

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

Departamento de Electrónica e Computación



Tesis doctoral

**DESARROLLO DE HERRAMIENTAS PARA LA SIMULACIÓN
DE DISPOSITIVOS BASADOS EN SEMICONDUCTORES
MAGNÉTICOS**

Presentada por:

Enrique Comesaña Figueroa

Dirigida por:

Dr. Antonio García Loureiro

Dr. Manuel Aldegunde Rodríguez

Santiago de Compostela, 20 de septiembre de 2013

Dr. Antonio García Loureiro, Profesor Titular de Universidad del Área de Electrónica de la Universidad de Santiago de Compostela.

Dr. Manuel Aldegunde Rodríguez, Investigador de la Universidad de Swansea, Reino Unido.

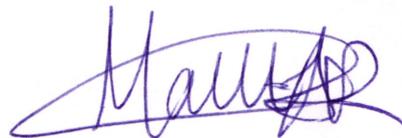
HACEN CONSTAR:

Que la memoria titulada **DESARROLLO DE HERRAMIENTAS PARA LA SIMULACIÓN DE DISPOSITIVOS BASADOS EN SEMICONDUCTORES MAGNÉTICOS** ha sido realizada por **D. Enrique Comesaña Figueroa** bajo nuestra dirección en el Departamento de Electrónica e Computación de la Universidad de Santiago de Compostela, y constituye la Tesis que presenta para optar al título de Doctor.

Santiago de Compostela, 20 de septiembre de 2013



Dr. Antonio García Loureiro
Codirector de la tesis



Dr. Manuel Aldegunde Rodríguez
Codirector de la tesis



Enrique Comesaña Figueroa
Autor de la tesis

A mis padres

De corazón suplico que lo aquí expuesto pueda ser leído con indulgencia; y que mis trabajos en un tema tan difícil puedan examinarse no tanto desde la perspectiva de la censura como para remediar sus defectos.

Isaac Newton

Philosophiæ naturalis principia mathematica

Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimiento a todas las personas e instituciones que a lo largo de estos años me han ayudado en la realización de esta tesis con sus comentarios, críticas o apoyo.

De un modo especial quiero manifestar mi reconocimiento y agradecimiento a mis directores de tesis, Antonio García Loureiro y Manuel Aldegunde Rodríguez, cuyos consejos, guía y paciencia han sido fundamentales para el buen término de este trabajo.

Al Departamento de Electrónica y Computación, y en especial al Grupo de Arquitectura de Computadores, junto con el Centro Singular de Investigación en Tecnoloxías da Información (CiTIUS) por facilitarme los medios para la realización de este proyecto. A mis compañeros, que he conocido a lo largo de estos años en estos centros, y que de un modo u otro también son parte de este trabajo. En especial, quiero agradecer a Raúl Valín su continuo apoyo y motivación en los días difíciles.

También quiero agradecer a la Prof. Gillian Gehring del Departamento de Física y Astronomía de la Universidad de Sheffield y al Dr. Karol Kalna de la Escuela de Ingeniería de la Universidad de Swansea por sus calurosas acogidas y buenos consejos durante mis estancias en el Reino Unido.

Al Gobierno de España, a la Xunta de Galicia y a la Comisión Europea por la financiación facilitada a través de los proyectos MCYT TIN2007-67537-C03-01, TEC2010-17320 y los contratos 2010/28 y 09TIC001CT.

Por último y con especial cariño, quiero agradecer a mis padres su continuo e incondicional apoyo.

Santiago de Compostela, 20 de septiembre de 2013

Índice general

Índice de figuras	xv
Índice de tablas	xxi
Publicaciones ligadas a la tesis	xxiii
Introducción	1
Introduction	5
1 Semiconductores magnéticos diluidos	9
1.1. Teoría básica de semiconductores	9
1.1.1. Semiconductor intrínseco	11
1.1.2. Semiconductor extrínseco	12
1.1.3. Cálculo del nivel de Fermi	14
1.1.4. Concentración de portadores	15
1.2. Principios del magnetismo	19
1.2.1. Reglas de Hund y principio de exclusión de Pauli	20
1.2.2. Propiedades magnéticas de los materiales	21
1.3. Interacciones de intercambio en sistemas magnéticos	26
1.3.1. Interacciones de intercambio directas	26
1.3.2. Interacciones de intercambio indirectas	27
1.4. Semiconductores magnéticos diluidos (DMS)	30
1.4.1. Propiedades de los DMS (III,Mn)V	32
1.4.2. Propiedades de los óxidos semiconductores	34

1.4.3.	Aproximaciones teóricas	37
1.4.4.	Temperatura de Curie	40
2	Modelos físico y numérico	45
2.1.	Ecuaciones básicas	47
2.1.1.	Ecuación de Poisson	47
2.1.2.	Ecuación de continuidad	47
2.1.3.	Condiciones de contorno	51
2.1.4.	Transporte en una heterounión	53
2.2.	Escalado de variables	57
2.3.	Coefficientes de recombinación	59
2.3.1.	Coefficiente de recombinación túnel	60
2.3.2.	Recombinación intrínseca	63
2.3.3.	Recombinación extrínseca	64
2.3.4.	Recombinación Auger	64
2.3.5.	Desdoblamiento de las bandas	65
2.4.	Método de las diferencias finitas	67
2.4.1.	Mallado y discretización	69
2.5.	Ecuación de Poisson discreta	70
2.6.	Ecuaciones de continuidad discretas	71
2.6.1.	Ecuaciones de Scharfetter-Gummel	72
2.6.2.	Otra discretización: n y p como variables	73
2.7.	Resolución de sistemas no lineales	74
2.7.1.	Solución acoplada	75
2.7.2.	Solución desacoplada	76
2.8.	Estructura del simulador	76
3	Resultados	79
3.1.	Unión PN ferromagnética	79
3.1.1.	Características I-V de un diodo Zener	80
3.1.2.	Corriente en el simulador desarrollado. Comparativa con Sentaurus Device y Atlas	89
3.2.	Desdoblamiento de las bandas de energía	95
3.2.1.	Medida de la polarización de espín	100

3.2.2. Desdoblamiento máximo de las bandas	101
3.3. Diodo con ambos lados ferromagnéticos	102
3.3.1. Magnetoresistencia túnel	103
3.4. Modelo para una heterounión	106
3.4.1. Coeficiente túnel modificado	108
3.4.2. Cálculo de las bandas desdobladas	112
3.5. Unión PN semiferromagnética	113
3.5.1. Resultados según el modelo analítico	114
3.5.2. Resultados según modelo numérico	119
3.6. Diodo totalmente ferromagnético	125
3.6.1. Resultados según modelo analítico	125
3.6.2. Resultados según modelo numérico	130
3.6.3. Análisis de la dependencia de la TMR con la temperatura	139
3.7. Heteroestructura GaAs/ZnO	143
3.8. Válvula de espín: estructuras PiP y NiN	146
Conclusiones	153
A Simulation of magnetic semiconductor based devices	159
A.1. Analytical model for spin polarized tunneling in a ferromagnetic Zener diode	159
A.2. TMR dependence on the temperature	165
A.3. Numerical simulation of Zener tunnel junctions	171
A.4. Simulation of the tunneling transport in ferromagnetic GaAs/ZnO heterojunctions	194
A.5. Simulation of electron transport in magnetic tunnel junctions	205
Conclusions	213
Bibliografía	219

Índice de figuras

1.1.	Dependencia típica de la concentración de portadores mayoritarios con la temperatura	12
1.2.	Representación de las bandas de energía para distintos tipos de semiconductores	13
1.3.	Niveles de energía de referencia	17
1.4.	Efecto Meissner en materiales superconductores	22
1.5.	Material paramagnético	23
1.6.	Magnetización frente a campo magnético en un material ferromagnético	24
1.7.	Mecanismo de super-intercambio en el MnO	28
1.8.	Mecanismo <i>mixed-valence double-exchange</i>	29
1.9.	Mecanismo de intercambio RKKY	30
1.10.	Temperatura de Curie de varios DMS dopados con 5 % de Mn	32
1.11.	Magnetización frente al campo magnético en (Zn,Mn)O	36
1.12.	Modelo de acoplamiento ferromagnético para un semiconductor (III,Mn)V	38
1.13.	Temperatura de Curie frente a la concentración de portadores en (G,Mn)As	40
1.14.	Temperatura de Curie frente a la concentración de portadores y de dopado en (Ga,Mn)As	42
2.1.	Unión metal semiconductor	54
2.2.	Esquema de bandas de una heterounión	55
2.3.	Procesos túnel directo e indirectos	61
2.4.	Representación de los procesos de recombinación	65
2.5.	Procesos túnel en una unión PN ferromagnética	66
2.6.	Particionado unidimensional	69

2.7.	Diagrama de flujo del simulador desarrollado para simular uniones PN ferromagnéticas.	77
3.1.	Bandas de energía en un diodo túnel	81
3.2.	Componentes de la corriente en un diodo túnel	82
3.3.	Densidad efectiva de estados, integral de solapamiento	83
3.4.	Diferentes estados de conducción en un diodo túnel	83
3.5.	Representación esquemática de un diodo túnel	85
3.6.	Representación esquemática de un diodo túnel. Límites de integración	86
3.7.	Mecanismos para procesos túnel asistidos	88
3.8.	Simulación de diodos túnel no magnéticos de GaAs y ZnO con dopados constantes a 300 K y a 77 K	90
3.9.	Representación esquemática de un proceso túnel a energía E	93
3.10.	Integrales de solapamiento en Atlas y Sentauros	94
3.11.	Dependencia con la temperatura del límite de la banda de valencia en un semiconductor ferromagnético	97
3.12.	Desdoblamiento de la banda de valencia en un diodo con un lado ferromagnético	99
3.13.	Ratio de polarización de espín frente al desdoblamiento	101
3.14.	Desdoblamiento de las bandas de conducción y valencia	103
3.15.	Magnetoresistencia túnel frente a la polarización de espín	104
3.16.	Representación esquemática de las bandas desdobladas en las configuraciones antiparalela y paralela	105
3.17.	Bandas de energía en una heterounión ferromagnética	108
3.18.	Esquema de la barrera túnel en una heterounión	110
3.19.	Evolución de la integral de solapamiento debido al desdoblamiento para el GaAs	115
3.20.	Corriente túnel para el diodo (Ga,Mn)As/GaAs obtenida con modelo analítico	117
3.21.	Cambio absoluto de la corriente túnel en un diodo semiferromagnético . . .	118
3.22.	Diodo semiferromagnético con alto nivel de polarización	119
3.23.	Corriente túnel para el diodo (Ga,Mn)As/GaAs obtenida con simulador numérico	120
3.24.	Corriente túnel para el diodo (Ga,Mn)As/GaAs obtenida con simulador numérico a baja temperatura	121

3.25.	Diodo semiferromagnético con alto nivel de polarización	122
3.26.	Diodo semiferromagnético con alto nivel de polarización	122
3.27.	Diagramas de bandas de energía en el modelo analítico y el simulador numérico para una unión semiferromagnética de (Ga,Mn)As/GaAs	124
3.28.	Distribucion de las bandas de energía para el diodo totalmente ferromagnético	126
3.29.	Corriente túnel en un diodo de GaAs completamente ferromagnético	127
3.30.	Corriente túnel en un diodo de ZnO completamente ferromagnético	130
3.31.	Estructura de bandas para un diodo ferromagnético de GaAs con el mismo nivel de degeneración en cada lado, $\varepsilon_{n,p} = 0,2$ eV. Densidad de corriente túnel para un diodo no ferromagnético, para la configuración paralela y la configuración antiparalela. También se muestra la TMR. Resultados se obtuvieron suponiendo una polarización constante de espín del 90 %	132
3.32.	Densidades de corriente paralela y antiparalela y la TMR calculadas para diferentes polarizaciones de espín a 77 K para un diodo de GaAs con el mismo nivel de degeneración en ambos lados.	133
3.33.	Densidades de corriente paralela y antiparalela y la TMR calculadas para diferentes polarizaciones de espín a 77 K para un diodo de GaAs con niveles de degeneración de $\varepsilon_p = 0,3$ eV and $\varepsilon_n = 0,1$ eV	134
3.34.	Diagrama de bandas para un diodo ferromagnético de ZnO con el mismo nivel de degeneración en ambos lados, $\varepsilon_{n,p} = 0,2$ eV. Densidad de corriente túnel para un diodo no ferromagnético, para la configuración paralela y la configuración antiparalela; también se muestra la TMR. Ambos resultados se obtuvieron suponiendo una polarización constante de espín del 90 %	134
3.35.	Densidades de corriente paralela y antiparalela y la TMR calculadas para diferentes polarizaciones de espín para un diodo de ZnO con el mismo nivel de degeneración en ambos lados a 77 K y 300 K	136
3.36.	Densidades de corriente paralela y antiparalela y TMR para un diodo ferromagnético de ZnO con niveles de degeneración de $\varepsilon_p = 0,3$ eV y $\varepsilon_n = 0,1$ eV a 77 K y 300 K	137
3.37.	Diagrama de bandas de energía para un diodo ferromagnético con diferentes niveles de degeneración a cada lado, $\varepsilon_S = \varepsilon_p = 0,017$ eV y $\varepsilon_L = \varepsilon_n = 0,2$ eV	139
3.38.	Dependencia con la temperatura de la densidad de corriente y de la TMR calculados cuando la tensión aplicada es 0,35 V.	140

3.39.	Variación de la TMR con la temperatura para diferentes tensiones aplicadas en la unión PN. Variación de la TMR con el potencial aplicado en la unión PN para diferentes temperaturas	141
3.40.	Dependencia de la TMR para diferentes niveles de dopado en el lado N. El temperatura de Curie en el lado P está fijada a 110 K. Las temperaturas críticas en el lado N son 27 K, 110 K y 139 K	142
3.41.	Diagrama de bandas de energía para una heterounión de GaAs (lado P) y ZnO (lado N) obtenidas a partir del modelo analítico y del simulador numérico. En ambos casos se considera una polarización de espín del 70 %	144
3.42.	Densidad de corriente túnel para un diodo no ferromagnético, para la configuración paralela y la configuración antiparalela; también se muestra la TMR para GaAs (lado P) y ZnO (lado N) obtenidas a partir del modelo analítico y del simulador numérico. En ambos casos se considera una polarización de espín del 70 %	145
3.43.	Representación esquemática de la unión tunel magnética simulada de ZnO. Desdoblamiento de la banda de conducción en los electodos ferromagnéticos de la unión	147
3.44.	Banda de conducción en el equilibrio para una MJT a una temperatura de 4 K. Configuración no ferromagnética y con polarización de espín de los electrones del 50 %	149
3.45.	TMR de las MTJ calculada para una tensión aplicada de $V_{1/2} \sim 0,05$ V a temperaturas de 4, 20, 50 y 100 K. Característica I-V de la MTJ cuando no hay polarización de espín y para una polarización de espín del 50 %	150
3.46.	Dependencia de la TMR con la tensión aplicada a la MJT a 4 K, 100 K y 300 K. Resultados de la simulación y medidas experimentales	152
A.1.	Tunnel diode band diagram and typical I-V characteristic, showing the three contributions to the total current: tunnel, excess and diffusion currents	160
A.2.	Schematic density of states for a Zener diode and the possible tunneling transitions, in this case when $\varepsilon_L = 0.3eV$ and $\varepsilon_S = 0.1eV$	162
A.3.	Relation between the relative spin splitting Δ/Δ_{\max} and the polarization P . . .	163
A.4.	The tunneling current and TMR for (Ga,Mn)As with the splitting of the P band of $\Delta^L/\Delta_{\max}^L = 0.7$, the splitting of the N band is $\Delta^S/\Delta_{\max}^S = 0.7$ and $\Delta^S/\Delta_{\max}^S = 0.2$. The tunneling currents for I_p and I_{ap} and zero spin splitting	164

A.5.	The tunneling current for and TMR for ZnO with the splitting of the P (Δ^L) and N (Δ^S) bands when $\Delta^L/\Delta_{\max}^L = 0.7$, $\Delta^S/\Delta_{\max}^S = 0.2$ and when $\Delta^L/\Delta_{\max}^L = 0.2$, $\Delta^S/\Delta_{\max}^S = 0.7$. The tunneling currents for I_p , for I_{ap} and for zero spin splitting	166
A.6.	Temperature dependence of the band edge in (Ga,Mn)As	169
A.7.	Band diagram for a (Ga,Mn)As diode at equilibrium in magnetic and non-magnetic configuration	169
A.8.	Tunneling current and TMR when the splittings of the P band and N band are near to 0.1 eV. The parallel and the antiparallel configurations are given as well as the current for zero spin-splitting. TMR dependence on the temperature for different N side doping levels	170
A.9.	General flow chart of our in-house simulator.	173
A.10.	Schematic representation of a tunneling process at energy E	177
A.11.	Simulation of non-magnetic tunnel diodes based on GaAs and ZnO with constant doping levels using three different tools: our in-house simulator, Atlas and Sentaurus	181
A.12.	Integral of the overlapping factor over the tunneling allowed energies for different biases in Sentaurus and Atlas	183
A.13.	Schematic representation of the spin-split bands for the antiparallel and parallel configurations	185
A.14.	Band structure for a ferromagnetic GaAs diode with the same degeneration level in each side, $\varepsilon_{n,p} = 0.2$ eV. Tunneling current density for a non-ferromagnetic diode, for the parallel configuration and for antiparallel configuration; the TMR is also presented. Results are obtained assuming a constant spin-polarization ratio of 90%	186
A.15.	Parallel and the antiparallel current densities and TMR, calculated at different spin-polarization ratios at 77 K for a GaAs diode with same degeneration levels (0.2 eV) in both sides and with degeneration levels of $\varepsilon_p = 0.3$ eV and $\varepsilon_n = 0.1$ eV	187

A.16.	Band structure for a ferromagnetic ZnO diode with the same degeneration level in each side, $\varepsilon_{n,p} = 0.2$ eV, and the tunneling current density for a non-ferromagnetic diode, for the parallel configuration and for antiparallel configuration; the TMR is also presented. Both results are obtained assuming a constant spin-polarization ratio of 90%	188
A.17.	Parallel and the antiparallel current densities and TMR, calculated at different spin-polarization ratios for a ZnO ferromagnetic diode with same degeneration levels in both sides at 77 K and 300 K	189
A.18.	The parallel and the antiparallel current densities and TMR, calculated at different spin-polarization ratios for a ZnO ferromagnetic diode with degeneration levels of $\varepsilon_p = 0.3$ eV and $\varepsilon_n = 0.1$ eV at 77 K and 300 K . . .	190
A.19.	Band structure for a ferromagnetic ZnO diode with the different degeneration level in each side, $\varepsilon_S = \varepsilon_p = 0.017$ eV and $\varepsilon_L = \varepsilon_n = 0.02$ eV	191
A.20.	Current density and TMR dependence on the bias voltage for 77 K. Current density and TMR dependence on the device temperature at 0.35 V. TMR variation with the temperature for different characteristic biases. TMR variation with the bias for different temperatures	192
A.21.	Schematic diagram of the tunneling barrier in a heterojunction	197
A.22.	Band diagram in an abrupt heterojunction	202
A.23.	Simulation results from the analytical model and the drift-diffusion simulator. Energy band diagram and together the I-V characteristic and the TMR. The spin polarisation ratio is 70%	204
A.24.	Schematic representation of the simulated magnetic tunnel junction based in ZnO. Schematic representation of the expected band diagram. Ferromagnetic electrodes should show conduction band splitting for each electron spin because of the N type nature of the ZnO doped with cobalt	206
A.25.	Conduction band in equilibrium of the MJT at a temperature of 4 K. Non-ferromagnetic configuration and with a spin-polarization ratio of $P = 50\%$.	208
A.26.	TMR curves of the junctions calculated for a bias $V_{1/2}$ at temperatures of 4, 20, 50 and 300 K. I-V characteristic of the MJT under no spin polarization and a spin polarization of $P = 50\%$	209
A.27.	Bias dependence of the TMR. Results from simulation and experimental measurements at 4 K, 100 K and 300 K	210

Índice de tablas

1.1.	Configuraciones de estados ferromagnéticos	25
1.2.	DMS, su proceso de fabricación y su temperatura de Curie	43
2.1.	Resumen de los factores de escalado empleados en el simulador	58
3.1.	Parámetros típicos para GaAs	91
3.2.	Parámetros típicos para ZnO	91
A.1.	Suitable parameters for GaAs	179
A.2.	Suitable parameters for ZnO	180

Publicaciones ligadas a la tesis

Revistas

- E. Comesaña y G. A. Gehring. Spin polarised tunnelling in a ferromagnetic Zener diode. *Applied Physics Letters*, 2007, vol. 91, p. 142510.
- E. Comesaña, M. Aldegunde, y A. Garcia-Loureiro. Spin-polarized transport in a full magnetic pn tunnel junction. *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 98, núm. 19, p. 192507.
- E. Comesaña, M. Aldegunde, y A. Garcia-Loureiro. Simulation of the spin polarization and the charge transport in Zener tunnel junctions based on ferromagnetic GaAs and ZnO. *Computer Physics Communications*, 2013, vol. 184, núm. 3, p. 746-756.

Congresos

- E. Comesaña, M. Aldegunde, G. A. Gehring, y A. J. Garcia-Loureiro. Numerical simulation of a ferromagnetic spin-polarised diode. En *2009 Spanish Conference on Electron Devices*, p. 160–163, Santiago de Compostela, España, 2009. IEEE.
- E. Comesaña, M. Aldegunde, y A. J. Garcia-Loureiro. Tunneling magnetoresistance dependence on the temperature in a ferromagnetic Zener diode. En *Journal of Physics: Conference Series - 16th International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (EDISON 16)*, volume 193, p. 012104, Montpellier, France, 2009.
- E. Comesaña y A. Garcia-Loureiro. Numerical simulation of a degenerated ZnO diode. En *Encuentro Anual de la Red Española de Micro y Nanosistemas*, p. 28, Sevilla, España, 2009. IBERNAM.

- E. Comesaña, M. Aldegunde, A. García-Loureiro, y G. A. Gehring. Simulation of the tunnelling transport in ferromagnetic GaAs/ZnO heterojunctions. En *Journal of Physics: Conference Series - 2nd Workshop on Theory, Modelling and Computational Methods for Semiconductors*, volume 242, p. 012015, York, Reino Unido, 2010.
- E. Comesaña, A. Garcia-Loureiro, y M. Aldegunde. Simulation of electron transport in magnetic tunnel junctions using the drift-diffusion model. En *2011 Spanish Conference on Electron Devices*, p. 1–4, Palma de Mallorca, España, 2011. IEEE.
- E. Comesaña y A. Garcia-Loureiro. Simulación y modelado de la magnetorresistencia en uniones magnéticas túnel multicapa. En *Workshop en Microsistemas y Nanotecnología y Asamblea Anual IBERNAM*, p. 28, Gran Canaria, España, 2011. IBERNAM.

Introducción

En los últimos años, el desarrollo de la tecnología basada en Si mantiene una elevada tasa de desarrollo, conservando la tendencia predicha por la ley de Moore que establece que el número de transistores en un chip debe doblarse a menor coste cada dos años. De forma similar, la densidad media de bits en un disco magnético se ha venido incrementando con una tasa anual de entre el 60 % y el 100 %.

El control del flujo de portadores a través de un semiconductor, en los circuitos integrados actuales, se consigue por medio de la aplicación de campos eléctricos y por lo tanto, la propiedad de interés en electrónica es la carga del electrón. En el caso del almacenamiento magnético y de posibles dispositivos futuros, el control de flujo de información se realiza mediante campos magnéticos que modifican el momento magnético neto local en el dispositivo, y el origen de este momento magnético esta en el espín del electrón siendo esta la propiedad clave en la magneto-electrónica o espintrónica.

A pesar de la alta capacidad de procesamiento de señales en los dispositivos electrónicos, los elementos de almacenamientos en un chip están basados en efectos capacitivos, mediante la acumulación de carga en condensadores. Esto provoca que sean volátiles, los datos se pierden cuando se apaga el sistema, y que introduzcan un tiempo de respuesta relativamente alto.

Actualmente la espintrónica está cobrando un interés creciente debido a la posibilidad de emplear el espín del portador de carga, el electrón, en semiconductores magnéticos diluidos (DMS). El principal problema de la espintrónica basada en DMSs es alcanzar el control de espín a temperatura ambiente, ya que el comportamiento ferromagnético de estos materiales es más intenso a bajas temperaturas. Si se alcanzase el control de la inyección, la transferencia y la detección del espín de portadores, se abriría un nuevo grado de libertad en el diseño de dispositivos electrónicos y fotónicos. Entre los nuevos dispositivos previstos se incluyen

los transistores de espín, emisores ópticos, memoria semiconductora de alta velocidad y no volátil, así como un mayor nivel de integración en los dispositivos.

Una de las características interesantes de los dispositivos espintrónicos es que deberían requerir mucha menos potencia de alimentación que la tecnología actual. Esto, por una parte favorecería la integración, ya que la densidad energética en los dispositivos sería inferior y además permitirá crear dispositivos móviles con baterías más pequeñas con todos los beneficios que esto supone, incluyendo el beneficio medioambiental que esto lleva implícito. Otra de las ventajas de la memoria basada en semiconductores magnéticos sería la posibilidad de retener la información después del apagado gracias a la remanencia natural presente en los materiales ferromagnéticos. La habilidad de codificar información por medio de luz polarizada también hace los posibles emisores ópticos muy útiles. Por último, la integración de sensores, memoria y procesamiento mediante medios magnéticos, electrónicos y fotónicos conduce a la idea conocida como “electromagnetismo en un chip”. Este paradigma tecnológico ofrecerá la oportunidad de integrar mayor funcionalidad en el mismo área, ofreciendo una eficiencia espacial mucho mayor.

Desde la predicción de que el ZnO puede presentar ferromagnetismo intrínseco a temperatura ambiente, existe una gran cantidad de investigación en el área de los óxidos semiconductores como posibles candidatos materiales que podrían dar soporte a la espintrónica. El ferromagnetismo intrínseco se observa en láminas delgadas de ZnO dopadas con metales de transición (Co, Mn, Ti o V) combinado con cantidades variables de Al. Además, otro material ampliamente estudiado en espintrónica es el GaAs dopado con impurezas metálicas (Mn, Co) que provocan el comportamiento ferromagnético. Este material a pesar de presentar ferromagnetismo intrínseco solo a bajas temperaturas, menos de 170 K, sigue siendo empleado ampliamente como material modelo a la hora de analizar dispositivos basados en DMSs ya que actualmente es el material mejor caracterizado en espintrónica.

El principal objetivo de esta memoria de tesis es mostrar el trabajo realizado para la simulación de dispositivos electrónicos construidos con semiconductores magnéticos, en este caso el GaAs y el ZnO. Para esto se ha complementado el desarrollo de modelos analíticos y numéricos de los diferentes procesos que ocurren en estos dispositivos, para posteriormente implementarlos en un simulador que permita la caracterización física de un dispositivo basado en materiales semiconductores magnéticos. El uso de simuladores en el desarrollo de nuevos procesos y/o dispositivos se presenta actualmente como una alternativa eficiente a los métodos tradicionales, basados en la aproximación experimental, la cual además es muchísi-

mo más costosa. Así, mediante la simulación numérica, podremos obtener información de la física de los procesos de fabricación, el comportamiento de los dispositivos y el rendimiento de los circuitos, de los nuevos dispositivos.

Para completar este proyecto con éxito, se ha hecho uso de la experiencia que nuestro grupo de investigación, en el Departamento de Electrónica y Computación de la Universidad de Santiago de Compostela, tiene ya en el campo de la simulación de dispositivos electrónicos, dado que ya se han desarrollado varios simuladores de dispositivos semiconductores y que mantiene colaboraciones con varios grupos nacionales e internacionales en este campo. Por otro lado, también ha contando con la colaboración y asesoramiento de la Profesora Gillian Gehring del Departamento de Física y Astronomía de la Universidad de Sheffield (Reino Unido), cuya área de especialización es la física de materia condensada y particularmente el magnetismo y ordenamiento orbital.

Los objetivos concretos de este proyecto de tesis se han centrado en los siguientes puntos:

- Desarrollo de modelos analíticos que permitan el análisis y predicción del comportamiento de un dispositivo electrónico cuando el espín de los portadores de carga está polarizado de forma relativamente rápida.
- Modificación de las ecuaciones de arrastre y difusión empleadas habitualmente para resolver dispositivos electrónicos para incluir la nueva variable de control que introduce la polarización del espín de los portadores.
- Introducción en el modelo numérico de los efectos físicos debidos al ferromagnetismo que no estaban presentes en la simulación de dispositivos electrónicos de forma habitual, tales como la relajación de espín y la dependencia con la temperatura y el dopado de las propiedades ferromagnéticas además de la degeneración de los semiconductores.
- Implementación de un simulador numérico que incluya los modelos desarrollados para estudiar un dispositivo ferromagnético, comenzando por el dispositivos más sencillo, la unión PN, y que permita obtener su caracterización eléctrica.
- Estudio y predicción de las propiedades eléctricas y de transporte de dispositivos basados en semiconductores magnéticos empleando el simulador desarrollado.

La principal hipótesis que se ha pretendido validar con este trabajo es si es todavía posible emplear el modelo de arrastre y difusión, incluyendo varias extensiones, para simular dispo-

sitivos electrónicos cuando se añade la variable espín en las ecuaciones y, consecuentemente, simular las características I-V de un diodo Zener ferromagnético.

En este trabajo nos hemos centrado principalmente en el estudio de la componente de corriente túnel a través de la región de vaciamiento del diodo que se produce para valores pequeños de tensión. Para la simulación de la corriente túnel se ha empleado un modelo no local que tiene en cuenta las propiedades del material a ambos lados de la región de vaciamiento para evaluar la probabilidad de que se produzca una recombinación electrón-hueco por efecto túnel. Este modelo se ha modificado para incluir la polarización de espín y la limitación que esta introduce en las recombinaciones posibles. La polarización de espín se traduce en una modulación de la corriente debido al desbalanceamiento de las corrientes debidas a portadores con distinto valor de espín. Este desbalanceamiento entre las componentes de corrientes asociadas a cada valor de espín se mide empleando una figura de merito conocida como magneto-resistencia túnel (TMR).

Esta memoria de tesis se divide tres capítulos. En el primero se realiza una breve introducción a la teoría de semiconductores en general y en particular se habla de los semiconductores degenerados y los principales efectos que la degeneración tiene sobre los modelos habitualmente empleados. A continuación se realiza una descripción de los modelos que explican el origen del ferromagnetismo, incluyendo la particularización para el GaAs y el ZnO.

En el segundo capítulo se formulan las ecuaciones, se introduce el método de discretización de las diferencias finitas y su aplicación a la resolución de la ecuación de Poisson y de las ecuaciones de continuidad. Se explica el modelo empleado para transporte túnel y se introduce la variable espín en todas las ecuaciones asociadas a estos modelos. Por último se estudian los métodos numéricos adecuados para su tratamiento computacional.

En la primera parte del tercer capítulo se muestran los resultados obtenidos para una unión PN a partir del simulador desarrollado. Estos resultados se comparan con los simuladores comerciales Sentaurus de Synopsys y Atlas de Silvaco para validar su comportamiento. En la segunda parte se enumeran y describen los resultados obtenidos a partir de los modelos analíticos y del simulador numérico para un diodo túnel semiferromagnética, un diodo túnel completamente ferromagnética, una heteroestructura formada GaAs y ZnO y por último, una unión túnel magnética.

Finalmente, tras la presentación del trabajo realizado, se indican las conclusiones más importantes alcanzadas, las principales aportaciones y las posibles líneas de investigación abiertas por el mismo.

Introduction

In the last years, the Si based technology is being developed at a high rate, keeping the tendency predicted by the Moore's Law, which states that the number of transistors in a chip should be doubled at minimum cost every two years. Similarly, the average density of bits in a magnetic disk has been growing with an annual rate between 60 % and 100 %.

In the modern integrated circuits, the flow control of the carriers through a semiconductor is achieved applying electric fields and, therefore, the interesting property in electronics is the electron charge. In the case of current magnetic storage and possible future magnetic devices, the information flow is mediated by magnetic fields that modify the net magnetic moment in the device. The origin of the magnetic moment is the electron spin, which is the key property in the magneto-electronics or spintronics.

Despite the high capacity of signal processing of the electronic devices, the storage elements in a chip are based on capacitive effects, by means of the accumulation of charge in capacitors. Therefore, the memory is not permanent and the data is lost when the system is powered off. In addition, they can lead to a fairly high response time.

Nowadays, the spintronics is achieving a growing interest thanks to the possibility of using the spin of the charge carrier in diluted magnetic semiconductors (DMS). The main problem of DMS spintronics is to achieve room temperature control of the spin polarization as the ferromagnetic response of these materials is stronger at low temperatures. If the control of the injection, the transfer and the detection of the carrier spin became possible at room temperature, then a new degree of freedom will be available in the design of new electronic and photonic devices. The spin transistors, polarized light emitters, permanent and fast semiconductor memory are among the new predicted devices in spintronics, as long as the higher level of integration of the devices.

One of the most interesting characteristics of the spintronic devices is that they will require much less power than the current equivalent technology. The energy density in these devices will be lower, allowing more integration, and mobile devices will require smaller batteries, with the implicit environmental benefit. Another of the advantages of the memories based on magnetic semiconductors is the retainability of the information after switching off thanks to the natural remanence present in the ferromagnetic materials. Also, the ability to codify information through polarized light made the magnetic light emitters quite useful. Lastly, the integration of sensors, memory and processing by magnetic, electronic and photonic means leads to the idea known as “electromagnetism in one chip”. This technological paradigm offers the opportunity to integrate much more functionality in the same area, bringing a larger spatial efficiency.

Since the prediction of ZnO as a intrinsic ferromagnet at room temperature, there is large amount of research in the field of the semiconductor oxides as possible candidates to serve as support material for spintronics. The intrinsic ferromagnetism is observed in ZnO thin films doped with transition metals (Co, Mn, Ti, or V) combined with variable amounts of Al. Another material widely studied for spintronic applications is the GaAs, also doped with metallic impurities (Mn, Co) which are the origin of the magnetic behavior. Even though this material only presents intrinsic ferromagnetism at low temperatures, less than 170 K, it is still used as a model material when analyzing DMS based devices because nowadays it is the best characterized material in spintronics.

The main objective of this thesis has been focused on the simulation of electronic devices made of magnetic semiconductors, in our case ZnO and GaAs. With this objective in mind, we have complemented the development of analytic and numerical models for the different processes that occur in these devices. These models have been implemented in a simulator that allow us to characterize electrically the possible devices based in DMSs. Using simulators in the development of new fabrication processes or new devices is nowadays an efficient alternative to the traditional methods, based on the experimental approximation that it is also much more expensive. By using numerical simulation, we can obtain the physical information of the fabrication processes, the behavior of the devices and the circuit efficiency of new possible designs.

The success in this project is heavily supported by the previous experience of our research group in the Department of Electronic and Computer Science of the University of Santiago de Compostela in the field of the simulation of electronic devices. This group has developed

several simulators for electronic nanodevices in collaboration with several national and international research groups. Moreover, we have count on the collaboration and the advice of Professor Gillian Gehring from the Physics and Astronomy Department of the University of Sheffield (United Kingdom), who is specialized in the field of the physics of the condensed mater and specifically in magnetism and orbital ordering.

The specific objectives of this thesis project are summarized in the following topics:

- Development of analytic models to allow the analysis and prediction of the behavior of a electronic device when the spin of the charge carriers is polarized in a short time and with a low computational cost.
- Modification of the drift-diffusion equations, which are usually employed to solve electronic devices, to include the new variable of control that introduces the spin polarization of the carriers.
- Addition to the numerical model the physical effects due to the ferromagnetism that were not present in the simulation of typical electronic devices, such as the spin relaxation, the temperature and doping dependence of the ferromagnetic properties and the semiconductor degeneration.
- Implementation of a numerical simulator that includes all the developed models to study the ferromagnetic devices, starting with the most simple device, the PN junction, to obtain their electric characteristics.
- Study and prediction of the electric and transport properties of DMS based devices using the developed simulator.

The main hypothesis that we intend to validate with this work is if it is still possible to employ and extended implementation of the drift-diffusion model to simulate electronic devices taking into account the spin variable and, therefore, to simulate the I-V characteristic of a ferromagnetic Zener diode.

This work mainly analyzes the behavior of the tunneling current at low bias voltages through the depletion region in the diode. The simulation of the tunneling current is made using a non-local model that accounts the properties of the material at both sides of the depletion region to evaluate the probability that takes place an electron-hole recombination assisted by a tunnel transition. This model has been modified to include the spin polarization and the limitation of the possible recombination processes. The spin polarization leads to a modulation

of the current due to the unbalance produced by different number of carriers with opposite value of the spin. This unbalance between the current components associated with each spin value is measured using the figure of merit known as tunnel magneto-resistance (TMR).

This thesis report is divided in three chapters. The first one is a brief introduction about the semiconductor theory in general and specifically about the degenerated semiconductor and the main effects of the degeneration on the typical models. Also, a description of the models about the origin of the ferromagnetism is shown, including the particularization to the GaAs and the ZnO.

The second chapter introduces the equation formulation, the finite-difference discretization method and its application to solve the Poisson equation and the continuity equations. The tunneling transport model is explained and the spin variable is added to all the equations associated to these models. Finally, the proper numerical methods necessary to the computational treatment of the problem are analyzed.

The first part of the third chapter shows the results obtained for a PN junction from the developed simulator. These results are compared with those obtained from the commercial tools Sentaurus from Synopsys and Atlas from Silvaco to validate them. The second part of the chapter shows the results for an half-ferromagnetic PN junction, an all-ferromagnetic PN junction, a GaAs/ZnO ferromagnetic heterojunction and ZnO magnetic tunnel junction, all of them obtained from the analytical models and the numerical simulator that we have developed.

