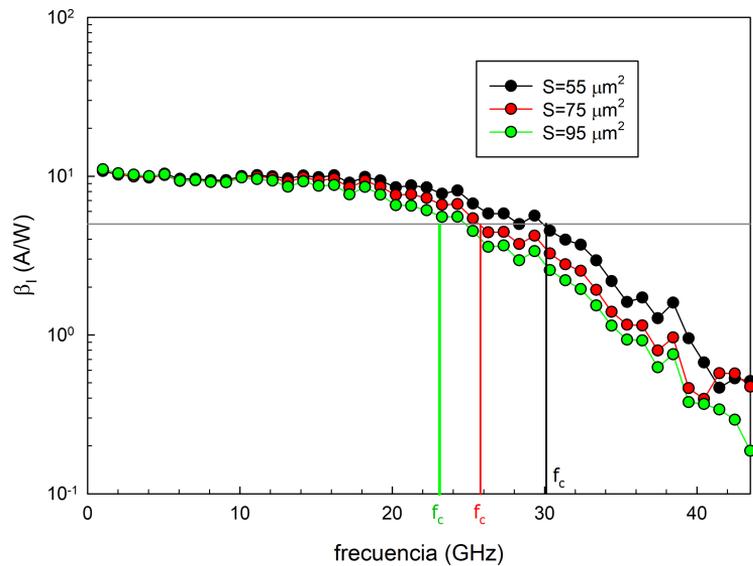


Figura 4.20: β_I en función de la frecuencia para tres diodos de GaAs con distinta superficie: 55, 75 y $95 \mu\text{m}^2$.

Finalmente, para entender mejor el origen de las dependencias obtenidas, hemos utilizado un modelo cuasiestático (QS) basado en la pendiente y la curvatura de las curvas I - V que es capaz de reproducir fielmente las medidas de la responsividad. El modelo se obtiene a partir de la expansión de Taylor de segundo orden de la corriente en función del voltaje [133, 134, 135]. Este modelo permite expresar la responsividad en función de γ y R (ver ecuaciones 4.10 y 4.11) como

$$\beta_V^{opt} = -\frac{1}{2}\gamma R, \quad (4.15)$$

$$\beta_I^{opt} = \frac{1}{2}\gamma. \quad (4.16)$$

Sin embargo, generalmente existe una desadaptación entre la impedancia del dispositivo (Z_d) y la fuente (Z_s) que debe tenerse en cuenta a la hora de estimar la responsividad. Para una fuente estándar de 50Ω , β viene dada por

$$\beta_V = -\frac{1}{2}\gamma R(1 - |\Gamma|^2), \quad (4.17)$$

$$\beta_I = \frac{1}{2}\gamma(1 - |\Gamma|^2), \quad (4.18)$$

siendo $\Gamma = (Z_d - Z_s)/(Z_d + Z_s)$ el coeficiente de reflexión de la señal de RF, que indica el grado de desadaptación entre el diodo y la fuente ($Z_s = 50 \Omega$). En la figura 4.21(a) se muestra la responsividad en corriente obtenida con el modelo QS comparada con las medidas experimentales a 1 GHz. Se observa que el modelo reproduce el comportamiento de la responsividad encontrado en las medidas. Además, hemos representado el valor de Γ (línea roja continua) y la desadaptación entre el diodo y la fuente, dada por $1 - |\Gamma|^2$ (línea roja discontinua). Fijándonos en esta última, se observa cuál es el punto óptimo donde la responsividad es máxima, aquel en el que el diodo y la fuente están perfectamente adaptados ($\Gamma = 0$). En la figura 4.21(b) se muestran los valores de la resistencia R (línea naranja) y de la curvatura γ (línea negra). En el punto donde el diodo y la fuente están adaptados ($R=50$), la curvatura es igual a 28.5 V^{-1} .

A partir de las derivadas primera y segunda de la expresión de la corriente termoiónica (mecanismo dominante en directa en un diodo Schottky), se puede obtener el valor teórico de la curvatura γ . El valor ideal de γ es 38.64 V^{-1} (para $\eta = 1$). Suponiendo una adaptación perfecta entre el diodo y la fuente ($\Gamma=0$), la responsividad en corriente sería 19.32 A/W , valor máximo ideal. En la figura 4.21(b) se observa que el valor máximo de γ , obtenido en torno a $0.3\text{-}0.4 \text{ V}$, se encuentra muy próximo al valor teórico. Sin embargo, en ese rango la desadaptación es muy grande ($1 - |\Gamma|^2 \approx 0$), y el valor máximo de la responsividad en corriente se encuentra cuando la curvatura γ

es menor, con un valor de 28.5 V^{-1} , en el punto en el que el diodo y la fuente están perfectamente adaptados, proporcionando un valor de la responsividad de 14.25 A/W .

En la figura 4.22(a) se presenta el modelo QS para el diodo de GaN junto con las medidas de la responsividad en corriente a 1 GHz, las cuales son prácticamente iguales. Además, se ha representado el valor de Γ y la desadaptación entre el diodo y la fuente ($1 - |\Gamma|^2$). Comparando con el diodo de GaAs, la resistencia de este diodo es mucho mayor [ver figura 4.22(b)] por lo que no se llega a conseguir una adaptación perfecta, de ahí el menor valor de la responsividad máxima, 1.8 A/W . Sin embargo, si se alcanza prácticamente el valor teórico de γ , véase la figura 4.22(b).

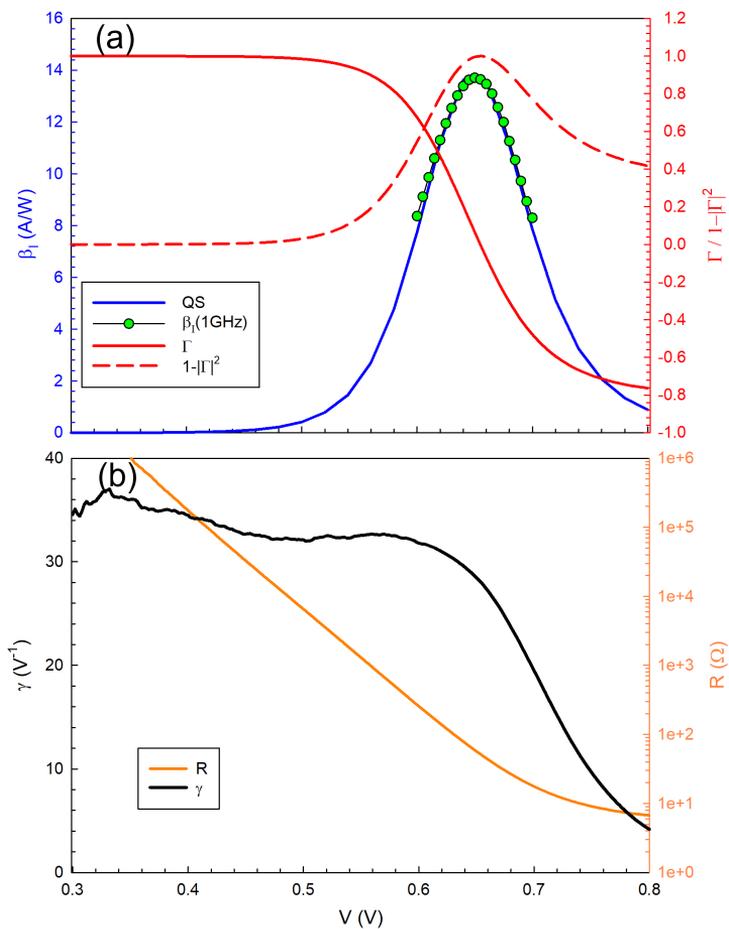


Figura 4.21: (a) Comparación de β_I en función del voltaje obtenida con el modelo QS (línea azul) y las medidas (símbolos verdes) para el diodo de GaAs. Se incluyen además los valores de Γ (línea continua roja) y $1 - |\Gamma|^2$ (línea discontinua roja). (b) Valores de la curvatura γ (línea continua negra) y la resistencia R (línea continua naranja). Señal aplicada de 1 GHz y -20 dBm.