Lastly, after presenting the results, the dissertation ends showing the conclusions, the main achievements and the alternatives opened by this work to continue future research in this topic.

CAPÍTULO 1

SEMICONDUCTORES MAGNÉTICOS DILUIDOS

En este capítulo se introducirán algunos aspectos teóricos básicos necesarios para el desarrollo de este trabajo. En primer lugar se dará una breve introducción a la teoría de semiconductores, que servirá de punto de partida al desarrollo de los modelos presentados en este trabajo, una descripción más detallada puede encontrarse en cualquier libro de electrónica física [SN06]. A continuación se presentarán los materiales semiconductores diluidos magnéticos (DMS por sus siglas en inglés), materia prima en el desarrollo de dispositivos espintrónicos. Se introducirán algunos de los modelos teóricos empleados actualmente para explicar las propiedades físicas de los DMS, se discutirán los principios del magnetismo y varios posibles mecanismos para la interacción de intercambio. Por último, en este capítulo se presentarán los DMS que podrían funcionar a temperatura ambiente y mostraremos porque el GaAs y el ZnO dopados con impurezas magnéticas son interesantes.

1.1. Teoría básica de semiconductores

El material semiconductor más usado es el silicio, aunque también presentan características semiconductoras el germanio o el azufre y las combinaciones de elementos de los grupos II y III con los de los grupos VI y V respectivamente (GaAs, InP, AlGaAs, CdTe, CdSe, CdS).

Los materiales semiconductores tienen propiedades especiales que hacen posible el control de la concentración de portadores de carga libres de moverse, y en consecuencia de la

conductividad del material, a través del cristal semiconductor gracias a su dependencia con la temperatura, la intensidad de iluminación o la cantidad de impurezas añadidas a la muestra de material semiconductor. En su estructura de bandas de energía es característica una región de energías prohibidas del orden de 1 a 3 eV, que separa la banda de valencia (estados de energía permitidos asociados a los enlaces entre átomos del cristal) de la banda de conducción (estados permitidos asociados a partículas que no participan en la estructura cristalina y que son libres de moverse por todo el cristal). Los portadores de carga son electrones en la banda de conducción (electrones que se desligan de la red cristalina) y huecos en la banda de valencia (producidos por la ausencia de un electrón que debería participar en un enlace entre átomos, esta vacante se puede desplazar por toda la red cristalina y tiene asociada una carga igual a la del electrón pero de signo positivo).

La concentración de portadores en los materiales semiconductores se obtiene a partir de la estadística de Fermi-Dirac y la densidad de estados permitidos de energía en el cristal. A partir de la estadística de Fermi-Dirac se calcula la probabilidad de ocupación $f(E)$ de un determinado nivel de energía E en un sistema mecánico-cuántico formado por fermiones, partículas con espín semientero, en función de la temperatura T y de la energía de Fermi E_F , energía a la cual la probabilidad de ocupación del estado correspondiente es $1/2$ o equivalente el nivel de energía más alto que está ocupado a temperatura 0 K. Su expresión es la siguiente

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp \frac{E-E_F}{k_B T}}, \quad (1.1)$$

donde k_B es la constante de Boltzman.

La densidad de estados permitidos de energía $g(E)$ se obtiene al resolver la ecuación de Schrödinger ($H\Psi = E\Psi$) en el volumen del semiconductor para un potencial periódico asociado a la red cristalina (teorema de Bloch). El efecto del potencial periódico puede interpretarse como una modificación de la masa de las partículas que se mueven en dicho potencial y el problema se reduce a resolver la ecuación de Schrödinger para partículas con masa efectiva m^* confinadas en una caja de dimensiones iguales a la muestra de semiconductor. Es decir

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (1.2)$$

donde $\Psi(\vec{r})$ es la función de ondas asociada a la partícula considerada y E es la energía del estado en el que se encuentra. La expresión resultante para la densidad de estados con energías entre E y $E + dE$ es

$$g(E) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{(m^*)^{3/2}}{\hbar^3} E^{1/2}. \quad (1.3)$$

A partir de las dos expresiones anteriores, (1.1) y (1.3), se obtiene las ecuaciones para las concentraciones de electrones en la banda de conducción n y huecos en la banda de valencia p en un material semiconductor

$$n = \int_{E_C}^{\infty} g_C(E)f(E)dE = N_C F_{1/2} \left(\frac{E_C - E_F}{k_B T} \right) \quad (1.4)$$

y

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} g_V(E)(1 - f(E)) dE = N_V F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_V}{k_B T} \right), \quad (1.5)$$

donde g_C y g_V son las densidades de estados en la bandas de conducción y de valencia, respectivamente, $F_{1/2}$ es la integral de Fermi-Dirac de orden 1/2, E_C es el mínimo valor de energía permitido para electrones en la banda de conducción y E_V la máxima energía para huecos en la banda de valencia valor. N_C es la densidad efectiva de estados en la banda de conducción y N_V la densidad efectiva de estados en la banda de valencia y se definen como

$$N_C = 4\pi \left(\frac{2m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (1.6)$$

y

$$N_V = 4\pi \left(\frac{2m_h^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2}, \quad (1.7)$$

donde m_e^* y m_h^* son las masas efectivas para electrones y huecos respectivamente.

1.1.1. Semiconductor intrínseco

Los materiales semiconductores forman una estructuras cristalinas mediante enlaces covalentes entre sus átomos. A medida que aumenta la temperatura, algunos electrones, que están participando en los enlaces, pueden emplear parte de la energía cinética que adquieren para superar la banda de energías prohibidas y saltar a la banda de conducción dejando el correspondiente hueco en la banda de valencia. Este proceso se denomina generación de pares electrón-hueco. Las energías mínimas requeridas (E_g) son características de cada material y dependen de la temperatura a la que se encuentra el semiconductor.

El proceso inverso también ocurre, es decir, los electrones pueden perder parte de su energía en forma de calor, luz o vibraciones en el cristal y decaer a un hueco en la banda de valencia. Este fenómeno se conoce como recombinación de pares electrón-hueco. Los procesos de generación y recombinación cuando el material está en un estado de equilibrio ocurren

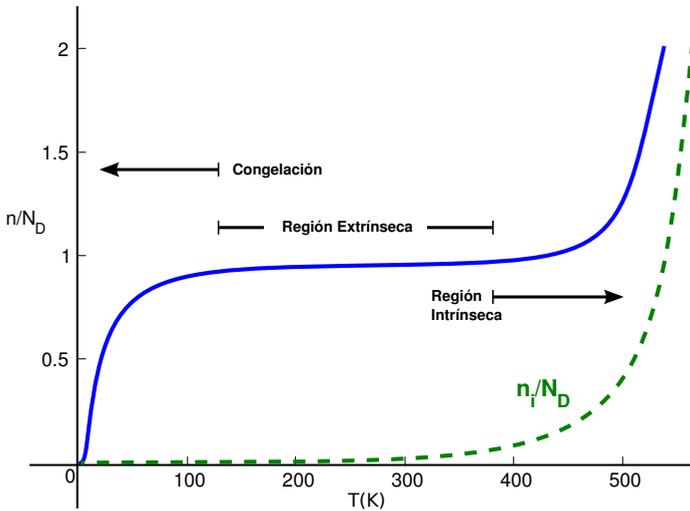


Figura 1.1: Dependencia típica de la concentración de portadores mayoritarios con la temperatura. La gráfica corresponde a una muestra de silicio dopada con fósforo que actúa como donador con una concentración $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

con igual probabilidad haciendo que la concentración de electrones y huecos permanezca invariable. Además como los electrones en la banda de conducción y los huecos en la banda de valencia aparecen por pares, la concentración de ambos es la misma

$$n = p = n_i, \quad (1.8)$$

siendo n_i la concentración intrínseca del semiconductor, función exclusiva de la temperatura. La figura 1.2(a) muestra el diagrama de bandas, la densidad de estados en las bandas de conducción y valencia, la probabilidad de ocupación de cada nivel de energía y la concentración de portadores en las bandas de conducción y valencia.

1.1.2. Semiconductor extrínseco

Si a un semiconductor se le añade impurezas, en el caso del silicio elementos trivalentes o pentavalentes, el semiconductor se denomina extrínseco, y se dice que está dopado. Estas impurezas pasan a formar parte de la estructura cristalina sustituyendo así algunos átomos del material semiconductor.

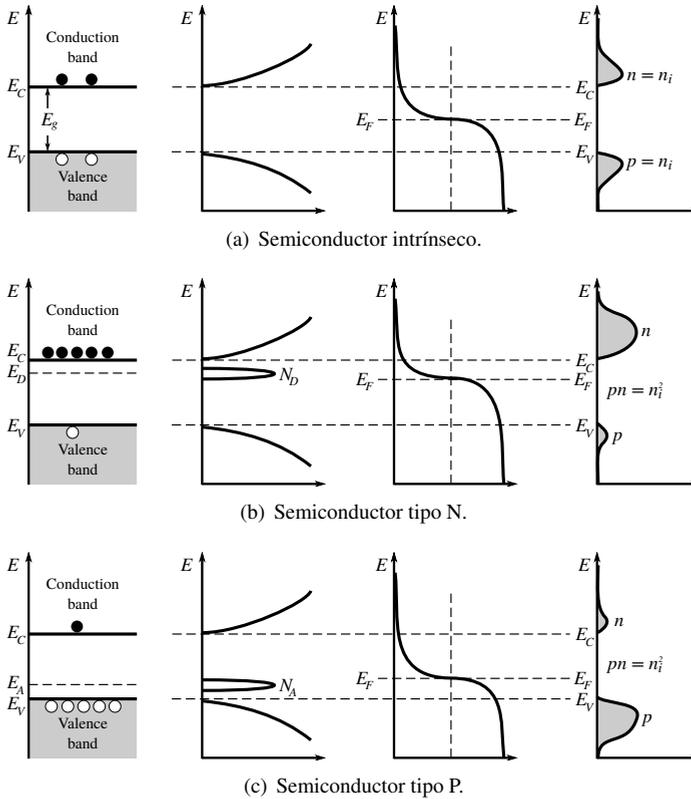


Figura 1.2: Representación de las bandas de energía, densidades de estados, probabilidad de ocupación de los estados y concentración de portadores en un material semiconductor.

Semiconductor tipo N

Un semiconductor tipo N se obtiene dopando el material puro con impurezas que provocan el incremento de electrones en la banda de conducción. Este tipo de impurezas se conocen como donadores y añaden electrones débilmente ligados a los átomos del cristal.

En el caso del silicio se añaden átomos pentavalentes (P, As o Sb), que se incorporan a la red cristalina sustituyendo átomos de silicio, quedando un electrón que no participa en ningún enlace. Estos electrones están en estados de energía que se encuentran dentro de la banda de energías prohibidas, pero muy próximos a la banda de conducción. La energía de ionización

de este tipo de impurezas suele estar en torno a los 100 meV. Esta situación se puede ver en la figura 1.2(b) donde se muestran los estados añadidos por las impurezas, con energía E_D , y como la concentración de electrones es mucho mayor que la de huecos.

Semiconductor tipo P

En el caso de un semiconductor tipo P se añaden impurezas al cristal de manera que favorezcan la aparición de huecos en la banda de valencia. En este caso las impurezas añadidas van a crear estados permitidos en la banda de energías prohibidas muy próximos a la banda de valencia, de forma que los electrones en la banda de valencia podrán alcanzarlos incluso a bajas temperaturas, generando así huecos en la banda de valencia. Este tipo de impurezas se conocen como impurezas aceptoras. En el caso del silicio se emplean átomos trivalentes (B, Al o Ga), que generan defectos en los enlaces con los átomos vecinos. Es caso se muestra en la figura 1.2(c) donde los estados añadidos por las impurezas tienen una energía E_A y la concentración de huecos es mucho mayor que la de electrones.

1.1.3. Cálculo del nivel de Fermi

Cuando se introducen impurezas en el semiconductor, dependiendo de la energía de ionización de las impurezas y la temperatura no todos los dopantes estarán necesariamente ionizados. Las concentraciones de impurezas ionizadas para donadores y aceptores pueden obtenerse a partir de las expresiones siguientes:

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + g_D \exp\left(\frac{E_F - E_D}{k_B T}\right)} \quad (1.9)$$

y

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + g_A \exp\left(\frac{E_A - E_F}{k_B T}\right)}, \quad (1.10)$$

donde N_D y N_A son las concentraciones de impurezas donadoras y aceptoras en el material y g_D y g_A son los factores de degeneración para los estados introducidos por las impurezas (típicamente su valor es 2 debido ya que en cada estado de energía pueden colocarse dos electrones con espines diferentes).

Para garantizar la neutralidad de carga en el semiconductor, el total de las cargas negativas $n + N_A^-$ debe ser igual al total de cargas positivas $p + N_D^+$. Si se considera el caso mostrado en la

figura 1.2(b), donde han sido añadidos donadores al cristal con una concentración N_D , la condición de neutralidad de carga para un semiconductor tipo N con comportamiento extrínseco se convierte en

$$n = N_D^+ + p \approx N_D^+ \quad (1.11)$$

y sustituyendo empleando las ecuaciones (1.4) y (1.9) resulta:

$$N_C F_{1/2} \left(\frac{E_C - E_F}{k_B T} \right) \approx \frac{N_D}{1 + g_D \exp \left(\frac{E_F - E_D}{k_B T} \right)}. \quad (1.12)$$

Del mismo modo, considerando la situación mostrada en la figura 1.2(c), para un semiconductor tipo P en régimen extrínseco la condición de neutralidad de carga se aproxima por $p \approx N_A^+$, y empleando las expresiones (1.5) y (1.10) tenemos:

$$N_V F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_V}{k_B T} \right) \approx \frac{N_A}{1 + g_A \exp \left(\frac{E_A - E_F}{k_B T} \right)}. \quad (1.13)$$

Empleando las expresiones anteriores (1.12) y (1.13) se puede obtener de forma implícita la energía del nivel de Fermi a partir del conjunto de parámetros N_D , E_D , N_C , N_A , E_A , N_V y T . Una vez conocida la posición del nivel de Fermi, el cálculo de la concentración de portadores es inmediato a partir de las expresiones (1.4) y (1.5).

1.1.4. Concentración de portadores

A partir de las ecuaciones (1.4) y (1.5) se puede obtener la concentración de portadores empleando la integral de Fermi, la cual no tiene solución analítica. Para resolver esto se emplean soluciones aproximadas de esta función [Ant93]. Sin embargo, es interesante obtener expresiones analíticas para estas concentraciones empleando la aproximación de Boltzmann de la integral de Fermi. De esta manera, las expresiones para n y p en función de los pseudo-potenciales de Fermi, ϕ_n y ϕ_p , y del potencial electrostático son

$$n = n_{ien} \exp \left(q_e \frac{\psi - \phi_n}{k_B T} \right) \quad (1.14)$$

$$p = n_{iep} \exp \left(q_e \frac{\phi_p - \psi}{k_B T} \right). \quad (1.15)$$

En estas expresiones n_i , la concentración intrínseca, ha sido sustituida por las concentraciones efectivas de electrones y huecos, n_{ien} y n_{iep} , las cuales corrigen la aproximación de

Boltzmann para que se tengan en cuenta los efectos de la degeneración de la concentración de portadores, la variación de las propiedades del material semiconductor a lo largo de un dispositivo, diferentes estructuras de bandas si se emplean materiales distintos o que la aproximación de banda parabólica no sea válida.

En un semiconductor con varias bandas (o valles equivalentes) que intervengan en el transporte, la concentración en cada banda para una energía dada, n_j , viene dada por la densidad de estados, $g_j(E)$, y de la probabilidad de ocupación de cada estado, $f_j(E)$, así

$$n_j = \int_{E_{C,j}}^{\infty} f_j(E)g_j(E)dE. \quad (1.16)$$

Si se tiene en cuenta la no parabolicidad de la banda empleando un factor de corrección B_j , la densidad de estados es

$$g_j(E) = \frac{\sqrt{2} m_j^*{}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^2} \left[(E - E_{C,j})^{1/2} + B_j(E - E_{C,j})^{3/2} \right] \quad (1.17)$$

donde m_j^* es la masa efectiva de los portadores en la banda j .

La concentración de portadores en la banda j será

$$n_j = N_{C,j} \left[F_{1/2}(\eta_{C,j}) + \frac{3}{2} k_B T B_j F_{3/2}(\eta_{C,j}) \right] \quad (1.18)$$

siendo $F_{3/2}$ la integral de Fermi-Dirac de orden 3/2 y $N_{C,j}$ es la densidad efectiva de estados,

$$N_{C,j} = 2 \left(\frac{2m_j^* k_B T \pi}{h^2} \right)^{3/2} \quad (1.19)$$

y

$$\eta_j = \frac{E_{Fn} - E_{C,j}}{k_B T}. \quad (1.20)$$

Si se tienen en cuenta todos las bandas en las que se produzca transporte, la concentración de electrones total será

$$n = \sum_j N_{C,j} \left[F_{1/2}(\eta_{C,j}) + \frac{3}{2} k_B T B_j F_{3/2}(\eta_{C,j}) \right]. \quad (1.21)$$

En el modelo físico de un semiconductor, los valores de los distintos niveles de energía se miden a partir de un nivel de referencia. El nivel de referencia escogido, energía cero, coincide con el nivel de vacío de un material referencia arbitrario que no tiene por que coincidir con

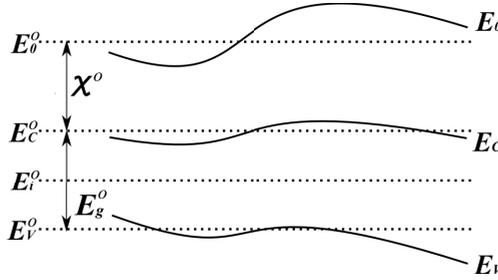


Figura 1.3: Niveles de energía del material referencia, E_0^o , E_C^o , E_i^o y E_V^o , junto con los niveles de energía a lo largo de un dispositivo semiconductor, E_0 , E_C y E_V .

ninguno de los materiales presentes en el dispositivo. En la notación se utilizará el superíndice ‘o’ cuando se trate de un parámetro del material referencia.

La figura 1.3 muestra los niveles del material referencia junto con los niveles de energía de un valle de conducción a lo largo de un dispositivo arbitrario. En este diagrama, el mínimo de la banda de conducción, E_C^o , y el máximo de la banda de valencia, E_V^o , se obtienen a partir de la afinidad, χ^o , y del ancho de la banda de energías prohibidas, E_g^o ; es decir, $E_C^o = -\chi^o$ y $E_V^o = -(\chi^o + E_g^o)$.

La concentración intrínseca del material de referencia, n_i^o , está relacionada con las densidades efectivas de estados y la anchura de la banda prohibida,

$$n_i^o = \sqrt{N_C^o N_V^o} \exp\left(-\frac{E_g^o}{2k_B T}\right) \quad (1.22)$$

donde N_C^o es la densidad efectiva de estados en la banda de conducción y N_V^o la densidad de estados en la banda de valencia, del material referencia.

El nivel intrínseco del material referencia, E_i^o , viene dado por

$$E_i^o = E_C^o + k_B T \ln\left(\frac{n_i^o}{N_C^o}\right). \quad (1.23)$$

Para obtener las expresiones de n y p es necesario conocer las relaciones entre los diferentes niveles de energía, el potencial y los pseudopotenciales de Fermi. Así, el nivel de vacío de un semiconductor en la referencia escogida es

$$E_0 = -q_e \psi, \quad (1.24)$$

el mínimo de la banda de conducción ‘ j ’

$$E_{C,j} = -q_e\psi - \chi_j, \quad (1.25)$$

y el máximo de la banda de valencia ‘ l ’

$$E_{V,l} = -q_e\psi - \chi_l - E_{g,l}. \quad (1.26)$$

Los pseudoniveles de Fermi

$$E_{Fn} = E_i^o - q_e\phi_n \quad (1.27)$$

$$E_{Ep} = E_i^o - q_e\phi_p. \quad (1.28)$$

Si la ecuación (1.21) se multiplica por el factor

$$\frac{n_i^o}{N_C^o} \exp\left(\frac{E_i^o - E_C^o}{k_B T}\right) = 1 \quad (1.29)$$

se obtiene

$$n = n_i^o \exp\left(\frac{E_i^o - E_C^o}{k_B T}\right) \sum_j \frac{N_{C,j}}{N_C^o} \left[F_{1/2}(\eta_{C,j}) + \frac{3}{2} k_B T B_j F_{3/2}(\eta_{C,j}) \right]. \quad (1.30)$$

Además como

$$\exp\left(\frac{E_{Fn} - E_{C,j}}{k_B T}\right) = \exp(\eta_{C,j}) \quad (1.31)$$

se la ecuación 1.30 se puede reescribir como

$$n = n_i^o \sum_j \frac{N_{C,j}}{N_C^o} \frac{F_{1/2}(\eta_{C,j}) + \frac{3}{2} k_B T B_j F_{3/2}(\eta_{C,j})}{\exp(\eta_{C,j})} \exp\left(\frac{\chi_j - \chi^o}{k_B T}\right) \times \exp\left(\frac{q_e\psi + E_{Fn} - E_i^o}{k_B T}\right) \quad (1.32)$$

donde se ha empleado que $E_C^o = -\chi^o$ y que $E_{C,j} = -q_e\psi - \chi_j$. Si se reescribe el pseudonivel de Fermi en función del pseudopotencial,

$$n = n_i^o \exp\left(\frac{q_e\psi - q_e\phi_n}{k_B T}\right) \times \sum_j \frac{N_{C,j}}{N_C^o} \frac{F_{1/2}(\eta_{C,j}) + \frac{3}{2} k_B T B_j F_{3/2}(\eta_{C,j})}{\exp(\eta_{C,j})} \exp\left(\frac{\chi_j - \chi^o}{k_B T}\right) \quad (1.33)$$

de forma similar se puede obtener la expresión para la concentración de huecos

$$p = n_i^o \exp\left(\frac{q_e \phi_p - q_e \psi}{k_B T}\right) \times \sum_l \frac{N_{V,l}}{N_V^o} \frac{F_{1/2}(\eta_{V,l}) + \frac{3}{2} k_B T B_l F_{3/2}(\eta_{V,l})}{\exp(\eta_{V,l})} \exp\left(-\frac{\chi_j - \chi^o + E_{g,l} - E_g^o}{k_B T}\right) \quad (1.34)$$

donde los superíndices j y l se refieren a la diferentes bandas que participan en el transporte de portadores y

$$\eta_{C,j} = \frac{E_{Fn} - E_{C,j}}{k_B T}$$

y

$$\eta_{V,l} = \frac{E_{V,l} - E_{Fp}}{k_B T}.$$

En las ecuaciones (1.33) y (1.34) los factores con los sumatorios en j y l se corresponden con las concentraciones intrínsecas de electrones, n_{ien} , y huecos, n_{iep} , respectivamente. Estas expresiones se pueden simplificar para una situación en la que sólo una banda participe en el transporte y si se considera válida la aproximación de banda parabólica:

$$n_{ien} = n_i^o \frac{N_C}{N_C^o} \exp\left(\frac{\chi - \chi^o}{k_B T}\right) \frac{F_{1/2}\left(\frac{\chi - \chi^o}{k_B T} - \ln \frac{N_C^o}{n_i^o} + q_e \frac{\psi - \phi_n}{k_B T}\right)}{\exp\left(\frac{\chi - \chi^o}{k_B T} - \ln \frac{N_C^o}{n_i^o} + q_e \frac{\psi - \phi_n}{k_B T}\right)} \quad (1.35)$$

$$n_{iep} = n_i^o \frac{N_V}{N_V^o} \exp\left(-\frac{\chi - \chi^o + E_g - E_g^o}{k_B T}\right) \times \frac{F_{1/2}\left(-\frac{\chi - \chi^o}{k_B T} - \frac{E_g - E_g^o}{k_B T} - \ln \frac{N_V^o}{n_i^o} + q_e \frac{\phi_p - \psi}{k_B T}\right)}{\exp\left(-\frac{\chi - \chi^o}{k_B T} - \frac{E_g - E_g^o}{k_B T} - \ln \frac{N_V^o}{n_i^o} + q_e \frac{\phi_p - \psi}{k_B T}\right)}. \quad (1.36)$$

Las concentraciones intrínsecas efectivas son funciones de la posición a través del valor de las propiedades del material en cada punto y además cambian con la polarización del dispositivo, puesto que el potencial y los pseudopotenciales de Fermi cambian con la polarización.

1.2. Principios del magnetismo

Para tener una visión del origen del ferromagnetismo en los DMS, primero se examinarán las reglas fundamentales que rigen el magnetismo. Esto también ayudará a comprender y

analizar algunos de los conceptos manejados en este trabajo. Esta introducción es un resumen obtenido a partir de los libros de texto *The Magnetic Properties of Solids* de J.R. Crangle [Cra77], *Quantum Theory of Magnetism* de R.M. White [Whi07] y *Solid State Physics* de J.R. Hook and Hall [HH91] y lo explicado en la tesis doctoral [Beh08].

La mecánica cuántica explica que las propiedades magnéticas de los materiales provienen de la contribución de los momentos magnéticos de espín que contribuyen a un campo molecular global. Existen tres fuentes principales de momento magnético en un átomo libre: el espín del electrón, el momento angular orbital provocado por el núcleo atómico y los cambios en el momento orbital debidos a campos magnéticos externos. Un electrón en un orbital atómico tiene un número cuántico de espín, s , y un número cuántico asociado al momento angular orbital, l , los cuales pueden ser sumados para todos los electrones en el átomo y así obtener el momento angular orbital total, L , y el momento de espín total, S , respectivamente.

1.2.1. Reglas de Hund y principio de exclusión de Pauli

El principio de exclusión de Pauli establece que no pueden existir dos fermiones que ocupen simultáneamente el mismo estado cuántico. Cuando se consideran interacciones de intercambio y solapamientos de orbitales de electrones este principio cobra especial relevancia. También es importante considerar las reglas de Hund, que explican como las transiciones de energía válidas determinan el estado fundamental, siempre y cuando las repulsiones electrón-electrón de las capas externas sean mucho mayores que la interacción espín-orbita. Estas reglas establecen que:

- Solamente los electrones más externos de la capa de valencia contribuyen al ordenamiento de los niveles de energía. Esto es así porque, para capas y subcapas llenas, la interacción espín-orbita y la repulsión electrostática entre electrones desplazarán a todos los niveles de energía simultáneamente.
- El estado atómico con energía más baja será aquel que maximice el valor de S . De acuerdo con el principio de exclusión de Pauli, cada orbital puede acomodar a dos electrones, uno con espín $s = +\frac{1}{2}$ y el otro con espín $s = -\frac{1}{2}$. Los electrones desapareados se colocarán en orbitales diferentes resultado en una mayor distancia entre ellos y por lo tanto menor repulsión electrón-electrón.
- El mayor valor de L producirá la menor energía del sistema. Desde un punto de vista clásico, los mayores valores de L se producirán cuanto los electrones orbiten en la

misma dirección. Esta también es la situación en la cual los electrones se encontrarán con menor frecuencia y por lo tanto habrá menor energía repulsiva.

- Para átomos donde la capa más externa está medio llena o menos, el momento angular total, J , viene dado por $|L - S|$. Esto ocurre cuando se consideran desplazamientos de los niveles de energía debido al acoplamiento espín orbita.

Estas reglas se emplean para calcular los valores de J , L y S en el estado fundamental de iones de metales de transición. Por ejemplo, el Mn^{2+} con cinco $3d$ electrones de valencia: los valores de l_z serán 2, 1, 0, -1 y -2, con un electrón en cada nivel para maximizar los espines paralelos. Esto da un momento angular de espín de $S = 5 \times \frac{1}{2} = \frac{5}{2}$. El momento angular orbital total es $L = 2 + 1 + 0 - 1 - 2 = 0$, con lo que el momento angular total resulta $J = |L - S| = S = \frac{5}{2}$. Usando la notación típica en espectroscopía $^{2S+1}L_J$, tenemos que para el ión Mn^{2+} su estado fundamental es $^6S_{5/2}$.

1.2.2. Propiedades magnéticas de los materiales

El momento magnético por unidad de volumen se define como M y el campo magnético macroscópico en un material se denota con H . La susceptibilidad magnética, χ , es la capacidad que tiene un material de magnetizarse en presencia de un campo magnético, es decir,

$$\chi = \frac{M}{H}. \quad (1.37)$$

La permeabilidad magnética de un material, μ , es una propiedad que define el grado de linealidad en la respuesta de la magnetización ante un campo magnético aplicado. El campo magnético inducido, B , es el campo magnético neto producido por un campo magnético aplicado externamente al material. El campo magnético externo es el resultado de las contribuciones de las corriente en el material y la magnetización:

$$B = \mu_0 H + \mu_0 M, \quad (1.38)$$

que, usando (1.37), también puede escribirse como

$$B = \mu_0 H + \mu_0 \chi H. \quad (1.39)$$

La permeabilidad relativa de un material, μ_r , es la relación entre la permeabilidad del material, μ , y la del vacío, μ_0 . La permeabilidad magnética de un material es igual a $1 + \chi$, por lo tanto

$$B = \mu_0(1 + \chi)H = \mu_r \mu_0 H. \quad (1.40)$$

Materiales diamagnéticos

Los valores χ y μ_r se emplean para clasificar los materiales. Un material diamagnético tiene un valor de susceptibilidad muy pequeño y negativo. Cuando un campo magnético externo aplicado al material acelera los electrones en sus orbitales en torno a los núcleos en el material, cambiando el momento dipolar magnético, provocando una magnetización que se opone a los cambios en el campo magnético aplicado. Si el campo magnético se mantiene constante, el efecto es suficientemente estable para apantallar el material del campo magnético aplicado. Todos los materiales tienen cierto grado de diamagnetismo pero solo se observa en aquellos que no posean otras componentes de momento dipolar en presencia de un campo externo aplicado.

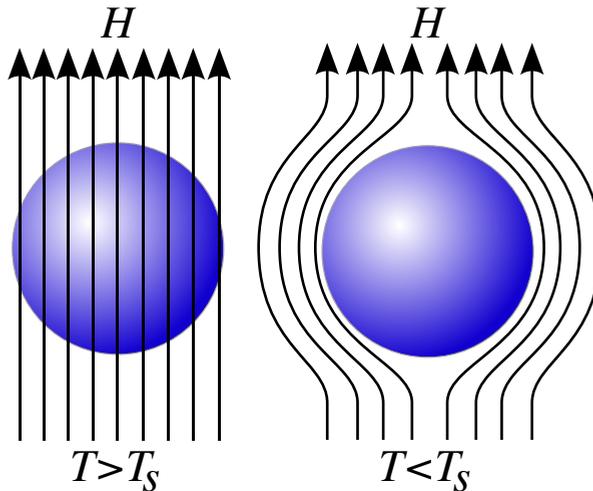


Figura 1.4: Diagrama del efecto Meissner. Las líneas de campo magnético aplicado, se curvan al ser este expulsado del material superconductor.

El diamagnetismo es especialmente intenso en materiales superconductores, los cuales pueden repeler el campo magnético con tal intensidad que este no es capaz de penetrar el material. Esto se conoce como efecto Meissner, según el cual un material superconductor expulsa el campo magnético de su interior al transitar al estado superconductor, es decir cuando se enfría por debajo de la temperatura de transición a superconducción T_S , tal y como se muestra en la figura 1.4. Sin embargo, en este caso, el origen de este superdiamagnetismo se produce debido a la aparición de corrientes eléctricas en superficie del material. El campo

magnético inducido, asociado a estas corrientes, cancela el campo magnético en el interior del superconductor y debido a la conductividad infinita del material, las corrientes que producen este efecto no decaen con el tiempo, manteniéndose la expulsión del campo aplicado aunque este permanezca constante.

Materiales paramagnéticos

En el caso de los materiales paramagnéticos tanto la susceptibilidad como la permeabilidad son positivas. Esto se observa en materiales en los que al menos una parte de los átomos que los componen presentan un momento magnético dipolar en ausencia de campo externo. Sin embargo, estos momentos están orientados de forma aleatoria provocando que la magnetización neta sea cero. Cuando se aplica un campo externo se establece un balanceo entre la alineación de los momentos y el desorden térmico, de tal manera que a mayor campo magnético aplicado tendremos un mayor grado de orden y por tanto mayor magnetización que crece linealmente con H . Sin embargo si la temperatura aumenta, se eleva el desorden y por tanto disminuirá la susceptibilidad paramagnética.

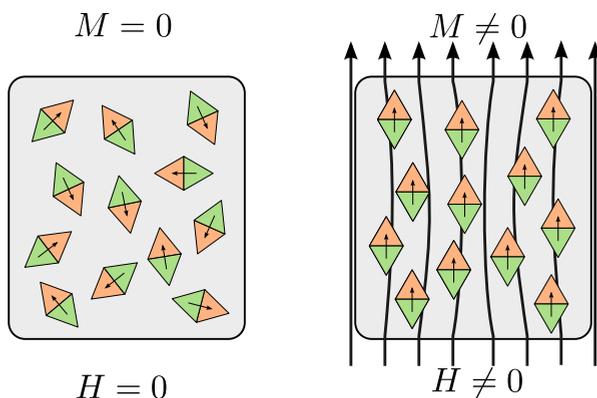


Figura 1.5: Representación de un material paramagnético como un conjunto de pequeños imanes que se alinean en presencia de un campo magnético externo H , lo que produce una magnetización neta resultante M .

Materiales ferromagnéticos

De forma similar, los materiales ferromagnéticos tienen susceptibilidad y permeabilidad positivas. En cambio, estas propiedades son mucho mayores en el caso del material ferro-

magnético y además la permeabilidad es no lineal. En la ecuación (1.40) esto significa que el campo magnético inducido, B , será muy significativo. Otra diferencia importante es que los materiales ferromagnéticos presentan magnetización espontánea en ausencia de campo externo aplicado. Esta ocurre debido al alineamiento de los dipolos magnéticos que se mantiene incluso a altas temperaturas lo que es indicio de que existe una fuerte interacción de intercambio, como se explica más adelante.

Una característica de los materiales ferromagnéticos es la temperatura de Curie, T_C . Por debajo de T_C los momentos permanecen alineados y el material es ferromagnético y por encima de T_C la energía térmica rompe el orden convirtiendo el material en paramagnético. La magnetización de un material ferromagnético es una función no-lineal del campo magnético aplicado y depende de la evolución pasada, como se muestra en la figura 1.6. En estos materiales aparecen tres parámetros característicos: Una magnetización de saturación, M_S , que se produce cuando todos los dominios ferromagnéticos del material o todos los dipolos magnéticos están alineados e indica el valor máximo de magnetización alcanzable. Para desmagnetizar completamente el material hay que aplicar un campo con signo contrario, el valor de este campo se llama campo coercitivo, H_C . Y el valor de magnetización que permanece en caso de que el campo externo se haga cero es la magnetización remanente, M_R . El bucle mostrado en la figura 1.6 se conoce como ciclo de histéresis y nos indica como un material ferromagnético recuerda la “historia” en la evolución de la magnetización del material.

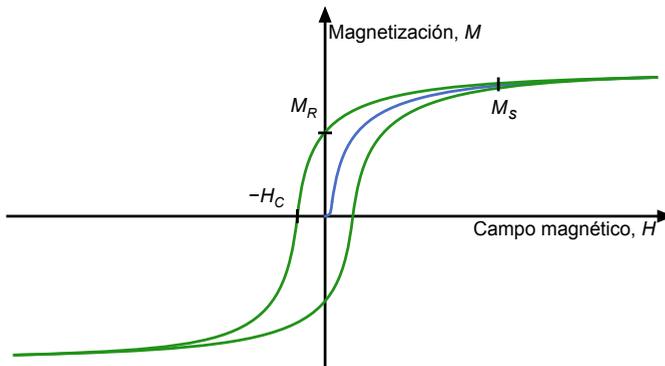


Figura 1.6: Evolución de la magnetización cuando se aplica un campo magnético externo sobre un material ferromagnético. En la figura se indican la magnetización de saturación, M_S , la magnetización remanente, M_R y el campo coercitivo, H_C .

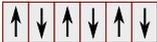
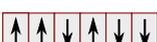
	<i>Disposición momento magnético</i>	<i>Red resultante</i>	<i>M resultante</i>
Ferromagnético	Alineados en la red cristalina		↑
Antiferromagnético	Dos subredes, con momentos alineados pero antiparalelos		0
Ferrimagnético	Dos subredes, con momentos antiparalelos, distinta intensidad		↑
Antiferromagnético ladeado	Dos subredes, con momentos con distinta dirección [BBC07]		→
Antiferromagnético con defectos	Dos subredes, con momentos antiparalelos, con defectos		↑
Antiferromagnético vidrio de espín	Dos subredes, con momentos paralelos, sentido aleatorio		X

Tabla 1.1: Tipos de alineaciones del momento magnético de espín en distintas configuraciones ferromagnéticas. En la columna “M resultante” la flecha muestra la dirección y sentido de la magnetización resultante, en el caso “0” la magnetización sería nula y en el caso “X” la magnetización resultante no está definida, puede darse cualquier situación.

Materiales antiferromagnéticos y ferrimagnéticos

Por último se muestran casos “particulares” de materiales ferromagnéticos que presentan características especiales, estos aparecen resumidos en la tabla 1.1. Uno de ellos son los materiales antiferromagnéticos, en los cuales la mitad de los dipolos magnéticos se orientan en una dirección y la otra mitad en la opuesta, resultando en una magnetización neta nula. De manera similar a la T_C de los materiales ferromagnéticos, existe una temperatura crítica conocida como temperatura de Néel, T_N , a partir de la cual todos los momentos magnéticos estarán desordenados, adquiriendo el material comportamiento paramagnético. Por debajo de

T_N , los dipolos se disponen de forma alternativa en una configuración paralela y antiparalela. Los espines de átomos vecinos se situarán siempre de forma antiparalela.