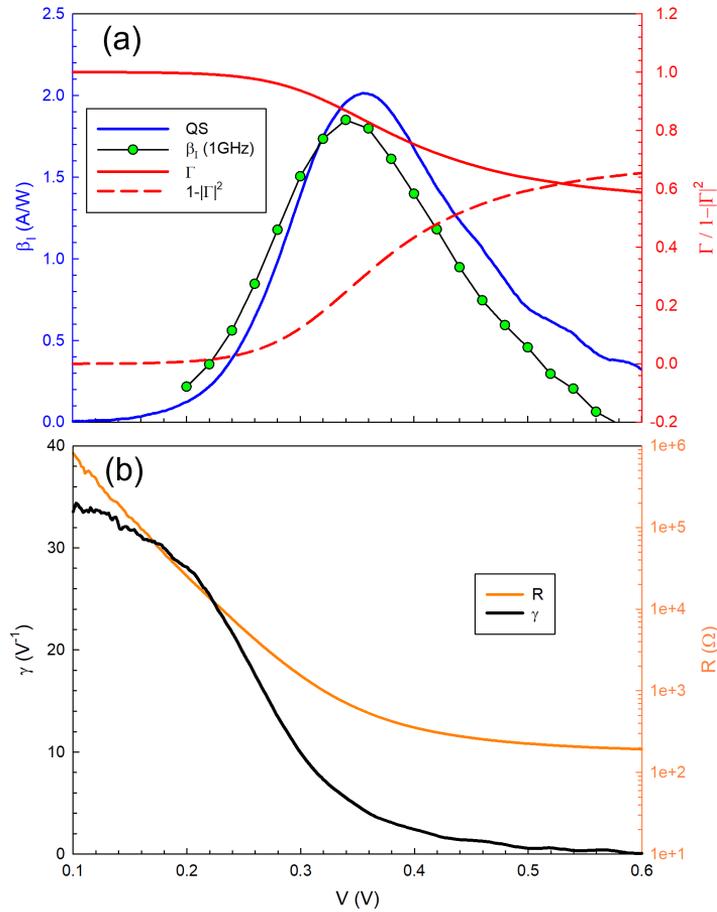


Figura 4.22: (a) Comparación de β_I en función del voltaje obtenida con el modelo QS (línea azul) y las medidas (símbolos verdes) para el diodo de GaN. Se incluyen además los valores de Γ (línea continua roja) y $1 - |\Gamma|^2$ (línea discontinua roja). (b) Valores de la curvatura γ (línea continua negra) y la resistencia R (línea continua naranja). Señal aplicada de 1 GHz y -20 dBm.

Conclusions

According to the main objectives presented in the introduction of this thesis, Schottky Barrier Diodes (SBDs) based on gallium arsenide (GaAs) and gallium nitride (GaN) have been characterized by means of experimental measurements and Monte Carlo (MC) simulations. Capacitance, current transport mechanisms and breakdown voltage are the main physical characteristics studied in the present work. The most relevant conclusions are organized by chapters as follows:

Chapter 2

1. The edge-effect capacitance is characterized by a dimensionless parameter, β , which depends on the surface charge. This capacitance has been analyzed using a constant charge model (CCM, that fixes the value of the surface charge determined by the surface potential), obtaining that with the increase of the surface charge the depletion region is laterally extended, so that the edge-effect capacitance decreases.
2. Using the CCM, it is found that for large enough values of the surface charge, β has similar values for different doping levels, being the edge effects independent of the doping in GaAs and GaN diodes. On the other hand, β increases with the doping for low surface charge values. This happens because of the coupling of the electric field between the Schottky contact and the semiconductor through the top dielectric, therefore adding an “extrinsic” contribution to the edge-effect capacitance. This “extrinsic” contribution depends mainly on the permittivity of the dielectric and the thickness of the Schottky contact, and is screened when a high value of the surface charge is used.
3. The lateral extension of the epilayer is a key parameter for the analysis of edge effects. The simulations show that the CCM can be only used when the depletion region is not affected by the lateral extension of the epilayer. The self-consistent charge model (SCCM) provides more realistic results. Two pa-

rameters are extracted with this model: β_e to characterize the capacitance at high frequency and β_T at low frequency. The SCCM has allowed us to demonstrate that a reduction of the epilayer lateral extension decreases the edge effects, being even suppressed. β_e is even negative when the epilayer and the Schottky contact are aligned, meaning that the depletion region under the Schottky is reduced by the effect of the surface charges at the vertical sidewall of the epilayer.

4. The influence of the dielectric passivation on the edge-effect capacitance has been studied in GaN SBDs. The depletion associated to the edge effects penetrates into the lateral extension of the epilayer to an extent which depends on the dielectric material. The results indicate that edge effects can be minimized by the use of a material with a low dielectric constant, as well as reducing its thickness. On the other hand, the sharp potential drop at the edges of the Schottky contact is smoothed by the presence of the passivation dielectric (effect which is enhanced with a high-k material), so that it can be beneficial for increasing the breakdown voltage of the diodes.

Chapter 3

5. A complete and unified model has been developed to predict the ideal current in SBDs, constituted by thermionic and tunneling contributions. This model uses the same set of parameters to reproduce the forward and reverse $I - V$ curves, considering the influence of image force and the doping. The barrier height, series resistance and ideality factor are extracted from the fitting between the model and the measurements in forward bias. For the higher temperatures, the ideality factor and the barrier remain practically constant. However, for lower temperatures the barrier decreases and the ideality factor increases, indicating a non-ideal behavior. In forward bias, the thermionic emission is the only current contribution considered, finding always a good agreement with the experimental curves for all temperatures.
6. The parameters extracted from forward $I - V$ characteristics allow to predict the reverse ideal behavior of the diode. For the highest temperatures, the results of the model practically coincide with the experimental values, thus confirming the nearly ideal behavior of the diodes, and for the other temperatures a current in excess associated to non-ideal trap-related mechanisms is studied. Two main mechanisms has been identified: the Poole-Frenkel emission shows a dependence with temperature and appears at high temperatures, while

the trap assisted tunneling is independent of temperature and has been found at low temperatures.

7. A hysteresis phenomenon was found in reverse dual sweep I - V curves. The hysteresis is observed at low temperatures and reveals the coexistence of two traps which are occupied by increasing the voltage. On the go path the trap with a lower energy (with respect to the conduction band) prevails, while for the return path the trap with higher energy dominates. The occupation of the lower energy trap has an important effect in the current, being a non-reversible process.
8. The breakdown voltage analysis has been done by means of an unidimensional MC simulator. For the precise calculation of the breakdown voltage in high reverse bias, the barrier profile determining electron tunnel injection must be self-consistently calculated with carrier concentration in the depletion region, thus being necessary the simulation of carrier transport. Impact ionizations must be considered, since the effect of the tunnel injection is boosted up. Electron-holes pairs are produced by the injected electrons, leading to the avalanche breakdown. The voltage range at which these effects are relevant depends on the doping of the epilayer and the barrier height.
9. The 2-D MC simulator has been used to calculate the breakdown voltage in realistic geometries considering bidimensional effects. A higher electric field is found at the edge of the Schottky contact, producing an increase in the tunnel injection in this region, thus generating more impact-ionization events. GaN SBDs with different doping, epilayer thickness and dielectric materials have been simulated. The passivation reduces the electric field and the tunnel injection at the contact edge, being beneficial to improve the breakdown voltage.
10. The larger the epilayer thickness, the higher the breakdown voltage. The breakdown is mainly produced by the presence of impact ionizations when the epilayer thickness is large enough to avoid full depletion. In contrast, the very high hole concentration in the vicinity of the Schottky contact which results in a higher tunnel injection associated with the narrowing of the barrier, also contributes to the breakdown, which becomes more pronounced.

Chapter 4

11. The intrinsic Y parameters of the SBDs have been obtained by de-embedding and then modeled by means of a small-signal equivalent circuit. The parasitic elements associated to the bridge and the intrinsic parameters of the diode

- (series resistance, junction resistance and junction capacitance) have been extracted. The capacitance obtained from C - V measurements in a big diode (no edge effects are present) and the one extracted from the circuit, exhibit similar values.
12. The capability of SBDs as detectors was studied in GaAs and GaN diodes. The responsivity is null at zero bias due to the strong mismatch. The bias condition where the responsivity is maximum thanks to the non linearity has been identified. For this bias point the responsivity is constant up to a cut-off frequency which in both diodes is around 20 – 25 GHz. The detection in diodes with different surface shows that the cut-off frequency decreases due to the higher capacitance when the surface is increased.
 13. A quasistatic model reproduces the RF measurements in forward-bias conditions. In GaAs, the optimum bias point coincides with the matched point, providing a high responsivity. However, in GaN the higher resistance produces a strong mismatch, thus obtaining a lower responsivity. The optimal theoretical value of the bowing coefficient (given by the thermionic emission equation) is reached in both diodes.