Existe otro estado intermedio entre el ferromagnético y el antiferromagnético conocido como ferrimagnético en el cual a pesar de que los espines adquieren configuración antiparalela los valores de magnetización asociado a cada sentido en el espín no son iguales, resultando en una magnetización neta espontánea.

Ocasionalmente, los espines en una configuración antiferromagnética no están perfectamente alineados. Otra perturbación de la configuración antiferromagnética se produce cuando se generan descompensaciones debido a defectos en el cristal. En ambas situaciones aparece una débil magnetización neta, fenómeno común en las hematitas.

Por último, el vidrio o hielo de espín es un imán desordenado que presenta una fuerte frustración de las interacciones magnéticas aumentando el desorden de las posiciones de los momentos de espín. Este fenómeno tiene su origen en el conflicto entre los enlaces ferromagnéticos y antiferromagnéticos manteniendo grados de libertad en la orientación de momento magnético de espín.

1.3. Interacciones de intercambio en sistemas magnéticos

Existen diversos mecanismos por los que se pueden producir interacciones de intercambio en un sistema magnético. Para intentar esclarecer cuales de ellas son importantes en los sistemas tratados aquí, se muestra aquí un pequeño resumen de estas interacciones.

1.3.1. Interacciones de intercambio directas

Las interacciones de intercambio directas son aquellas en las que los dipolos magnéticos interactúan directamente, también se conocen como interacciones dipolo-dipolo. La energía asociada a estas interacciones está en el orden de los μeV y a esta escala, temperaturas por encima de 1 K destruirán cualquier orden que este tipo de interacción pueda introducir. Sin embargo, si la temperatura es lo suficientemente baja, los dipolos magnéticos se orientarán de tal manera que se minimice la energía asociada a esta interacción. Esta interacción se presenta en materiales paramagnéticos, por lo que pueden presentar magnetización espontánea a bajas temperaturas. Sin embargo, dado que los sistemas basados en semiconductores magnéticos pretenden funcionar a temperatura ambiente este tipo de interacción no será relevante para los análisis realizados en este trabajo.

Existe otro mecanismo de interacción directa que se produce cuando los momentos magnéticos están localizados en átomos. Cuando dos átomos libres están lo suficientemente próximos, sus respectivos lóbulos de densidad de carga tienen la tendencia a solaparse formando una región de densidad de carga compartida por ambos átomos. Debido a que el principio de exclusión de Pauli no permite la ocupación de un mismo estado por dos electrones y si tenemos una función de onda asociada al orbital simétrica, los espines deben alinearse de forma antisimétrica. Por lo que esta forma de interacción de intercambio producirá estados antiferromagnéticos. Al invertir la simetría de un espín, la simetría del orbital debe cambiar y la carga redistribuirse. La correlación de los espines electrónicos de ambos átomos muestra como una energía de interacción existe entre ellos.

1.3.2. Interacciones de intercambio indirectas

Cuando los iones, en los que se localiza los momentos magnéticos, están lo suficientemente alejados, los mecanismos de intercambio directo no son posibles. En esta situación, esta interacción se puede producir de manera indirecta. Por ejemplo, en el caso de materiales aislantes esto parece producirse por medio de aniones no magnéticos situados entre los iones magnéticos. Estos mecanismos indirectos se conocen como super-intercambio y *mixed-valence double-exchange*.

Super-intercambio

La interacción de super-intercambio se puede emplear para describir el acoplamiento magnético que se produce en el MnO. Este compuesto forma una estructura iónica donde los iones Mn^{2+} y O^{2-} forman dos estructuras cúbicas centradas en las caras que están interpenetradas. Los espines vecinos de los iones Mn^{2+} son siempre antiparalelos con un anión O^{2-} en medio. Las funciones de onda de los electrones del O^{2-} , en dirección del enlace $p - \sigma$, se extienden con espines opuestos para cada electrón, de forma que satisfagan el principio de exclusión de Pauli. Estas funciones de onda solaparán con las funciones de onda de los electrones en los estados e_g-d de los iones Mn^{2+} y el único solapamiento posible es aquel que forme un enlace covalente con electrones con el mismo espín. La situación de menor energía se produce cuando los electrones de los Mn^{2+} a cada lado del O^{2-} tienen espines opuestos. Esta configuración conduce a un acoplamiento antiferromagnético en la dirección del enlace $p - \sigma$, como se muestra en la figura 1.7(a).

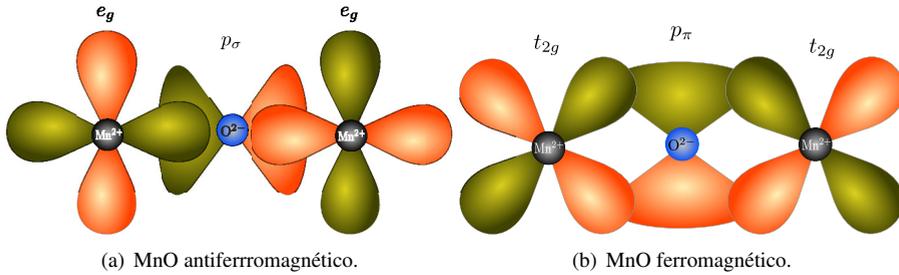


Figura 1.7: En el MnO el mecanismo de interacción de super-intercambio se puede manifestar en configuración antiferromagnética (a) mediante una transferencia σ de electrones o en configuración ferromagnética (b) mediante transferencia π .

Otra posibilidad es que los electrones formen un enlace $p-\pi$ en la dirección perpendicular al enlace $p-\sigma$ tal y como se muestra en la figura 1.7(b). En este caso las funciones de onda de los electrones del Mn^{2+} en el estado t_{2g} se solaparán con los p -electrones del O^{2-} con el mismo espín conduciendo a un acoplamiento ferromagnético. El solapamiento orbital será mucho mayor, para una distancia interatómica dada será mucho mayor en el caso del enlace σ por lo que la configuración antiferromagnética dominará.

Mixed-valence double-exchange

Este tipo de interacción de intercambio describe el ferromagnetismo observado en el compuesto mangánico $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ [Zen51]. En este caso, iones de Ca^{2+} reemplazan a iones de La^{3+} , lo que provocará la presencia de iones Mn^{4+} . Este Mn^{4+} coexistirá con el Mn^{3+} e intercambiará un electrón adicional. Debido a la débil interacción entre los átomos de Mn estos intercambiarán los electrones a través de los orbitales $2p$ del O^{2-} .

Considerando las reglas de Hund, cada ion Mn deberá estar en una configuración de máxima multiplicidad y esto se logra mediante la transferencia de un electrón p del O^{2-} al Mn^{4+} que está acompañada por la transferencia de un electrón e_g del Mn^{3+} al ión de O, reemplazando el electrón anterior. Las reglas de Hund establecen que para minimizar la energía, el electrón en el nivel e_g deberá ser siempre paralelo a los que estén en el estado t_{2g} . En este caso, el mecanismo de intercambio es degenerado debido a que como los iones Mn tienen diferentes cargas se puede producir una configuración ferromagnética sin contradecir el principio de exclusión de Pauli.

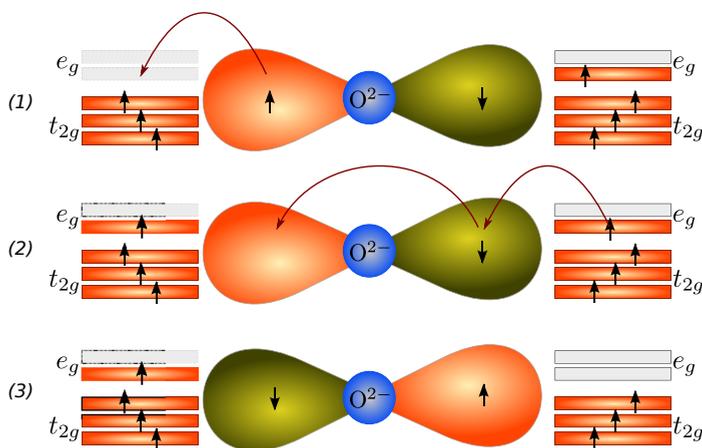


Figura 1.8: Mecanismo *mixed-valence double-exchange* entre los electrones $3d$ del Mn^{3+} y el Mn^{4+} vía los electrones $2p$ del O^{2-} en las manganitas. Se muestran los estados $3d$ de los iones de Mn y los orbitales $2p$ del ion de O. Cada polarización de espín se representa con diferentes colores (naranja para espín \uparrow y verde para espín \downarrow).

Intercambio RKKY

Los mecanismos de interacción de intercambio también pueden ocurrir cuando el intercambio se produce por medio de la polarización de los electrones de conducción. Cuando el momento magnético de los iones localizados se propaga empleando gas de electrones de conducción en que se polariza su espín, esto se describe empleando el modelo RKKY. Si se considera un cristal donde todos los núcleos excepto dos son no-magnéticos, la interacción hiperfina de estos núcleos magnéticos con las funciones de onda de los electrones provocará una dispersión de las funciones de onda [RK54]. Esta dispersión se calcula empleando teoría de las perturbaciones de segundo orden. De ahí se encuentra que se produce un acoplamiento indirecto de los espines de los dos núcleos magnéticos ya que la función de onda global vista por uno de ellos dependerá de la orientación del espín del otro.

En la figura 1.9 el momento localizado del ion magnético se acoplará con los electrones en un entorno cercano del ion provocando una conducción de electrones con espín paralelo al del ion magnético. Esta polarización decae con la distancia al ion con un patrón oscilatorio, por lo que la polarización de espín se concentrará en la vecindad de la impureza magnética. Si se añade una segunda impureza magnética esta puede acoplar su espín con la primera siempre

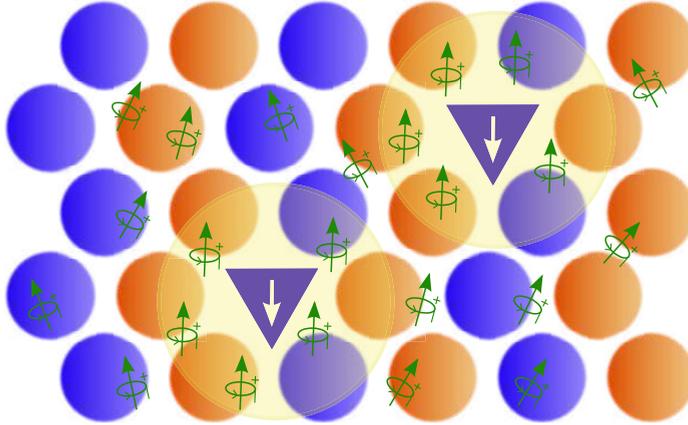


Figura 1.9: Mecanismo de intercambio RKKY debido al acoplamiento de los electrones cercanos a los iones magnéticos (triángulos en la figura) que a su vez provoca el acoplamiento entre estos cuando la distancia entre iones no es muy grande.

y cuando la distancia entre los ellas no sea muy grande. El modelo RKKY predice que este tipo de interacciones puede ser de más largo alcance que las interacciones directas, pero el acoplamiento ferromagnético puede cambiar mucho con pequeñas variaciones de la distancia entre iones magnéticos.

1.4. Semiconductores magnéticos diluidos (DMS)

El empleo del espín del electrón como portador de información está teniendo un creciente interés en la comunidad científica. Además, el transporte de carga en materiales con propiedades magnéticas ya viene siendo estudiado desde hace años, destacan en particular el estudio de estructuras multicapa de metales ferromagnéticos [Jul75] que condujo al descubrimiento del efecto de la magnetoresistencia gigante (GMR) [BBF⁺88, FGB⁺95, TP01], que ha permitido incrementar la densidad de información en los discos duros en varios ordenes de magnitud así como el desarrollo de nuevos sensores magnéticos. Una extensión de este fenómeno es la magnetoresistencia túnel (TMR) [Jul75], que viene siendo aplicado en el desarrollo de nuevas memorias de acceso aleatorio (MRAM) [Hob10] basadas en uniones túnel magnéticas (MJTs) [IHA⁺08], en las cuales compañías como IBM, Intel y otras están mostrando un enorme interés.

De forma paralela, se ha venido realizando el estudio de los semiconductores magnéticos, que se inició con una serie de trabajos experimentales y teóricos de materiales compuestos como anfígenos y espinelas rojas (CdCr_2Se_4). Se observaron una gran cantidad de propiedades exóticas, como GMR y propiedades magneto-ópticas, originadas a partir de la concurrencia de las propiedades ferromagnéticas y semiconductoras [MG86]. Estas nuevas características han inspirado nuevas posibilidades de los materiales semiconductores al añadir el espín como grado de libertad. Hoy en día, la mayor parte de las investigaciones relacionadas con los semiconductores magnéticos se centran en aleaciones semiconductoras que incorporan impurezas magnéticas que sustituyen átomos de la red cristalina [DOM⁺00, FTY05, Cha10]. Estos incluyen aleaciones del tipo II-V, III-VI, IV-VI, V y II-VI-V₂ a las que se le añaden impurezas como Mn, Co, Cr, Fe o Ni.

Dado que las estructuras basadas en semiconductores magnéticos diluidos (DMS) pueden ser crecidas fácilmente empleando las técnicas actuales, como crecimiento epitaxial por haz molecular (MBE), empleadas ya en la electrónica tradicional, existe un amplio interés en el estudio de estructuras multicapa y de lámina delgada basadas en compuestos II-VI y III-V como son el ZnO y el GaAs [CZP09, SCK⁺09].

En el caso del (GaMn)As, que actualmente es el semiconductor magnético con una investigación más extensa, el ferromagnetismo surge como consecuencia de las impurezas de Mn añadidas. Buena parte de ellas sustituyen a átomos de Ga en la red cristalina, dejando un ion Mn^{2+} que contribuye con momento angular $L = 0$ y espín $S = 5/2$. Es aceptado de forma general que el ferromagnetismo surge debido a la interacción del momento magnético de las impurezas de Mn por medio de los huecos en la banda de valencia. Este acoplamiento resulta en una magnetización neta del cristal en ausencia de campo magnético externo, dando lugar a una polarización neta de los espines de los portadores. Esta magnetización remanente en el cristal se traduce en la estructura de bandas como un desdoblamiento de los niveles de energía. Así, el límite de la banda de valencia se desdobra en dos nuevos valores, uno para cada tipo de espín de los huecos. El grado de desdoblamiento de las bandas de energía depende de la fuerza con que los huecos de la red cristalina se acoplan con las impurezas metálicas introducidas.

La temperatura de transición ferromagnética se conoce como temperatura de Curie, T_C , y puede ser controlada mediante la concentración de la impureza metálica (Mn en el caso de GaAs) y la concentración de portadores. Además los procesos de dopado y crecimiento de los cristales semiconductores tienen una importancia muy alta en alcanzar los más altos valores

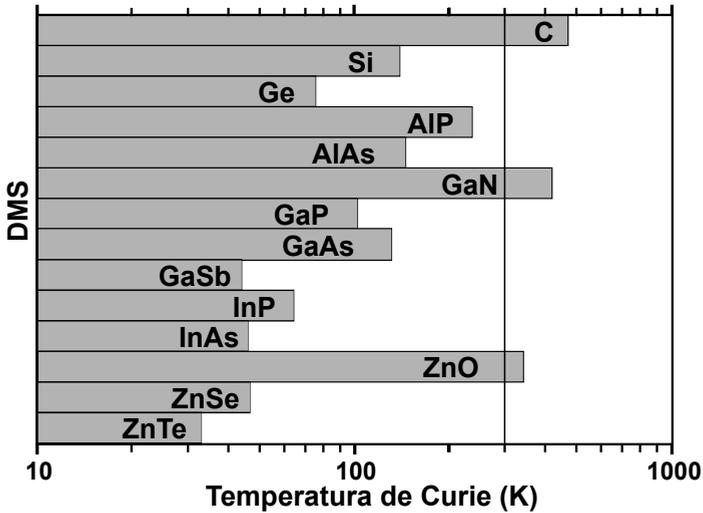


Figura 1.10: Temperatura de Curie obtenida a partir de cálculos teóricos para varios DMS tipo P con una concentración de Mn del 5 % y una concentración de huecos de $3,5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. La línea vertical está situada a 300 K.

de la temperatura crítica. Algunas de las propiedades de este tipo de impurezas en el (GaMn)As son presentadas a continuación [JSM⁺06].

Dos de los materiales más interesantes y estudiados son semiconductores del grupo III-V y un óxido. A pesar del trabajo realizado hasta el momento, ninguno de ellos se considera universalmente aceptados como DMS a temperatura ambiente. A continuación, se muestra un resumen de las principales características más importantes de estos materiales.

1.4.1. Propiedades de los DMS (III,Mn)V

En este apartado se muestra un resumen de las propiedades típicas de los semiconductores magnéticos (III,Mn)V establecidas a partir de resultados experimentales recientes, que van a determinar las restricciones exigidas a las posibles descripciones teóricas de estos materiales. Estas propiedades se pueden encontrar en revisiones detalladas realizadas por Dietl [DOM01], Jungwirth [JSM⁺06] y Ohno [Ohn99]:

- Medidas realizadas mediante experimentos de resonancia paramagnética electrónica (EPR) y experimentos ópticos [SSTP99] [LJM⁺97] muestran que el momento local es $S = 5/2$ para concentraciones diluidas de Mn en GaAs.
- Los estados inducidos por el Mn cerca de la energía de Fermi juegan un papel principal en el origen del ferromagnetismo y en las propiedades de magnetotransporte de estos DMSs. De acuerdo con estudios de fotoemisión [OKR⁺98], estos estados pueden ser asociados con estados de la banda de valencia en el GaAs. Experimentos realizados mediante fotoemisión angular muestran un desdoblamiento despreciable de bandas asociadas a los huecos ligeros y pesados para concentraciones de Mn $x \leq 7\%$.
- El ferromagnetismo no se observa cuando la concentración de Mn es inferior al 1% [Ohn99]. Medidas realizadas mediante EPR muestran que para tan bajas concentraciones de Mn la mayor parte de los huecos se ven atrapados por defectos y As antisitio.
- La magnetización en el estado fundamental, $M(T = 0)$, por ion de Mn puede exceder $4\mu_B$ para concentraciones altas de Mn [Ohn99]. Un semiconductor ferromagnético con estos valores de $M(T = 0)$ tiene completamente alineados los momentos locales de los átomos de Mn.
- La temperatura de transición más alta obtenida hasta ahora para el (GaMn)As, $T_C = 110$ K [Ohn98], se obtiene para una concentración de Mn del 5%. Existe una correlación entre los valores $M(T = 0)$ y T_C .
- La temperatura de transición y su dependencia con la magnetización son sensibles a los procesos de recocido a los que se someta el semiconductor [Ohn99].
- Las bandas de valencia en el semiconductor se desdobladas para cada espín en la fase ferromagnética. Estos semiconductores presentan fuertes efectos magnetoresistivos, como la magnetoresistencia túnel [HSST99].

Efecto de las impurezas de Mn en GaAs

Mn sustitutivo. Mn_{Ga} Los elementos en el compuesto (GaMn)As tienen las siguientes estructuras $[Ar]3d^{10}4s^2p^1$ el Ga, $[Ar]3d^54s^2$ el Mn y $[Ar]3d^{10}4s^2p^3$ el As. Debido a esto, la posición más común del Mn en el cristal es colocarse en lugar del Ga donde sus dos electrones

4s que participan en los enlaces del cristal reemplazan a dos electrones 4s del Ga. Todavía falta un electrón 4p de valencia, lo que hace que el Mn_{Ga} actúe como una impureza aceptora.

Mn_{Ga} actúa como un momento localizado contribuyendo con un momento angular $L = 0$ y de espín $S = 5/2$ y un hueco ligeramente ligado a la red, $E_b = 112,4 meV$.

Mn intersticial. Mn_I Medidas experimentales muestran que cuando la concentración de Mn se hace muy elevada, en torno a un 20 % de las impurezas de Mn se sitúan en posiciones intersticiales. Esto puede ocurrir siguiendo dos configuraciones distintas: un Mn rodeado de cuatro átomos de Ga o un Mn rodeado de cuatro átomos de As. Ambas configuraciones introducen distorsión en la red cristalina, expandiéndola un 1,5 % y 2,5 % respectivamente. Esta situación conduce a comportamientos anisótropos en las propiedades magnéticas de los semiconductores.

Es posible reducir el número de este tipo de impurezas mediante procesos de recocido posteriores al crecimiento del cristal, gracias a que estas impurezas se encuentran en un estado metaestable.

El Mn_I actúa como un doble donador, así, cada Mn intersticial compensa dos Mn_{Ga} . El espín neto de un par de impurezas $Mn_{Ga} - Mn_I$ es mucho más pequeño que $5/2$ como consecuencia de interacciones antiferromagnéticas de corto alcance entre estos dos tipos de impurezas.

As antisitio. As_{Ga} Los procesos de crecimiento a baja temperatura conducen a la formación de As antisitio, átomo de As que se coloca en posiciones del Ga, debido a las condiciones de no equilibrio y a las sobrepresiones. Estos defectos actúan como donadores dobles y compensan el número de huecos total.

Son estables a altas temperaturas, por lo que no es posible hacerlos desaparecer por procesos de recocido posteriores al crecimiento del cristal.

1.4.2. Propiedades de los óxidos semiconductores

De los óxidos semiconductores, dos de los materiales más prometedores y ampliamente estudiados como candidatos para DMS ha sido el TiO_2 y el ZnO dopados con metales de transición. El TiO_2 dopado con cobalto tiene gran interés en este área por alguna de sus propiedades, como su alta constante dieléctrica, su alto índice de refracción y buena transmitancia óptica en el infrarrojo cercano [MMS⁺01]. El TiO_2 puede presentarse en tres configuraciones cristalinas diferentes: brookita, con los iones de Ti con coordinación octahédrica, rutila y anatesa [FTY05].

La configuración *antásica* produce conducción tipo N con una alta movilidad en torno a $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ a temperatura ambiente y crece rápidamente al disminuir la temperatura [FCE⁺94]. Sin embargo, debido a su inestabilidad termodinámica es un cristal difícil de crecer, lo que solo posibilita su uso en láminas delgadas sobre sustratos adecuados, como LaAlO_3 . Existe evidencia experimental de comportamiento ferromagnético para el TiO_2 dopado con cobalto [FTY05, MMS⁺01], además de otros empleando otros metales de transición como dopantes, como el V [HSH04] y el Fe [WTT⁺03].

El uso del ZnO como material espintrónico tiene ventajas añadidas debido a otras de sus propiedades [Loo01]. El ZnO es un material piezoeléctrico que permite usarlo en dispositivos transductores para la conversión entre energía eléctrica y energía mecánica [TCH⁺04]. El ZnO también presenta una banda de energías prohibidas muy ancha, en torno a 3,4 eV a temperatura ambiente, lo que lo hace interesante para aplicaciones optoelectrónicas, como la producción de LEDs [OAL⁺05]. En este aspecto va de la mano del GaN pero con algunas ventajas.

La disponibilidad del ZnO es mayor que en el caso de GaN [OAL⁺05]. El ZnO se puede depositar fácilmente sobre sustratos baratos, como vidrio, ya que se emplean temperaturas menores en el proceso [XBZ⁺06, VTS⁺97]. Además tiene un gran potencial como emisor LASER basado en la recombinación de excitones. El ZnO puede ser gravado químicamente usando ácidos y materiales alcalinos, haciéndolo útil para la fabricación de micro y nano dispositivos. Además tiene alta resistencia a las radiaciones ionizantes convirtiéndose en un buen material para aplicaciones espaciales.

A partir del trabajo realizado por Dietl *et al.* [DOM⁺00] y Sato *et al.* [SKD⁺10] usando cálculos basados en primeros principios se ha predicho el comportamiento del ZnO cuando este se dopa con metales de transición tales como el V, Cr, Fe, Co o Ni, sin necesidad de dopar para incrementar la cantidad de portadores de carga, lo cual está en concordancia con lo ya visto en sistemas dopados con Mn. El estado ferromagnético se estabiliza gracias al mecanismo de doble intercambio causado por electrones *d* itinerantes. Sin embargo, el ZnO crece como un material tipo N debido a la formación de defectos en el cristal tales como las vacantes de oxígeno o Zn intersticial [BLCY04].

En la primera observación experimental del ferromagnetismo a temperatura ambiente en ZnO [SGR⁺03] se utilizó como dopante Mn debido a su solubilidad a alta temperatura permitiendo preparar muestras de tamaño relativamente grande. Para ello una mezcla de ZnO y MnO_2 se calcina a $400 \text{ }^\circ\text{C}$ durante 8 horas y a continuación se sinteriza durante 12 horas en

aire entre 500 °C y 900 °C. La magnetización espontánea de las muestras disminuía con la temperatura de sinterización. A partir de mediciones de difracción de rayos X se observó que el incremento de la temperatura de sinterización introducía inhomogeneidades en la muestra.

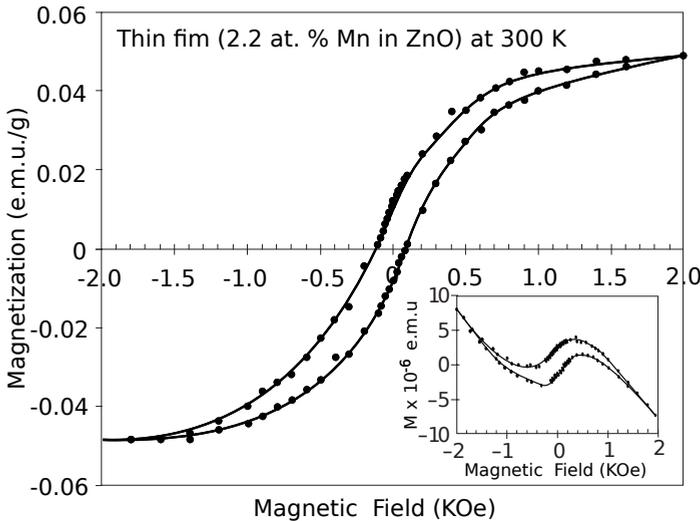


Figura 1.11: Magnetización frente al campo magnético en una lámina delgada de $\text{Zn}_{0,978}\text{Mn}_{0,022}\text{O}$ depositada sobre cuarzo fundido. En los datos en la gráfica principal se ha eliminado la componente asociada al diamagnetismo propio del cuarzo. Los datos originales se muestran en la figura insertada [SGR⁺03].

Para aplicaciones prácticas, solo era necesario crecer láminas delgadas, permitiendo reducir la temperatura de sinterización. Así, se ha depositado $\text{Zn}_{0,978}\text{Mn}_{0,022}\text{O}$ en sustrato de cuarzo usando deposición por laser pulsado y en las muestras obtenidas se observa ferromagnetismo incluso más allá de los 400 K [BLCY04].

Se han usado otros metales de transición para producir ZnO ferromagnético obteniendo resultados inconsistentes o incluso contradictorios. Se ha observado ferromagnetismo a temperatura ambiente en ZnO dopado con Fe [Kol04a], Cr [UTK01], Ni [VFLC04], Ti [VFLC04], V [STK01], Mn [JAY⁺02] y Co [UTK01]. Pero también existe evidencia experimental de ZnO no ferromagnético dopado con Fe, Cr [JFK⁺01], Mn [Kim04] y Co [KKK⁺02]. Las referencias aquí indicadas son un ejemplo de la bibliografía existente al respecto.

El origen del ferromagnetismo en este tipo de materiales todavía no está claro. Una de la hipótesis establece que el ferromagnetismo no es intrínseco al material sino que viene dado por la aparición de una fase con aglomerados de metal de transición, de lo cual existe evidencia

obtenida a partir de medidas de microscopía, difracción de rayos X y absorción de rayos X de estructura fina [VSD⁺07, KLK⁺02]. La formación de aglomerados está especialmente clara en el caso de muestras dopadas con más de un 12 % de Co [PKJ⁺04]. Teóricamente se predice una T_C de entorno a 300 K, sin embargo existe evidencia experimental que muestra que el ferromagnetismo se observa para temperaturas superiores. Por lo que todavía es necesario un mecanismo que describa de forma precisa el ferromagnetismo en este tipo de materiales.

1.4.3. Aproximaciones teóricas

El origen del ferromagnetismo se explicaría desde un punto de vista microscópico resolviendo la ecuación de Schrödinger para un sistema de muchos electrones dada la posición de los núcleos. Sin embargo, esta aproximación es imposible debido al elevado número de grados de libertad en las interacciones electrónicas. En lugar de esto, se emplearan modelos fenomenológicos que conduzcan a buenas aproximaciones de los resultados experimentales, proceso típico en este campo de investigación.

Una aproximación típica en la física de sistemas de muchos electrones es la teoría del funcional de la densidad de espín (SDF), en la cual los efectos de considerar muchos cuerpos se traduce en contribuciones de potencial de intercambio/correlación que se añade al Hamiltoniano de las partículas independientes. Esta teoría tiene la ventaja de que no necesita de parámetros fenomenológicos y la desventaja de no se conoce la forma exacta del Hamiltoniano, en particular la parte que añade el efecto de la correlación, lo que obliga a emplear aproximaciones que muchas veces incluyen parámetros de ajuste. Sin embargo, cuando es aplicada a materiales para analizar el ferromagnetismo en (III,Mn)V [SH00], empleando la aproximación de densidad local (LDA), conduce a resultados erróneos en la energía de los estados asociados a las impurezas de Mn, que no se corresponderían con un momento local $S = 5/2$. Una corrección posible es la conocida como LDA+U, que tiene en cuenta el incremento de energía cuando aumenta la ocupación de un orbital localizado, que corrige el defecto de la (LDA-SDF) [PKM00].

La aproximación LDA+U-SDF parece ser un buen modelo para describir las propiedades electrónicas de los semiconductores ferromagnéticos (III,Mn)V [SP03]. Sin embargo, en este trabajo se emplea un modelo obtenido a partir de una estrategia semi-fenomenológica, partiendo de un modelo donde el carácter local de los momentos de los orbitales d de los iones de Mn se impone en lugar de derivarse. Los grados de libertad de baja energía en el modelo cinético-intercambio que se emplea [SP03, LHEC88] son los momentos localizados $S = 5/2$

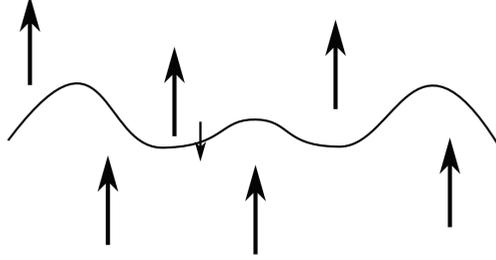


Figura 1.12: Modelo de acoplamiento ferromagnético para un semiconductor (III,Mn)V: los momentos magnéticos locales (Mn^{2+}) con espín $S = 5/2$ están acoplados antiferromagnéticamente con los portadores itinerantes (huecos) con espín $s = 1/2$ [SP03].

y los huecos en la banda de valencia del Mn (ver Figura 1.12). Como los Mn^{2+} actúan como aceptores se espera un hueco por Mn, pero debido a los otros tipos de impurezas o defectos de la red que compensan la cantidad de huecos, la densidad de huecos y la de Mn se toman como dos variables separadas para poder determinarlas experimentalmente.

Los términos que incluye el Hamiltoniano obtenido del modelo fenomenológico considerado son el operador de espín \mathbf{S}_I para el momento localizado $S = 5/2$ en la posición I y la función de densidad de espín de huecos $\mathbf{s}(\mathbf{r})$. A continuación se muestran los términos de la versión mínima del Hamiltoniano:

- El acoplamiento del espín del Mn con el campo magnético externo, $g\mu_B \sum_I \vec{S}_I \cdot \vec{H}_{ext}$.
- El Hamiltoniano asociado a las bandas del semiconductor III-V, normalmente descrito empleando el modelo de Luttinger-Kohn o la teoría de perturbaciones \vec{k} [CKS99] [AJBM01].
- El acoplamiento de intercambio antiferromagnético entre el espín de los iones Mn^{2+} y los huecos en la banda de valencia, $J_{exch} \sum_I \vec{S}_I \cdot \vec{s}(\vec{R}_I)$. Estas interacciones se pueden considerar isotrópicas porque los Mn^{2+} tienen un momento angular $L = 0$. Medidas experimentales de J_{exch} obtienen distintos valores como $150 \pm 40 \text{ meV}\cdot\text{nm}^3$ [Ohn98], $68 \pm 10 \text{ meV}\cdot\text{nm}^3$ [OMD⁺00] o $55 \pm 10 \text{ meV}\cdot\text{nm}^3$ [OKR⁺98], aunque los últimos experimentos muestran que J_{exch} tiende al valor más bajo de los anteriores.

Teoría de campo medio

La teoría de campo medio aplicada al estudio de los semiconductores ferromagnéticos [CSM01], y que también se conoce como aproximación de cristal virtual, se basa en considerar un *continuo de Mn*. Esta aproximación está motivada por la observación de que la longitud de onda de Fermi de los electrones en la banda de valencia del cristal es normalmente más larga que la distancia entre iones de Mn, debido a la compensación de los Mn que actúan como aceptores, y en parte por las cuatro bandas de valencia completamente llenas del cristal. Cuando la distribución de iones de Mn se reemplaza con un continuo con la misma densidad de espín, las consecuencias de la distribución aleatoria del Mn desaparecen del modelo mínimo considerado. Esta aproximación falla cuando la concentración de iones de Mn es muy diluida y si la interacción de intercambio entre los espines de los huecos en la banda de valencia y los Mn es muy fuerte. Además esta teoría no explica la sensibilidad a los procesos de recocido que se observa experimentalmente. Sin embargo, parece adecuada para describir semiconductores magnéticos con altas densidades de Mn y altas temperaturas de transición. La mayor aportación de esta aproximación es que da una buena predicción cuantitativa de muchas de las propiedades físicas de estos semiconductores.

La teoría de campo medio se deriva en el funcional densidad de espín y conduce a un conjunto de ecuaciones acopladas [JALM99]. El campo magnético efectivo visto por los iones magnéticos proviene de la superposición de un campo magnético externo y de la contribución del acoplamiento de los portadores con el espín polarizado debido a la interacción de intercambio,

$$\vec{H}_{eff} = \vec{H}_{ext} + \frac{J_{pd} \langle \vec{s}(\vec{R}_I) \rangle}{g\mu_B}, \quad (1.41)$$

donde $\langle \vec{s}(\vec{R}_I) \rangle$ es la densidad de portadores de espín en la posiciones de los iones de Mn y g es el factor giromagnético de los momentos localizados. La polarización media de un ion magnético viene dada por [Aha96]

$$\langle \vec{S} \rangle_I = -S B_S \left(\frac{S g \mu_B \vec{H}_{eff}(\vec{R}_I)}{k_B T} \right) \hat{H}_{eff}(\vec{R}_I), \quad (1.42)$$

donde $B_S(x)$ es la función de Brioullin y $\hat{H}_{eff}(\vec{R}_I)$ es el vector unitario en la dirección del campo magnético efectivo definido en la ecuación (1.41). La densidad de espín itinerante se determina resolviendo la ecuación de Schrödinger para huecos sometidos a un campo Zeeman efectivo $\vec{h}(\vec{r})$. El campo $\vec{h}(\vec{r})$ es distinto de cero solamente en el estado ferromagnético y en el

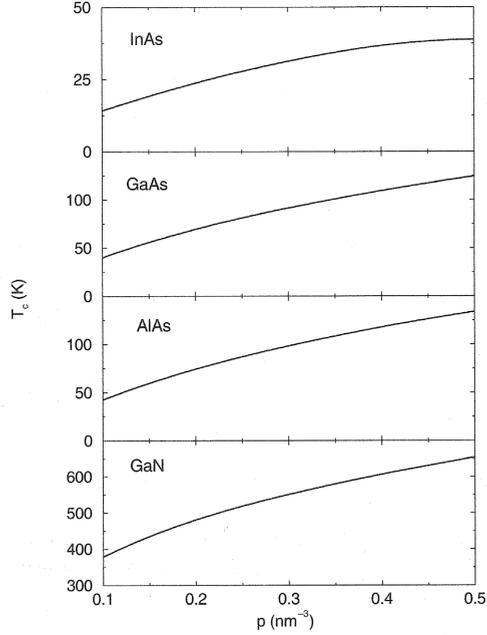


Figura 1.13: Contribución de la energía cinética a la temperatura crítica, T_C , calculada empleando la teoría de campo medio para una concentración de Mn de $x = 5\%$ como función de la concentración de huecos p para InAs, GaAs, AlAs y GaN [SP03].

límite continuo viene dado por

$$\vec{h}(\vec{r}) = J_{pd} N_{Mn}(\vec{r}) \langle \vec{S} \rangle(\vec{r}) \quad (1.43)$$

donde $N_{Mn} = 4x/a_{lc}$ es la densidad de Mn en el semiconductor $(\text{III}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{V}$ con constante de red a_{lc} .