Future outlook

This thesis includes measurements and simulations that, from the physics point of view, aim at analysing carrier dynamics inside the device and contribute to the optimization of GaN SBDs. We suggest some ideas to improve and continue the topic of this work that, either due to lack of time or because they were beyond the scope and objectives presented in this manuscript, could not be addressed in detail. We collect them here as future research lines:

- Trapping effects should be analyzed in more detail by means of impedance measurements versus temperature, in order to determine the kind of traps present in the devices and the trapping and detrapping times.
- S -parameters and detection measurements should be performed in a wider frequency range and in temperature, as well as in diodes with different geometries and sizes.
- The extraction of diode parameters from the small-signal equivalent circuit for different temperatures should be done to study the presence of trap effects.
- The output power and conversion efficiency should be determined to characterize the Schottky diode as frequency multiplier at different frequencies for GaAs and GaN technology.

- MC 1-D and 2-D models used to estimate the breakdown voltage should be compared. Simulations should be validated by comparison with experiments.

Conclusiones

De acuerdo con los objetivos presentados en la introducción de esta tesis, se han analizado diodos de barrera Schottky (SBDs) basados en arseniuro de galio (GaAs) y nitruro de galio (GaN) mediante la caracterización experimental y el modelado Monte Carlo (MC). Los aspectos fundamentales que hemos estudiado son la capacidad, los procesos de transporte de corriente y el voltaje de ruptura. Las conclusiones más relevantes extraídas se han dividido por capítulos y son las siguientes:

En relación con el capítulo 2

1. La contribución a la capacidad debida a los efectos de borde se caracteriza a partir de un parámetro adimensional, β , que depende de la carga superficial. Mediante un modelo de carga constante (CCM, que fija el valor de la carga de superficie) se encuentra que al aumentar el valor de la carga de superficie, el vaciamiento se extiende lateralmente, haciendo que el valor absoluto de la capacidad de efectos de borde disminuya.
2. Usando el CCM, para valores de la carga superficial suficientemente grandes, β toma valores similares para diferentes dopajes en los diodos de GaAs y GaN. Además, los efectos de borde son prácticamente independientes del dopaje. Sin embargo, cuando el valor de la carga superficial es pequeño, β aumenta con el dopaje. Esto ocurre debido a la presencia de una contribución “extrínseca” añadida a la capacidad de efectos de borde y provocada por el acoplamiento del campo eléctrico entre el contacto Schottky y el semiconductor a través del dieléctrico. Esta contribución depende de la permitividad del dieléctrico y del espesor del contacto Schottky. Cuando la carga en la superficie es suficientemente grande se apantalla dicho efecto.
3. La extensión lateral de la *epilayer* constituye un parámetro fundamental en el análisis de los efectos de borde. Las simulaciones realizadas muestran que el CCM se puede usar únicamente cuando la zona de vaciamiento no depende

de la extensión lateral de la *epilayer*. De manera general, el modelo de carga autoconsistente (SCCM) proporciona resultados más realistas. Este modelo diferencia entre la capacidad a alta frecuencia (caracterizada por β_e) y la capacidad a baja frecuencia (β_T). Con el SCCM se encuentra que reduciendo la extensión lateral de la *epilayer*, los efectos de borde se reducen, llegando incluso a revertirse. De hecho, cuando la *epilayer* y el contacto Schottky están alineados, el valor de β_e que se obtiene es negativo, lo que implica que la zona de vaciamiento debajo del contacto Schottky se reduce por el efecto de la carga superficial en las paredes laterales de la *epilayer*.

4. Las simulaciones de los SBDs de GaN realizadas con el modelo SCCM muestran que el vaciamiento asociado a los efectos de borde y producido en la zona de la extensión lateral de la *epilayer* depende del material dieléctrico que se utiliza para pasivar el diodo. Cuanto menor sea la permitividad del material de pasivación, menores son los efectos de borde. Además, a medida que se reduce el espesor del dieléctrico, se reduce la capacidad. A pesar de que la capacidad aumenta al utilizar un material dieléctrico con una permitividad alta, el campo eléctrico en el borde es menor, constituyendo un beneficio para la mejora del voltaje de ruptura.

En relación con el capítulo 3

5. Mediante un modelo completo y unificado se predice la corriente ideal en SBDs, formada por las contribuciones de la emisión termoiónica y la inyección túnel. El modelo incluye el efecto de la carga imagen y el efecto del dopaje, además de utilizar los mismos parámetros para reproducir las curvas en directa e inversa. Del ajuste de las curvas experimentales en directa se extraen los parámetros específicos de un diodo Schottky, como son la barrera, la resistencia serie y el factor de idealidad. Para las temperaturas altas, el factor de idealidad y la barrera se mantienen prácticamente constantes. Sin embargo, para las temperaturas bajas, la barrera disminuye y el factor de idealidad aumenta, indicando un comportamiento no tan ideal. En directa se considera únicamente la emisión termoiónica y se ajustan perfectamente las curvas experimentales de diodos circulares de GaN para todas las temperaturas.
6. Los parámetros que se extraen de los ajustes de las curvas $I-V$ en directa permiten predecir el comportamiento ideal del diodo en inversa. Comparando las medidas experimentales con el modelo, se concluye que para las temperaturas más altas los diodos presentan un comportamiento prácticamente ideal, y

para el resto de temperaturas se estudia el exceso de corriente observado. La contribución adicional de corriente se atribuye a mecanismos no ideales presentes en los diodos. Se han encontrado dos mecanismos diferenciados, ambos producidos por trampas. El primero es la emisión Poole-Frenkel, que aparece para temperaturas altas y cuya corriente depende de la temperatura, y el segundo es el túnel asistido por trampas, presente a bajas temperaturas, y cuya contribución a la corriente es independiente de la temperatura.

7. El doble barrido en las medidas de las curvas $I-V$ en inversa muestra un fenómeno de histéresis para las temperaturas más bajas, indicando la coexistencia de dos trampas que se van ocupando al aplicar voltajes crecientes en inversa. En el barrido de ida predomina la de menor energía (con respecto a la banda de conducción), la cual no se desocupa, y en el de vuelta la corriente disminuye y predomina la de mayor energía. Se concluye que el efecto en la corriente debido a la ocupación de las trampas es no reversible para la de menor energía.
8. El análisis cualitativo del voltaje de ruptura y sus causas, realizado mediante simulaciones MC unidimensionales en SBDs de GaN para polarizaciones en inversa altas, demuestra la necesidad de utilizar un modelo de inyección túnel en el que el perfil de la barrera sea autoconsistente con la concentración de portadores en la zona de vaciamiento. Además, es importante considerar la ionización por impacto, ya que cuando la inyección túnel es significativa, los electrones inyectados producen pares electrón-hueco que pueden llevar a la ruptura por avalancha. El rango de voltaje donde el túnel y la ionización por impacto son importantes depende del dopaje y la barrera del diodo.
9. El simulador MC bidimensional es necesario para calcular el voltaje de ruptura considerando los efectos bidimensionales, los cuales generan un valor mayor del campo en el borde del contacto. Al aumentar la inyección túnel en esa zona, se producen más ionizaciones por impacto que pueden llevar a la ruptura del diodo. Se simulan SBDs de GaN con diferentes dopajes, espesores de la *epilayer* y materiales dieléctricos de pasivación. La pasivación del diodo mejora el voltaje de ruptura, generando un menor valor del campo eléctrico en el borde y, por lo tanto, menor inyección túnel.
10. El voltaje de ruptura es mayor cuanto mayor sea el espesor de la *epilayer* y la permitividad del dieléctrico. Cuando el espesor de la *epilayer* es suficientemente grande como para que no se vacíe del todo a voltajes próximos a la ruptura, esta es producida fundamentalmente por el aumento de los procesos de ionización por impacto. En caso contrario, el estrechamiento de la barrera y la mayor inyección túnel asociada, originados por la presencia de una concentración muy

elevada de huecos junto al contacto Schottky, también contribuyen a la ruptura, que es más abrupta.