1.4.4. Temperatura de Curie

En sistemas DMS homogéneos, la densidad de espín asociada a huecos $\langle s \rangle$ y el potencial cinético de intercambio h están relacionados para pequeños valores de h por [JSM⁺06]

$$\langle s \rangle = -\frac{\chi_f}{(g^* \mu_B)^2} h, \quad (1.44)$$

donde g^* es el factor giromagnético asociado a los huecos y χ_f es la susceptibilidad magnética de los huecos que intervienen en la interacción,

$$\frac{\chi_f}{(g^*\mu_B)^2} = -\frac{d^2}{dh^2} (E_{tot}/V), \quad (1.45)$$

donde E_{tot}/V es la densidad total de energía del sistema de huecos itinerantes. La temperatura de transición de Curie, T_C , se obtiene a partir de las ecuaciones 1.41 a 1.45 en el caso en que el campo externo es $H_{ext} = 0$ y viene dada por

$$k_B T_C = \frac{N_{Mn} S(S+1)}{3} \frac{J_{pd}^2 \chi_f}{(g^*\mu_B)^2}. \quad (1.46)$$

Para entender la física que implica la ecuación de T_C , necesitamos conocer la forma de la susceptibilidad magnética obtenida para un sistema modelo de electrones itinerantes con una sola banda desdoblada para cada espín y una masa efectiva m^* . La contribución de la energía cinética E_{tot}^{cin} a la energía total da

$$\frac{d^2}{dh^2} (E_{tot}^{cin}/V) = -\frac{m^* k_F}{4\pi^2 \hbar^2} \quad (1.47)$$

donde k_F es el vector de onda de Fermi. La energía de intercambio empleando un modelo de bandas parabólicas añade la contribución

$$\frac{d^2}{dh^2} (E_{tot}^{int}/V) = -\frac{q_e^2 (m^*)^2}{4\pi^3 \epsilon \hbar^4}, \quad (1.48)$$

donde ϵ es la constante dieléctrica del semiconductor. Para concentraciones altas de huecos, p , la energía cinética determina el comportamiento de T_C , por lo que esta será proporcional al vector de onda de Fermi, es decir, a $p^{1/3}$. Como resumen se puede decir que la temperatura de Curie va a depender de:

- La concentración efectiva de Mn. Es necesario considerar la compensación que la aparición de impurezas del tipo Mn_I y el As_{Ga} producen en el valor neto de los momentos de espín localizados.
- La concentración de huecos a través del vector de onda de Fermi, es decir, $T_C \propto p^{1/3}$.
- La masa efectiva de los portadores en el cristal.

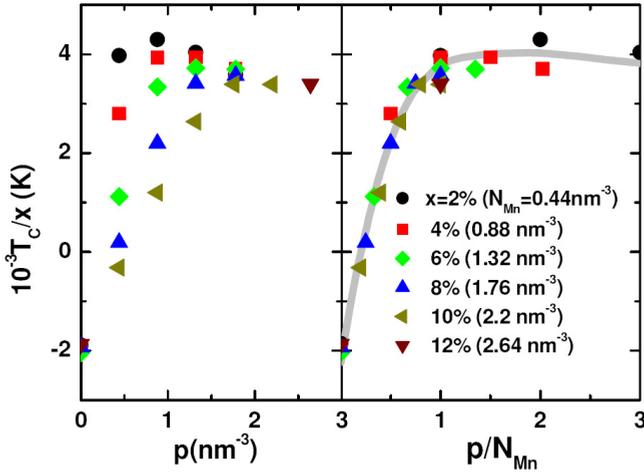


Figura 1.14: La temperatura de Curie depende de la concentración de portadores (huecos) y de la concentración de Mn. La gráfica muestra las diferentes T_C calculadas para el $(\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{As}$ empleando la teoría de campo medio y un modelo realista de bandas de energía [JSM⁺06].

Para obtener predicciones cuantitativas de T_C es preciso evaluar las contribuciones de la energía cinética y de intercambio a la susceptibilidad empleando modelos de bandas realistas en lugar del modelo parabólico. El Hamiltoniano incluye un parámetro de desdoblamiento por la interacción espín-órbita Δ_{so} y una serie de parámetros fenomenológicos [SP03]. Los resultados obtenidos para la predicción de T_C para distintos materiales empleando la teoría de campo medio se muestran en la figura 1.13 y para $(\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{As}$ a distintas concentraciones de Mn en la figura 1.14. Los resultados numéricos son consistentes con la predicción cualitativa empleando la aproximación de banda parabólica, donde la contribución debida a la energía cinética a T_C sigue aproximadamente la dependencia $p^{1/3}$.

La teoría de campo medio predice una temperatura crítica que está de acuerdo con la medida experimental realizada para GaAs dopado con Mn a una concentración de $x = 5\%$ y una concentración de huecos de $p = 0,35 \text{ nm}^{-3}$. Fluctuaciones térmicas, despreciadas en el modelo de la teoría de campo medio, reducen el valor teórico en menos de un 5% [DOM01]. Si se sigue un análisis similar para el $(\text{Ga},\text{Mn})\text{N}$ se encuentra que la reducción en este caso sería del 20% [DOM01] por lo que la teoría del campo medio predice que este material

es ferromagnético a temperatura ambiente. En la tabla 1.2 [PAN⁺03] se muestran algunos materiales que presentan ferromagnetismo a temperatura ambiente.

Material	E_g (eV)	Comentarios fabricación	T_C (K)
$(Ga, Mn)As$	1.4	Crecimiento mediante VG100H MBE	~ 110
$Cd_{1-x}Mn_xGeP_2$	1.72	Reacción de fase solida con Mn evap.	> 300
$(Ga, Mn)N$	3.4	Mn añadido durante MBE	> 300
$(Ga, Cr)N$	3.4	Cr añadido durante MBE	> 400
$(ZnO) : Co$	3.1-3.6	Co añadido durante PLD	> 300

Tabla 1.2: DMS, su proceso de fabricación y su temperatura de Curie. Algunas de las aleaciones que muestran ferromagnetismo a temperatura ambiente [PAN⁺03].

CAPÍTULO 2

MODELOS FÍSICO Y NUMÉRICO

Para analizar el comportamiento de un dispositivo electrónico y obtener sus características eléctricas, como puede ser su respuesta I-V, los modelos comúnmente empleados son simplificaciones de la ecuación de transporte de Boltzman (BTE). El caso típico y más tradicional es el modelo de arrastre-difusión que proporcionan descripciones que se pueden considerar válidas en un tiempo muy inferior al necesario con otros métodos más precisos. Sin embargo, a medida que se reducen las dimensiones del dispositivo, se introduce la necesidad de resolver la BTE usando técnicas Monte-Carlo, de añadir correcciones cuánticas a los fenómenos de transporte o de usar formalismos de transporte cuántico en lugar de semiclásicos.

El primer nivel de aproximación a la hora de simular un dispositivo electrónico son los modelos compactos que condensan toda la información física del sistema en aproximaciones analíticas y parámetros empíricos. Estos modelos son los que menos tiempo de cálculo requieren pero no tienen en cuenta ni la naturaleza distribuida de los parámetros ni la geometría del sistema. En este nivel se encuentran las soluciones SPICE [NP73].

A continuación se encuentra la aproximación de arrastre y difusión [Sel84, ZWK⁺00, GLKA05, SICn⁺13] donde solo se consideran los dos primeros momentos de la BTE: la ecuación de continuidad de corriente y la ecuación de conservación del momento, ambos acoplados con la ecuación de Poisson mediante el potencial electrostático. La relación entre campo eléctrico y velocidad es local y solo modela estados de equilibrio.

Por encima del modelo de arrastre y difusión se encuentra la aproximación hidrodinámica de la BTE [Gar94]. En este caso se incluye la conservación de la energía (tercer momento de la BTE) añadiendo complejidad a la ecuación de conservación del momento. Mediante apro-

ximación se pueden simular sistemas fuera del equilibrio ya que la relación entre velocidad y campo eléctrico ya no es local.

El siguiente nivel es el empleo de técnicas Monte Carlo para resolver la BTE [JR83, JL89]. En este caso se simula el movimiento en el espacio real de una muestra aleatoria representativa de las cargas que se mueven en el dispositivo, sometidas a los fenómenos dispersivos típicos del sistema simulado. Esta aproximación es altamente costosa a nivel computacional y solo se emplea en dispositivos de dimensiones muy reducidas donde la aproximación de vaciamiento ya no es válida [BAY⁺03, VSA⁺12].

Por último, se encuentran las aproximaciones de transporte cuántico que emplean soluciones acopladas de la ecuación de Poisson y de Schrödinger, la matriz densidad o la función de distribución de Wigner [DRPD02, KFP08]. Junto a estas se encuentra el formalismo de funciones de Green [Dat00, AMA11] que permite añadir mecanismos de dispersión en la formulación cuántica. Todas estas técnicas son extremadamente costosas en su implementación computacional lo que constituye su principal limitación.

Existe un punto intermedio entre las aproximaciones “clásicas” y la mecano-cuánticas que se conoce como correcciones cuánticas. Estas correcciones permiten añadir a los métodos clásicos fenomenología puramente cuántica, tales como el confinamiento cuántico o el transporte de carga por efecto túnel. Las dos correcciones más ampliamente usadas son el gradiente de densidad [WSF01] y el potencial efectivo [ARV10].

En este trabajo se centra en los dos primeros niveles de aproximación en la simulación de las características eléctricas de un dispositivo espintrónico. Para ello se han desarrollado modelos analíticos acompañados con un simulador numérico basado en el modelo de arrastre y difusión. En ambos casos se ha añadido la fenomenología cuántica introducida por el ferromagnetismo presente en los semiconductores magnéticos como son el transporte túnel y la polarización del espín de los portadores de carga. Lo que se pretende es obtener una primera aproximación del comportamiento de una unión PN cuando se emplean materiales con propiedades ferromagnéticas en su construcción. Siempre teniendo en cuenta que para construir un modelo preciso de este tipo de dispositivos, el modelo de arrastre y difusión puede no ser el más adecuado, tanto por las pequeñas dimensiones de la zona de vaciamiento de la unión, al estar esta fabricada con materiales altamente degenerados, como por la naturaleza cuántica del ferromagnetismo.

Dada la simetría del sistema, se considera una unión PN lineal con los contactos a los extremos, y para simplificar el desarrollo se ha optado por implementar un simulador 1D

para una unión degenerada al que se le han ido añadiendo modificaciones para considerar los efectos del ferromagnetismo sobre las ecuaciones básicas. La dimensión considerada es aquella en la que se realiza el transporte de portadores y por lo tanto se asume que las variables no dependen de la posición en las otras dos direcciones.

2.1. Ecuaciones básicas

Las ecuaciones fundamentales que van a modelar el comportamiento de un dispositivo electrónico son las ecuaciones de Poisson y de continuidad de corriente, que se obtienen a partir de las ecuaciones de Maxwell en un medio material [Mar86] que definen el campo electromagnético en el dominio del dispositivo simulado.

2.1.1. Ecuación de Poisson

La ecuación de Poisson se obtiene directamente a partir de las ecuaciones de Maxwell teniendo en cuenta que en los dispositivos simulados la velocidad de la luz es mucho mayor comparada con cualquiera de las velocidades relevantes en el dispositivo. Esto permite despreciar la dependencia temporal del potencial y obtener la ecuación de Poisson que viene dada por:

$$\nabla(\epsilon\nabla\psi) = -\rho, \quad (2.1)$$

donde ψ es el potencial electrostático, ϵ la constante dieléctrica del material y ρ la densidad de carga en el dominio del sistema a simular, que viene dada por la suma de la carga móvil, electrones y huecos, y la cargas fijas, las impurezas ionizadas. Es decir:

$$\rho = q_e(p - n + N_C^+ - N_A^-), \quad (2.2)$$

donde se han considerado las densidades de huecos (p), electrones (n), impurezas ionizadas donadoras (N_D^+) y impurezas ionizadas aceptoras (N_A^-).

2.1.2. Ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad también se obtiene a partir de las ecuaciones de Maxwell aplicando el operador divergencia a la ley de Ampère generalizada. Si esto se combina con la ley de Gauss, se obtiene la ecuación de continuidad:

$$\nabla\vec{J} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0, \quad (2.3)$$

si consideramos que la corriente tiene dos contribuciones, una debido a la corriente de electrones, J_n , y otra a la corriente de huecos, J_p , de tal manera que $J = J_n + J_p$ y además que la densidad de impurezas en (2.2) no cambia con el tiempo, tenemos que en el interior del sistema simulado se verifica que

$$\nabla \vec{J}_n - q_e \frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \vec{J}_p - q_e \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (2.4)$$

Si consideramos que ambos miembros de la expresión anterior son iguales a una cantidad $q_e R$, donde R es una función que describe la recombinación ($R > 0$) y generación ($R < 0$) neta de pares electrón-hueco en el semiconductor, tenemos que

$$\nabla \vec{J}_n - q_e \frac{\partial n}{\partial t} = q_e R \quad (2.5)$$

$$\nabla \vec{J}_p + q_e \frac{\partial p}{\partial t} = -q_e R. \quad (2.6)$$

Modelo de arrastre-difusión

El modelo de arrastre-difusión se basa en que la corriente a través de un dispositivo tiene dos componentes, la componente de arrastre causada por el movimiento de cargas en el campo eléctrico y la componente de difusión causada por las variaciones de concentración de portadores a lo largo del dispositivo, es decir, el gradiente de la concentración. Las ecuaciones de este modelo se pueden obtener a partir de la BTE considerando varias simplificaciones [Sel84]:

- Las colisiones de los portadores son elásticas.
- Los tiempos de colisión y la estructura de bandas son constantes.
- Los efectos de la degeneración no se consideran en una primera aproximación.
- Las fuerzas externas son constantes.
- No hay inducción magnética.
- El sistema está en equilibrio térmico.
- La aproximación parabólica de la estructura de bandas es válida.
- Los fenómenos de transporte son independientes del tiempo.

– El dispositivo tiene longitud infinita.

Considerando las simplificaciones anteriores en la BTE y sabiendo que la función distribución en el equilibrio viene dada por la estadística de Fermi-Dirac [Sel84],

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\vec{F}}{\hbar} \nabla_k f - \vec{v} \nabla_r f, \quad (2.7)$$

$$f_0 = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E_c(x,k) - E_F(x)}{k_B T}\right]} \quad (2.8)$$

se obtienen las expresiones de la corriente para electrones y huecos:

$$\vec{J}_n = -q_e \mu_n n \nabla \phi_n \quad (2.9)$$

$$\vec{J}_p = -q_e \mu_p p \nabla \phi_p, \quad (2.10)$$

donde ϕ_x son los pseudopotenciales de Fermi de cada tipo de portador y μ_x son las movilidades efectivas de los portadores definidas por [SN06]

$$\mu_x = q_e \frac{\langle \tau_x \rangle}{m_x^*}, \quad (2.11)$$

donde τ_x es el tiempo de relajación y m^* la masa efectiva. En nuestro caso las masas efectivas se toman como valores constantes.

Para escribir las ecuaciones de la corriente en la forma de un término debido al arrastre y otro a la difusión de portadores, empleamos la expresión de la concentración de portadores. Para los electrones:

$$n = N_c F_{1/2}(\eta_n), \quad (2.12)$$

donde

$$\eta_n = \frac{E_{Fn} - E_C}{k_B T} \quad (2.13)$$

El gradiente de la concentración viene dado por

$$\begin{aligned} \nabla n &= N_c \nabla F_{1/2}(\eta_n) = N_c F_{-1/2}(\eta_n) \nabla \eta_n = \\ &= N_c F_{-1/2}(\eta_n) \frac{\nabla E_{Fn} - \nabla E_C}{k_B T}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

donde se ha empleado la propiedad de la integral de Fermi-Dirac [Pie87]

$$\frac{d}{d\eta} F_\nu(\eta) = F_{\nu-1}(\eta). \quad (2.15)$$

La integral de Fermi-Dirac se define como

$$F_\nu = \frac{1}{\Gamma(\nu + 1)} \int_0^\infty \frac{t^\nu}{\exp(t - x) + 1} dt, \quad (2.16)$$

donde $\Gamma(\nu + 1)$ es la función gamma.

Sabiendo que $E_{Fn} = -q_e\phi_n$, tenemos que:

$$-q_e\nabla\phi_n = \frac{k_B T}{N_c F_{-1/2}(\eta_n)} \nabla n + \nabla E_C, \quad (2.17)$$

que sustituyéndolo en la expresión de la corriente (2.9):

$$J_n = \mu_n n \left(\frac{k_B T}{N_c F_{-1/2}(\eta_n)} \nabla n + \nabla E_C \right) = \mu_n \left(\frac{F_{1/2}(\eta_n)}{F_{-1/2}(\eta_n)} k_B T \nabla n + n \nabla E_C \right). \quad (2.18)$$

De forma similar se puede obtener la expresión para la corriente de huecos:

$$J_p = -\mu_p \left(\frac{F_{1/2}(\eta_p)}{F_{-1/2}(\eta_p)} k_B T \nabla p - p \nabla E_V \right). \quad (2.19)$$

En las ecuaciones anteriores, ∇E_x es igual al campo eléctrico en el dispositivo y el factor $\lambda_x = \frac{F_{1/2}(\eta_x)}{F_{-1/2}(\eta_x)}$ se puede interpretar como una corrección a la relación de Einstein que tiene en cuenta el grado de degeneración del material [SOK94, Kim09]. Así, la relación entre la constante de difusión y la movilidad en un material degenerado sería:

$$D_x = \lambda_x \frac{k_B T}{q_e} \mu_x \quad (2.20)$$

Estas ecuaciones para el modelo de arrastre-difusión, obtenidas a partir de la BTE, tienen varias limitaciones por las simplificaciones realizadas. Sólo son válidas mientras el campo eléctrico se mantenga en valores bajos, dado que para valores altos los mecanismos de dispersión en el material no son suficientes para mantener la temperatura de los portadores constante e igual a la temperatura de la red, rompiendo la condición de equilibrio isotérmico. Además se ha empleado la función de distribución de portadores en el equilibrio, la cual se hace muy asimétrica si la región de campo eléctrico con valores altos es muy pequeña. Por último se ha añadido un factor λ_x para considerar materiales degenerados, pero esta corrección está limitada debido a que para la simplificación de la BTE se ha empleado la aproximación de bandas parabólicas, la cual deja de ser cierta a medida que aumenta la degeneración.

2.1.3. Condiciones de contorno

El análisis de un dispositivo semiconductor se realiza evaluando las ecuaciones antes obtenidas en todo el dispositivo, pero este sistema está conectado con el exterior además de haber interfaces entre diferentes regiones con distintas propiedades materiales. El acoplamiento de las diferentes zonas del dispositivo y de este con su entorno se realiza mediante las condiciones de contorno. Estas relaciones entre variables en las fronteras de las distintas regiones del dispositivo deben ser físicamente representativas y deben ser elegidas en función de cada tipo de frontera. En particular, en nuestros modelos se han empleado dos tipos de condiciones de frontera, condiciones de tipo Dirichlet y de tipo Neumann.

Condiciones Neumann

Las condiciones de tipo Neumann se pueden aplicar en la superficie del dispositivo o en un contorno introducido artificialmente lejos de las regiones activas de un dispositivo. En este tipo de condiciones se especifica el valor de la derivada en la frontera. En nuestro caso, la derivada del potencial fuera de la región de vaciamiento es cero, es decir, el campo eléctrico perpendicular a la interfaz es cero. Esto se traduce en la expresión [Sel84]

$$\hat{n}\nabla\psi = 0. \quad (2.21)$$

El empleo de este tipo de condiciones debe realizarse con cuidado: el potencial electrostático no tiene una referencia, es una magnitud flotante, esto es, cualquier función ψ' sumada a ψ que cumpla la condición $\nabla^2\psi' = 0$ hará que la ecuación de Poisson se siga cumpliendo. Por lo tanto, para conseguir una solución única para la ecuación de Poisson, debemos fijar el valor del potencial en algún punto del dispositivo. Para calcular el potencial en el dispositivo en equilibrio se usarán condiciones de contorno de Neumann ya que al no fijar previamente el valor en los contactos, permite una mejor solución final aún no teniendo los valores del potencial en los contactos bien ajustados en la solución inicial.

Contactos óhmicos, condiciones Dirichlet

Los contactos óhmicos son la interfaz típica para conectar el dispositivo con el entorno, en nuestro caso corresponderán con los contactos ánodo y cátodo del diodo. Este tipo de contactos se pueden modelar empleado condiciones de contorno de tipo Dirichlet, en las cuales el valor de la variable en la frontera es conocido y está fijado de antemano. En el caso de los

dispositivos electrónicos se fijarán mediante estas condiciones el valor del potencial electrostático, la concentración de electrones y la concentración de huecos en los contactos del diodo. Se usaran este tipo de condiciones para resolver el dispositivo fuera del equilibrio tal como se expone a continuación.

El valor de los pseudo-potenciales de Fermi en la frontera será igual al valor del potencial aplicado en los contactos [Sel84]

$$\begin{aligned}\phi_n^a &= \phi_p^a = V_a, \\ \phi_n^c &= \phi_p^c = V_c,\end{aligned}\tag{2.22}$$

donde “a” se refiere al ánodo y “c” al cátodo.

Las condiciones de contorno para las concentraciones de portadores se pueden obtener a partir de la condición de neutralidad de carga fuera de las regiones activas del dispositivo.

$$n + N_A^- - p - N_D^+ = 0\tag{2.23}$$

Entonces, considerando la estadística de Fermi, ya que vamos a trabajar con semiconductores degenerados, y teniendo en cuenta que las concentraciones de electrones y huecos han de permanecer constantes en los contactos e iguales a sus valores de equilibrio tenemos que las condiciones de contorno para las concentraciones son:

$$\begin{cases} N_c F_{1/2}(\eta_n) + N_A^+ - N_v F(\eta_p) - N_D^+ = 0 \\ n_0 - N_c F_{1/2}(\eta_n) = 0 \\ p_0 - N_v F_{1/2}(\eta_p) = 0 \end{cases}\tag{2.24}$$

donde n_0 y p_0 son los valores de las concentraciones de electrones y huecos en el equilibrio, N_A^- y N_D^+ son las concentraciones efectivas de impurezas ionizadas y

$$\eta_n = \frac{-q_e \phi_n - E_C}{k_B T} = \frac{-q_e V_{ap} - E_C}{k_B T}\tag{2.25}$$

$$\eta_p = \frac{E_V - q_e \phi_p}{k_B T} = \frac{E_V - q_e V_{ap}}{k_B T}\tag{2.26}$$

$$E_C = -q_e \psi - \chi\tag{2.27}$$

$$E_V = E_C - E_g,\tag{2.28}$$

$V_{ap} = \{V_a, V_c\}$ es el potencial aplicado, tanto en el ánodo como en el cátodo, según para que contacto sea la condición de contorno.

2.1.4. Transporte en una heterounión

La división de un dispositivo en distintas regiones, permite analizar estructuras compuestas por materiales con distintas propiedades. Las diferentes regiones del dispositivo se enlazan mediante relaciones matemáticas que respetan las características físicas de la estructura. En los dispositivos de heterounión la composición o las propiedades de los materiales constituyentes cambian de forma abrupta, lo que se traduce en la aparición de barreras de potencial en las bandas que hacen que el modelo de arrastre-difusión no mantenga su validez.

Para simular dispositivos de heterounión es necesario modificar las ecuaciones básicas para considerar esas barreras de potencial. Para obtener las modificaciones, primero estudiaremos el transporte en uniones metal semiconductor debido a que su comportamiento es similar al caso de la unión de dos semiconductores de diferente naturaleza. Seguidamente, se mostrarán las expresiones que modelan el transporte por emisión termiónica y efecto túnel en este tipo de estructuras.

Unión metal-semiconductor

La forma de las barreras que aparecen en las heteroestructuras es similar a las que se producen en las uniones metal-semiconductor o contactos Schottky [Mea66], por lo que se pueden emplear las formulaciones de este tipo de contactos para describir las uniones semiconductor-semiconductor.

El transporte en los diodos basados en contactos Schottky, cuyo estudio comenzó en los años 30, se explica mediante la difusión de portadores desde el semiconductor al metal. Esta teoría supone que el modelo de arrastre-difusión se cumple en las proximidades de la interfaz metal/semiconductor. Además supone que en una pequeña región del semiconductor adyacente a la interfaz, la concentración de portadores no depende de la corriente. La densidad de corriente, en condiciones estacionarias, viene dada por [SN06]

$$J_n = J_{sdif} \left[\exp\left(\frac{q_e V}{k_B T}\right) - 1 \right], \quad (2.29)$$

donde J_{sdif} es la densidad de corriente de saturación en inversa de la unión metal-semiconductor y depende del valor de la concentración de portadores y la forma de la barrera de potencial en la región considerada anteriormente.

Sin embargo, en la mayoría de los casos, el modelo anterior no es correcto, y el principal mecanismo responsable del transporte es la emisión termiónica de portadores minoritarios.

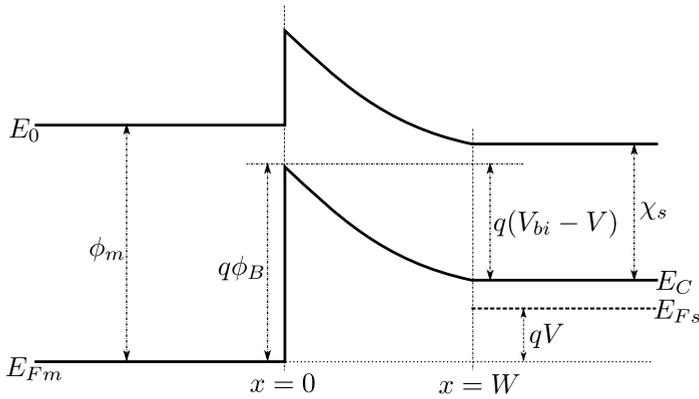


Figura 2.1: Esquema de bandas de una unión metal-semiconductor fuera del equilibrio.

Este modelo establece que la corriente a través de la barrera solo depende de la altura de esta y es independiente de su forma. La densidad de corriente en el lado del semiconductor dependerá de la altura de la barrera en ese lado, y esta va a depender de la tensión aplicada, sin embargo, en el lado del metal la barrera permanece constante, tal como se muestra la figura 2.1. La expresión de la densidad de corriente que se obtiene a partir de este modelo viene dada por

$$J_n = J_{set} \left[\exp \left(\frac{q_e V}{k_B T} - 1 \right) \right], \quad (2.30)$$

siendo J_{set} la densidad de corriente de saturación en inversa de la unión metal-semiconductor debida al transporte por emisión termioiónica.

Las dos ecuaciones anteriores son similares en forma, sin embargo J_{sdif} es más dependiente de la tensión aplicada y menos sensible a los cambios de temperatura que J_{set} .

Posteriormente, se perfeccionó la teoría de la unión metal-semiconductor surgiendo el modelo emisión-difusión [Rho82, SN06] a partir de la síntesis de los modelos de difusión y emisión termioiónica. Este modelo consiste en igualar la corriente por emisión termioiónica en una región próxima a la interfaz con la corriente obtenida a partir del modelo de arrastre-difusión aplicado fuera de esa región. Sin embargo, hay que tener en cuenta que a bajas temperaturas y para altos dopados, la corriente túnel a través de la barrera de potencial en la interfaz puede tomar valores importantes.

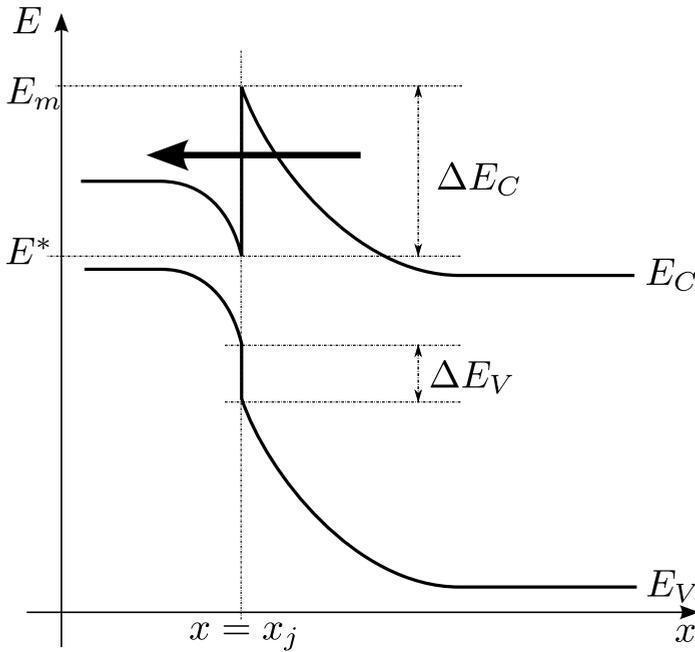


Figura 2.2: Esquema de bandas de energía de una heterounión abrupta.

Emisión termiónica en una heterounión

El modelo empleado para tratar la emisión termiónica incluyendo efecto túnel en la interfaz de la heterounión se basa en la formulación de [Lop94]. Este modelo tiene en cuenta el efecto que tiene la diferencia de masas efectivas sobre la densidad de estados en cada región de la heterounión. Se considera que todo el transporte va a ocurrir en la dirección normal al plano de la interfaz de los dos materiales, y que el efecto túnel sólo ocurre en la banda de conducción, como se muestra en la figura 2.2. En esta figura x_j es la posición de la interfaz, E_m y E^* son los niveles de energía que caracterizan la altura de la barrera en la banda de conducción, cuyo valor es ΔE_C , y $\Delta E_V = E_V(x_j^+) - E_V(x_j^-)$ es el valor de la discontinuidad del límite de la banda de valencia en la interfaz. Las posiciones con superíndices $+$ y $-$ hacen referencia al valor de la variable, en este caso la energía del límite superior de la banda de valencia (E_V), en el lado derecho e izquierdo de la discontinuidad. Esta notación se sigue empleando en las expresiones que aparecen a continuación en este apartado.

La densidad de corriente para electrones viene dada por:

$$J_n^{fet} = -q_e v_{nef} \left[\frac{N_{c2}}{N_{c1}} n(x_j^-) - n(x_j^+) \exp\left(-\frac{\Delta E_C}{k_B T}\right) \right], \quad (2.31)$$

donde v_{nef} es la velocidad efectiva de los portadores que se obtiene de

$$v_{nef} = \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m^*}} (1 + p_t), \quad (2.32)$$

siendo p_t un factor de transmisión túnel que da la probabilidad de que los portadores atraviesen la barrera de energía en la interfaz por efecto túnel. Este factor se puede obtener a partir de

$$p_t = \frac{1}{k_B T} \int_{E^*}^{E_m} T(E) \exp\left(\frac{E_m - E}{k_B T}\right) dE, \quad (2.33)$$

donde $T(E)$ es el coeficiente de transmisión túnel que se puede obtener a partir de la aproximación WKB [Kan61],

$$T(E) = \exp\left(\frac{-4\pi\sqrt{2m^*}}{h} \int_x^{x_j} \sqrt{E_C(x) - E} dx \Theta(E_m - E)\right), \quad (2.34)$$

donde $\Theta(x)$ es la función escalón de Heaviside. En esta aproximación se está ignorando la reflexión cuántica para energías de los portadores mayores que la barrera de potencial.

Empleando una aproximación de la barrera a una forma triangular, la ecuación anterior quedaría después de integrar

$$T(E) = \exp\left(\frac{-8\pi\sqrt{2m^*}}{3h} \sqrt{E_C(x) - E(x_j - x)}\right). \quad (2.35)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación (2.33), la formula que se obtiene no tiene solución analítica, por lo que es necesario emplear técnicas de integración numérica para resolverla.

Siguiendo el mismo tipo de análisis se puede obtener una expresión para la corriente de huecos. En el caso que estamos considerando (figura 2.2) no habría transmisión túnel de huecos por la forma de la discontinuidad en el límite de la banda de valencia, por lo que la densidad de corriente de huecos por emisión termoiónica sería:

$$J_p^{et} = q_e v_{pef} \left[\frac{N_{v2}}{N_{v1}} p(z_j^-) - p(z_j^+) \exp\left(-\frac{\Delta E_v}{k_B T}\right) \right], \quad (2.36)$$

donde v_{pef} es la velocidad efectiva de huecos y viene dada por

$$v_{pef} = \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m^*}}. \quad (2.37)$$

Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno deben tener en cuenta que los materiales a ambos lados de la interfaz son diferentes. Debido a esto pueden aparecer discontinuidades en las variables al cambiar de material, por lo que las condiciones de contorno deben relacionar el valor de las variables a cada lado de la interfaz.

Una de las condiciones de contorno es la continuidad del potencial electrostático, $\psi(x_j^-) = \psi(x_j^+)$, y este debe seguir cumpliendo la ecuación de Poisson.

Además de las ecuaciones de continuidad de portadores tendríamos que:

$$J_n(x_j^-) - J_n(x_j^+) = q_e \left(R_I + \int_{x_j^-}^{x_j} R(x_j^-) dx + \int_{x_j}^{x_j^+} R(x_j^+) dx \right) \quad (2.38)$$

$$J_p(x_j^-) - J_p(x_j^+) = -q_e \left(R_I + \int_{x_j^-}^{x_j} R(x_j^-) dx + \int_{x_j}^{x_j^+} R(x_j^+) dx \right) \quad (2.39)$$

Si el diagrama de bandas de energía fuesen continuas en la interfaz las ecuaciones anteriores se completarían con

$$n(x_j^-) = n(x_j^+) \quad (2.40)$$

$$p(x_j^-) = p(x_j^+). \quad (2.41)$$

Sin embargo, si existiesen discontinuidades en las bandas de energía en la interfaz, las ecuaciones (2.40) y (2.41) deben ser sustituidas por las ecuaciones (2.42) y (2.43) respectivamente, de las que se obtienen las densidades de corriente que atravesarían la interfaz por emisión termoiónica y efecto túnel si procede:

$$J_n = -q_e v_{nef} \left[\frac{N_{c2}}{N_{c1}} n(x_j^-) - n(x_j^+) \exp\left(-\frac{\Delta E_C}{k_B T}\right) \right] \quad (2.42)$$

$$J_p = q_e v_{pef} \left[\frac{N_{v2}}{N_{v1}} p(x_j^-) - p(x_j^+) \exp\left(-\frac{\Delta E_v}{k_B T}\right) \right]. \quad (2.43)$$

2.2. Escalado de variables

Las variables escaladas se emplean por ser más adecuadas para su tratamiento computacional. El escalado de las variables consiste en escoger determinados factores de escala, para cada variable en las ecuaciones a resolver, de tal manera que las cantidades escaladas obtenidas reduzcan sus diferencias de magnitud y aislen los parámetros dimensionales de los

que depende el modelo. Una magnitud escalada x' es adimensional, ya que sus dimensiones quedan recogidas en su factor de escala x_0 , de esta forma $x = x_0 x'$ donde x es la magnitud a escalar.

Existen diferentes formas de escalar las variables [Mar86], en nuestro caso hemos escogido el conjunto que se muestra en la tabla 2.1.

<i>Magnitud</i>	<i>Factor de escalado</i>	<i>Valor</i>
ψ	V_{T0}	$k_B T / q_e$
n, p, C	C_0	$ N_a - N_d $
x	x_0	$\sqrt{\frac{\epsilon_0 V_{T0}}{q_e C_0}}$
D_n, D_p	D_0	$10^{-4} \text{ m}^2 / \text{s}$
τ_n, τ_p	τ_0	x_0^2 / D_0
μ_n, μ_p	μ_0	V_{T0} / D_0
J	J_0	$q_e x_0 C_0 / \tau_0$

Tabla 2.1: Resumen de los factores de escalado empleados en el simulador.

Es decir, se aplican los siguientes criterios de escalado:

- El potencial se escala con el potencial térmico del sistema: $V_{T0} = k_B T / q_e$.
- Las concentraciones de portadores y de dopado se escalan con una concentración característica que es igual a la media de las concentraciones efectivas en cada región del dispositivo.
- El factor de escalado de las longitudes se obtiene de forma indirecta a través del potencial térmico y del factor de escalado de las concentraciones de portadores y de dopado.
- Se elige un factor de escalado para las constantes de difusión aunque no se emplea directamente. Se emplea para calcular el escalado de la movilidad y las vidas medias de los portadores.
- El factor de escalado de las movilidades es tal que los valores escalados de la movilidad son del orden de la unidad.
- Las corrientes se escalan con un factor obtenido a partir del factor de escalado de las longitudes, de las concentraciones de dopado y portadores y de las vidas medias de los portadores.

Estos factores de escalado permiten reescribir las ecuaciones que modelan el dispositivo con las nuevas variables escaladas. En particular, en el caso de la ecuación de Poisson, si se emplea la misma notación para las variables escaladas que para las variables sin escalar, aparece un factor de escalado que multiplica al término del potencial:

$$\lambda^2 \nabla (\epsilon \nabla \phi) + \rho = 0, \quad (2.44)$$

donde λ viene dado por

$$\lambda = \frac{\lambda_D}{x_0} \quad \text{y} \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon V_{T0}}{q_e C_0}} \quad (2.45)$$

siendo λ_D la longitud de Debye característica del dispositivo. En la mayor parte de las situaciones, λ toma valores muy pequeños, del orden de 10^{-3} a 10^{-5} .

2.3. Coeficientes de recombinación

Las ecuaciones de continuidad en un estado estacionario,

$$\nabla \vec{J}_n = q_e R \quad (2.46)$$

$$\nabla \vec{J}_p = -q_e R, \quad (2.47)$$

describen el cambio de la densidad de corriente como consecuencia de un término R que puede ser entendido como una función que describe la generación ($R < 0$) o recombinación ($R > 0$) neta de electrones y huecos en el material semiconductor. De las ecuaciones de continuidad no se puede extraer más información acerca de este término, por lo que R tiene que ser modelado empleando el conocimiento que tengamos de la física de los materiales semiconductores. Esta sección está dedicada a la discusión de los fenómenos físicos a partir de los cuales se derivan los modelos que describen la función R .

En un semiconductor en equilibrio térmico y dopado de forma homogénea, la concentración de portadores estará continuamente fluctuando debido a los procesos de generación y recombinación que se dan por la energía cinética que los portadores poseen. Sin embargo, habrá un balance neto entre la recombinación y la generación que conservará las concentraciones en sus valores de equilibrio. Cuando el semiconductor es excitado por algún estímulo externo, el balance entre la recombinación y la generación será roto y las concentraciones se alejarán de sus valores de equilibrio. Si la cantidad de portadores de carga disponibles aumenta, los procesos de generación se harán dominantes y si disminuye serán los mecanismos de recombinación los más importantes.