En relación con el capítulo 4

11. Se han medido los parámetros S de los diodos y se ha realizado el *de-embedding* para eliminar los efectos parásitos asociados a los *pads*. Se han calculado los elementos parásitos (asociados al puente del contacto Schottky) y los parámetros intrínsecos del diodo (resistencia serie, resistencia de la unión y capacidad) mediante un modelo simple de circuito equivalente. El valor de la capacidad medido en diodos grandes donde no hay efectos de borde y el obtenido mediante nuestro circuito equivalente son similares.
12. La capacidad de detección de los SBDs se ha estudiado en diodos de GaAs y de GaN. Cuando el diodo no se polariza, debido a la desadaptación entre el diodo y la fuente, la responsividad es prácticamente nula. Es necesario polarizar en torno al voltaje o la corriente donde la no linealidad es máxima para obtener la mayor responsividad posible. En el punto óptimo ambos diodos presentan una responsividad constante hasta alcanzar una frecuencia de corte de aproximadamente 20 – 25 GHz, a partir de la cual el valor disminuye. La comparación de la frecuencia de corte de la detección entre diodos del mismo material pero con diferente superficie muestra que a medida que la superficie aumenta, la frecuencia de corte disminuye por el aumento de la capacidad.
13. Un modelo cuasiestático reproduce las medidas experimentales de la responsividad en condiciones de polarización directa. Para el diodo de GaAs, el punto óptimo coincide con el punto donde el diodo y la fuente están perfectamente adaptados y presenta una responsividad elevada. Sin embargo, en el diodo de GaN, su alta resistencia provoca una mayor desadaptación y en consecuencia una menor responsividad. En ambos diodos se alcanza el valor teórico ideal de la curvatura, el cual se obtiene a partir de las derivadas de la ecuación de la emisión termoiónica.

Líneas futuras

Esta tesis presenta medidas y simulaciones que, desde el punto de vista de la física, tienen como objetivo analizar los procesos que ocurren en el interior del dispositivo y contribuir a la optimización de SBDs de GaN. A continuación se van a sugerir algunas ideas para proseguir con el presente trabajo que, debido a la falta de tiempo o a que

se encuentran más allá de los objetivos planteados en esta tesis doctoral, no se han podido desarrollar en detalle. Las posibles líneas de investigación futuras son:

- Analizar con más detalle los efectos de trampas en temperatura a través de medidas de impedancia, para determinar el tipo de trampas presentes en los dispositivos y sus tiempos de liberación y captura.
- Medir en RF tanto los parámetros S como la detección en un rango de frecuencia más amplio, así como comparar diodos con diferentes geometrías y tamaños.
- Extraer los parámetros del circuito equivalente de pequeña señal y medir detección para diferentes temperaturas teniendo en cuenta la posibilidad de realizar la calibración de los parámetros S en temperatura.
- Caracterizar el diodo Schottky como multiplicador, determinando la potencia de salida y su eficiencia para GaAs y GaN.
- Tratar de correlacionar los modelos de MC 1-D y 2-D para el estudio del voltaje de ruptura, además de comparar los resultados de las simulaciones con valores experimentales.

Publicaciones y Contribuciones a Congresos

Publicaciones

Algunos de los resultados presentados en esta tesis se han publicado en revistas científicas internacionales:

- **B. Orfao**, B. G. Vasallo, D. Moro-Melgar, S. Pérez, J. Mateos, and T. González, “Analysis of surface charge effects and edge fringing capacitance in planar GaAs and GaN Schottky barrier diodes”, *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 67, no. 9, pp. 3530, Jul. 2020.
- **B. Orfao**, B. G. Vasallo, S. Pérez, J. Mateos, D. Moro-Melgar, M. Zaknoune, and T. González, “Dielectric Passivation and Edge Effects in Planar GaN Schottky Barrier Diodes”, *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 68, no. 9, pp. 4296, Jul. 2021.
- **B. Orfao**, G. Di Gioia, B. G. Vasallo, S. Pérez, J. Mateos, Y. Roelens, E. Frayssinet, Y. Cordier, M. Zaknoune, and T. González “Comprehensive model for ideal reverse leakage current components in Schottky barrier diodes tested in GaN-on-SiC samples”, *Journal of Applied Physics*, vol. 132, no. 4, pp. 044502, Jul. 2022.
- T. González, **B. Orfao**, S. Pérez, J. Mateos, and B. G. Vasallo “Role of impact ionization and self-consistent tunnel injection in Schottky-barrier diodes operating under strong reverse-bias conditions”, *Applied Physics Express*, vol. 16, no. 2, pp. 024003, Feb. 2023.

Contribuciones a congresos

Algunos de los resultados se han presentado (o se presentarán) en los siguientes congresos nacionales e internacionales:

- **B. Orfao**, B. G. Vasallo, D. Moro-Melgar, T. González and J. Mateos, “Influence of the Surface Charges on the Edge Fringing Capacitance in GaAs and GaN Schottky Barrier Diodes”, *2019 The 9th Asia-Pacific Workshop on Widegap Semiconductors (APWS 2019)*, Okinawa, Japan (2019). **Poster Presentation.**
- **B. Orfao**, B. G. Vasallo, D. Moro-Melgar, T. González and J. Mateos, “Analysis of surface charge and edge effects in GaN Schottky barrier diodes”, *Summer School on wide-bandgap nitride devices*, Ghent, Belgium (2019). **Poster Presentation.**
- **B. Orfao**, B. G. Vasallo, D. Moro-Melgar, M. Zaknونة, G. Di Gioia, M. Samnoui, S. Pérez, T. González, and J. Mateos, “Technological Parameters and Edge Fringing Capacitance in GaN Schottky Barrier Diodes: Monte Carlo Simulations”, *2021 13th Spanish Conference on Electron Devices (CDE 2021)*, Sevilla, (2021). **Oral Presentation.**
- **B. Orfao**, G. Di Gioia, B. G. Vasallo, S. Pérez, J. Mateos, Y. Roelens, Y. Cordier, M. Zaknونة and T. González, “Physical Analysis of Current Mechanisms in High-Frequency GaN-on-SiC Schottky Barrier Diodes”, *2022 Workshop on Compound Semiconductor Devices and Integrated Circuits held in Europe (WOCSDICE 2022)*, Ponta Delgada, Portugal (2022). **Oral Presentation.**
- **B. Orfao**, G. Di Gioia, B. G. Vasallo, S. Pérez, M. Zaknونة, Y. Cordier, Y. Roelens, J. Mateos and T. González, “Analysis of the low temperature behavior of GaN-on-SiC Schottky barrier diodes”, *2022 32nd International Symposium on Space Terahertz Technology (ISSTT 2022)*, Baeza (2022). **Poster Presentation.**
- R. A. Peña, **B. Orfao**, B. G. Vasallo, I. Íñiguez-de-la-Torre, M. A. Daher, M. Zaknونة, J. Mateos, T. González and S. Pérez, “Temperature analysis of reverse leakage current hysteresis in GaN Schottky Barrier Diodes”, *2023 Workshop on Compound Semiconductor Devices and Integrated Circuits held in Europe (WOCSDICE 2023)*, Palermo, Italia (2023). **Oral Presentation.**
- **B. Orfao**, M. A. Daher, B. G. Vasallo, M. Zaknونة, S. Pérez, J. Mateos, and T. González, “Modeling and Characterization of GaN Schottky Barrier Diodes”, *2023 14th Spanish Conference on Electron Devices (CDE 2023)*, Valencia, (2023). **Oral Presentation.**
- **B. Orfao**, B. G. Vasallo, S. Pérez, J. Mateos, and T. González, “Modelling of Schottky-Barrier Diodes Operating under Strong Reverse-Bias Conditions”,

2023 International Workshop on Computational Nanotechnology (IWCN 2023),
Barcelona (2023). **Oral Presentation.**

Estancia de investigación

Se realizó una estancia de tres meses (25/04/2022-25/07/2022) en el Institut d'Électronique de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN), de la Universidad de Lille, en Villeneuve d'Ascq, (Francia) financiada mediante el Programa IV: ayuda de movilidad del personal investigador de la Universidad de Salamanca.

Financiación y proyectos de investigación

El desarrollo de esta tesis doctoral ha sido posible gracias a la financiación del Programa de ayudas a la contratación de personal investigador de reciente titulación universitaria de la Junta de Castilla y León, cofinanciadas por el Fondo Social Europeo (Orden EDU/556/2019).

Los resultados presentados en esta tesis forman parte del trabajo del Grupo de Investigación Dispositivos Nanoelectrónicos de Alta Frecuencia (<http://nanoelec.usal.es>) de la Universidad de Salamanca, reconocido por la Junta de Castilla y León como Unidad de Investigación Consolidada.

Los proyectos de Investigación en los que ha participado el doctorando son:

- Diodes based on GaN technology for generation and detection in the subterahertz band (TEC2017-83910-R). Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO).
- Simulation and characterization of electrothermal effects in sub-THz electronic devices for high-speed communications (SA254P18). Consejería de Educación de la Junta de Castilla y León.
- Ultrafast and efficient nanodevices for THz communications and spectroscopy based on narrow and wide bandgap semiconductors (PID2020-115842RB-I00). Ministerio de Ciencia e Innovación.