La importancia de cada uno de los mecanismos de generación y recombinación en un dispositivo depende del material, de la intensidad del campo eléctrico, de los niveles de dopado y de los procesos de fabricación. En particular en nuestro dispositivo se tienen en cuenta los siguientes mecanismos:

- Recombinación túnel [Kan61, BA10]: Este término de recombinación es básico en nuestro modelo ya que la componente de corriente túnel se obtiene a partir de los procesos de túnel de los portadores al atravesar la banda de energías prohibidas en la región de vaciamiento, esto se tratará en detalle en el siguiente capítulo. Se mostrarán dos modelos diferentes: un modelo local que obtiene el valor del término de recombinación en cada punto del dispositivo a partir de los valores de las magnitudes físicas en ese punto y un modelo no local que tiene en cuenta valores de las magnitudes físicas en ambos lados de la región de vaciamiento.
- Recombinación intrínseca [SN06]: También llamada banda-banda o de transición por fotones, que consiste en transiciones directas en las que un electrón pasa de la banda de conducción a la de valencia (o viceversa) emitiendo (absorbiendo) un fotón, conservando su posición en el dispositivo. Este mecanismo es importante en materiales de gap directo, pero pierde importancia a medida que el gap de energías permitidas del material es mayor.
- Recombinación extrínseca [SNS57, SR52]: También conocida como Shockley-Read-Hall (SRH). Son procesos de recombinación asistidos por centros de recombinación (impurezas, fallos en la red cristalina), por lo que ganará importancia en materiales altamente dopados.
- Recombinación Auger [SN06]: Proceso de recombinación que ocurre simultáneamente a la colisión entre dos portadores. La recombinación Auger también gana importancia a medida que el cristal es menos uniforme.

2.3.1. Coeficiente de recombinación túnel

Los procesos de túnel a través de la banda de energías prohibidas es una parte importante del transporte de carga en las uniones PN altamente dopadas. Existe dos posibles mecanismos túnel: la transición directa de un portador de una banda a otra, figura 2.3(a), y la transición

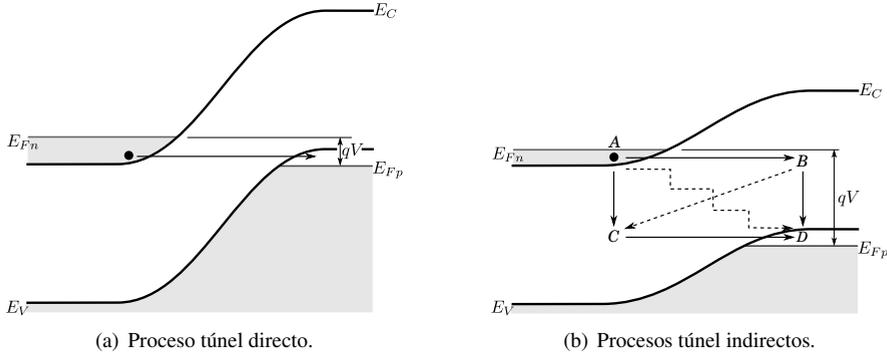


Figura 2.3: Representación esquemática de los procesos túnel directo (a) e indirectos (b) siguiendo diferentes posibles caminos. Asistidos por un estado (ABD y ACD) y asistidos por por varios estados (ABCD y AD) introducidos por defectos en el cristal o átomos dopantes.

asistida por estados permitidos en la banda de energías prohibidas, figura 2.3(b). Los principios básicos de los procesos túnel banda a banda fueron explicados por Kane [Kan61], quien desarrollo un modelo analítico para la corriente túnel. La probabilidad de una transición túnel se puede obtener empleando la aproximación WKB

$$T_t \simeq \exp \left[-2 \int_u^l |k(x)| dx \right], \quad (2.48)$$

donde $k(x)$ es el vector de onda asociado al portador cerca de la barrera, u y l son los puntos de retorno clásico en la barrera de potencial y x la dirección de transporte de carga. La densidad de corriente túnel se puede obtener a partir de

$$J_t \propto \int_{E_C}^{E_V} [f_C(E) - f_V(E)] T_t g_C(E) g_V(E) dE, \quad (2.49)$$

donde T_t se asume igual en ambas direcciones (procesos túnel de la banda de valencia a la banda de conducción $J_{t,V \rightarrow C}$ y viceversa $J_{t,C \rightarrow V}$), $f_C(E)$ y $f_V(E)$ son las distribuciones de Fermi-Dirac para la banda de conducción y la banda de valencia y $g_C(E)$ y $g_V(E)$ son las densidades de estados para cada banda. La ecuación (2.49) muestra que la corriente túnel depende tanto de la probabilidad de que se produzca una transición túnel como de una función de disponibilidad de electrones y huecos, descrita por la densidad de estados y la distribución de probabilidad de ocupación en cada banda.

Añadir los mecanismos para las transiciones túnel en el modelo de arrastre y difusión se traduce en incorporar nuevos términos de recombinación en las ecuaciones de continuidad de electrones y huecos; y para esto existen dos estrategias: los modelos de recombinación túnel locales y no locales [HLPB08].

Modelos locales

Los modelos locales emplean solamente los valores locales de las variables en cada nodo de la malla para calcular el término de recombinación túnel en ese nodo, despreciando valores de los nodos vecinos relacionados con estos procesos túnel. Un ejemplo de modelo local fue presentado por Hurkx *et al.* [HKK92]. Ellos implementaron el término de recombinación túnel banda a banda a partir del trabajo teórico de Kane [Kan61] quien obtuvo una expresión para la densidad de corriente por unidad de energía dJ_t/dE . La ecuación obtenida para el coeficiente de recombinación túnel banda a banda es

$$R_t = -C|F|^2 D(F, E, E_{Fn}, E_{Fp}) \exp\left(\frac{-\mathcal{E}_0}{|\mathcal{E}|}\right), \quad (2.50)$$

donde $D(\mathcal{E}, E, E_{Fn}, E_{Fp})$ tiene en cuenta la posición relativa de los pseudoniveles de Fermi, E_{Fn} y E_{Fp} , en las regiones masivas del dispositivo y actúa como una función de disponibilidad de portadores. \mathcal{E} es el campo eléctrico local, \mathcal{E}_0 es el campo eléctrico característico que depende de la masa efectiva y del ancho de la banda de energías prohibidas, E es la energía del portador que sufre el proceso túnel y C es una constante.

Modelos no locales

Los modelos no locales tiene en cuenta el transporte real de carga en el espacio en los procesos de recombinación túnel. En este modelo, los electrones recombinan con huecos que están en diferentes posiciones. El software Sentaurus Device [sen05] posibilita el uso de un modelo no local basado en el trabajo de Jeong *et al.* [ISL⁺98]. Este modelo calcula la probabilidad de que un electrón, con energía E , sufra un proceso túnel de la posición u a la posición l y a continuación recombinen con un hueco, haciendo uso de la aproximación WKB:

$$\Gamma_{C \rightarrow V} = \exp\left(-2 \int_l^u \frac{k_c(x, E) \cdot k_v(x, E)}{\sqrt{k_c^2(x, E) + k_v^2(x, E)}} dx\right), \quad (2.51)$$

donde κ_c y κ_v son los números de onda locales que contienen información acerca las masas efectivas de los portadores en los procesos túnel m_c y m_v , de la posición de los límites de las

bandas:

$$k_c(x, E) = \sqrt{(2m_c(x)|E_C(x) - E)|\Theta[E_C(x) - E]/\hbar} \quad (2.52)$$

$$k_v(x, E) = \sqrt{(2m_v(x)|E - E_V(x)|\Theta[E - E_V(x)]/\hbar}, \quad (2.53)$$

donde Θ es la función de Heaviside y x es la dirección de transporte de carga.

Entonces, el perfil de la barrera de potencial a lo largo de todo el camino donde el portador sufre el proceso túnel se tiene en cuenta para calcular la probabilidad de que dicho proceso ocurra. Empleando la expresión (2.51) para la probabilidad de transición túnel, la tasa de recombinación túnel de los electrones en la banda de conducción con energía E desde un punto u a un punto l puede ser calculada como:

$$R_{c \rightarrow v}(u, l, E) = \frac{A_{cv}}{qk_B} \times \mathcal{E} \times \Gamma_{CV} \times T \times \log \left[\frac{1 + \exp\left(\frac{E_{Fp}(u) - E}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_{Fn}(l) - E}{k_B T}\right)} \right] \quad (2.54)$$

El factor logarítmico describe la función de disponibilidad de electrones y huecos y mide el solapamiento de los estados ocupados en la banda de conducción con los estados vacíos en la banda de valencia, T es la temperatura, \mathcal{E} es el valor del campo eléctrico local y A_{cv} es la constante de Richarson efectiva ($A_{cv} = \sqrt{g_c g_v} A_0$, donde $g_c \cdot g_v$ es un factor de escalado y A_0 la constante de Richarson).

Para el desarrollo del simulador presentado en este trabajo, se ha escogido esta segunda opción para el modelo de recombinación túnel porque esta da un mayor control sobre los parámetros que definen el término de recombinación. Esto va a ser necesario para facilitar las modificaciones necesarias para añadir el desdoblamiento de las bandas cuando se considere la polarización de espín de los portadores de carga. Además, la mayor parte de los modelos locales fueron desarrollados para emplearse en el modelado de transistores MOS y algunas de las simplificaciones que se hacen pueden no ser aplicables a los diodos túnel [HLPB08].

2.3.2. Recombinación intrínseca

La recombinación intrínseca o banda-banda, R_{BB} , es proporcional a la diferencia entre el producto de las concentraciones de portadores en un determinado momento y las concentraciones en el equilibrio. La constante de proporcionalidad es el coeficiente banda-banda, C_{BB} . Si n_0 y p_0 son las concentraciones de portadores en el equilibrio, la recombinación banda-banda vendrá dada por

$$R_{BB} = C_{BB}(np - n_0 p_0). \quad (2.55)$$

2.3.3. Recombinación extrínseca

El mecanismo más importante de recombinación es el extrínseco o SRH. Este proceso emplea centros de recombinación, estados de energía permitidos y localizados dentro de la banda de energías prohibidas, que aparecen en las posiciones de impurezas, imperfecciones en la red cristalina y otros. La recombinación SRH ocurre en dos pasos: en el primero un electrón de la banda de conducción es atrapado por el centro, y en el segundo este electrón pasa a la banda de valencia recombinando con un hueco. Estos procesos no emiten radiación y la energía liberada se transforma en energía térmica o lo que es lo mismo vibraciones del cristal semiconductor. La expresión que cuantifica el número de recombinaciones/generaciones SRH es

$$R_{SRH} = \frac{np - n_0p_0}{\tau_p(n + n_T) + \tau_n(p + p_T)} \quad (2.56)$$

que relaciona la recombinación global con las concentraciones de portadores. En esta ecuación τ_n y τ_p son los tiempos de vida media de los electrones y huecos, y n_T y p_T representan la concentración de portadores que habría en cada banda si el nivel de Fermi en equilibrio coincidiese con el nivel de energía de los centros de recombinación:

$$n_T = n_0 \exp \frac{E_T - E_F}{k_B T} \quad (2.57)$$

$$p_T = p_0 \exp \frac{E_F - E_T}{k_B T} \quad (2.58)$$

donde E_T es el valor de energía de los estados permitidos dentro de la banda de energías prohibidas.

2.3.4. Recombinación Auger

La recombinación Auger es un proceso no-radiactivo en el que la recombinación directa o vía centros ocurre simultáneamente a la colisión entre dos portadores del mismo tipo. Los procesos Auger pueden tener lugar de dos maneras distintas: en uno, la energía que se obtiene de la desaparición de un par electrón-hueco se emplea en aumentar la energía de un electrón de la banda de conducción, mientras que en el otro, esta energía se emplea para aumentar la energía de un hueco en la banda de valencia. El número de procesos Auger del primer tipo es proporcional a $n^2 p$ dado que intervienen dos electrones, y del segundo tipo es proporcional a np^2 por intervenir dos huecos. Entonces la recombinación Auger vendrá descrita por

$$R_A = C_{An}(n^2 p - n_0^2 p_0) + C_{Ap}(np^2 - n_0 p_0^2) \quad (2.59)$$

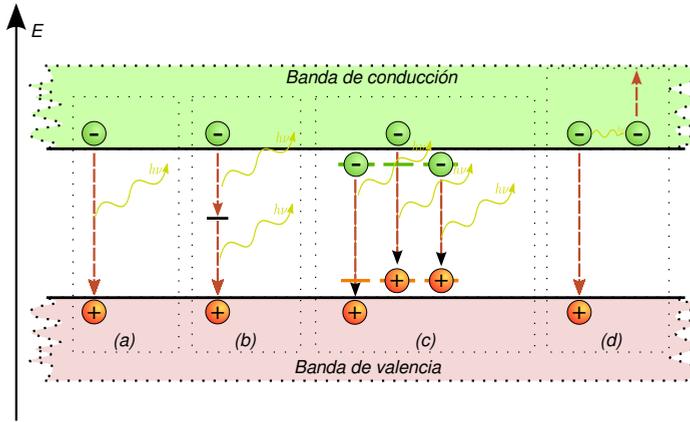


Figura 2.4: Representación de los procesos de recombinación típicos en un material semiconductor. Recombinación directa o radiativa (a), recombinación asistida por estados energéticos permitidos y localizados introducidos por la defectos en la red cristalina (b) y las impurezas dopantes (c) en la banda prohibida (recombinación SRH), recombinación auger (d).

donde C_{An} y C_{Ap} son los coeficientes Auger de electrones y huecos.

2.3.5. Desdoblamiento de las bandas

El ferromagnetismo produce una señal característica en medidas experimentales que puede ser interpretado en términos de un desdoblamiento de la banda de conducción en semiconductores tipo N o de la banda de valencia en semiconductores tipo P [NBI⁺06]. Esta polarización de espín está causada por la interacción de intercambio entre los espines localizados de los dopantes tipo metales de transición y los portadores de carga móviles. Como consecuencia de esto, tendremos dos banda de conducción, una para electrones con espín arriba y otra para electrones con espín abajo, y dos banda de valencia, para huecos con espín arriba y abajo.

Cuando las bandas estén desdobladas, habrá dos cantidades de energía que caractericen la ocupación de cada banda [LK03]:

$$\varepsilon_n^\sigma = E_{Fn} - E_C^\sigma = E_{Fp} - E_C \pm \frac{\Delta_n}{2} \tag{2.60}$$

$$\varepsilon_p^\sigma = E_V^\sigma - E_{Fp} = E_V \pm \frac{\Delta_p}{2} - E_{Fp}, \tag{2.61}$$

con $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$, y ambas ε_n^σ y ε_n^σ definidas en las regiones masivas N y P respectivamente. Δ_n y Δ_p son los valores de desdoblamiento para cada banda [GBB⁺06] y son proporcionales a $\langle S^z \rangle$ en cada lado de la unión, donde $\langle S^z \rangle$ es el valor medio del espín de los iones magnéticos.

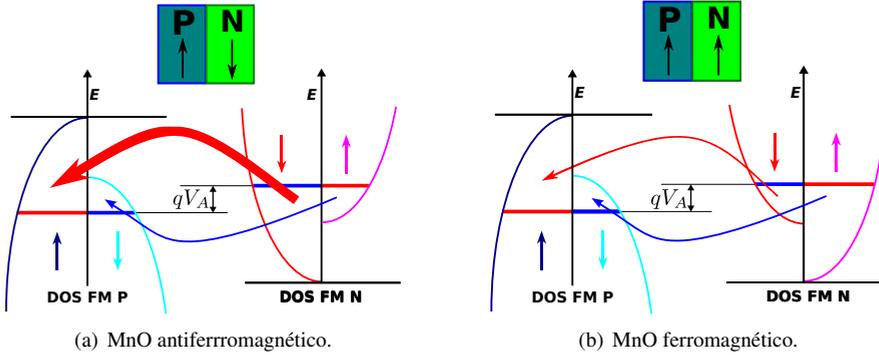


Figura 2.5: Representación esquemática de los procesos túnel, en una unión con materiales P y N ferromagnéticos en ambos casos, en configuración antiparalela (a) y paralela (b).

Los procesos de recombinación túnel pueden ocurrir de dos maneras: recombinación de portadores con espín mayoritario en ambos lados de la unión o, si la magnetización relativa de zona se invierte, recombinación de portadores con espín minoritario de un lado del diodo con portadores con espín mayoritario del otro lado del diodo. La corriente que surge en la primera configuración se denomina corriente paralela $I_p(V)$ y la de la segunda corriente antiparalela $I_{ap}(V)$. La figura 2.5 muestra una representación esquemática de los procesos túnel, en una unión con materiales P y N ferromagnéticos en ambos casos, en configuración antiparalela y paralela. Los términos de recombinación túnel deben ser reevaluados para cada valor de espín, con lo que se obtendrán cuatro términos de recombinación: recombinación de electrones con espín arriba y huecos con espín abajo, recombinación de electrones con espín abajo y huecos con espín arriba, recombinación de huecos con espín arriba y electrones con espín abajo y por último, recombinación de huecos con espín abajo y electrones con espín arriba.

Conocida la estructura de bandas para cada espín, los vectores de onda resultan:

$$k_v^\sigma(x, E) = \sqrt{(2m_v^\sigma(x)|E_C^\sigma(x) - E|)\Theta[E_C^\sigma(x) - E]}/\hbar, \quad (2.62)$$

$$k_v^\sigma(x, E) = \sqrt{(2m_v^\sigma(x)|E - E_V^\sigma(x)|)\Theta[E - E_V^\sigma(x)]}/\hbar, \quad (2.63)$$

y las probabilidades de transición túnel para cada espín

$$\Gamma_{C \rightarrow V}^{\sigma} = \exp \left(-2 \int_l^u \frac{k_c^{\sigma} \cdot k_v^{\sigma'}}{\sqrt{(k_c^{\sigma})^2 + (k_v^{\sigma'})^2}} \right), \quad (2.64)$$

donde $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$ y $\sigma' = (\downarrow, \uparrow)$. La expresión para la probabilidad túnel de la banda de valencia a la banda de conducción $\Gamma_{V \rightarrow C}^{\sigma}$ se obtiene de forma similar. Entonces, empleando los cuatro valores distintos de Γ en la ecuación de recombinación túnel, ecuación (2.54), y teniendo en cuenta las diferentes bandas en la función disponibilidad, se pueden obtener los cuatro términos de recombinación para cada tipo de portador de espín: $R_{C \rightarrow V}^{\uparrow}$, $R_{C \rightarrow V}^{\downarrow}$, $R_{V \rightarrow C}^{\uparrow}$ y $R_{V \rightarrow C}^{\downarrow}$.

Los demás términos de recombinación son fácilmente calculables una vez conocidas las concentraciones de cada valor de espín a lo largo del dispositivo. Así para el caso de la recombinación intrínseca tendríamos

$$R_{BB}^{\sigma} = C_{BB}(n^{\sigma} p^{\sigma'} - n_0^{\sigma} p_0^{\sigma'}). \quad (2.65)$$

La recombinación extrínseca quedaría

$$R_{SRH}^{\sigma} = \frac{(n^{\sigma} p^{\sigma'} - n_0^{\sigma} p_0^{\sigma'})}{\tau_p(n^{\sigma} + n_T^{\sigma}) + \tau_n(p^{\sigma'} + p_T^{\sigma'})}. \quad (2.66)$$

La recombinación Auger será

$$R_A^{\sigma} = C_{An}(nn^{\sigma} p^{\sigma'} - n_0 n_0^{\sigma} p_0^{\sigma'}) + C_{Ap}(n^{\sigma} p^{\sigma'} p - n_0^{\sigma} p_0^{\sigma'} p_0). \quad (2.67)$$

En todos los procesos de recombinación/generación electrón-hueco se ha considerado que estos han de producirse entre portadores con espín antiparalelo para garantizar la conservación de espín.

2.4. Método de las diferencias finitas

El sistema de ecuaciones en derivadas parciales que forman las ecuaciones básicas de los semiconductores junto con las condiciones de contorno adecuadas no puede ser resuelto de forma explícita en general. Es por tanto necesario calcular la solución por medio de aproximaciones numéricas. Tendremos que encontrar numéricamente una solución que satisfaga las siguientes ecuaciones escaladas:

$$\lambda^2 \nabla (\epsilon_r \nabla \psi) - (n - p - N_D^+ - N_A^-) = 0 \quad (2.68)$$

$$\nabla \vec{J}_n = R(\psi, n, p) \quad (2.69)$$

$$\nabla \vec{J}_p = -R(\psi, n, p), \quad (2.70)$$

donde, al usar los pseudopotenciales como variables

$$\vec{J}_n = -q_e \mu_n n \nabla \phi_n \quad (2.71)$$

$$\vec{J}_p = -q_e \mu_p p \nabla \phi_p, \quad (2.72)$$

o, al usar las concentraciones de portadores como variables

$$\vec{J}_n = -\mu_n (n \nabla \psi - \lambda_n \nabla n) \quad (2.73)$$

$$\vec{J}_p = -\mu_p (p \nabla \psi + \lambda_p \nabla p) \quad (2.74)$$

Para encontrar esta solución hay que realizar tres pasos. Primero hay que particionar el dominio de simulación en un número finito de subdominios, en los cuales la solución será aproximada con la precisión requerida. Segundo, las ecuaciones diferenciales tienen que ser aproximadas en cada subdominio por ecuaciones algebraicas empleando los valores de las variables continuas en los puntos resultantes del particionado previo, además será necesario conocer la forma de las funciones que aproximen el valor de las variables en cada subdominio. El tercer paso sería resolver el sistema formado por las ecuaciones algebraicas anteriores. Los dos primeros son críticos para una adecuada solución del sistema, ya que una mala elección del particionado o una discretización mal realizada puede no converger o conducir a una solución no adecuada para el sistema simulado.

A la hora de realizar el particionado, se debe tener en cuenta que las variables no cambian con igual velocidad en todo el dominio y por lo tanto el grado de refinamiento con que se realiza el particionado se debe escoger de tal manera que las variables no varíen excesivamente entre dos puntos de la malla resultante. Además, se debe tener en cuenta que un mayor número de puntos en la malla conlleva mayor tiempo de cálculo ya que el número de ecuaciones en el sistema a resolver es proporcional al número de puntos en la malla. Por lo tanto, lo fino que se haga el particionado del dominio a simular es un compromiso entre la precisión de la solución obtenida y el tiempo de cálculo para resolver el problema. La solución obtenida del sistema algebraico de ecuaciones representará una buena aproximación de la solución analítica exacta dependiendo del grado de refinamiento del particionado y de lo adecuadas que sean las funciones que aproximan las variables en los subdominios.

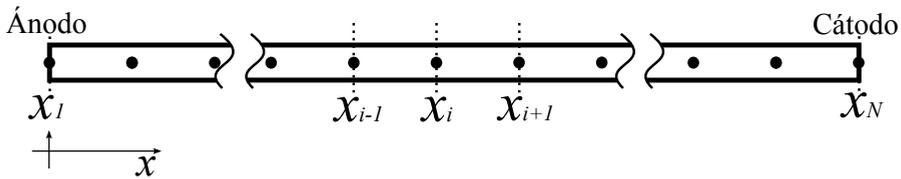


Figura 2.6: Ejemplo de particionado de la estructura continua para obtener los nodos discretos donde se van a calcular las propiedades del material.

Para derivar el problema discreto, existen varios métodos como son el método de las diferencias finitas, el método de las cajas finitas, que es una generalización del anterior y el método de los elementos finitos. El método de las diferencias finitas es más ventajoso en términos de complejidad en el tratamiento matemático y en coste computacional. Sin embargo esta ventaja desaparece cuando se consideran problemas con dominios espaciales complejos en dos o tres dimensiones, donde el método de los elementos finitos resulta más eficiente [Sel84].

2.4.1. Mallado y discretización

Para construir nuestro simulador hemos considerado un dominio homogéneo, el cual se particiona en un conjunto de segmentos que unen los puntos donde la solución aproximada va a ser buscada (nodos). El primer y último nodos coinciden con la posición de los contactos de ánodo y cátodo del diodo, respectivamente.

En nuestro caso, dado que se consideran dopados constantes en cada región del diodo, se van a emplear particionados con distancias constantes entre nodos para cada lado de la unión. Además, el tamaño del dispositivo se va a adecuar para que la mayor parte de los nodos caigan en la región de vaciamiento, ya que es en esa zona donde más rápidamente cambia la magnitud de las variables. Normalmente se emplearán del orden de mil nodos para resolver el dispositivo.

Una vez establecido el mallado que se va a emplear para resolver el dispositivo, el siguiente paso es reemplazar las ecuaciones diferenciales por ecuaciones en diferencias en las cuales los valores en los nodos vecinos a cada nodo son empleados para describirlas. Para el desarrollo de las ecuaciones en diferencias finitas se va a emplear una discretización en tres puntos. La nomenclatura empleada se puede interpretar empleado la figura 2.6.

Asumiendo entonces el problema 1D, tendremos que las derivadas parciales en la dirección \hat{y} y \hat{z} son cero. Entonces si U es una función tres veces derivable y con derivada continua, la derivada parcial de primer orden vendrá dada por [Sel84]:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x_i} = \frac{U_{i+1/2} - U_{i-1/2}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} + \frac{h_{i-1} - h_i}{4} \left. \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right|_{x_i} + O\left(\frac{h_i^3 + h_{i-1}^3}{h_i + h_{i-1}}\right) \quad (2.75)$$

donde

$$\left. \begin{aligned} h_i &= x_{i+1} - x_i \\ U_{i+1/2} &= U\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) \end{aligned} \right\} \quad i = 1, 2, \dots, N-1. \quad (2.76)$$

Si se emplea una estimación pesimista del error de truncamiento, la notación se simplifica enormemente. Este error de truncamiento es el residuo que aparece cuando se resuelve un problema continuo mediante técnicas discretas. Al truncar con un residuo de $O(h)$ tenemos que

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x_i} \approx \frac{U_{i+1/2} - U_{i-1/2}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} \quad (2.77)$$

y la derivada parcial de segundo orden será

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right|_{x_i} \approx \frac{\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x_{i+1/2}} - \left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x_{i-1/2}}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} \approx \frac{\frac{U_{i+1} - U_i}{h_i} - \frac{U_i - U_{i-1}}{h_{i-1}}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}}, \quad (2.78)$$

donde $U_i = U(x_i)$ con $i = 2, \dots, N-1$.

Partiendo de las dos expresiones anteriores para la derivada parcial y la derivada parcial de segundo orden, se pueden reescribir las ecuaciones que describen los semiconductores de forma discreta para ser tratadas numéricamente.

2.5. Ecuación de Poisson discreta

La ecuación de Poisson (2.68) en forma discreta en el interior del dispositivo, esto es $1 < i < N$, viene dada por

$$\frac{\epsilon_{i+1/2} \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x_{i+1/2}} - \epsilon_{i-1/2} \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x_{i-1/2}}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} - (p_i - n_i + N_{D,i}^+ - N_{A,i}^-) = 0 \quad (2.79)$$

y sustituyendo las derivadas parciales por sus expresiones discretas

$$\frac{\epsilon_{i+1/2} \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h_i} - \epsilon_{i-1/2} \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h_{i-1}}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} - (p_i - n_i + N_{D,i}^+ - N_{A,i}^-) = 0, \quad (2.80)$$

donde se emplea el valor de la permitividad dieléctrica relativa en el punto medio del segmento que une dos nodos $\epsilon_{i+1/2} = (\epsilon_i + \epsilon_{i+1})/2$. Si el espaciado de los nodos de la malla fuese constante, $h_i = k$, entonces la expresión anterior se podría simplificar a:

$$\epsilon_{i-1/2}\psi_{i-1} - (\epsilon_{i-1/2} + \epsilon_{i+1/2})\psi_i + \epsilon_{i+1/2}\psi_{i+1} - k^2(p_i - n_i + N_{D,i}^+ - N_{A,i}^-) = 0 \quad (2.81)$$

La ecuación de Poisson discreta tiene un error de truncamiento que es proporcional al espaciado de la malla y a la tercera derivada del potencial en una malla no uniforme. Para realizar esta discretización se ha supuesto que el potencial varía linealmente con la posición entre dos nodos vecinos, lo cual implica que el campo eléctrico es constante entre esos dos nodos.

2.6. Ecuaciones de continuidad discretas

La discretización de las ecuaciones de continuidad de electrones y huecos es mucho más crítica, debido a la rápida variación de las concentraciones de portadores en la región de vaciamiento del diodo, donde pueden variar decenas de ordenes de magnitud al cambiar de lado en el diodo.

A la hora de realizar esta discretización se pueden seguir diferentes estrategias. Una de ellas emplea los pseudopotenciales de electrones y huecos junto con el potencial en el dispositivo como variables. La otra emplea las concentraciones de portadores y el potencial como variables y realiza una interpolación exponencial de las concentraciones entre nodos vecinos. Estas dos estrategias de discretización conducen a las ecuaciones de Scharfetter-Gummel, que se presentan aquí. La primera aproximación se emplea porque da buenos resultados para semiconductores con bajos niveles de degeneración y alcanza la solución numérica muy rápidamente y la segunda porque el trabajar directamente con las concentraciones de portadores parece más adecuado para el estudio del efecto del ferromagnetismo, que dará lugar a concentraciones diferentes según el espín del portador en cuestión.

Las formas discretas de las ecuaciones de continuidad (2.69) y (2.70) vienen dadas por las siguientes expresiones

$$J_{n,i+1/2} - J_{n,i-1/2} = \frac{h_i - h_{i-1}}{2} R \quad (2.82)$$

$$J_{p,i+1/2} - J_{p,i-1/2} = -\frac{h_i - h_{i-1}}{2} R \quad (2.83)$$

donde se está suponiendo que que las densidades de corriente son constantes en cada segmento entre dos nodos vecinos y que los coeficientes de recombinación son constante en el intervalo $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$.

2.6.1. Ecuaciones de Scharfetter-Gummel

Teniendo en cuenta la dependencia de n y p con los pseudopotenciales de Fermi,

$$n = n_{ien} \exp\left(qe \frac{\psi - \phi_n}{k_B T}\right) \quad (2.84)$$

$$p = n_{iep} \exp\left(qe \frac{\phi_p - \psi}{k_B T}\right), \quad (2.85)$$

en las ecuaciones de la densidad de corriente,

$$\vec{J}_n = -q_e \mu_n n \nabla \phi_n \quad (2.86)$$

$$\vec{J}_p = -q_e \mu_p p \nabla \phi_p, \quad (2.87)$$

respectivamente, y suponiendo que las densidades de corriente permanecen constantes en el intervalo (x_i, x) , su integración lleva a las siguientes expresiones:

$$J_n(x) = \frac{e^{-\phi_n(x)} - e^{-\phi_{n,i}}}{\int_{x_i}^x \frac{1}{n_{ien} \mu_n} e^{-\psi(x)} dx} \quad (2.88)$$

$$J_p(x) = \frac{e^{-\phi_p(x)} - e^{-\phi_{p,i}}}{\int_{x_i}^x \frac{1}{n_{iep} \mu_p} e^{-\psi(x)} dx}, \quad (2.89)$$

donde x_i es un nodo arbitrario donde se conocen las propiedades físicas del dispositivo. Si se supone que las movilidades y las concentraciones intrínsecas permanecen constantes en cada segmento y una variación lineal del potencial entre nodos vecinos, desarrollando las ecuaciones anteriores se obtienen las siguientes expresiones para la corriente:

$$J_{n,i+1/2} = (\mu_n n_{ien})_{i+1/2} \frac{e^{-\phi_{n,i+1}} - e^{-\phi_{n,i}}}{h_i e^{\psi_i}} B(-\Delta\psi_i) \quad (2.90)$$

$$J_{p,i+1/2} = -(\mu_p n_{iep})_{i+1/2} \frac{e^{-\phi_{p,i+1}} - e^{-\phi_{p,i}}}{h_i e^{\psi_i}} B(-\Delta\psi_i), \quad (2.91)$$

donde $B(y)$ es la función de Bernouilli definida como

$$B(y) = \frac{y}{e^y - 1}. \quad (2.92)$$

Para su uso en un simulador numérico y para evitar problemas de desbordamiento se emplea la siguiente aproximación racional [Sel84]:

$$B(y) = \begin{cases} \frac{y}{e^y - 1} & |y| \geq 10^{-4} \\ 1 - \frac{y}{2} \left(1 + \frac{y}{6}\right) \left(1 - \frac{y^2}{60}\right) & |y| \leq 10^{-4} \end{cases} \quad (2.93)$$

Las aproximaciones aquí resumidas fueron sugeridas por primera vez por Scharfetter y Gummel [SG69]. Estas ecuaciones de continuidad discretas tienen un error de truncamiento proporcional al espaciado de la malla, si esta es homogénea, y a la suma de la primera y segunda derivadas de las densidades de corriente respecto de la posición.

2.6.2. Otra discretización: n y p como variables

Si se toman ψ , n y p en lugar de los pseudopotenciales, como en el apartado anterior, se puede obtener otra forma discreta de las ecuaciones de continuidad de portadores, que son más conveniente para la simulación de dispositivos espintrónicos por trabajar directamente con las concentraciones de portadores. En este caso se van a emplear las expresiones de la densidad de corriente (2.73) y (2.74), que vamos a discretizar, para ser empleadas después en las ecuaciones de continuidad discretas (2.82) y (2.83).

Las versión discretas de las densidades de corriente dadas por las ecuaciones (2.73) y (2.74) serían

$$J_{n,i+1/2} = \mu_{n,i+1/2} \left(n_{i+1/2} \frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{h_i} + \lambda_{n,i+1/2} \nabla n|_{i+1/2} \right) \quad (2.94)$$

$$J_{p,i+1/2} = \mu_{p,i+1/2} \left(p_{i+1/2} \frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{h_i} - \lambda_{p,i+1/2} \nabla p|_{i+1/2} \right) \quad (2.95)$$

donde $\mu_{x,i+1/2}$ es la movilidad de electrones escalada calculada como promedio del valor de la movilidad en dos nodos vecinos y que se supone constante en todo el segmento que une esos nodos. $\lambda_{x,i+1/2}$ es el factor de degeneración de la concentración de electrones, para calcularlo se emplea el valor de la concentración en el punto medio del segmento.

Si se emplea una interpolación lineal de la concentración de portadores entre dos nodos vecinos

$$n_{i+1/2} = \frac{n_i + n_{i+1}}{2}, \quad \nabla n|_{i+1/2} = \frac{n_{i+1} - n_i}{h_i}. \quad (2.96)$$

Sin embargo, este tipo de interpolación sólo es estable cuando la corriente de arrastre es mucho más pequeña que la corriente de difusión y sólo puede ser usada cuando el espaciado del mallado es pequeño, el campo eléctrico es débil y para bajas concentraciones de portadores.

Para obtener sistemas con soluciones estables para altas corrientes de arrastre, se emplea el esquema propuesto por Scharfetter y Gummel [SG69] que se obtiene a partir de considerar la corriente constante en cada segmento de la malla. La función de interpolación obtenida tiene la siguiente forma

$$n(x) = n_i[1 - g(x)] + n_{i+1}g(x) \quad (2.97)$$

donde

$$g(x) = \frac{1 - \exp\left[(\psi_{i+1} - \psi_i) \frac{x-x_i}{h_i}\right]}{1 - \exp(\psi_{i+1} - \psi_i)} \quad (2.98)$$

es la función de crecimiento.

Empleando esta interpolación se pueden obtener las concentraciones de electrones y huecos y sus gradientes en los puntos intermedios entre dos nodos vecinos:

$$n_{i+1/2} = n_i f_2\left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{2}\right) + n_{i+1} f_2\left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{2}\right) \quad (2.99)$$

$$p_{i+1/2} = p_i f_2\left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{2}\right) + p_{i+1} f_2\left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{2}\right) \quad (2.100)$$

$$\nabla n|_{i+1/2} = f_1\left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{2}\right) \frac{n_{i+1} - n_i}{h_i} \quad (2.101)$$

$$\nabla p|_{i+1/2} = f_1\left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{2}\right) \frac{p_{i+1} - p_i}{h_i} \quad (2.102)$$

donde $f_1(x)$ y $f_2(x)$ son dos funciones auxiliares empleadas para simplificar la notación y definidas como:

$$f_1(x) = \frac{x}{\sinh(x)} \quad (2.103)$$

$$f_2(x) = \frac{1}{1 + e^x} \quad (2.104)$$

2.7. Resolución de sistemas no lineales

Los conjuntos de ecuaciones (2.80), (2.90) y (2.91) (variables $\Psi = (\psi, \phi_n, \phi_p)$), o (2.80), (2.94) y (2.95) (variables $\Psi = (\psi, n, p)$), constituyen un sistema acoplado de ecuaciones no lineales que definen el comportamiento del dispositivo. Expresado en forma matricial

$$\begin{pmatrix} F_\psi(\psi, \phi_n, \phi_p) \\ F_{\phi_n}(\psi, \phi_n, \phi_p) \\ F_{\phi_p}(\psi, \phi_n, \phi_p) \end{pmatrix} = 0 = \begin{pmatrix} F_\psi(\psi, n, p) \\ F_n(\psi, n, p) \\ F_p(\psi, n, p) \end{pmatrix} \quad (2.105)$$

donde F_ψ representa a la ecuación de Poisson, F_{ϕ_n} y F_n la ecuación de continuidad de electrones, y F_{ϕ_p} y F_p la ecuación de continuidad de huecos, para los dos conjuntos de variables. Es necesario, por lo tanto, resolver un sistema formado por $3N$ ecuaciones y $3N$ incógnitas, donde N es el número de nodos en los que se divide el dispositivo al realizar el mallado unidimensional.

Para resolver el sistema (2.105) se suelen emplear dos métodos. Una opción consiste en resolver el sistema completo formado por las $3N$ ecuaciones directamente, empleando algún método iterativo tipo Newton. La otra opción consiste en desacoplar las tres ecuaciones empleando una iteración del tipo Gauss-Seidel/Jacobi [Dem97], que permite resolver tres sistemas de ecuaciones de dimensión N por separado, empleando el método de Newton [Ypm95].