Equipos

Los resultados experimentales presentados en este trabajo se han obtenido en el Laboratorio de Dispositivos RF perteneciente a USAL-NANOLAB (Laboratorio de Nanoelectrónica y Nanomateriales de la Universidad de Salamanca), situado en el Edificio Multiusos I+D+i. Los equipos utilizados son:

- Cascade M150 probe station
- Keithley 4200-SCS semiconductor analyzer
- Agilent PNA-X N5244 vector network analyzer
- LakeShore CRX-VF cryogenic probe station
- Agilent B2902A source/measure unit
- Agilent E4980A impedance analyzer

Las simulaciones se han llevado a cabo en un cluster de 240 vías cuya última actualización está formada por 4 nodos con 2 CPUs Intel Xeon 6234 con 8 cores a 3.3 GHz (96 Gb RAM).

Bibliografía

- [1] P. H. Siegel, “Terahertz technology,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 50, no. 3, pp. 910–928, 2002.
- [2] T. W. Crowe, W. L. Bishop, D. W. Porterfield, J. L. Hesler, and R. M. Weikle, “Opening the terahertz window with integrated diode circuits,” *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, vol. 40, no. 10, pp. 2104–2110, 2005.
- [3] R. Han, Y. Zhang, Y. Kim, D. Y. Kim, H. Shichijo, E. Afshari, and K. K. O, “Active terahertz imaging using Schottky diodes in CMOS: Array and 860-GHz pixel,” *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, vol. 48, no. 10, pp. 2296–2308, 2013.
- [4] K. Mitobe, M. Manabe, N. Yoshimura, and T. Kurabayashi, “Imaging of epithelial cancer in sub-terahertz electromagnetic wave,” in *IEEE Engineering in Medicine and Biology 27th Annual Conference*, 2005, pp. 199–200.
- [5] G. Gauthier, W. Ali-Ahmad, T. Budka, D. Filipovic, and G. Rebeiz, “A uniplanar 90-GHz Schottky-diode millimeter-wave receiver,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 43, no. 7, pp. 1669–1672, 1995.
- [6] I. Mehdi, S. M. Marazita, D. A. Humphrey, L. Trong-Huang, R. J. Dengler, J. E. Oswald, A. J. Pease, S. C. Martin, W. L. Bishop, T. W. Crowe, and P. Siegel, “Improved 240-GHz subharmonically pumped planar Schottky diode mixers for space-borne applications,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 46, no. 12, pp. 2036–2042, 1998.
- [7] D. Mittleman, *Sensing with THz Radiation*. Springer-Verlag, 2003.
- [8] H. Eisele, “State of the art and future of electronic sources at terahertz frequencies,” *Electronics Letters*, vol. 46, no. 26, pp. 8–11, 2010.

- [9] G. Chattopadhyay, "Technology, capabilities, and performance of low power terahertz sources," *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, vol. 1, no. 1, pp. 33–53, 2011.
- [10] L. Gatilova, A. Maestrini, J. Treuttel, T. Vacelet, Y. Jin, A. Cavanna, L. Couraud, A. Féret, G. Gay, S. Carooopen, J. Valentin, S. Mignoni, J. M. Krieg, and C. Goldstein, "Recent progress in the development of french THz Schottky diodes for astrophysics, planetology and atmospheric study," 2019, pp. 1–2.
- [11] J. C. Pedro, "The wonderful world of nonlinearity : A distinguished microwave lecture on the modeling and characterization of RF and microwave circuits," *IEEE Microwave Magazine*, vol. 16, no. 9, pp. 22–35, 2015.
- [12] A. Maestrini, J. Ward, G. Chattopadhyay, E. Schlecht, and I. Mehdi, "Terahertz sources based on frequency multiplication and their applications," *Frequenz*, vol. 62, no. 5-6, pp. 118–122, 2008.
- [13] A. Maestrini, B. Thomas, H. Wang, C. Jung, J. Treuttel, Y. Jin, G. Chattopadhyay, I. Mehdi, and G. Beaudin, "Schottky diode-based terahertz frequency multipliers and mixers," *Comptes Rendus Physique*, vol. 11, no. 7-8, pp. 480–495, 2010.
- [14] D. W. Porterfield, "High-efficiency terahertz frequency triplers," in *IEEE/MTT-S International Microwave Symposium*, 2007, pp. 337–340.
- [15] A. Maestrini, J. S. Ward, J. J. Gill, H. S. Javadi, E. Schlecht, C. Tripon-Canseliet, G. Chattopadhyay, and I. Mehdi, "A 540-640 GHz high-efficiency four-anode frequency tripler," *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 53, no. 9, pp. 2835–2843, 2005.
- [16] J. V. Siles, A. Maestrini, B. Alderman, S. Davies, H. Wang, J. Treuttel, E. Lelerc, T. Narhi, and C. Goldstein, "A single-waveguide in-phase power-combined frequency doubler at 190 GHz," *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, vol. 21, no. 6, pp. 332–334, 2011.
- [17] I. Mehdi, J. V. Siles, C. Lee, and E. Schlecht, "THz diode technology: status, prospects, and applications," *Proceedings of the IEEE*, vol. 105, no. 6, pp. 990–1007, 2017.
- [18] C. Jacoboni and P. Lugli, *The Monte Carlo method for semiconductor device simulation*. Springer Science & Business Media, 1989.

- [19] C. Moglestue, *Monte Carlo simulation of semiconductor devices*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [20] K. Tomizawa, *Numerical simulation of submicron semiconductor devices*. Artech House, 1993.
- [21] G. D. Gioia, M. Samnoui, V. Chinni, P. Mondal, J. Treuttel, M. Zegaoui, G. Ducournau, M. Zaknoune, and Y. Roelens, “GaN Schottky diode on sapphire substrate for THz frequency multiplier applications,” *Micro and Nanostructures*, vol. 164, pp. 1–8, 2022.
- [22] J. M. Schellenberg, “A 2-W W-band GaN traveling-wave amplifier with 25-GHz bandwidth,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 63, no. 9, pp. 2833–2840, 2015.
- [23] Y. Zhang, M. Sun, D. Piedra, M. Azize, X. Zhang, T. Fujishima, and T. Palacios, “GaN-on-Si vertical Schottky and pn diodes,” *IEEE Electron Device Letters*, vol. 35, no. 6, pp. 618–620, 2014.
- [24] Z. H. Feng, S. X. Liang, D. Xing, J. L. Wang, D. B. Yang, Y. L. Fang, L. S. Zhang, and X. Y. Zhao, “High-frequency multiplier based on GaN planar Schottky barrier diodes,” in *IEEE MTT-S International Microwave Workshop Series on Advanced Materials and Processes for RF and THz Applications (IMWS-AMP)*, 2016, pp. 1–3.
- [25] S. Liang, Y. Fang, D. Xing, Z. Zhang, J. Wang, H. Guo, L. Zhang, G. Gu, and Z. Feng, “GaN planar Schottky barrier diode with cut-off frequency of 902 GHz,” *Electronics Letters*, vol. 52, no. 16, pp. 1408–1410, 2016.
- [26] B. Zhang, D. Ji, D. Fang, S. Liang, Y. Fan, and X. Chen, “A novel 220-GHz GaN diode on-chip tripler with high driven power,” *IEEE Electron Device Letters*, vol. 40, no. 5, pp. 780–783, 2019.
- [27] S. Liang, X. Song, L. Zhang, Y. Lv, Y. Wang, B. Wei, Y. Guo, G. Gu, B. Wang, S. Cai, and Z. Feng, “A 177–183 GHz high-power GaN-based frequency doubler with over 200 mW output power,” *IEEE Electron Device Letters*, vol. 41, no. 5, pp. 669–672, 2020.
- [28] N. F. Mott and N. Sneddon, *Wave Mechanics and Its Applications*. University Press, Oxford, 1948.
- [29] J. W. Archer, “Millimeter wavelength frequency multipliers,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 29, no. 6, pp. 552–557, 1981.