2.7.1. Solución acoplada

El método de Newton [Ypm95] es un técnica iterativa de resolución de sistemas de ecuaciones lineales. Se parte de una función definida como $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ para la que hay que encontrar un vector $x^* \in \mathbb{R}^N$ tal que $F(x^*) = 0$. Para resolver el sistema se parte de un vector solución inicial $x^0 \in \mathbb{R}^N$ y se busca un serie para la que $\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = x^*$. Los elementos de dicha serie se obtienen a partir de la regla de recurrencia

$$F'(x^k)\Delta x^k = -F(x^k) \quad (2.106)$$

$$x^{k+1} = x^k + \Delta x^k \quad (2.107)$$

siendo $F'(x)$ el jacobiano del sistema

$$F'(x) = \left(\frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right). \quad (2.108)$$

La importancia del método de Newton reside en que, con ciertas condiciones naturales de F , la iteración del sistema presenta una convergencia cuadrática

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq c\|x^k - x^*\|^2 \quad (2.109)$$

siempre que el vector inicial x^0 esté lo suficientemente próximo a la solución buscada. Esto indica que el $(k + 1)$ -ésimo error cometido es proporcional al cuadrado del k -ésimo error, por lo que la convergencia es muy rápida para errores pequeños.

La aplicación del método de Newton en un dispositivo semiconductor implica resolver el siguiente sistema

$$F'(\Psi^k)\Delta\Psi^k = -F(\Psi^k) \quad (2.110)$$

y actualizar las variables $\Psi^{k+1} = \Psi^k + \Delta\Psi^k$.

Suele ser necesario mejorar la convergencia del método de Newton para lo cual se utiliza una versión modificada, en la que se añade un factor de amortiguamiento o sobrerrelajación, t_k , en la actualización de Ψ

$$\Psi^{k+1} = \Psi^k + t_k \Delta\Psi^k, \quad 0 < t_k \leq 1. \quad (2.111)$$

Este factor se ajusta experimentalmente.

2.7.2. Solución desacoplada

El método de Gummel [Gum64] ha sido aplicado ampliamente en la resolución de las ecuaciones de semiconductores. Matemáticamente corresponde a un algoritmo iterativo por bloques no lineal tipo Gauss-Seidel [Dem97]. Empleando este método se desacoplan las ecuaciones de Poisson y continuidad permitiendo resolverlas por separado.

Dado un conjunto $(\psi^k, \phi_n^k, \phi_p^k)$, el método de Gummel realiza la siguiente iteración. ψ^{k+1} se computa resolviendo la ecuación de Poisson, con ϕ_n^k y ϕ_p^k constantes. ϕ_n^{k+1} se obtiene resolviendo la ecuación de continuidad de electrones empleando ψ^{k+1} y ϕ_p^k constantes. Por último se obtiene el valor de ϕ_p^{k+1} a partir de ψ^{k+1} y ϕ_n^{k+1} .

Este método alcanza la convergencia incluso empleando una muy mala solución inicial y en muchas ocasiones es bastante rápida. Sin embargo, en situaciones donde los términos de recombinación tienen un peso elevado la convergencia se degrada, debido a que estos se calculan antes de resolver los sistemas. En algunas situaciones, el método de Gummel converge rápidamente al principio ralentizándose a medida que se acerca a la solución final. Cuando se da esta situación, una combinación de los métodos de Gummel y Newton puede ser una solución, usando el primero para obtener una buena solución inicial para el método de Newton que tiene una convergencia cuadrática cuando la solución inicial está próxima a la solución real.

2.8. Estructura del simulador

La figura 2.7 muestra las principales tareas del simulador numérico que hemos desarrollado para la simulación de la unión PN ferromagnética. Tiene en cuenta la corriente túnel a través del dispositivo y el desdoblamiento de las bandas de energía. El simulador resuelve

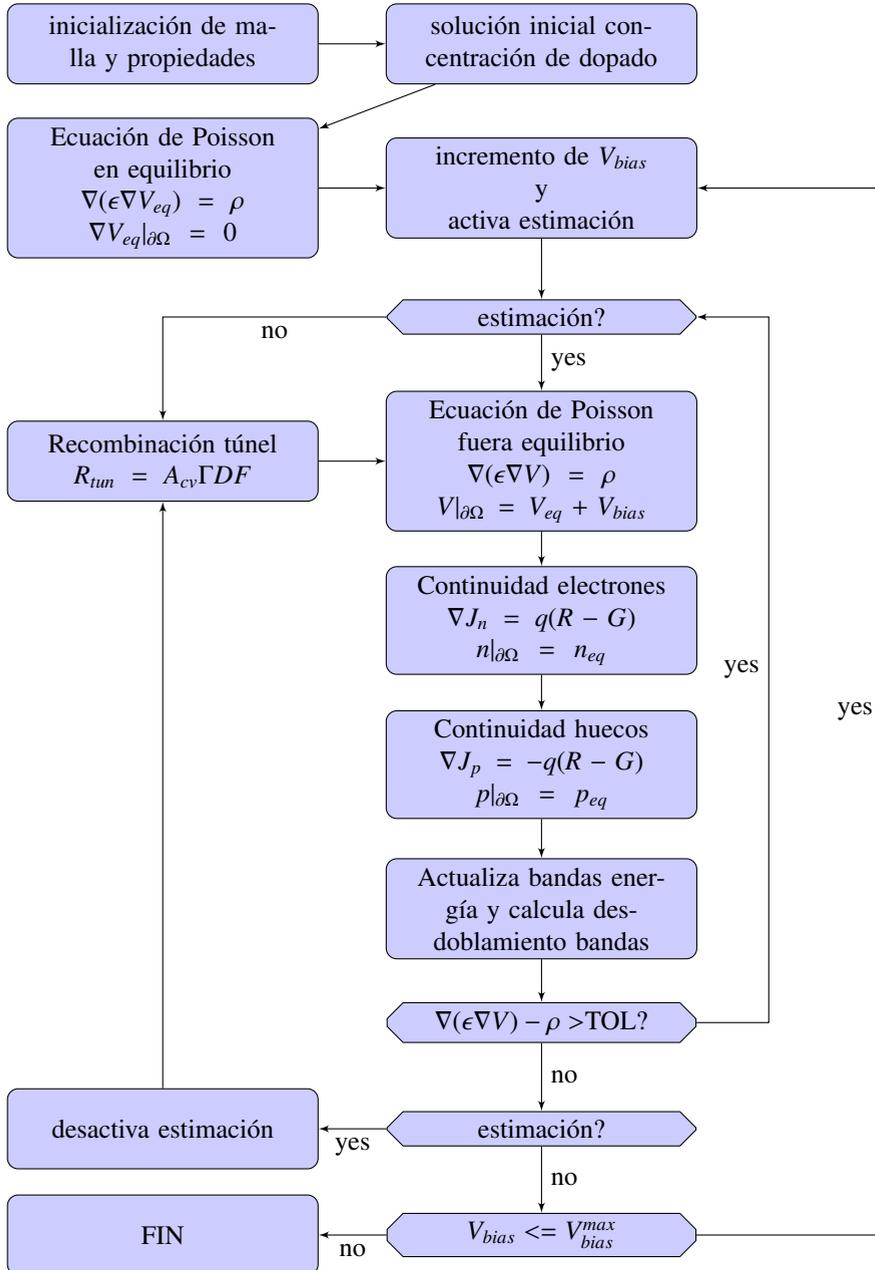


Figura 2.7: Diagrama de flujo del simulador desarrollado para simular uniones PN ferromagnéticas.

numéricamente la ecuación de Poisson acoplada con las ecuaciones de continuidad de electrones y huecos para cada valor de espín, empleando el método de las diferencias finitas y la aproximación de Scharfetter-Gummel para discretizar esas ecuaciones diferenciales.

El simulador permite obtener las características eléctricas en régimen estacionario y para pequeña señal de dispositivos túnel. Para esto se han incluido los modelos de generación/recombinación túnel explicados en apartados anteriores. Además, se le han añadido las características necesarias para tratar semiconductores degenerados debido a la naturaleza de los DMSs. Por lo tanto, incluye las modificaciones del modelo de arrastre y difusión comentadas en este capítulo para tratar la degeneración de los semiconductores [SOK94]. También se ha incluido el modelo de emisión termoiónica para el análisis de las densidades de portadores y densidad de corriente en las interfaces de las heterouniones ferromagnéticas.

El código del simulador se ha escrito empleando C++ y se ha desarrollado de forma modular para permitir agregar nuevas funcionalidades que puedan completar la descripción de los dispositivos simulados de forma sencilla. Las ecuaciones algebraicas no lineales resultantes se resuelven empleando el método de Newton y los sistemas de ecuaciones construidos se resuelven mediante resolutores directos provistos por la librería SuperLU [Li05, LDG⁺99, DEG⁺99] que implementa el método de descomposición LU o por la librería *Gnu Scientific Library* [GDT⁺09] que implementa una variación del método de descomposición de Cholesky.

CAPÍTULO 3

RESULTADOS

En este capítulo se van a mostrar los resultados obtenidos a partir de los modelos analíticos y el simulador numéricos desarrollados con el objetivo de modelar y comprender el transporte de carga y espín en diferentes uniones PN ferromagnéticas. En la primera parte de este capítulo se presentará el diodo Zener ferromagnético y sus características relevantes para este trabajo. Además, se hará una comparativa de los resultados para curvas características I-V para un diodo túnel no ferromagnético obtenidas a partir de la herramienta comercial Sentaurus Device [sen05] con las curvas obtenidas a partir de los modelos analíticos y a partir del simulador numérico. A continuación se mostrarán los resultados obtenidos para un diodo con un solo electrodo ferromagnético, comparando estos datos con los obtenidos en un trabajo previo que se usa como referencia [HLN⁺05]. Seguidamente se hará el estudio teórico de una unión abrupta con ambos lados ferromagnéticos empleado los parámetros adecuados para los materiales que la constituyen, el GaAs y el ZnO. Por último se extenderá todo lo anterior para considerar una configuración más realista basada en una heterounión de (Ga,Mn)As y (Zn,Mn)O. En ambos casos se mostrará también la dependencia de la respuesta del dispositivo con la temperatura.

3.1. Unión PN ferromagnética

El diodo o unión PN está formado por la unión de un material semiconductor tipo P y uno tipo N. Dependiendo del perfil de dopado y de la geometría del dispositivo puede presentar diferente respuesta eléctrica. La más sencilla es una unión abrupta, en la cual la concentración de impurezas cambia de forma brusca al pasar de la zona P a la zona

N del diodo. Debido a esta diferencia de dopados y, consecuentemente, a la diferencia de concentración de portadores en la unión, aparece un campo eléctrico en la unión que produce una redistribución de las cargas libres creando una región en el dispositivo llamada región de vaciamiento. En esta zona la concentración de portadores es varios ordenes de magnitud inferior respecto de la concentración en un semiconductor aislado con el mismo nivel de dopado y tiene una distribución de carga neta debido a los iones de impurezas que están fijos en el cristal.

Debido a esta distribución de carga fija, aparece una diferencia de potencial entre ambos lados del diodo que se conoce como “potencial de contacto”. Esta diferencia de potencial está directamente relacionada con la concentración de impurezas y el perfil de dopado a ambos lados de la unión. El diagrama de bandas típico de una unión PN altamente degenerada se muestra en la figura 3.1, donde el potencial de contacto se puede obtener por análisis visual y es $V_{bi} = V_n + V_p + E_{gap}/q_e$, donde V_n y V_p miden las distancias del nivel de Fermi a los límites de la banda de conducción y valencia, respectivamente, fuera de la región de vaciamiento (regiones masivas) y están directamente relacionados con el nivel de dopado del material semiconductor.

3.1.1. Características I-V de un diodo Zener

El diodo túnel o diodo Zener fue descubierto por L. Esaki en 1958 [Esa58]. Encontró que hay una zona de resistencia negativa en la curva I-V característica de este dispositivo cuando se polariza con una diferencia de potencial positiva entre la zona P y la N. Esaki explicó este fenómeno empleando el efecto túnel cuántico, así los electrones atraviesan la banda de energías prohibidas en la región de vaciamiento del diodo.

La principal diferencia entre un diodo “normal” y un diodo túnel es el nivel de dopado y por tanto la concentración de portadores, que son muy altos en ambos lados del diodo. Por tanto, el material semiconductor que forma el diodo tiene niveles altos de degeneración. Debido a esto las aproximaciones habituales para resolver este tipo de dispositivos, especialmente la aproximación de Boltzman de la integral de Fermi, no son válidas. Por este motivo, será necesario resolver el dispositivo empleando métodos numéricos o aproximaciones polinómicas de la integral de Fermi. Además debido al alto nivel de dopado, estos dispositivos tienen una región de vaciamiento muy estrecha que favorece considerablemente los procesos túnel a través de la región de vaciamiento en la unión, tal y como se muestra en la figura 3.1 .

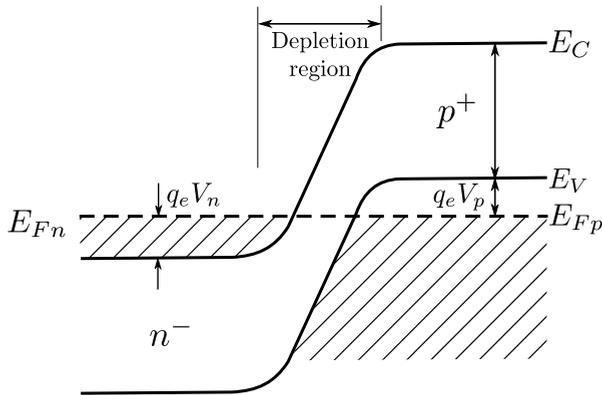


Figura 3.1: Bandas de energía en un diodo túnel. El nivel de Fermi está localizado fuera de la banda de energías prohibidas, esto es debido al fuerte dopado de los semiconductores. En este caso el potencial de contacto es $V_{bi} = V_n + V_p + E_{gap}/q_e$.

La respuesta I-V estática para un diodo túnel se muestra en la figura 3.2 y se puede describir mediante cuatro parámetros: la tensión pico V_p , la corriente pico I_p , la tensión valle V_V y la corriente valle I_V . Hay tres componentes de corriente que contribuyen a la corriente total:

- Corriente túnel: Esta es la componente principal para tensiones inferiores a V_V . Es producida por procesos de túnel directo para electrones en la banda de conducción y huecos en la banda de valencia que atraviesan la banda prohibida a través de la región de vaciamiento.
- Corriente de exceso: Se convierte en la componente principal para tensiones en torno a V_V , es decir, cuando la corriente túnel está a punto de desaparecer. Esta componente está producida por procesos túnel indirectos de los portadores a través de la banda prohibida asistidos por estados localizados permitidos en la región de vaciamiento.
- Corriente de difusión: Es la componente de corriente típica de todos los diodos, comienza a tomar valores apreciables cuando la tensión aplicada es mayor que V_V y V_T .

V_p y V_V están fuertemente relacionadas con la distancia entre el nivel de Fermi y los límites de las bandas de conducción y valencia en las regiones masivas, $\varepsilon_n = q_e V_n$ y $\varepsilon_p = q_e V_p$ respectivamente. Así, $V_p \sim \min(V_n, V_p)$ y $V_V \sim V_n + V_p$. Esto se puede ver fácilmente a partir de la evolución de la densidad efectiva de estados de energía que participan en los procesos

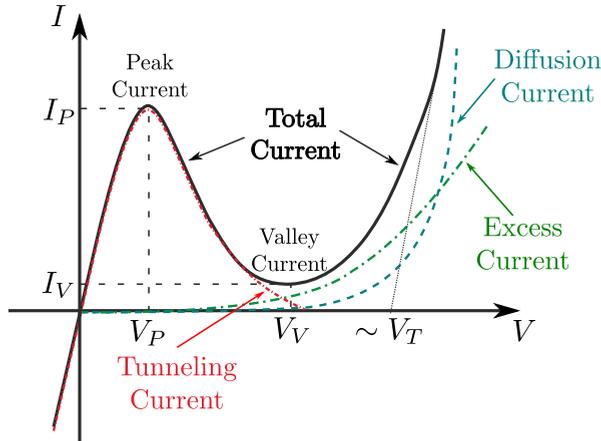


Figura 3.2: Componentes de la corriente en un diodo túnel. La corriente total a través del diodo Zener está compuesta de tres componentes: la corriente túnel, la corriente de exceso y la corriente de difusión o térmica [SN06].

túnel a medida que se aplica tensión a un diodo. Esto se muestra en la figura 3.3, donde, a medida que aumenta la tensión aplicada al diodo, la disponibilidad de estados de energía para procesos túnel primero aumenta hasta alcanzar una tensión igual al menor de V_n y V_p , se mantiene constante hasta alcanzar el mayor de V_n y V_p y finalmente se hace cero para tensiones mayores que $V_n + V_p$. I_P puede ser obtenida a partir del coeficiente túnel y la densidad de portadores I_V , que se obtiene a partir de medidas experimentales, está relacionada con el número de estados permitidos que aparecen en la banda prohibida como consecuencia de los defectos del cristal o los átomos de impurezas, además es muy dependiente con los procesos de crecimiento del dispositivo. La figura 3.4 muestra puntos característicos en la curva I-V de un diodo túnel y que componente de la corriente túnel es la dominante en cada caso.

Corriente túnel

Esta es la componente más significativa para evaluar el efecto del ferromagnetismo en un diodo Zener. Por ello se va a dar una descripción detallada.

Cuando el campo eléctrico en un dispositivo semiconductor es suficientemente alto, del orden de 10^6 V/cm, existe una probabilidad no despreciable de que se produzcan procesos túnel interbanda, es decir, transiciones directas de electrones desde la banda de conducción a la banda de valencia o viceversa. La probabilidad de que se produzca un proceso túnel T_t se

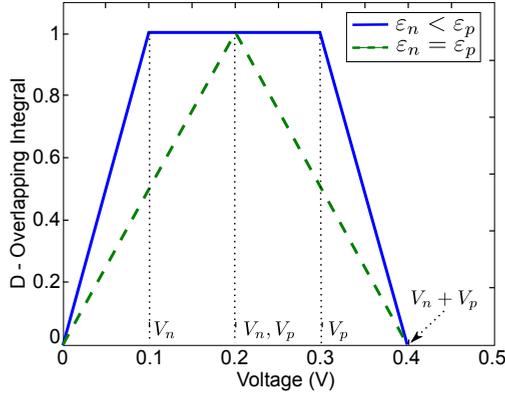


Figura 3.3: Densidad efectiva de estados, función que mide el solapamiento de los estado vacíos en la banda de valencia (lado P) con los estados llenos en la banda de conducción (lado N). Esta función se conoce como integral de solapamiento [Kan61].

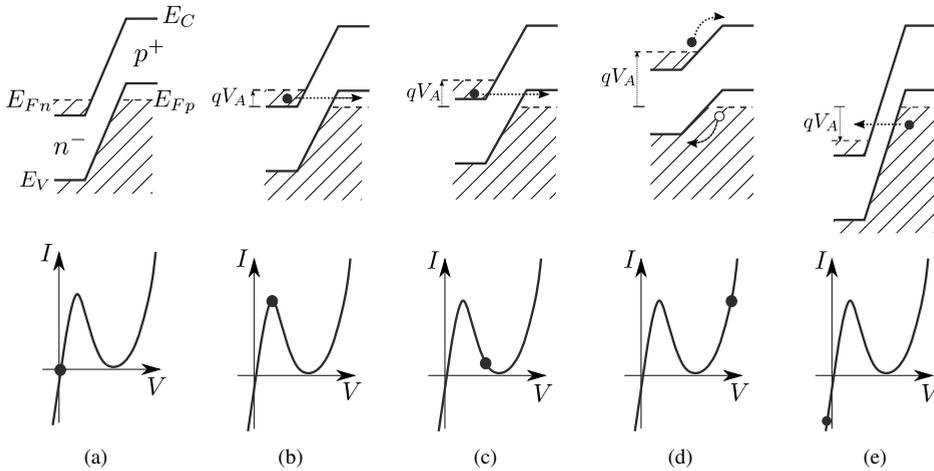


Figura 3.4: Estados de conducción en un diodo túnel. Este diagrama representa las cinco configuraciones características de las bandas de energía que favorecen las diferentes formas de conducción eléctrica en el diodo: (a) sin potencial aplicado, es decir, corriente cero, (b) zona donde la componente de corriente túnel es dominante, (c) en esta región la corriente de exceso gana importancia, (d) ahora la corriente de difusión es la principal componente y (e) corresponde con la polarización en inversa del diodo, la corriente túnel cobra de nuevo importancia en esta región.

puede calcular a partir de la aproximación WKB

$$T_t \sim \exp \left[-2 \int_0^{x_2} |k(x)| dx \right], \quad (3.1)$$

donde $|k(x)|$ es el valor absoluto del vector de ondas del portador de carga en el interior de la barrera, y $x = 0$ y x_2 son los puntos de retorno clásicos [figura 3.5(a)] en la barrera de potencial formada por la banda de energías prohibidas en la región de vaciamiento.

El tratamiento matemático del movimiento de un electrón a través de la región de vaciamiento por efecto túnel es formalmente igual al análisis del proceso túnel de una partícula a través de una barrera de potencial. Como primera aproximación, la barrera de potencial formada en la región de vaciamiento puede ser asimilada a un potencial con forma triangular. La expresión general para la relación $E - k$ viene dada por

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar}(E_C - E)}, \quad (3.2)$$

donde E es la energía del portador. Durante la transición por efecto túnel, el electrón tiene una energía menor que su energía potencial, entonces el valor dentro de la raíz cuadrada es negativo y k es imaginario. Si la variación del límite inferior de la banda de conducción E_C se expresa en términos del campo eléctrico \mathcal{E} y se considera una barrera triangular el vector de onda se puede reescribir como

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar}(-q\mathcal{E}x)}. \quad (3.3)$$

Empleando esto en la expresión (3.1) del coeficiente túnel se tiene

$$T_t \sim \exp \left[-2 \int_0^{x_2} \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar}(-q\mathcal{E}x)} dx \right], \quad (3.4)$$

y como para una barrera triangular en un campo eléctrico uniforme $x_2 = E_g/\mathcal{E}q_e$ [figura 3.5(b)] entonces la probabilidad de transición túnel en una barrera triangular será

$$T_t = \exp \left(-\frac{4\sqrt{2m^*}E_g^{3/2}}{3q\hbar\mathcal{E}} \right). \quad (3.5)$$

De la expresión resultante se puede extraer que para obtener un número relevante de transiciones túnel, tanto la masa efectiva m^* de los portadores de carga como la banda de energías prohibidas E_g deben tener valores pequeños y el campo eléctrico en la región de vaciamiento debe tener un valor elevado.

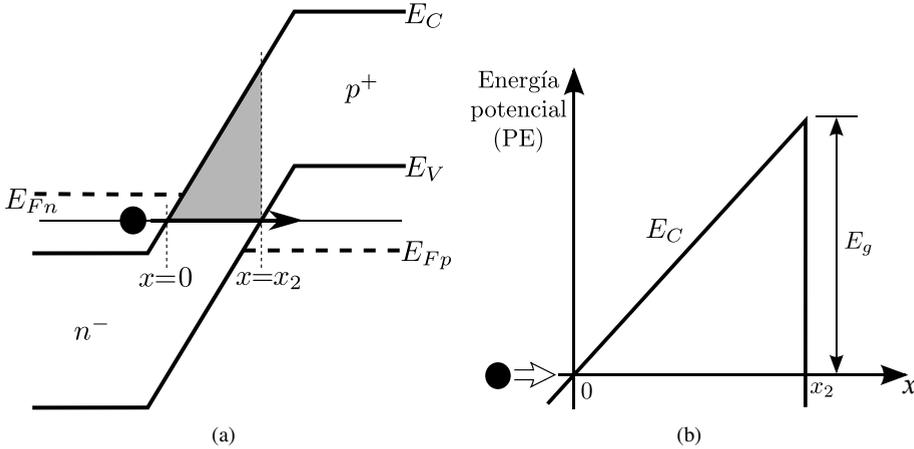


Figura 3.5: (a) Los procesos túnel se realizan entre los puntos de retorno clásicos ($x = 0$ y $x = x_2$) y estos procesos pueden ser analizados empleando (b) una barrera de potencial triangular [SN06].

Cuando a una unión se le aplica un potencial positivo entre ánodo y cátodos, la corriente producida por procesos túnel directos en equilibrio térmico puede ser calculada empleando las siguientes expresiones

$$I_{c \rightarrow v} = C_1 \int f_c(E)g_c(E)T_t[1 - f_v(E)]g_v(E)dE \tag{3.6}$$

$$I_{v \rightarrow c} = C_2 \int f_v(E)g_v(E)T_t[1 - f_c(E)]g_c(E)dE, \tag{3.7}$$

donde $I_{c \rightarrow v}$ es la corriente de electrones de la banda de conducción en el lado N a la banda de valencia en el lado P, y $I_{v \rightarrow c}$ es la corriente de huecos desde la banda de valencia en el lado P a la banda de conducción en el lado N. $f_c(E)$ y $f_v(E)$ son las funciones de Fermi en cada banda y $g_c(E)$ y $g_v(E)$ las densidad de estados en las bandas de conducción y valencia.

Entonces, la corriente túnel total a través del diodo será la suma de las dos componentes anteriores:

$$I_t = I_{c \rightarrow v} - I_{v \rightarrow c} = C \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} [f_c(E) - f_v(E)]T_t g_c(E)g_v(E)dE. \tag{3.8}$$

Los límites de integración son el límite inferior de la banda de conducción, E_C , en el lado N y el límite superior de la banda de valencia, E_V , en el lado P. Sustituyendo en la expresión anterior la fórmula del coeficiente túnel (3.5) y de las densidades de estados en cada lado, se

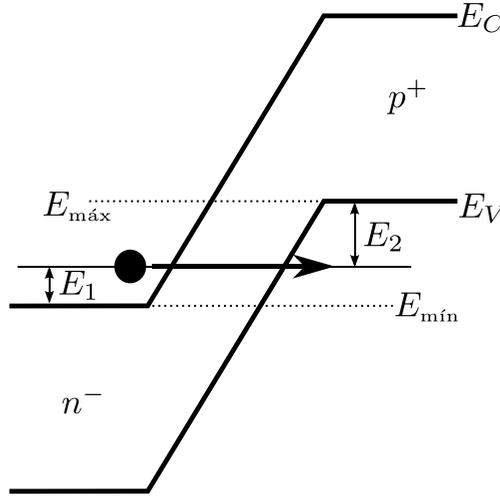


Figura 3.6: Límites de integración y distancias significativas cuando se calcula la integral de solapamiento según la aproximación propuesta por Kane [Kan61].

obtiene la siguiente expresión para la densidad de corriente

$$J_t = \frac{q^2 \mathcal{E}}{36\pi\hbar^2} \sqrt{\frac{2m^*}{E_g}} D \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m^*}E_g^{3/2}}{3q\hbar\mathcal{E}}\right), \quad (3.9)$$

donde D es conocida como la integral de solapamiento y describe el solapamiento de los estados ocupados en la banda de conducción con los estados vacíos en la banda de valencia. Este solapamiento de estados va a permitir la corriente túnel a través de la región de vaciamiento en el diodo. Su expresión es

$$D = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} [f_c(E) - f_v(E)] \left[1 - \exp\left(-\frac{2E_S}{\bar{E}}\right)\right] dE, \quad (3.10)$$

$E_S = \min(E_1, E_2)$, E_1 , E_2 y E_{\max} , E_{\min} , los límites de integración, están definidos en la figura 3.6 y \bar{E} viene dado por la expresión

$$\bar{E} \equiv \frac{\sqrt{2}q\hbar\mathcal{E}}{\pi\sqrt{m^*}E_g}, \quad (3.11)$$

donde m^* es la masa efectiva asociada a la portador. En el caso de una unión abrupta el campo eléctrico \mathcal{E} en la región de vaciamiento vendrá dado por

$$\mathcal{E} = \sqrt{\frac{q_e(V_{bi} - V_A)N_A N_D}{2\epsilon_S(N_A + N_D)}}, \quad (3.12)$$

donde V_{bi} es el potencial de contacto asociado a la unión, V_A es tensión aplicada al diodo, N_D es la concentración de impurezas donadoras y N_A la concentración de impurezas aceptoras ϵ .

Las ecuaciones (3.8) y (3.10) son las expresiones de partida para el desarrollo de nuestro modelo analítico. La forma típica de la integral de solapamiento se muestra en la figura 3.3. Para obtener esta curva se integró numéricamente la expresión (3.10) (Kane [Kan61] la obtiene a partir de una aproximación de la integral definida a trozos) empleando los parámetros correspondientes a un diodo de GaAs, donde $\epsilon_p = 0,3$ eV y $\epsilon_n = 0,1$ eV. Es fácil ver como la forma de la curva está totalmente definida por los valores que toman las distancias entre el nivel de Fermi y los límites de las bandas de conducción y valencia. Mientras el potencial aplicado toma valores entre $V_n = \epsilon_n/q_e$ y $V_p = \epsilon_p/q_e$, la integral de solapamiento permanece constante, esto corresponde con la situación mostrada en la figura 3.4(b), en la que el mayor número de portadores estarían disponibles para participar en procesos de recombinación túnel. Por encima y por debajo de esos valores el solapamiento entre estados ocupados en la banda de conducción y estados vacíos en la banda de valencia disminuye, reduciéndose por tanto la cantidad de posibles procesos de recombinación.

Una descripción más detallada del desarrollo matemático de estas expresiones puede encontrarse en [DK70, Esa58, Kan61, SN06].

Otras componentes de corriente

Corriente de exceso

La corriente de exceso crece en importancia a medida que la tensión aplicada en el diodo se aproxima a V_V . Esta componente de corriente depende de la concentración de defectos e impurezas en el cristal, dado que estas están relacionadas con la densidad de estados permitidos en la banda de energías prohibidas. La corriente de exceso está producida por procesos de recombinación túnel a través de la región de vaciamiento asistidos por estos estados de energía permitidos. La figura 3.7 muestra varios caminos que un proceso de recombinación túnel indirecto podría seguir.

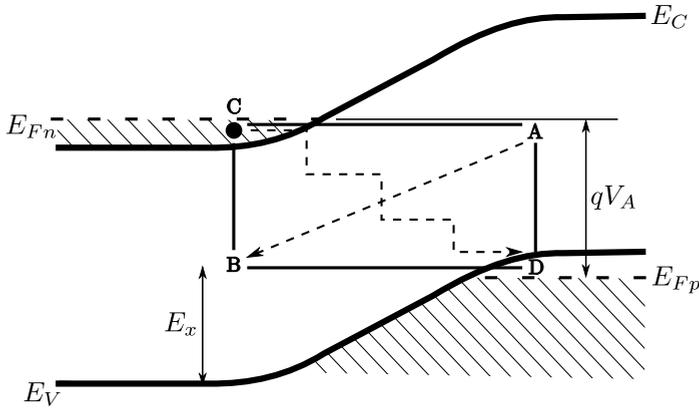


Figura 3.7: Procesos túnel asistidos: La corriente túnel indirecta se sirve de estados permitidos en la banda del gap producidos por impurezas o defectos en la red cristalina. [SN06].

Es posible hacer un desarrollo paso a paso de esta componente [SN06], pero para el seguimiento de este trabajo sólo es necesario conocer la parametrización que se hace de la corriente de exceso, que se puede ver en la siguiente expresión:

$$J_x = J_V \exp C_1(V - V_V), \quad (3.13)$$

donde $J_V = C_2 D_x$, donde D_x es la densidad de estados permitidos de energía en la banda prohibida. Este es un parámetro experimental y fuertemente dependiente de los procesos que se hayan seguido para fabricar el dispositivo. C_1 y C_2 son dos parámetros de ajuste. J_V puede ser expresada en términos de la corriente pico, J_P , donde los ratios típicos de J_P/J_V son 8:1 para el Ge o 28:1 para el GaAs [SN06].

La tensión valle, V_V , se sitúa en torno a $V_n + V_p$. Para este valor de tensión aplicada, la corriente túnel está disminuyendo rápidamente a cero y la corriente de exceso tiene un crecimiento exponencial, convirtiéndose en la mayor contribución a la corriente total en un pequeño rango de tensiones aplicadas en torno a V_V .

Corriente de difusión

La corriente de difusión es la componente que se suele emplear cuando se analiza el comportamiento del diodo, pero para el propósito de este trabajo es la menos relevante. La corriente de difusión se produce por la diferencia de concentración de portadores entre los dos

lados del diodo. Comienza a tener un valor no despreciable cuando la tensión aplicada es tal que los portadores de carga pueden atravesar la zona de vaciamiento venciendo la barrera que el potencial de contacto supone. La tensión a la cual la corriente de difusión es relevante se conoce como tensión de despegue, V_T , y se define a partir de las concentraciones de dopado a ambos lados de la unión.

La expresión estándar para la corriente de difusión viene dada por el modelo Shockley [SN06]:

$$I_{diff} = Aqen_i^2 \left[\frac{D_n}{L_n N_A} + \frac{D_p}{L_p N_D} \right] (e^{q(V - R_S I_{tot})/k_B T} - 1), \quad (3.14)$$

donde A es la sección transversal del diodo, n_i la concentración intrínseca de portadores, D_n y D_p son los coeficientes de difusión de los portadores, L_n y L_p las longitudes de difusión, N_D y N_A las concentraciones de dopado y R_S la resistencia interna del diodo.

3.1.2. Corriente en el simulador desarrollado. Comparativa con Sentaurus Device y Atlas

A continuación se muestran los resultados obtenidos de la simulación de la característica I-V de uniones túnel basadas en GaAs y ZnO usando Atlas [Atl10] de Silvaco y Sentaurus Device [sen10] de Synopsys, dos herramientas de simulación comerciales ampliamente utilizadas. Los resultados se comparan con los obtenidos usando nuestro simulador para comprobar si su comportamiento es adecuado. Los cálculos se han realizado usando los parámetros listados en la tabla 3.1 para el GaAs y en la tabla 3.2 para ZnO los cuales describen bien muchos de los experimentos y son consistentes con los datos en la literatura relacionada [VMRM01, JSM⁺06, ARL⁺99, OAL⁺05].

La figura 3.8 muestra los resultados para la corriente túnel en un diodo de GaAs con dopados constantes de $N_A = 2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ en el lado P y $N_D = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ en el lado N y un diodo de ZnO con $N_A = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $N_D = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Estos valores están en el rango de las concentraciones de dopado típicas en un diodo ferromagnético. Además, los valores se han escogido para tener la misma relación entre las distancias entre el nivel de Fermi y los bordes de las bandas de conducción y valencia. De esta forma los portadores mayoritarios más con mayor concentración son los huecos en la zona P en el caso del diodo de GaAs y los electrones en la zona N para el diodo de ZnO tal y como ocurre de forma natural en las muestras de GaAs y ZnO ferromagnético, los cuales son tipo P y tipo N, respectivamente, cuando se dopan con impurezas magnéticas.

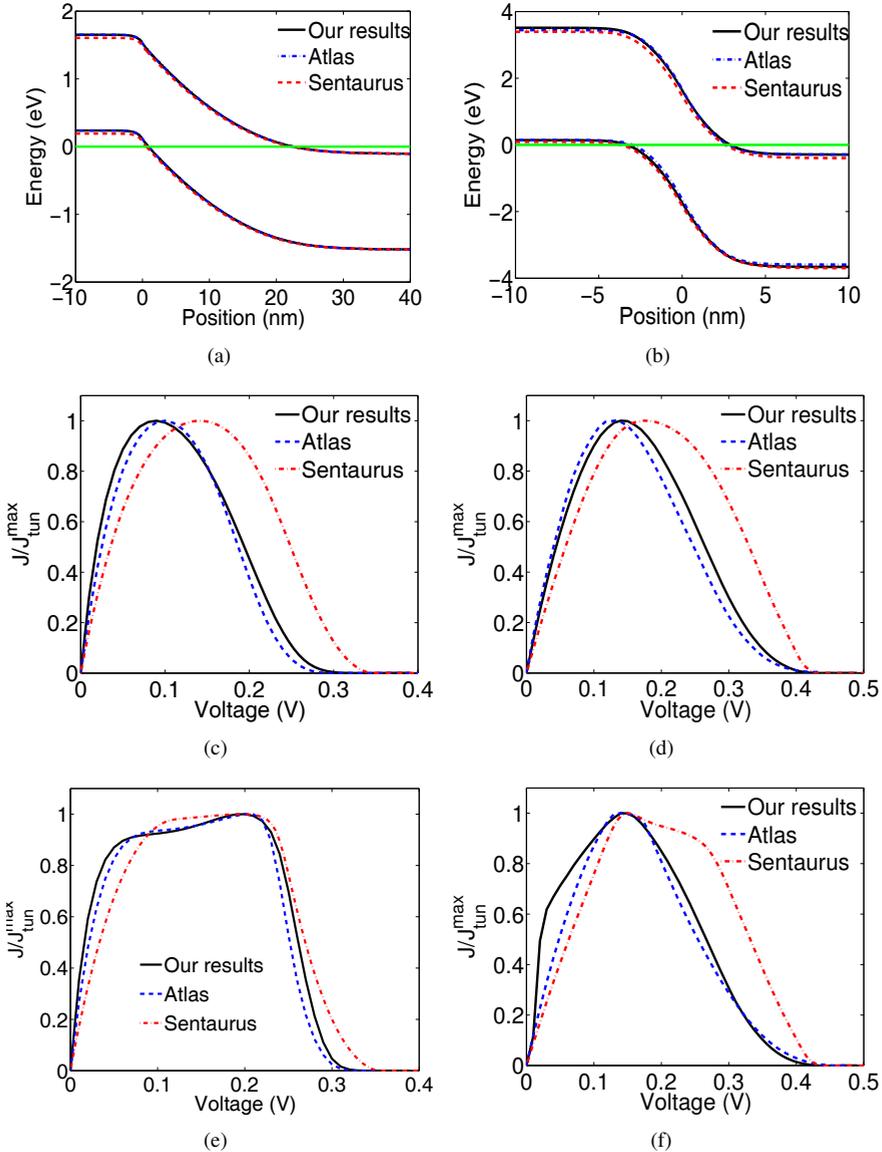


Figura 3.8: Simulación de diodos túnel de GaAs con dopados constantes de $N_A = 2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $N_D = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ y ZnO con $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $N_D = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Las figuras muestran el diagrama de bandas para GaAs (a) y ZnO (b), la corriente túnel para GaAs (c) y ZnO (d) a 300 K; y la corriente túnel para GaAs (e) y ZnO (f) a 77 K. Cálculos realizados con nuestro simulador, Atlas de Silvaco y Sentaurus de Synopsys.

Tabla 3.1: Parámetros típicos para GaAs.

Parámetro	Valor
Energía banda prohibida (E_g)	1,4 eV
Afinidad electrónica (χ)	4,2 eV
Constante dieléctrica (ϵ estática)	13,2 ϵ_0
Constante dieléctrica (ϵ óptica)	3,5 ϵ_0
Masa efectiva del electrón (m_e^*)	0,067 m_0
Masa efectiva del hueco (m_h^*)	0,47 m_0
Densidad efectiva de estados en la banda de conducción (N_c)	4,4 $\times 10^{17}$ cm $^{-3}$
Densidad efectiva de estados en la banda de valencia (N_v)	8,5 $\times 10^{18}$ cm $^{-3}$
Movilidad de los electrones (μ_n)	8500 cm 2 V $^{-1}$ s $^{-1}$
Movilidad de los huecos (μ_p)	400 cm 2 V $^{-1}$ s $^{-1}$

Tabla 3.2: Parámetros típicos para ZnO

Parámetro	Valor
Energía banda prohibida (E_g)	3,3 eV
Afinidad electrónica (χ)	4,1 eV
Constante dieléctrica (ϵ estática)	$E \perp c$ 7,6 ϵ_0 $E \parallel c$ 8,5 ϵ_0
Constante dieléctrica (ϵ óptica)	$E \perp c$ 3,6 ϵ_0 $E \parallel c$ 3,7 ϵ_0
Masa efectiva del electrón (m_e^*)	0,27 m_0
Masa efectiva del hueco (m_h^*)	0,54 m_0
Densidad efectiva de estados en la banda de conducción (N_c)	3,5 $\times 10^{18}$ cm $^{-3}$
Densidad efectiva de estados en la banda de valencia (N_v)	1 $\times 10^{19}$ cm $^{-3}$
Movilidad de los electrones (μ_n)	100 – 300 cm 2 V $^{-1}$ s $^{-1}$
Movilidad de los huecos (μ_p)	0,1 – 6 cm 2 V $^{-1}$ s $^{-1}$

$E \parallel c$ se refiere a polarización paralela y $E \perp c$ a polarización perpendicular del campo eléctrico respecto del eje óptico.

Los resultados obtenidos a partir de las simulaciones se han ejecutado a diferentes temperaturas y todos ellos muestran el mismo resultado para el diagrama de bandas, tanto nuestro simulador como las versiones comerciales, y son los que se muestran en las figuras 3.8(a) y 3.8(b). Sin embargo, la corriente túnel presenta diferentes comportamientos dependiendo de la

herramienta empleada en la simulación. Los resultados a 300 K, mostrados en la figura 3.8(c) para el diodo de GaAs y en la figura 3.8(d) para el ZnO, obtenidos desde nuestro simulador y desde Atlas muestran un comportamiento similar. Esto era esperado ya que ambos simuladores usan un modelo equivalente para la corriente túnel. Sin embargo, los resultados obtenidos con Sentaurus muestran un comportamiento claramente diferente debido al tratamiento que este hace de las componentes transversales a la energía de la partícula y que conduce a valores más altos de la corriente túnel en torno al voltaje valle.

A bajas temperaturas también se obtienen diferentes respuestas para la corriente túnel en los tres simuladores, tal y como se muestra en la figura 3.8(e) para el GaAs y en la figura 3.8(f) para el ZnO. El comportamiento extraño de nuestro simulador a voltajes muy bajos en el caso del ZnO se produce debido a la inestabilidad de la resolución numérica que no permite alcanzar una solución con un nivel de error lo suficientemente bajo en algunas configuraciones. Sin embargo, este problema desaparece a medida que la tensión aplicada se acerca a la tensión pico de la característica túnel.

La diferencia en respuesta eléctrica obtenida a partir de nuestro simulador o Atlas y la obtenida en Sentaurus se puede observar perfectamente si se presentan los factores de solapamiento que se emplean en cada simulador. En todos los simuladores la corriente túnel se obtiene como el producto de la probabilidad de transición túnel, $\Gamma(E)$, por el factor de solapamiento, $D(E)$:

$$\Delta J_{tun}(E) \propto \Gamma(E) \times D(E) \times \Delta E. \quad (3.15)$$

Los factores de solapamiento recogen la información relativa a la energía de las partículas que participan en el proceso túnel y el solapamiento en energía entre la banda de valencia en el lado P del diodo y la banda de conducción en el lado N. En el caso de nuestro simulador y del simulador comercial Atlas, se usa la siguiente expresión para el factor de solapamiento:

$$D(E) = \log \left\{ \frac{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fl}-E}{k_B T}\right) \right]}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fu}-E}{k_B T}\right) \right]} \times \frac{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fu}-E-E_{m\acute{a}x}}{k_B T}\right) \right]}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fl}-E-E_{m\acute{a}x}}{k_B T}\right) \right]} \right\}. \quad (3.16)$$

donde $E_{m\acute{a}x} = \min(E - E_{sup}, E_{inf} - E)$ es la máxima energía debida a componentes transversales a la dirección del transporte del momento de la partícula involucrada en el proceso túnel, E es la componente de la energía en la dirección del transporte y E_{Fl} y E_{Fu} son los valores de los pseudoniveles de Fermi en los extremos de la barrera túnel. Los niveles de energía E_{sup} y E_{inf} están definidos en la figura 3.9.

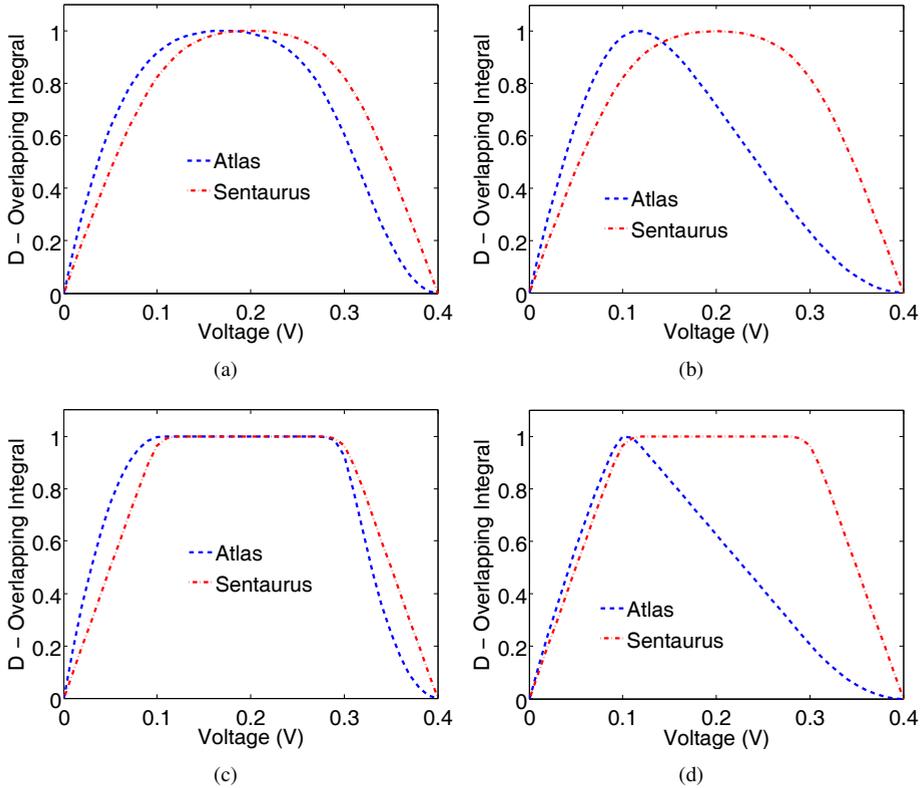


Figura 3.10: Integral de los factores de solapamiento sobre las energías permitidas para procesos túnel para cada valor de potencial aplicado de los factores de solapamiento, usando las expresiones del factor de solapamiento de los simuladores comerciales Atlas y Sentaurus. Curvas obtenidas para el GaAs y para el ZnO a 300 K (a) y (b), y a 77 K (c) y (d), respectivamente.

Es importante notar que la más pequeña de las energías relativas de Fermi ε_S , ε_n para el dispositivo basado en GaAs y ε_p para el dispositivo basado en ZnO, determina la tensión aplicada para que se produzca el máximo en la corriente túnel que estará en torno a ε_S/q_e . Teniendo en cuenta que se busca analizar la dependencia de la corriente túnel con la polarización de espín en torno al valor donde la corriente túnel es máxima, está claro que cualquier cambio en la más pequeña de las energías relativas de Fermi, ε_S , gobernará el comportamiento de la TMR en la unión.

Con estos resultados se pretende mostrar que las diferentes implementaciones de los modelos para la corriente túnel no local conducen a resultados diferentes dependiendo del simulador empleado, sin embargo conseguimos mostrar como nuestra implementación concuerda con los resultados obtenidos a partir del simulador comercial Atlas, que se ha empleado como modelo. Esto provee de un buen punto de partida para calcular la corriente túnel cuando se considera el desdoblamiento de las bandas de energía debido al efecto del ferromagnetismo. En esta nueva situación la corriente túnel se volverá muy dependiente del modelo empleado para simular la polarización de espín en la región de vaciamiento del diodo con lo que las relativamente pequeñas diferencias entre nuestro simulador y el simulador Atlas se consideraran irrelevantes. Por lo tanto, los resultados se consideran validos porque, aún teniendo en cuenta las diferencias entre los tres simuladores, todos muestran el mismo comportamiento para la corriente túnel y además los valores obtenidos para las tensiones pico y valle siguen la predicción realizada por el modelo de Kane para la corriente en un diodo Zener [Kan61].

3.2. Desdoblamiento de las bandas de energía

Debido a la presencia de Mn (o del Co en el caso del ZnO) y a la interacción de intercambio que produce el acoplamiento antiferromagnético entre estos iones magnéticos y los portadores de carga, el espín de los portadores está polarizado parcialmente, y el ratio de polarización va a ser función de la concentración de impurezas magnéticas. Esta polarización de espín se traduce como un desdoblamiento de las bandas de energía, así el límite de la banda de valencia en el (GaMn)As se desdobra en dos nuevos valores, uno para los huecos con espín arriba y otro para los huecos con espín abajo.

El efecto de la interacción de intercambio puede ser estimado usando una teoría perturbativa basada en funciones de Green [FW03]. El Hamiltoniano que describe el sistema formado por los portadores de carga y los subsistemas magnéticos en el semiconductor magnético di-

luido (DMS) viene dado por [LK03]:

$$H_{tot} = H^1 + H_{exch} + H_m, \quad (3.18)$$

donde H_{exch} describe la interacción entre los iones magnéticos y los portadores libres

$$\begin{aligned} H_{exch} = & -\frac{\Omega}{2} \sum_{\vec{R}} \int J(\vec{r} - \vec{R}) \left\{ S_{\vec{R}}^+ \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\uparrow}(\vec{r}) + \right. \\ & \left. + S_{\vec{R}}^- \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\downarrow}(\vec{r}) + (S_{\vec{R}}^z - \langle S^z \rangle) \times \right. \\ & \left. \times \left[\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\uparrow}(\vec{r}) - \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\downarrow}(\vec{r}) \right] \right\} d^3 \vec{r}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

H_m tiene en cuenta la interacción entre diferentes iones magnéticos y la energía Zeeman debido a un posible campo magnético al que se vea sometido el sistema

$$H_m = - \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} I(\vec{R}, \vec{R}') S_{\vec{R}} \cdot S_{\vec{R}'} - g_L \mu_B B \sum_{\vec{R}} S_{\vec{R}}^z, \quad (3.20)$$

y H^1 describe la energía de los portadores en un sistema con las bandas de energía desdobladas para cada valor de espín

$$H^1 = \sum_{\vec{k}, \sigma} E_{\vec{k}, \sigma}^{(1)} a_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}, \sigma}, \quad (3.21)$$

y la expresión para la energía de los portadores libres será [LK03]

$$E_{\vec{k}, \sigma} = E_{be}^0 + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} - \frac{\Delta}{2} (\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow}), \quad (3.22)$$

donde E_{be}^0 es la energía de los límites de las bandas y $\Delta = x J_{exch} \langle S^z \rangle$ es la aproximación a primer orden del desdoblamiento de las bandas, siendo x la concentración efectiva de iones de Mn, J_{exch} el factor de intercambio y $\langle S^z \rangle$ el valor medio del momento magnético de espín. El factor de intercambio, J_{exch} , mide la fuerza con la que los iones de Mn se acoplan por interacción de intercambio y es un parámetro experimental. En la aproximación de campo medio, el valor medio del espín de los momentos magnéticos polarizados $\langle S^z \rangle$ viene dado por

$$x \langle S^z \rangle = x S B_S(y) \quad (3.23)$$

donde $B_S(y)$ es la función de Brioullin para el número cuántico S con $y = g_L \mu_B S B_{eff} / k_B T$. El campo molecular efectivo B_{eff} puede ser obtenido a partir de la expresión del Hamiltoniano magnético H_m y tiene la forma

$$B_{eff} = B + \frac{2I(q=0) \langle S^z \rangle}{g_L \mu_B}, \quad (3.24)$$

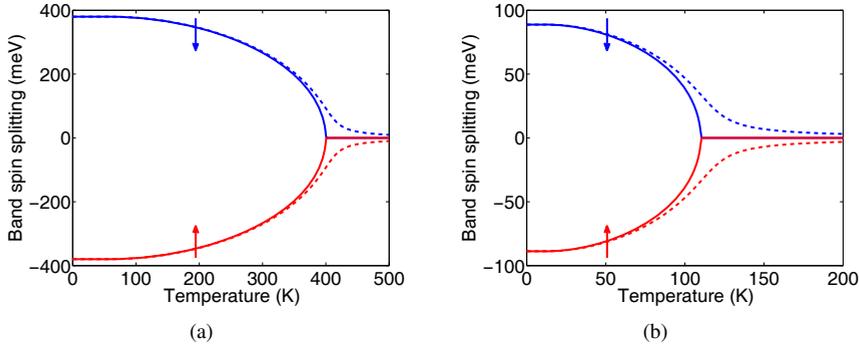


Figura 3.11: Dependencia con la temperatura del límite de la banda de valencia en un semiconductor ferromagnético cuando el campo externo $B = 0$ T (curva continua) y cuando $B = 4$ T (curva discontinua), mostrando el desdoblamiento de las bandas de energía de portadores mayoritarios para dos materiales semiconductores (Zn,Co)O (a) y (Ga,Mn)As (b).

donde $I(q)$ es la transformada de Fourier del parámetro de acoplamiento magnético $I(\vec{R}, \vec{R}')$ en la ecuación (3.20). Para una red fcc $I(q)$ viene dado por la expresión [KSKS80]

$$I(q) = \frac{3k_B T_C}{2S(S+1)} \left[1 - \frac{a_0^2 q^2}{12} \right], \quad (3.25)$$

donde a_0 es la constante de red.

La figura 3.11 muestra la dependencia con la temperatura de la posición del límite de la banda $E_\sigma(\vec{k} = 0)$ en dos casos: $J_{exch} = 4$ eV, figura 3.11(a), que corresponde con un valor típico de la interacción de intercambio para los electrones de conducción en un óxido ferromagnético, como el $(\text{Zn}_{0.9}, \text{Co}_{0.1})\text{O}$, donde los iones magnéticos de Co aportan un momento magnético máximo de $S = 1,9\mu_B$ [MG86, SMT⁺99, PZA⁺13]; y $J_{exch} = 1,4$ eV, figura 3.11(b), corresponde con los valores apropiados para la interacción con los huecos como en el $(\text{Ga}_{0.95}, \text{Mn}_{0.15})\text{As}$ donde los iones de Mn aportan un momento magnético máximo de $S = 2,5\mu_B$ [SMT⁺99, OMO01]. En el caso del (Zn,Co)O la temperatura de Curie es 400 K y en para el (Ga,Mn)As es 110 K que son los valores típicos en la literatura referida. El desdoblamiento de las bandas de energía desaparece para temperaturas mayores que la temperatura de Curie cuando no hay campo magnético externo aplicado ($B = 0$) y crece hasta alcanzar su mayor valor a 0 K. En el caso de existir una fuerza magnética externa esta intensifica el desdoblamiento para temperaturas altas permitiendo observar los efectos del ferromagnetismo en la respuesta eléctrica del dispositivo más allá de la temperatura de Curie. De estos resultados se

extrae que el desplazamiento de las bandas puede llegar a ser comparable a la energía térmica o de Fermi de los portadores.

En un DMS el desdoblamiento de las bandas para cada espín será $\Delta_1 = E_{C\uparrow} - E_{C\downarrow}$ para los electrones de conducción y $\Delta_2 = E_{V\uparrow} - E_{V\downarrow}$ para los huecos. Si consideramos un caso más general donde los materiales presentes a ambos lados de la unión no sean iguales, se debe tener en cuenta una posible discontinuidad en las bandas de energía, con lo que la expresión que define el límite de la banda de conducción es

$$E_C^\sigma = E_C^0 - \Delta E_C^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} - \frac{\Delta_1}{2}(\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow}) \quad (3.26)$$

y la banda de valencia viene definida por

$$E_V^\sigma = E_V^0 + \Delta E_V^0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} - \frac{\Delta_2}{2}(\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow}), \quad (3.27)$$

donde los desdoblamientos serán $\Delta_1 = xJ_{exch}^n \langle S^z \rangle$ y $\Delta_2 = xJ_{exch}^p \langle S^z \rangle$ y $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ se refiere a cada valor del espín $S_z = \{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$ de los portadores de carga. Las discontinuidades en las bandas de energía de conducción y valencia se contemplan a través de los parámetros ΔE_C^0 y ΔE_V^0 , respectivamente. En la figura 3.12 se puede ver un diagrama de bandas esquemático para una unión PN donde el lado P es ferromagnético y por lo tanto la banda de valencia está desdoblada para cada valor de espín.

Cuando los bordes de las bandas de energía se dividen debido a la polarización de espín, se pueden definir dos energías características [HLN⁺07, GBB⁺06] equivalentes a los niveles de ocupación de cada espín,

$$\varepsilon_n^\sigma = E_{Fn} - E_C^\sigma = E_{Fn} - E_C \pm \Delta_1/2 \quad (3.28)$$

$$\varepsilon_p^\sigma = E_V^\sigma - E_{Fp} = E_V \pm \Delta_2/2 - E_{Fp} \quad (3.29)$$

donde $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$.

Las concentraciones de portadores en las bandas polarizadas para cada valor de espín se pueden calcular empleando las expresiones típicas de la teoría de semiconductores, en este caso, la concentración de electrones para cada espín será

$$n^\sigma = \frac{N_C}{2} F_{1/2} \left(\frac{E_{Fn} - E_C^\sigma}{k_B T} \right) \quad (3.30)$$

y la concentración de huecos

$$p^\sigma = \frac{N_V}{2} F_{1/2} \left(\frac{E_V^\sigma - E_{Fp}}{k_B T} \right), \quad (3.31)$$

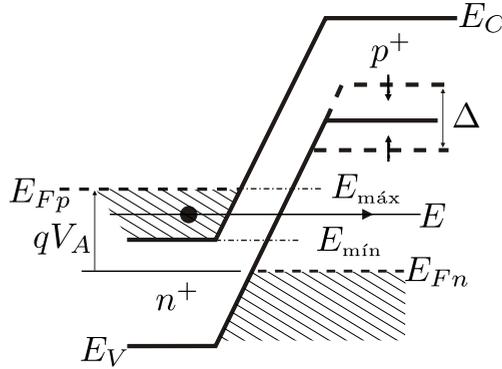


Figura 3.12: Desdoblamiento de la banda de valencia para un diodo con el lado P ferromagnético y el lado N magnético. Las prolongaciones discontinuas de la banda de valencia representan el desdoblamiento de las bandas Δ cuando los huecos están parcialmente polarizados. E_{\min} y E_{\max} serán los límites de integración en la integral de solapamiento.

donde N_C y N_V son las densidades efectivas de estados de electrones y huecos y $F_{1/2}$ es la integral de Fermi de orden 1/2.

Lo siguiente sería reescribir la ecuación (3.8) para la corriente túnel

$$I_t \sim \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} [f_C(E) - f_V(E)] T_t g_C(E) g_V(E) dE, \quad (3.32)$$

para un diodo zener ferromagnético que presenta desplazamiento de las bandas de energía en uno o ambos lados de la unión, dado que ahora tanto las densidades de estados g_C y g_V se ven modificadas por el desplazamiento de las bandas de energía. Así, la densidad de estados en la banda de conducción queda como

$$g_C^\sigma(E) \sim \left(E - E_C - \frac{\Delta_1}{2} (\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow}) \right)^p \quad (3.33)$$

y la densidad de estados en la banda de valencia será

$$g_V^\sigma(E) \sim \left(E_V - E - \frac{\Delta_2}{2} (\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow}) \right)^p, \quad (3.34)$$

donde $p = 1/2$ si se considera la aproximación de banda parabólica, aunque en el caso de semiconductores degenerados esta aproximación puede no ser válida teniendo que considerar polinomios de mayor orden [HLN⁺05]. Del mismo modo el coeficiente túnel se puede ver modificado dado que al cambiar la forma de las bandas, el valor del campo eléctrico y la

posición de los puntos de retorno para cada espín es diferente. De esta forma la corriente túnel a través del diodo para cada valor de espín vendrá dada por

$$I_t^\sigma \sim \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} [f_C(E) - f_V(E)] T_t(E, E_C^\sigma, E_V^{\sigma'}) g_C(E, E_C^\sigma) g_V(E, E_V^{\sigma'}) dE, \quad (3.35)$$

donde $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ y $\sigma' = \{\downarrow, \uparrow\}$.

3.2.1. Medida de la polarización de espín

En este trabajo, el valor del desdoblamiento de las bandas Δ se emplea como una medida del grado de polarización del espín de los portadores. Sin embargo, este no es el modo natural de expresar el valor de la polarización, sino que esta se obtiene de calcular la relación de concentración de portadores para cada espín

$$\mathcal{R}_n = \frac{n^\uparrow - n^\downarrow}{n^\uparrow + n^\downarrow}. \quad (3.36)$$

donde $\mathcal{R}_n = 1$ cuando la banda está completamente polarizada y $\mathcal{R}_n = 0$ cuando hay igual número de portadores para cada valor de espín.

Entonces, es necesario analizar la relación de la polarización de espín con el valor del desdoblamiento de las bandas de energía. El número de portadores para cada valor de espín se puede obtener a partir de la estadística de Fermi-Dirac y la densidad de estados

$$n^\sigma = \int_{E_C^\sigma}^{\infty} f(E) g(E, E_C^\sigma) dE. \quad (3.37)$$

Tomando la aproximación parabólica de las bandas y el límite a bajas temperatura, $T \rightarrow 0$, de tal forma que la función de Fermi sea una función escalón

$$\lim_{T \rightarrow 0} F(E) = \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_{Fn}}{k_B T}}} = \begin{cases} 1 & \text{si } 0 \leq E \leq E_{Fn} \\ 0 & \text{si } E > E_{Fn} \end{cases}, \quad (3.38)$$

la concentración de portadores tendrá la forma siguiente

$$\begin{aligned} n^\sigma &\propto \int_{E_C^\sigma}^{E_{Fn}} (E - E_C^\sigma)^{1/2} dE \propto (E_{Fn} - E_C^\sigma)^{3/2} \\ &\propto \left[E_{Fn} - E_C - \frac{\Delta_1}{2} (\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow}) \right]^{3/2} \end{aligned} \quad (3.39)$$

donde E_{Fn} depende del valor de Δ para mantener la neutralidad de carga como se mostrará en la sección siguiente. Usando la expresión anterior en la ecuación (3.36), se obtiene el grado de polarización de los portadores para un desdoblamiento de las bandas dado.

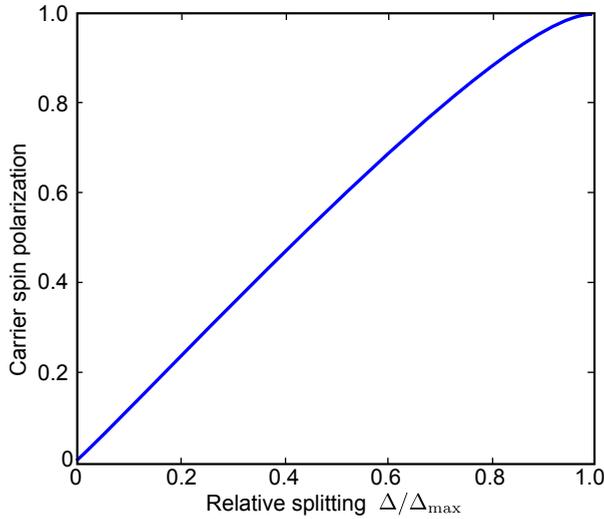


Figura 3.13: Ratio de polarización de espín frente al desdoblamiento. Este gráfica muestra la correspondencia existente entre el desdoblamiento de las bandas relativo al desdoblamiento máximo alcanzado al polarizar completamente el espín de los portadores (Δ/Δ_{max}) y el grado de polarización.

3.2.2. Desdoblamiento máximo de las bandas

Para mantener la condición de neutralidad de carga en el dispositivo, es decir, mantener la concentración de electrones y huecos cuando las bandas están desdobladas es necesario que el nivel de Fermi se desplace tal y como se muestra a continuación. Partimos de la condición de carga constante

$$n^{\uparrow} + n^{\downarrow} = n^0, \quad (3.40)$$

donde n^0 es la concentración de portadores total si las bandas no están desdobladas. Empleando de nuevo la estadística de Fermi-Dirac y límite a bajas temperaturas,

$$\begin{aligned} \int_{E_C}^{E_{Fn}} \left(E - E_C + \frac{\Delta}{2} \right)^{1/2} dE + \int_{E_C}^{E_{Fn}} \left(E - E_C - \frac{\Delta}{2} \right)^{1/2} dE = \\ = 2 \int_{E_C}^{E_{Fn}} (E - E_C)^{1/2} dE, \end{aligned} \quad (3.41)$$

donde E'_{Fn} es el nuevo valor del nivel de Fermi para garantizar la neutralidad de carga. Empleando los cambios de variable $\varepsilon = E - E_C$, $E_{Fn} - E_C = \varepsilon_n$ y $E'_{Fn} - E_C = \varepsilon'_n$:

$$\int_0^{\varepsilon'_n} \left(\varepsilon + \frac{\Delta}{2} \right)^{1/2} d\varepsilon + \int_0^{\varepsilon_n} \left(\varepsilon - \frac{\Delta}{2} \right)^{1/2} d\varepsilon = 2 \int_0^{\varepsilon_n} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \quad (3.42)$$

e integrando

$$\left(\varepsilon'_n + \frac{\Delta}{2} \right)^{3/2} + \left(\varepsilon'_n - \frac{\Delta}{2} \right)^{3/2} = 2\varepsilon_n^{3/2}. \quad (3.43)$$

Entonces, cuando el desdoblamiento de las bandas es máximo, es decir, los portadores tienen su espín completamente polarizado, $\varepsilon'_n = \Delta_{\text{máx}}/2$, con lo cual

$$\Delta_{\text{max}} = 2^{2/3} \varepsilon_n \quad (3.44)$$

Este resultado unido a lo descrito en el apartado anterior, nos permite emplear dos medidas distintas del grado de polarización del espín de los portadores a la hora de mostrar los resultados: por un lado el ratio de polarización propiamente dicho, ecuación (3.36), y por otro la relación $\Delta/\Delta_{\text{máx}}$, es decir, el valor del desdoblamiento relativo a su valor máximo alcanzable en el límite de $T = 0$ K. La correspondencia entre estas dos medidas se muestra en la figura 3.13 donde se puede observar que la relación entre el desdoblamiento relativo de las bandas y la polarización de espín es prácticamente lineal en la aproximación parabólica de las bandas y además $\mathcal{R} = 1$ cuando $\Delta/\Delta_{\text{máx}} = 1$ y $\mathcal{R} = 0$ cuando $\Delta/\Delta_{\text{máx}} = 0$ [CnG07].

3.3. Diodo con ambos lados ferromagnéticos

El siguiente paso en este trabajo es dar una primera descripción teórica de la respuesta I-V de una unión PN en la que ambos lados tienen propiedades ferromagnéticas.

En la figura 3.14 se muestra una representación esquemática de las dos bandas desdobladas, la banda de conducción en el lado N y la banda de valencia en el lado P. Por lo tanto, será necesario considerar dos valores diferentes de desdoblamiento, Δ_n para la banda de conducción y Δ_p para la banda de valencia.

Retomando de nuevo la ecuación (3.35), tenemos que la corriente túnel en este tipo de dispositivo vendría dada por la suma de las dos contribuciones para cada espín

$$I_{\text{tun}} \sim \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{E_{\text{mín}}}^{E_{\text{máx}}} [f_C(E) - f_V(E)] T_i(E, E_C^\sigma, E_V^{\sigma'}) g_C(E, E_C^\sigma) g_V(E, E_V^{\sigma'}) dE, \quad (3.45)$$

donde $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ y $\sigma' = \{\downarrow, \uparrow\}$.

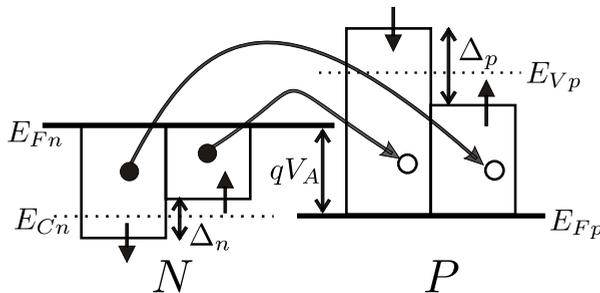


Figura 3.14: Desdoblamiento de las bandas de conducción y valencia: Si los dos lados del diodo son ferromagnéticos es posible producir diferentes grados de polarización del espín de los portadores.

3.3.1. Magnetoresistencia túnel

Para explicar el comportamiento de la unión PN totalmente ferromagnética se emplea una nueva estrategia. En este caso, las impurezas magnéticas en el DMS producen una polarización parcial de los huecos en el lado P y de los electrones en el N, debido a la interacción de intercambio explicada en el capítulo anterior. Sin embargo el acoplamiento entre las impurezas metálicas y los portadores puede producir dos situaciones distintas: puede ocurrir una polarización paralela, es decir la mayor parte de los electrones se polarizan con el mismo estado de espín que los iones magnéticos (interacción ferromagnética); o una polarización antiparalela, donde la mayor parte de los electrones se polarizan con espín opuesto al de los iones (interacción antiferromagnética). Con lo cual, tenemos dos configuraciones distintas posibles en el dispositivo que inducen a emplear un concepto ya usado en el estudio de las uniones de metales ferromagnéticos [Jul75], esto es, la magnetoresistencia túnel (TMR). Este concepto solamente se puede aplicar en esta situación debido a que cuando solo uno de los lados del diodo es ferromagnético, la TMR es siempre cero al no existir diferencia entre las configuraciones paralela y antiparalela. En la figura 3.15(a) se muestra la evolución del valor de la magnetización cuando el grado de polarización de los electrones y huecos está cambiando; de nuevo, se puede ver que hay dos configuraciones posibles, una que corresponde con la situación en la que los electrones y huecos tienen polarizaciones paralelas que conduce a un valor de magnetoresistencia túnel alta y otra en la que la polarización es antiparalela y por tanto la magnetoresistencia será baja tal y como se muestra en la figura 3.15(b). En resumen las dos configuraciones consideradas son:

- Polarización paralela: La mayor cantidad de electrones con espín polarizado (sea arriba o abajo) pueden recombinar con la mayor parte de los huecos con espín polarizado y la menor parte de los electrones con espín polarizado (en sentido contrario) recombinarán con la menor parte de los huecos polarizados.
- Polarización antiparalela: La mayor cantidad de electrones con espín polarizado (sea arriba o abajo) pueden recombinar con la menor parte de los huecos con espín polarizado y la menor parte de los electrones con espín polarizado (en sentido contrario) recombinarán con la mayor parte de los huecos polarizados.

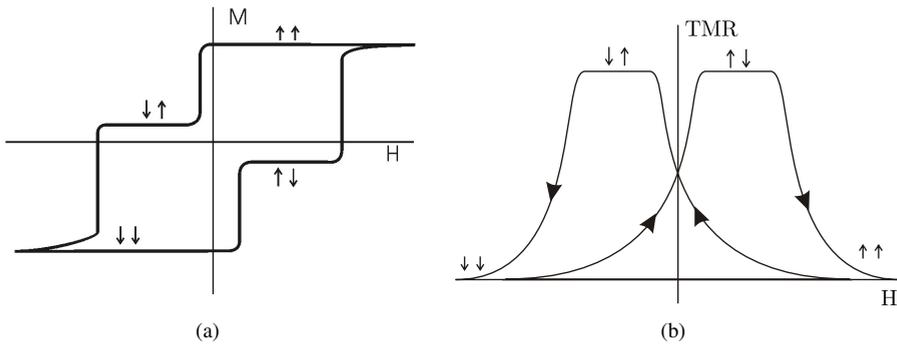
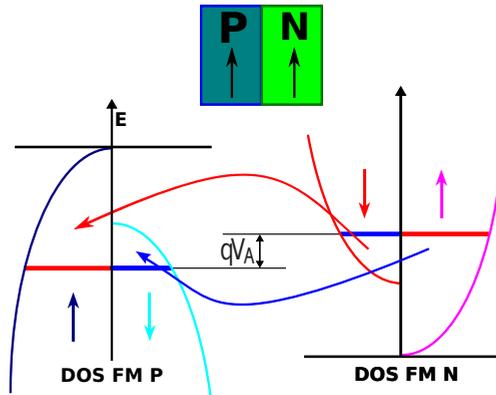


Figura 3.15: Magnetoresistencia túnel frente a la polarización de espín: (a) muestra la evolución de la magnetización cuando el ratio de polarización relativo entre ambos lados de la unión PN está cambiando. (b) Debido a las cuatro posibles configuraciones de las orientaciones del espín sería posible obtener valores muy altos o muy bajos de magnetoresistencia túnel en el dispositivo.

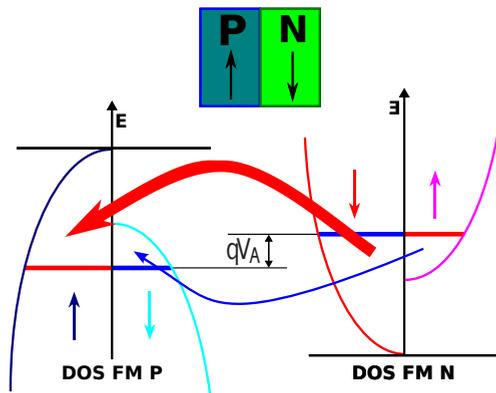
La corriente túnel se produce entre las dos bandas mayoritarias y las dos bandas minoritarias o, si la magnetización relativa se invierte, entre la banda mayoritaria y la banda minoritaria, esto se muestra esquemáticamente en la figura 3.16. A estas corrientes les llamamos corriente antiparalela $I_{ap}(V)$, figura 3.16(a), y corriente paralela $I_p(V)$, figura 3.16(b), respectivamente.

Entonces las cuatro componentes de corriente túnel con espín polarizado pueden ser definidas en función de la polarización relativa de los huecos y electrones en cada lado de la unión PN y será el camino a seguir para explicar el comportamiento de la TMR para las dos configuraciones. La configuración paralela tendrá dos componentes de corriente

$$I_p = I_{\text{mayoría-electrones} \rightarrow \text{mayoría-huecos}} + I_{\text{minoría-electrones} \rightarrow \text{minoría-huecos}}, \quad (3.46)$$



(a) Corriente antiparalela



(b) Corriente paralela

Figura 3.16: Representación esquemática de las bandas desdobladas en las configuraciones antiparalela (a) y paralela (b). Las flechas muestran los procesos de recombinación túnel.

y la configuración antiparalela

$$I_a = I_{\text{mayoría-electrones} \rightarrow \text{minoría-huecos}} + I_{\text{minoría-electrones} \rightarrow \text{mayoría-huecos}}. \quad (3.47)$$

Si a un diodo Zener con ambos lados ferromagnéticos se somete a un bucle de histéresis estos interactuarán ferromagnéticamente o antiferromagnéticamente y se podrá obtener la TMR con la diferencia relativa entre las corrientes en la configuración paralela y la configuración antiparalela,

$$\text{TMR}(V) = \frac{|I_p(V) - I_{ap}(V)|}{I_p(V) + I_{ap}(V)} \times 100 \%, \quad (3.48)$$

como una función del campo magnético, esto ocurre debido a que para campos magnéticos altos, la magnetizaciones de ambos lados serán paralelas, sin embargo serán antiparalelas para un determinado rango intermedio [Jul75], tal y como se muestra en la figura 3.15. En el caso improbable de que en ambos lados el 100 % de los portadores tengan el mismo espín, la concentración de portadores con espín minoritario será cero y por lo tanto no habrá corriente en la configuración antiparalela, $I_{ap}(V)$, haciendo que la $\text{TMR} = 100 \%$ para todos los voltajes aplicados en la región donde domina el transporte túnel.