- [30] P. Sobis, V. Drakinskiy, N. Wadefalk, Y. Karandikhar, A. Hammar, A. Emrich, H. Zhao, T. Bryllert, A. Y. Tang, P. A. Nilsson, J. Schlee, H. Kim, K. Jacob, A. Murk, J. Grahn, and J. Stake, “Low noise GaAs Schottky TMIC and InP HEMT MMIC based receivers for the ISMAR and SWI instruments,” in *Proceedings ESAESTEC Micro-and Milimetre Wave Technology and Techniques Workshop*, 2014, pp. 25–27.
- [31] O. Cojocari, C. Sydlo, H. L. Hartnagel, S. Biber, J. Schür, and L. P. Schmidt, “Schottky-structures for THz-applications based on quasi-vertical design-concept,” in *International Symposium on Space Terahertz Technology, Göteborg, Sweden*, 2005, pp. 490–495.
- [32] N. An, Q. Li, J. Zeng, J. Jiang, B. Lu, and W. Tan, “GaN planar Schottky barrier diode with cut-off frequency of 627 GHz,” in *14th China International Forum on Solid State Lighting: International Forum on Wide Bandgap Semiconductors China (SSLChina: IFWS)*, 2017, pp. 204–206.
- [33] J. T. Louhi, “The capacitance of a small circular Schottky diode for submillimeter wavelengths,” *IEEE Microwave Guided Wave Letters*, vol. 4, no. 4, pp. 107–108, 1994.
- [34] D. Moro-Melgar, A. Maestrini, J. Treuttel, L. Gatilova, T. González, B. G. Vasallo, and J. Mateos, “Monte Carlo study of 2-D capacitance fringing effects in GaAs planar Schottky diodes,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 63, no. 10, pp. 3900–3907, 2016.
- [35] X. Guo, Y. Zhong, X. Chen, Y. Zhou, S. Su, S. Yan, J. Liu, X. Sun, Q. Sun, and H. Yang, “Reverse leakage and breakdown mechanisms of vertical GaN-on-Si Schottky barrier diodes with and without implanted termination,” *Applied Physics Letters*, vol. 118, no. 24, pp. 1–6, 2021.
- [36] F. Huang, C. Chu, X. Jia, K. Tian, Y. Zhang, Q. Zheng, Q. Li, and Z. H. Zhang, “Simulation study for GaN-based hybrid trench MOS barrier Schottky diode with an embedded p-type NiO termination: increased forward current density and enhanced breakdown voltage,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 61, no. 1, pp. 1–10, 2022.
- [37] B. Orfao, G. D. Gioia, B. G. Vasallo, S. Pérez, J. Mateos, Y. Roelens, E. Fraysinet, Y. Cordier, M. Zaknoune, and T. González, “Comprehensive model for ideal reverse leakage current components in Schottky barrier diodes tested in GaN-on-SiC samples,” *Journal of Applied Physics*, vol. 132, no. 4, pp. 1–10, 2022.

- [38] K. Fu, H. Fu, X. Huang, T. Yang, C. Cheng, P. Peri, H. Chen, J. Montes, C. Yang, J. Zhou, X. Deng, X. Qi, D. J. Smith, S. M. Goodnick, and Y. Zhao, "Reverse leakage analysis for As-grown and regrown vertical GaN Schottky barrier diodes," *IEEE Journal Electron Devices Society*, vol. 8, pp. 74–83, 2020.
- [39] X. Liu, H. Gu, K. Li, J. Wang, L. Wang, H. C. Kuo, W. Liu, L. Chen, J. Fang, M. Liu, X. Lin, K. Xu, and J. P. Ao, "GaN Schottky barrier diodes on free-standing GaN wafer," *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, vol. 6, no. 10, pp. N216–N220, 2017.
- [40] J. Suda, K. Yamaji, Y. Hayashi, T. Kimoto, K. Shimoyama, H. Namita, and S. Nagao, "Nearly ideal current-voltage characteristics of Schottky barrier diodes formed on hydride-vapor-phase-epitaxy-grown GaN free-standing substrates," *Applied Physics Express*, vol. 3, no. 10, pp. 1–3, 2010.
- [41] X. Liu, F. Lin, J. Li, Y. Lin, J. Wu, H. Wang, X. Li, S. Huang, Q. Wang, H. C. Chiu, and H. C. Kuo, "1.7-kV Vertical GaN-on-GaN Schottky barrier diodes with helium-implanted edge termination," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 69, no. 4, pp. 1938–1944, 2022.
- [42] S. Han, S. Yang, and K. Sheng, "High-voltage and high- I_{ON}/I_{OFF} vertical GaN-on-GaN Schottky barrier diode with nitridation-based termination," *IEEE Electron Device Letters*, vol. 39, no. 4, pp. 572–575, 2018.
- [43] D. Johnstone, S. Biyikli, S. Dogan, Y. T. Moon, F. Yun, and H. Morkoç, "Comparison of deep levels in GaN grown by MBE, MOCVD, and HVPE," *Light-Emitting Diodes: Research, Manufacturing, and Applications IX*, vol. 5739, pp. 7–15, 2005.
- [44] J. Treuttel, L. Gatilova, A. Maestrini, D. Moro-Melgar, F. Yang, F. Tamaouz, T. Vacelet, Y. Jin, A. Cavanna, J. Mateos, A. Feret, C. Chaumont, and C. Goldstein, "A 520-620 GHz Schottky receiver front-end for planetary science and remote sensing with 1070K-1500K DSB noise temperature at room temperature," *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, vol. 6, no. 1, pp. 148–155, 2016.
- [45] M. T. Faber, J. Chramiec, and M. E. Adamski, *Microwave and Millimeter-Wave Diode Frequency Multipliers*. Artech House, 1995.
- [46] S. M. Sze and K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, 2007.

- [47] H. A. Bethe, *Theory of the boundary layer of crystal rectifiers*. World Scientific, 1991.
- [48] C. Y. Chang and S. M. Sze, "Carrier transport across metal-semiconductor barriers," *Solid-State Electronics*, vol. 13, pp. 727–740, 1970.
- [49] L. Sun, X. Y. Liu, M. Liu, G. Du, and R. Q. Han, "Monte Carlo simulation of Schottky contact with direct tunnelling model," *Semiconductors Science and Technology*, vol. 18, pp. 576–581, 2003.
- [50] C. K. Huang, W. E. Zhang, and C. H. Yang, "Two-dimensional numerical simulation of Schottky barrier MOSFET with channel length to 10 nm," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 45, no. 4, pp. 842–848, 1998.
- [51] E. L. Murphy and R. H. Good, "Thermionic Emission, Field Emission, and the Transition Region," *Physical Review*, vol. 102, no. 6, pp. 1464–1473, 1956.
- [52] F. A. Padovani and R. Stratton, "Field and thermionic-field emission in Schottky barriers," *Solid State Electronics*, vol. 9, no. 7, pp. 695–707, 1966.
- [53] W. Li, "Electrostatic engineering in wide-bandgap semiconductors for high power applications," Ph.D. dissertation, Cornell University, 2020.
- [54] J. Ren, W. Mou, L. Zhao, D. Yan, Z. Yu, G. Yang, S. Xiao, and X. Gu, "A comprehensive study of reverse current degradation mechanisms in Au/Ni/n-GaN Schottky diodes," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 64, no. 2, pp. 407–411, 2017.
- [55] Z. Bian, T. Zhang, J. Zhang, S. Zhao, H. Zhou, J. Xue, X. Duan, Y. Zhang, J. Chen, and K. D. et al., "Leakage mechanism of quasi-vertical GaN Schottky barrier diodes with ultra-low turn-on voltage," *Applied Physics Express*, vol. 12, no. 8, pp. 1–5, 2019.
- [56] D. Yu, C. Wang, B. L. Wehrenberg, and P. Guyot-Sionnest, "Variable range hopping conduction in semiconductor nanocrystal solids," *Physical Review Letters*, vol. 92, no. 21, pp. 1–4, 2004.
- [57] M. P. Houng, Y. H. Wang, and W. J. Chang, "Current transport mechanism in trapped oxides: A generalized trap-assisted tunneling model," *Journal of Applied Physics*, vol. 86, no. 3, pp. 1488–1491, 1999.

- [58] Z. H. Liu, G. I. Ng, S. Arulkumaran, Y. K. T. Maung, and H. Zhou, "Temperature-dependent forward gate current transport in atomic-layer-deposited $Al_2O_3/AlGaN/GaN$ metal-insulator-semiconductor high electron mobility transistor," *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 16, pp. 1–3, 2011.
- [59] E. J. Miller, E. T. Yu, P. Waltereit, and J. Speck, "Analysis of reverse-bias leakage current mechanisms in GaN grown by molecular-beam epitaxy," *Applied Physics Letters*, vol. 84, no. 4, pp. 535–537, 2004.
- [60] K. R. Peta and M. D. Kim, "Leakage current transport mechanism under reverse bias in Au/Ni/GaN Schottky barrier diode," *Superlattices and Microstructures*, vol. 113, pp. 678–683, 2018.
- [61] H. Zhang, E. J. Miller, and E. T. Yu, "Analysis of leakage current mechanisms in Schottky contacts to GaN and $Al_{0.25}Ga_{0.75}NGaN$ grown by molecular-beam epitaxy," *Journal of Applied Physics*, vol. 99, no. 2, pp. 1–6, 2006.
- [62] J. R. Yeagan and H. L. Taylor, "The Poole Frenkel Effect with compensation present," *Journal Applied Physics*, vol. 39, no. 12, pp. 5600–5604, 1968.
- [63] H. Iwano, S. Zaima, and Y. Yasuda, "Hopping conduction and localized states in p-Si wires formed by focused ion beam implantations," *Journal Vacuum Science Technology B Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, vol. 16, no. 4, pp. 2551–2554, 1998.
- [64] L. He, X. J. Wang, and R. Zhang, "Enhanced electrical performance of Au/n-GaN Schottky diodes by novel processing," *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, vol. 17, no. 4, pp. 1217–1220, 1999.
- [65] T. González, "Análisis del ruido electrónico en materiales y dispositivos semiconductores unipolares mediante el método de Monte Carlo," Ph.D. dissertation, Departamento de Física Aplicada Universidad de Salamanca, 1994.
- [66] J. Mateos, "Modelización microscópica del ruido electrónico en estructuras MESFET y HEMT submicrométricas. análisis numérico y experimental," Ph.D. dissertation, Departamento de Física Aplicada. Universidad de Salamanca, 1997.
- [67] B. G. Vasallo, "Transporte electrónico en estructuras de heterounión InAlAs/InGaAs: HEMTs y dispositivos balísticos de dimensiones nanométricas," Ph.D. dissertation, Departamento de Física Aplicada. Universidad de Salamanca, 2005.

- [68] N. Metropolis, “The beginning of the Monte Carlo method,” *Los Alamos Science*, vol. 15, pp. 125–130, 1987.
- [69] I. Íñiguez-de-la Torre, “Análisis de efectos de carga superficial en nanodispositivos semiconductores modelizados mediante simulaciones Monte Carlo,” Ph.D. dissertation, Departamento de Física Aplicada. Universidad de Salamanca, 2008.
- [70] S. García, “Monte Carlo analysis of Gunn oscillations and thermal effects in GaN-based devices,” Ph.D. dissertation, Departamento de Física Aplicada Universidad de Salamanca, 2015.
- [71] H. Sanchez, “High-frequency response and thermal effects in GaN diodes and transistors: modeling and experimental characterization,” Ph.D. dissertation, Departamento de Física Aplicada. Universidad de Salamanca, 2020.
- [72] S. Chen and G. Wang, “High-field properties of carrier transport in bulk wurtzite GaN: A Monte Carlo perspective,” *Journal of Applied Physics*, vol. 103, no. 2, pp. 1–6, 2008.
- [73] S. García, S. Pérez, I. Íñiguez-De-La-Torre, J. Mateos, and T. González, “Comparative Monte Carlo analysis of InP-and GaN-based gunn diodes,” *Journal of Applied Physics*, vol. 115, no. 4, pp. 1–7, 2014.
- [74] T. González, J. E. Velázquez, P. M. Gutiérrez, and D. Pardo, “Five-valley model for the study of electron transport properties at very high electric fields in GaAs,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 6, no. 9, pp. 862–871, 1991.
- [75] B. Nag, *Electron Transport in a Strong Magnetic Field*. Springer, 1980.
- [76] D. K. Ferry and R. O. Grondin, *Physics of submicron devices*. Plenum Press, 1991.
- [77] L. Cao, J. Wang, G. Harden, H. Ye, R. Stillwell, A. J. Hoffman, and P. Fay, “Experimental characterization of impact ionization coefficients for electrons and holes in GaN grown on bulk GaN substrates,” *Applied Physics Letters*, vol. 112, no. 26, pp. 1–5, 2018.
- [78] D. Ji, B. Ercan, and S. Chowdhury, “Experimental determination of impact ionization coefficients of electrons and holes in gallium nitride using homojunction structures,” *Applied Physics Letters*, vol. 115, no. 7, pp. 1–4, 2019.
- [79] D. Ji and S. Chowdhury, “On impact ionization and avalanche in gallium nitride,” *Applied Physics Letters*, vol. 117, no. 25, pp. 1–5, 2020.

- [80] T. Maeda, T. Narita, S. Yamada, T. Kachi, T. Kimoto, M. Horita, and J. Suda, "Impact ionization coefficients and critical electric field in GaN," *Journal of Applied Physics*, vol. 129, no. 18, pp. 1–12, 2021.
- [81] B. G. Vasallo, T. González, V. Talbo, Y. Lechaux, N. Wichmann, S. Bollaert, and J. Mateos, "Impact ionization and band-to-band tunneling in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ PIN ungated devices: A Monte Carlo analysis," *Journal of Applied Physics*, vol. 123, no. 3, pp. 1–5, 2018.
- [82] R. H. Fowler, *Statistical thermodynamics*. CUP Archive, 1939.
- [83] E. Pascual, "Modelado de estructuras Schottky y de transistores MOSFET con contactos de fuente y drenador metálicos para aplicaciones de alta frecuencia," Ph.D. dissertation, Departamento de Física Aplicada. Universidad de Salamanca, 2010.
- [84] D. Moro-Melgar, J. Mateos, T. González, and B. G. Vasallo, "Effect of tunnel injection through the Schottky gate on the static and noise behavior of GaInAs/AlInAs high electron mobility transistor," *Journal of Applied Physics*, vol. 116, no. 23, pp. 1–7, 2014.
- [85] H. Kim, H. S. Min, T. W. Tang, and Y. J. Park, "An extended proof of the Ramo-Shockley theorem," *Solid-State Electronics*, vol. 34, no. 11, pp. 1251–1253, 1991.
- [86] E. Yang, *Microelectronic devices*. McGraw-Hill New York, 1988.
- [87] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge university press, 2007.
- [88] T. W. Crowe, J. L. Hesler, E. Bryerton, and S. A. Retzliff, "Terahertz sources and receivers for science applications and test & measurement systems," in *IEEE Compound Semiconductor Integrated Circuit Symposium (CSICS)*, 2016, pp. 1–4.
- [89] J. Mateos, T. González, D. Pardo, V. Hoel, and A. Cappy, "Effect of the T-gate on the performance of recessed HEMTs, A Monte Carlo analysis," *Semiconductors Science and Technology*, vol. 14, no. 9, pp. 864–870, 1999.
- [90] J. Mateos, T. González, D. Pardo, V. Hoel, H. Happy, and A. Cappy, "Improved Monte Carlo algorithm for the simulation of δ -doped AlInAs/GaInAs HEMTs," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 47, no. 1, pp. 250–253, 2000.

- [91] T. González and D. Pardo, “Physical models of ohmic contact for Monte Carlo device simulation,” *Solid-State Electronics*, vol. 39, no. 4, pp. 555–562, 1996.
- [92] R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer Simulation using Particles*. CRC Press, 1988.
- [93] S. Tiwari, *Compound semiconductor device physics*. Academic press, 2013.
- [94] J. A. Copeland, “Diode edge effect on doping-profile measurements,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. ED-17, no. 5, pp. 404–407, 1970.
- [95] B. Gelmont, M. Shur, and R. J. Mattauch, “Capacitance-voltage characteristics of microwave Schottky diodes,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Technology*, vol. 39, no. 5, pp. 857–863, 1991.
- [96] J. T. Louhi and A. V. Raisanen, “On the modeling and optimization of Schottky varactor frequency multipliers at submillimeter wavelengths,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Technology*, vol. 43, no. 4, pp. 922–926, 1995.
- [97] I. Íñiguez-de-la Torre, J. Mateos, T. González, D. Pardo, J. S. Galloo, S. Bollert, Y. Roelens, and A. Cappy, “Influence of the surface charge on the operation of ballistic T-branch junctions: A self-consistent model for Monte Carlo simulations,” *Semiconductors Science and Technology*, vol. 22, no. 6, pp. 663–670, 2007.
- [98] I. Íñiguez-de-la Torre, C. Daher, J.-F. Millithaler, J. Torres, P. Nouvel, L. Varani, P. Sangaré, G. Ducournau, C. Gaquière, T. Gonzalez, and J. Mateos, “Operation of GaN planar nanodiodes as THz detectors and mixers,” *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, vol. 4, no. 6, pp. 670–677, 2014.
- [99] S. García, I. Íñiguez-de-la Torre, O. García-Pérez, J. Mateos, T. González, P. Sangaré, C. Gaquière, and S. Pérez, “Self-consistent electro-thermal simulations of AlGaN/GaN diodes by means of Monte Carlo method,” *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, vol. 30, no. 035001, pp. 1–8, 2015.
- [100] T. Hashizume, S. Ootomo, T. Inagaki, and H. Hasegawa, “Surface passivation of GaN and GaN/AlGaN heterostructures by dielectric films and its application to insulated-gate heterostructure transistors,” *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, vol. 21, no. 4, pp. 1828–1838, 2003.

- [101] A. Kumar, T. Singh, M. Kumar, and R. Singh, "Sulphide passivation of GaN based Schottky diodes," *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, vol. 14, no. 3, pp. 491–495, 2014.
- [102] A. Maestrini, L. Gatilova, J. Treuttel, Y. Jin, A. Cavanna, J. Valentin, T. Vacelet, A. Féret, S. Caroopen, G. Gay, S. Mignoni, J.-M. Krieg, P. D. Maagt, and C. Goldstein, "Terahertz Schottky mixers for atmospheric and planetary sciences," in *44th International Conference on Infrared Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz)*, 2019, pp. 1–2.
- [103] M. Ebrish, T. J. Anderson, A. D. Koehler, G. M. Foster, J. C. Gallagher, R. J. Kaplar, B. P. Gunning, and K. D. Hobart, "A study on the impact of mid-gap defects on vertical GaN diodes," *IEEE Transaction on Semiconductor Manufacturing*, vol. 33, no. 4, pp. 546–552, 2020.
- [104] M. Leszczynski, P. Prystawko, J. Plesiewicz, L. Dmowski, E. Litwin-Staszewska, S. Grzanka, E. Grzanka, and F. Roccaforte, "Comparison of Si, Sapphire, SiC, and GaN substrates for HEMT epitaxy," *ECS Transactions*, vol. 50, no. 3, pp. 163–171, 2012.
- [105] Y. Sun, X. Kang, Y. Zheng, J. Lu, X. Tian, K. Wei, H. Wu, W. Wang, X. Liu, and G. Zhang, "Review of the recent progress on GaN-Based vertical power Schottky barrier diodes (SBDs)," *Electronics*, vol. 8, no. 5, pp. 1–15, 2019.
- [106] S. K. Cheung and N. W. Cheung, "Extraction of Schottky diode parameters from forward current-voltage characteristics," *Applied Physics Letters*, vol. 49, no. 2, pp. 85–87, 1986.
- [107] W. Li, D. Saraswat, Y. Long, K. Nomoto, D. Jena, and H. G. Xing, "Near-ideal reverse leakage current and practical maximum electric field in β -Ga₂O₃ Schottky barrier diodes," *Applied Physics Letters*, vol. 116, no. 19, pp. 1–5, 2020.
- [108] M. Hara, H. Tanaka, M. Keneko, and T. Kimoto, "Critical electric field for transition of thermionic field emission/field emission transport in heavily doped SiC Schottky barrier diodes," *Applied Physics Letters*, vol. 120, no. 17, pp. 1–6, 2022.
- [109] J. Nicholls, S. Dimitrijević, P. Tanner, and J. Han, "Description and verification of the fundamental current mechanisms in silicon carbide Schottky barrier diodes," *Scientific Reports*, vol. 9, no. 3754, pp. 1–9, 2019.

- [110] W. Li, D. Jena, and H. G. Xing, “A unified thermionic and thermionic-field emission (TE-TFE) model for ideal Schottky reverse-bias leakage current,” *Journal Applied Physics*, vol. 131, no. 1, pp. 1–10, 2022.
- [111] K. Ejderha, S. Duman, C. Nuhoglu, F. Urhan, and A. Turut, “Effect of temperature on the current (capacitance and conductance) voltage characteristics of Ti/n-GaAs diode,” *Journal Applied Physics*, vol. 116, no. 23, pp. 1–6, 2014.
- [112] M. Gulnihar, “Temperature dependence of current-and capacitance-voltage characteristics of an Au/4H-SiC Schottky diode,” *Superlattices Microstructures*, vol. 76, pp. 394–412, 2014.
- [113] T. Maeda, M. Okada, M. Ueno, Y. Yamamoto, T. Kimoto, M. Horita, and J. Suda, “Terahertz sources based on frequency multiplication and their applications,” *Applied Physics Express*, vol. 10, pp. 1–4, 2017.
- [114] M. Vivona, G. Greco, G. Bellocchi, L. Zumbo, S. D. Franco, M. Saggio, S. Rascuna, and F. Roccaforte, “Electrical properties of inhomogeneous tungsten carbide Schottky barrier on 4H-SiC,” *Journal Applied Physics*, vol. 54, no. 5, pp. 1–9, 2021.
- [115] G. Chattopadhyay, E. Schlecht, J. S. Ward, J. J. Gill, H. Javadi, F. Maiwald, and I. Mehdi, “An all-solid-state broad-band frequency multiplier chain at 1500 GHz,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 52, no. 5, pp. 1538–1547, 2004.
- [116] W. K. Loke, S. F. Yoon, S. Wicaksono, K. H. Tan, and K. L. Lew, “Defect-induced trap-assisted tunneling current in GaInNAs grown on GaAs substrate,” *Journal of Applied Physics*, vol. 102, no. 5, pp. 1–6, 2007.
- [117] F. Bertazzi, M. Moresco, and E. Bellotti, “Theory of high field carrier transport and impact ionization in wurtzite GaN. Part I: A full band Monte Carlo model,” *Journal of Applied Physics*, vol. 106, no. 6, pp. 1–12, 2009.
- [118] J. R. Laroche, F. Ren, K. W. Baik, S. J. Pearson, B. S. Shelton, and B. Peres, “Design of edge termination for GaN power Schottky diodes,” *Journal of Electronic Materials*, vol. 34, pp. 370–374, 2005.
- [119] Y. Lei, H. Shi, H. Lu, D. Chen, R. Zhang, and Y. Zheng, “Field plate engineering for GaN-based Schottky barrier diodes,” *Journal of Semiconductors*, vol. 34, no. 5, pp. 1–8, 2013.

- [120] F. Caspers, “Rf engineering basic concepts: S-parameters,” *CERN Yellow Report*, pp. 95–116, 2012.
- [121] J. Choma, “Scattering parameters: concept, theory, and applications,” *University of Southern California, Course notes*, 2009.
- [122] D. Frickey, “Conversions between S, Z, Y, H, ABCD, and T parameters which are valid for complex source and load impedances,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 42, no. 2, pp. 205–211, 1994.
- [123] M. Koolen, “An improved de-embedding technique for on-wafer high-frequency characterization,” in *Proceedings Bipolar Circuits and Technology Meeting*, 1991, pp. 188–191.
- [124] A. Y. Tang, V. Drakinskiy, K. Yhland, J. Stenarson, T. Bryllert, and J. Stake, “Analytical extraction of a Schottky diode model from broadband S-Parameters,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 61, no. 5, pp. 1870–1878, 2013.
- [125] A. Westlund, “Self-switching diodes for zero-bias terahertz detection,” Ph.D. dissertation, Chalmers Tekniska Hogskola (Sweden), 2015.
- [126] Z. Zhang, R. Rajavel, P. Deelman, and P. Fay, “Sub-micron area heterojunction backward diode millimeter-wave detectors with $0.18 \text{ pW/Hz}^{1/2}$ noise equivalent power,” *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, vol. 21, no. 5, pp. 267–269, 2011.
- [127] H. C. Torry and C. A. Whitmer, *Crystal rectifiers*. McGrawHill New York, 1950.
- [128] H. Nyquist, “Thermal agitation of electric charge in conductors,” *Physical Review*, vol. 32, no. 1, pp. 110–113, 1928.
- [129] F. N. Hooge, “ $1/f$ noise sources,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 41, no. 11, pp. 1926–1935, 1994.
- [130] T. González, D. Pardo, L. Reggiani, and L. Varani, “Microscopic analysis of electron noise in GaAs Schottky barrier diodes,” *Journal of Applied Physics*, vol. 82, no. 5, pp. 2349–2358, 1997.
- [131] H. Zirath, “High-frequency noise and current-voltage characteristics of mm-wave platinum $n^- - n^+$ GaAs Schottky barrier diodes,” *Journal of applied physics*, vol. 60, no. 4, pp. 1399–1407, 1986.

- [132] K. S. Champlin and G. Eisenstein, “Cutoff frequency of submillimeter Schottky-barrier diodes,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 26, no. 1, pp. 31–34, 1978.
- [133] M. A. Andersson and J. Stake, “An accurate empirical model based on volterra series for fet power detectors,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 64, no. 5, pp. 1431–1441, 2016.
- [134] A. M. Cowley and H. Sorensen, “Quantitative comparison of solid-state microwave detectors,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 14, no. 12, pp. 588–602, 1966.
- [135] G. Paz-Martínez, I. I. de-la Torre, H. Sánchez-Martín, T. González, and J. Mateos, “Analysis of GaN-based HEMTs operating as RF detectors over a wide temperature range,” *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 2023.