3.4. Modelo para una heterounión

Por último, en este modelo analítico que se ha desarrollado en este trabajo, se presenta una generalización para una heteroestructura, ya que los materiales presentes a cada lado de la unión no tienen por que ser de la misma naturaleza, tener las mismas propiedades o la misma estructura de bandas de energía, es necesario, por tanto, considerar posibles discontinuidades en la unión metalúrgica del diodo. Además se extiende para considerar una temperatura arbitraria cualquiera, ya que el objetivo de estos materiales es que trabajen a temperatura ambiente.

Para establecer los niveles de dopado, se van a fijar las distancias entre el límite de la banda de valencia en la región masiva P y el nivel de Fermi (ϵ_p) y el límite de la banda de conducción en la región masiva N y el nivel de Fermi (ϵ_n) y se establece la referencia de energías en $E_F = E_{F,p} = 0$. De esta manera, que en la región masiva P, el borde de la banda de valencia será

$$E_{V,p} = E_{F,p} + \epsilon_p = \epsilon_p \quad (3.49)$$

y el borde de la banda en conducción es

$$E_{C,p} = E_{V,p} + E_{g,p}, \quad (3.50)$$

y en la región masiva N, el borde de la banda de conducción se calcula como

$$E_{C,n} = q_e V_A - \varepsilon_n \quad (3.51)$$

y restando el ancho de de la banda prohibida se obtiene el borde de la banda de valencia como

$$E_{V,n} = E_{C,n} - E_{g,n} \quad (3.52)$$

donde V_A es el potencial aplicado entre los terminales del diodo. Es inmediato calcular el potencial de contacto V_{bi}

$$q_e V_1 = \chi_p + E_{g,p} + \varepsilon_p \quad (3.53)$$

$$q_e V_2 = \chi_n - \varepsilon_n \quad (3.54)$$

$$V_{bi} = |V_1 - V_2| \quad (3.55)$$

donde χ_p y χ_n son las afinidades electrónicas y V_1 y V_2 son las distancias entre el nivel de vacío y el nivel de Fermi en las regiones masivas del lado P y el lado N, respectivamente.

El ancho de la región de vaciamiento $WD = WD_1 + WD_2$ para una unión abrupta de dos semiconductores uniformemente dopados se puede calcular de forma analítica y viene dada por

$$WD_1 = \sqrt{\frac{2n_n \varepsilon_{s,p} \varepsilon_{s,n} (V_{bi} - V_A)}{q_e p_p (p_p \varepsilon_{s,p} + n_n \varepsilon_{s,n})}}, \quad (3.56)$$

$$WD_2 = \sqrt{\frac{2p_p \varepsilon_{s,p} \varepsilon_{s,n} (V_{bi} - V_A)}{q_e n_n (p_p \varepsilon_{s,p} + n_n \varepsilon_{s,n})}}, \quad (3.57)$$

donde WD_1 y WD_2 son los anchos de la región de vaciamiento en el lado P y N, $\varepsilon_{s,p}$ y $\varepsilon_{s,n}$ son las constantes dieléctricas de los semiconductores en los lados P y N, y p_p y n_n son las concentración de huecos y electrones en los lados P y N, respectivamente, y pueden ser obtenidos a partir de la integral de Fermi

$$p_p = N_{v,p} F_{1/2} \left(\frac{\varepsilon_p}{k_B T} \right) \quad (3.58)$$

$$n_n = N_{c,n} F_{1/2} \left(\frac{\varepsilon_n}{k_B T} \right) \quad (3.59)$$

Empleando los parámetros anteriormente descritos, se puede construir un diagrama de bandas para la heterounión tal y como se muestra en la figura 3.17 y que viene descrito por las

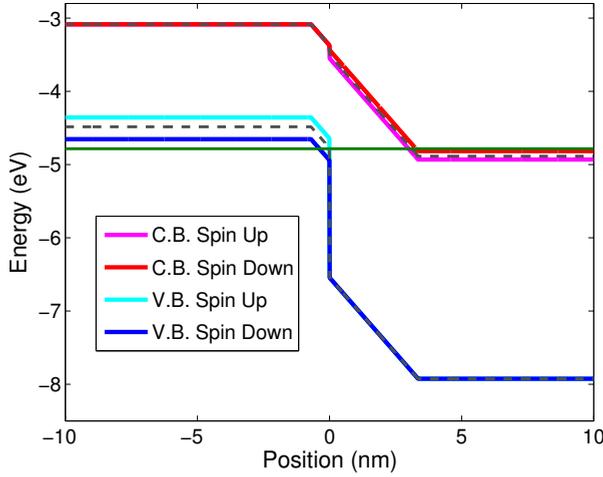


Figura 3.17: Diagrama de bandas calculadas en el equilibrio para una heterounión empleando los parámetros adecuados para GaAs tipo P y ZnO tipo N.

siguientes ecuaciones, en las que se ha considerado una aproximación triangular de la barrera de potencial en la región de vaciamiento del diodo. Así el borde de la banda de conducción viene dado por

$$E_C(x) = \begin{cases} E_{V,p} + E_{g,p} & \text{si } x < -WD_1 \\ -\epsilon_{s,p} \frac{\psi_{bi-V_A}}{WD_1+WD_2}(x + WD_1) + E_{V,p} + E_{g,p} & \text{si } -WD_1 \leq x < 0 \\ -\epsilon_{s,n} \frac{\psi_{bi-V_A}}{WD_1+WD_2}(x - WD_2) + E_{C,n} & \text{si } 0 \leq x < WD_2 \\ E_{C,n} & \text{si } x \geq WD_2 \end{cases} \quad (3.60)$$

y el borde de la banda de valencia se expresa como

$$E_V(x) = \begin{cases} E_{V,p} & \text{si } x < -WD_1 \\ -\epsilon_{s,p} \frac{V_{bi-V_A}}{WD_1+WD_2}(x + WD_1) + E_{V,p} & \text{si } -WD_1 \leq x < 0 \\ -\epsilon_{s,n} \frac{V_{bi-V_A}}{WD_1+WD_2}(x - WD_2) + E_{C,n} - E_{g,n} & \text{si } 0 \leq x < WD_2 \\ E_{C,n} - E_{g,n} & \text{si } x \geq WD_2 \end{cases} \quad (3.61)$$

3.4.1. Coeficiente túnel modificado

Al introducir las discontinuidades en los bordes de las bandas de energía es necesario tenerlas en cuenta al calcular el coeficiente de transmisión túnel, ya que estas modifican la

barrera de potencial existente en la zona de vaciamiento del diodo. A continuación, se analiza el efecto de estas discontinuidades en la probabilidad de que los portadores atraviesen la zona de vaciamiento por efecto túnel.

Puntos de retorno clásicos

Los puntos de retorno clásicos (figura 3.18) en la barrera de potencial se pueden calcular a partir de las expresiones anteriores de las bandas, para cada valor de energía cinética del portador, mediante un cálculo geométrico sencillo. Estos puntos de retorno vendrán definidos entonces como

$$r_1(E) = \begin{cases} r_1^+ & \text{si } r_1^+ > 0 \text{ y } r_1^- > 0 \\ r_1^- & \text{si } r_1^+ < 0 \text{ y } r_1^- < 0 \\ 0 & \text{si } r_1^+ \geq 0 \text{ y } r_1^- \leq 0 \end{cases}, \quad (3.62)$$

donde

$$r_1^+ = -\frac{1}{\epsilon_{s,n}} \frac{WD_1 + WD_2}{V_{bi} - V_A} (E - E_{C,n} + E_{g,n}) + WD_2, \quad (3.63)$$

$$r_1^- = -\frac{1}{\epsilon_{s,p}} \frac{WD_1 + WD_2}{V_{bi} - V_A} (E - E_{V,p}) - WD_1, \quad (3.64)$$

y el punto de retorno en la banda de conducción es

$$r_2(E) = \begin{cases} r_2^+ & \text{si } r_2^+ > 0 \text{ y } r_2^- > 0 \\ r_2^- & \text{si } r_2^+ < 0 \text{ y } r_2^- < 0 \\ 0 & \text{si } r_2^+ \geq 0 \text{ y } r_2^- \leq 0 \end{cases}, \quad (3.65)$$

donde

$$r_2^+ = -\frac{1}{\epsilon_{s,n}} \frac{WD_1 + WD_2}{V_{bi} - V_A} (E - E_{C,n}) + WD_2, \quad (3.66)$$

$$r_2^- = -\frac{1}{\epsilon_{s,p}} \frac{WD_1 + WD_2}{V_{bi} - V_A} (E - E_{V,p} - E_{g,p}) - WD_1, \quad (3.67)$$

Nuevo coeficiente túnel

La probabilidad de que un electrón sufra un proceso túnel a través de una barrera de potencial se puede obtener a partir de la aproximación WKB como

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \int_{r_2(E)}^{r_1(E)} |k(x, E)| dx \right], \quad (3.68)$$

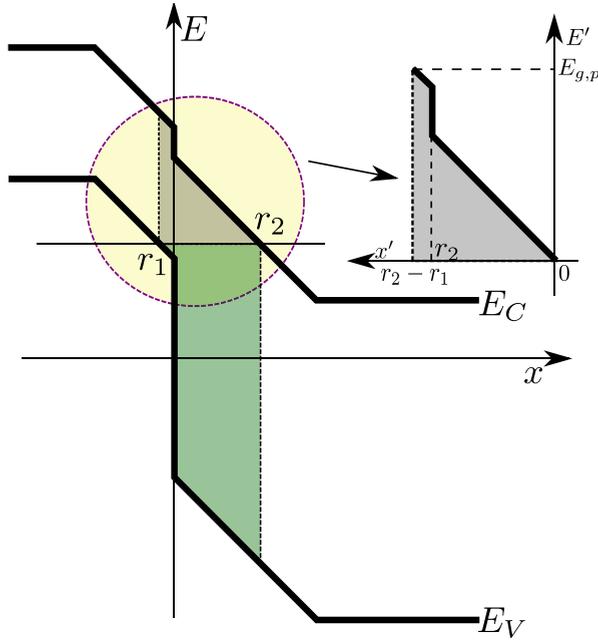


Figura 3.18: Representación esquemática de la barrera túnel y de los parámetros empleados para el cálculo del coeficiente túnel en la heterounión GaAs/ZnO.

y suponiendo una estructura de bandas parabólica

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \int_{r_2(E)}^{r_1(E)} \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar} (E_C - E)} dx \right], \quad (3.69)$$

que reescribiéndola según el cambio de variable indicado en la figura 3.18

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \int_0^{|r_2(E) - r_1(E)|} \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar} E_C} dx \right]. \quad (3.70)$$

Si empleamos las expresiones obtenidas anteriormente para las bandas de energía y para los puntos de retorno, se obtiene el coeficiente túnel para la heteroestructura considerada. Si se fija la posición de la unión metalúrgica en $r = 0$ se obtienen tres expresiones para el coeficiente túnel en función de la posición relativa de los puntos de retorno r_1 y r_2 . Así, si

$r_1(E) < 0$ y $r_2(E) > 0$ se tiene que

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \left(\int_0^{r_2(E)} \sqrt{\frac{2m_n^*}{\hbar^2} q_e \mathcal{E}_n x} dx + \int_{r_2(E)}^{|r_2(E)-r_1(E)|} \sqrt{\frac{2m_p^*}{\hbar^2} (q_e \mathcal{E}_p x + \Delta\chi)} dx \right) \right], \quad (3.71)$$

que integrando resulta en

$$T_t(E) \sim \exp \left\{ -\frac{4\sqrt{2}}{\hbar} \left[\sqrt{m_n^* q_e \mathcal{E}_n} r_2(E)^{3/2} + \frac{\sqrt{m_p^*}}{q_e \mathcal{E}_p} [q_e \mathcal{E}_p |r_2(E) - r_1(E)| - \Delta\chi]^{3/2} - [q_e \mathcal{E}_p r_2(E) - \Delta\chi]^{3/2} \right] \right\}. \quad (3.72)$$

La segunda posibilidad es que $r_1(E) > 0$ y $r_2(E) > 0$, entonces

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \int_0^{|r_2(E)-r_1(E)|} \sqrt{\frac{2m_n^*}{\hbar^2} q_e \mathcal{E}_n x} dx \right], \quad (3.73)$$

que una vez integrado queda

$$T_t(E) \sim \exp \left[-\frac{4\sqrt{2}}{\hbar} \sqrt{m_n^* q_e \mathcal{E}_n} |r_2(E) - r_1(E)|^{3/2} \right]. \quad (3.74)$$

Y la tercera y última posibilidad es que $r_1(E) < 0$ y $r_2(E) < 0$, resulta en

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \int_0^{|r_2(E)-r_1(E)|} \sqrt{\frac{2m_p^*}{\hbar^2} (q_e \mathcal{E}_p x + \Delta\chi)} dx \right], \quad (3.75)$$

que integrando queda

$$T_t(E) \sim \exp \left[-\frac{4\sqrt{2m_p^*}}{\hbar q_e \mathcal{E}_p} [q_e \mathcal{E}_p |r_2(E) - r_1(E)| - \Delta\chi]^{3/2} \right], \quad (3.76)$$

donde para las tres expresiones anteriores $\mathcal{E}_p = -\epsilon_{s,p} \frac{V_{bi}-V_A}{WD_1+WD_2}$ y $\mathcal{E}_n = -\epsilon_{s,n} \frac{V_{bi}-V_A}{WD_1+WD_2}$ es el campo eléctrico en la región de vaciamiento para las zonas P y N.

3.4.2. Cálculo de las bandas desdobladas

Las concentraciones de huecos p_p y electrones n_n obtenidas anteriormente a partir de las distancias relativas entre los límites de las bandas y el nivel de Fermi ε_p y ε_n (ecuaciones (3.58) y (3.59)) se emplean para calcular las concentraciones de cada tipo de portador, con carga y espín diferenciados, a partir de grados de polarización preestablecidos para los huecos en la zona P, \mathcal{R}_p , y electrones en la zona N, \mathcal{R}_n . Entonces, la concentración de huecos para cada espín es

$$p_p^\uparrow = p_p \frac{\mathcal{R}_p + 1}{2}, \quad (3.77)$$

$$p_p^\downarrow = p_p \frac{1 - \mathcal{R}_p}{2}, \quad (3.78)$$

y para los electrones

$$n_n^\uparrow = n_n \frac{\mathcal{R}_n + 1}{2}, \quad (3.79)$$

$$n_n^\downarrow = n_n \frac{1 - \mathcal{R}_n}{2}. \quad (3.80)$$

A partir de estas concentraciones de espín se pueden obtener las distancias entre el nivel de Fermi y las bandas desdobladas. Así las distancias relativas entre el nivel de Fermi y las bandas de conducción para espín arriba y abajo son

$$\varepsilon_p^\uparrow = k_B T F_{-1/2} \left(2 \frac{p_p^\uparrow}{N_{V,p}} \right), \quad (3.81)$$

$$\varepsilon_p^\downarrow = k_B T F_{-1/2} \left(2 \frac{p_p^\downarrow}{N_{V,p}} \right), \quad (3.82)$$

y entre el nivel de Fermi y la banda de valencia desdoblada son

$$\varepsilon_n^\uparrow = k_B T F_{-1/2} \left(2 \frac{n_n^\uparrow}{N_{C,n}} \right), \quad (3.83)$$

$$\varepsilon_n^\downarrow = k_B T F_{-1/2} \left(2 \frac{n_n^\downarrow}{N_{C,n}} \right). \quad (3.84)$$

Empleando estas distancias se pueden obtener los nuevos parámetros para el cálculo de la estructura de bandas desdobladas para cada espín. Así, los nuevos bordes de las bandas de valencia, para cada espín, en la región masiva P son

$$E_{V,p}^\sigma = E_{F,p} + \varepsilon_p^\sigma = \varepsilon_p^\sigma \quad (3.85)$$

y para la banda de conducción tenemos que

$$E_{C,p}^\sigma = E_{V,p}^\sigma + E_{g,p}. \quad (3.86)$$

Para región masiva N se obtiene que los bordes de las bandas de conducción, para cada espín, son

$$E_{C,n}^\sigma = q_e V_A - \varepsilon_n^\sigma \quad (3.87)$$

y de nuevo, restando el ancho de la banda prohibida se obtiene la energía de los bordes de las bandas de valencia desdobladas

$$E_{V,n}^\sigma = E_{C,n}^\sigma - E_{g,n}. \quad (3.88)$$

A partir de todo esto, se puede desarrollar las funciones definidas a trozos que modelizan las bandas de conducción y valencia para cada valor de espín y en toda la heterounión. Entonces las bandas de conducción vienen definidas por

$$E_C^\sigma(x) = \begin{cases} E_{V,p}^\sigma + E_{g,p} & \text{si } x < -WD_1 \\ -\varepsilon_{s,p} \frac{\psi_{bi-V_A}}{WD_1+WD_2} (x + WD_1) + E_{V,p}^\sigma + E_{g,p} & \text{si } -WD_1 \leq x < 0 \\ -\varepsilon_{s,n} \frac{\psi_{bi-V_A}}{WD_1+WD_2} (x + WD_2) + E_{C,n}^\sigma & \text{si } 0 \leq x < WD_2 \\ E_{C,n}^\sigma & \text{si } x \geq WD_2 \end{cases} \quad (3.89)$$

y las bandas de valencia por

$$E_V^\sigma(x) = \begin{cases} E_{V,p}^\sigma & \text{si } x < -WD_1 \\ -\varepsilon_{s,p} \frac{V_{bi-V_A}}{WD_1+WD_2} (x + WD_1) + E_{V,p}^\sigma & \text{si } -WD_1 \leq x < 0 \\ -\varepsilon_{s,n} \frac{V_{bi-V_A}}{WD_1+WD_2} (x + WD_2) + E_{C,n}^\sigma & \text{si } 0 \leq x < WD_2 \\ E_{C,n}^\sigma - E_{g,n} & \text{si } x \geq WD_2 \end{cases} \quad (3.90)$$

donde $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

Estas nuevas bandas serán las que se empleen para el calculo de los puntos de retorno clásicos y el coeficiente de transmisión túnel y así obtener la corriente túnel en las configuraciones paralela y antiparalela y por último la TMR correspondiente a cada polarización de espín.

3.5. Unión PN semiferromagnética

Como ya se ha mencionado anteriormente, el primer objetivo y punto de partida de este trabajo ha sido intentar reproducir un trabajo anterior [HLN⁺05] donde se analiza el compor-

tamiento de la corriente túnel a través de una unión PN de (Ga,Mn)As/GaAs, donde el lado P del diodo tiene propiedades ferromagnéticas que afectan a la estructura de bandas y por tanto a las características I-V del dispositivo. Ese trabajo es un intento de desarrollar un modelo que permita predecir como funcionaría un diodo que presente polarización de espín de los portadores de carga.

En resumen, el resultado interesante que se obtiene de ese trabajo previo es la disminución del máximo de corriente túnel cuando los portadores están parcialmente espín-polarizados. El grado de polarización de espín en los semiconductores magnéticos (DMS) se controla por medio de la concentración de impurezas magnéticas, en este caso Mn, añadidas al semiconductor anfitrión.

3.5.1. Resultados según el modelo analítico

Para analizar el comportamiento de esta estructura túnel se ha desarrollado un modelo analítico que permite obtener un buen primer acercamiento a la hora de predecir el comportamiento del diodo túnel. Para esto se aplica lo descrito en la sección 3.1.

Cambio en la densidad de portadores

Una primera aproximación para obtener una idea de como se va a comportar la corriente túnel es analizar el cambio en la distribución relativa de portadores en las bandas debido al desdoblamiento por polarización de espín. Para esto empleamos la integral de solapamiento, ecuación (3.10), que mide la superposición energética de los estados ocupados en la banda de conducción del lado N con los estados vacíos en la banda de valencia del lado P en el diodo. Los cálculos se realizan en el límite a muy bajas temperaturas ($T \sim 0$ K), de tal manera que los portadores llenarán completamente las bandas hasta la energía de Fermi.

Para realizar estos cálculos se han empleado los parámetros adecuados para el (Ga,Mn)As: $m^* = 0,5m_0$ para electrones y huecos, $E_g = 1,4$ eV, y se fijan las concentraciones de portadores a través de las distancias relativas de las bandas al nivel de Fermi $\varepsilon_n = 0,1$ eV y $\varepsilon_p = 0,3$ eV, siendo entonces el potencial de contacto $V_{bi} \approx 1,8$ V y el campo eléctrico se puede calcular fácilmente empleando la ecuaciones para una unión abrupta, ver [SN06], resultando $\mathcal{E} \approx 10^8$ V/cm.

En la figura 3.19 se muestran los resultados obtenidos para la integral de solapamiento para tres valores de desdoblamiento de las bandas: $\Delta = 0$ que corresponde con la situación en

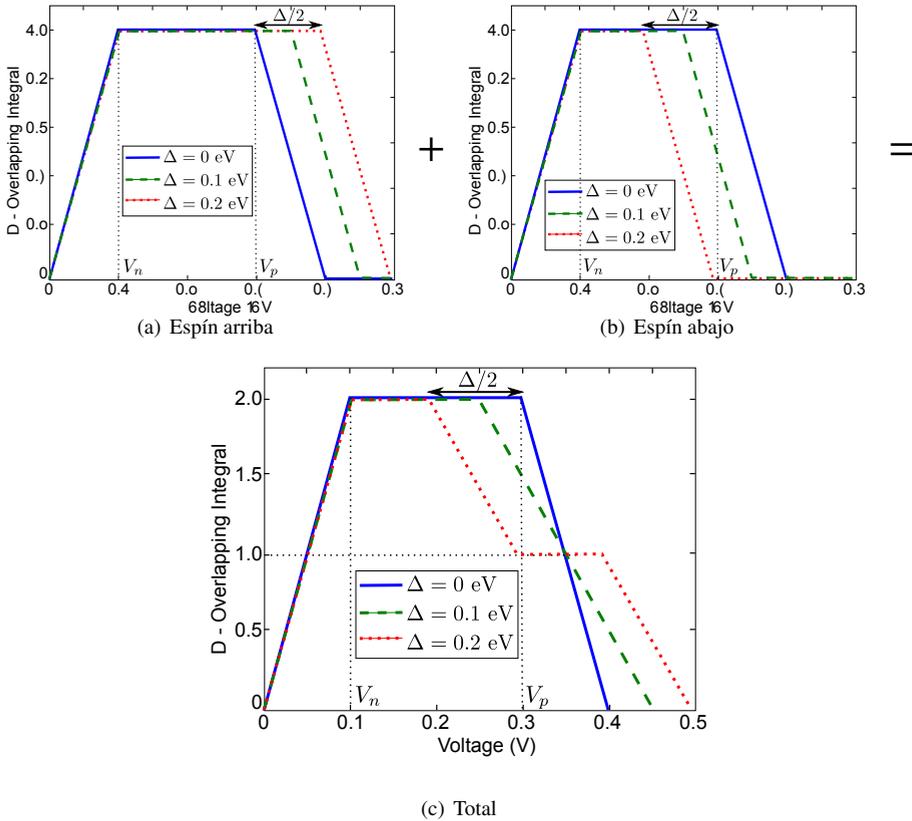


Figura 3.19: Evolución de la integral de solapamiento debido al desdoblamiento para el GaAs. La integral de solapamiento está calculada para valores de desdoblamiento de $\Delta = 0$, $\Delta = 0,1$ eV y $\Delta = 0,2$ eV. Las figuras ya predicen una reducción del valor de la corriente más allá del máximo de corriente túnel. Se muestran las dos contribuciones a la corriente túnel una correspondiente a los electrones con espín arriba (a) y otra para los electrones con espín abajo (b).

la que no hay polarización de espín y cuando las bandas se desdoblán 0,1 eV y 0,2 eV, que son los mismo valores empleados en el trabajo de Holmberg *et al.* [HLN⁺05].

Con los resultados obtenidos, es posible observar como la mayor variación en la corriente túnel se espera que suceda en la región de resistencia negativa, es decir, para tensiones aplicadas que estén entre la tensión para la corriente túnel máxima, V_P , y el mínimo de corriente antes de comenzar a cobrar importancia la corriente de difusión, V_V (ver figura 3.2). Además se observa que a medida que el grado de desdoblamiento de la banda de valencia aumenta, el solapamiento disminuye, lo que conducirá a corrientes túnel menores. Solamente para tensiones aplicadas donde la corriente túnel está cercana a desaparecer se consiguen mayores valores de solapamiento, pero en esa región, en torno a V_V , las otras componentes de la corriente total, la corriente de exceso y la corriente de difusión, están creciendo exponencialmente convirtiéndose en las componentes principales y ocultado el aumento de la corriente túnel.

Cambio en la corriente túnel

A continuación se muestran los resultados alcanzados para la corriente túnel a partir del modelo propuesto en [HLN⁺05], los resultados obtenidos se muestran en la figuras 3.20(a) y 3.20(b), la primera muestra los resultados de Holmberg *et al.* y la segunda corresponde a los resultados obtenidos a partir de la implementación del modelo analítico realizada en este trabajo.

Al comparar las figuras, se observa que los resultados son semejantes hasta alcanzar tensiones cercanas a $(\epsilon_n + \epsilon_p)/q_e$; en torno a este valor de tensión aplicada, los resultados obtenidos para la corriente túnel evolucionan de forma diferentes, especialmente en el caso de desdoblamiento $\Delta = 0,1$ eV donde la corriente túnel desaparece para tensiones $V_A > (\epsilon_n + \epsilon_p)/q_e$, en el caso de los resultados previos. La forma obtenida para la curva característica I-V resulta llamativa, dado que a partir de los resultados obtenidos para la integral de solapamiento, se esperaría una evolución diferente de la corriente para tensiones $V_A > (\epsilon_n + \epsilon_p)/q_e$, permitiendo esta valores de corriente túnel mayores que cero cuando hay polarización de portadores, tal y como ocurre en los resultados obtenidos a partir del modelo desarrollado en este trabajo. Sin embargo, la diferencia en los resultados de la componente túnel no es un impedimento para continuar, dado que, para estos valores de tensión aplicada, la corriente túnel no es la mayor contribución a la corriente total ya que la corriente de exceso y la corriente de difusión están

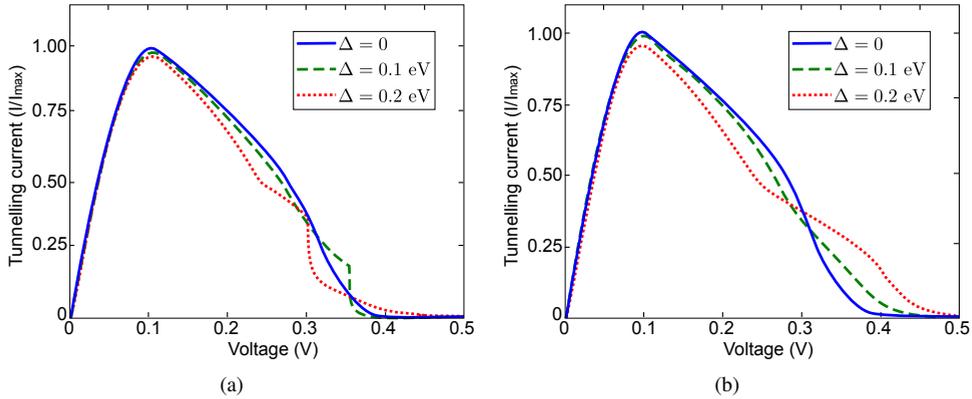


Figura 3.20: Corriente túnel para el diodo (Ga,Mn)As/GaAs obtenida a partir del modelo analítico. Valores de desdoblamiento $\Delta = 0$, $\Delta = 0,1$ eV y $\Delta = 0,2$ eV. (a) muestra los resultados obtenidos por Holmberg *et al.* [HLN⁺05] y (b) los nuevos resultados obtenidos a partir de la implementación del modelo realizada en este trabajo. En ambas figuras $\varepsilon_n = 0,1$ eV y $\varepsilon_p = 0,3$ eV, por lo que la corriente túnel no polarizada es máxima en $\text{mín}(\varepsilon_n, \varepsilon_p)/q_e = 0,1$ V y se hace cero para $V_A > (\varepsilon_n + \varepsilon_p)/q_e = 0,4$ V. Las diferencias en los resultados, entre las curvas con espín polarizado y sin polarizar, puede ser explicada en términos de la integral de solapamiento (3.19) que muestra que la corriente túnel puede ser mayor que cero para tensiones aplicadas mayores de 0,4 V.

creciendo rápidamente, ocultando el comportamiento de la corriente túnel que está cercana a desaparecer.

Por otro lado, en la región en torno a $V_P \sim \text{mín}(\varepsilon_n, \varepsilon_p)/q_e$, el comportamiento de la corriente túnel es similar, y se observa una disminución del valor máximo que alcanza la corriente túnel. Además, en la zona de resistencia negativa (región de la curva I-V donde la pendiente es negativa) la evolución de la corriente es muy dependiente con la polarización de espín en ambos casos, donde se obtienen disminuciones del valor de la corriente espín-polarizada de hasta un 30 % respecto de la corriente obtenida para la misma tensión aplicada pero sin polarización de espín.

A tenor de los resultados anteriores podemos concluir que el mayor cambio en la corriente ocurre a medio camino de la región de resistencia negativa y que ambas implementaciones del modelo de transporte en el diodo espín-polarizado muestran acuerdo hasta tensiones cercanas a V_V , y teniendo en cuenta que existen medidas experimentales que muestran que la polarización de espín en un material semiconductor ferromagnético tiende a disminuir a medida que las tensión aplicada sobre este aumenta, parece relevante concentrar la atención del análisis

del comportamiento de la corriente túnel para tensiones menores que V_V , más concretamente cuando $0 < V_A < \max(\varepsilon_n, \varepsilon_p)/q_e$.

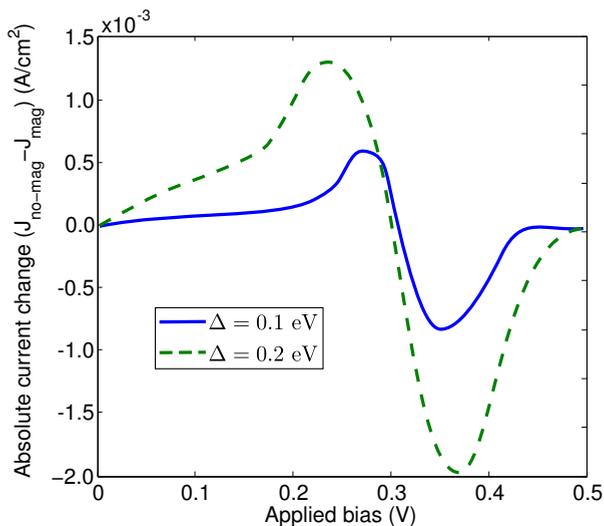


Figura 3.21: Cambio absoluto de la corriente túnel en un diodo semiferromagnético. Diferencia entre el valor de la corriente túnel sin polarización de espín y con desdoblamientos de las banda de valencia de $\Delta = 0,1$ eV (línea continua) y $\Delta = 0,2$ eV (línea discontinua).

La figura 3.21 muestra el cambio absoluto de la corriente túnel para los dos valores de desdoblamiento considerados, $\Delta = 0,1$ eV y $\Delta = 0,2$ eV. Como ya se menciono anteriormente, la mayor diferencia ocurre en la región de resistencia negativa, $V_P < V_A < V_V$, si no se tiene en cuenta la zona donde $V_A > V_V$ por lo dicho en el parrafo anterior. Estos resultados hacen pensar que la zona de resistencia negativa de un diodo túnel ferromagnético va a ser el rango ideal de tensiones para observar el efecto de la polarización de espín en este tipo de dispositivos y donde la magnetorresistencia túnel se manifestará con mayor intensidad en un diodo construido completamente con material ferromagnético.

Otro resultado interesante es comprobar la evolución de la corriente polarizada para valores de desdoblamiento mayores, esto está justificado porque existen trabajos experimentales donde se muestra que actualmente es posible alcanzar valores de polarización de espín de hasta un 80 % [DLR⁺04]. La figura 3.22 muestra los resultados obtenidos para valores de desdoblamiento del 80 % y del 90 % del desdoblamiento máximo $\Delta_{\text{máx}}$ (desdoblamiento necesario para que los portadores estén completamente espín-polarizados) de la banda de valencia, en

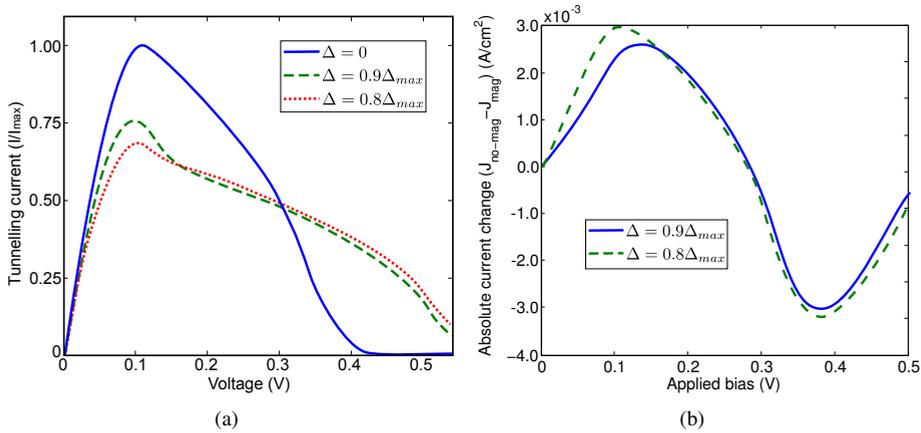


Figura 3.22: Diodo semiferromagnético con alto nivel de polarización: (a) muestra la corriente túnel para valores elevados de la polarización del espín de los huecos, esto es, 80 % (línea discontinua) y 90 % (línea punteada). Al incrementarse la polarización del espín, la corriente túnel disminuye provocando mayores diferencias con la corriente sin polarizar (b). En este caso se dan los desdoblamientos como una cantidad relativa al desdoblamiento máximo que es, para estas condiciones de dopado, de $\Delta_{m\acute{a}x} = 0,48$ eV.

las condiciones de dopado consideradas para el (Ga,Mn)As $\Delta_{m\acute{a}x} = 0,48$ eV. Se puede observar como la polarización de espín tiene una fuerte influencia sobre la máxima corriente que puede circular a través del diodo, obteniendo una reducción del valor de la corriente cercana al 50%. En este caso el mayor cambio en el valor de la corriente se obtiene para la tensión $V_A \sim V_P$. Además se observa un desplazamiento de la posición del máximo de la corriente túnel hacia un valor de tensión inferior debido a que el desdoblamiento de las bandas hace que el mayor valor de solapamiento ocurra para tensiones más pequeñas.

3.5.2. Resultados según modelo numérico

El siguiente paso es analizar la estructura empleando el simulador numérico desarrollado para estudiar el comportamiento del diodo desde un punto de vista lo más realista posible. Se analizan las mismas configuraciones que en el apartado anterior, para comprobar si la respuesta obtenida a partir del simulador numérico muestran acuerdo con lo obtenido a partir del modelo analítico y los resultados propuestos por Holmberg *et al.* [HLN⁺05].

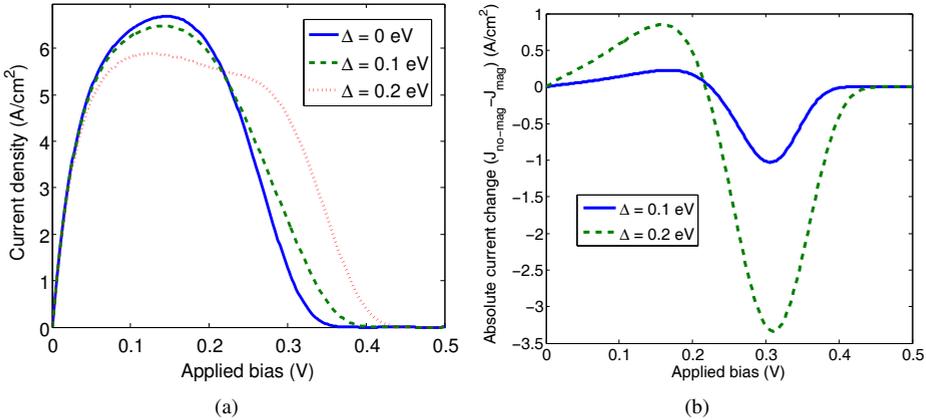


Figura 3.23: (a) Corriente túnel para el diodo (Ga,Mn)As/GaAs. Valores de desdoblamiento $\Delta = 0$, $\Delta = 0,1$ eV y $\Delta = 0,2$ eV. (b) Cambio absoluto de la corriente túnel en un diodo semiferromagnético: diferencia entre el valor de la corriente túnel sin polarización de espín y con desdoblamientos de las banda de valencia de $\Delta = 0,1$ eV (línea continua) y $\Delta = 0,2$ eV (línea discontinua). Resultados obtenidos a partir del simulador numérico considerando temperatura ambiente.

Cambio en la corriente túnel

Inicialmente, se analizan los resultados obtenidos para la corriente túnel desde el simulador numérico para una unión PN de $(\text{Ga}_{1-x}, \text{Mn}_x)\text{As}$. Las figuras 3.23 y 3.24 muestran la corriente túnel y el cambio absoluto de la corriente túnel obtenidas para una unión PN en las mismas condiciones de dopado y polarización de espín que en el apartado anterior, sin embargo ahora las simulaciones se han repetido en dos situaciones: considerando que el dispositivo se encuentra a temperatura ambiente (figura 3.23) o que se encuentra a una temperatura de 77 K (figura 3.24)

Al comparar las figuras con lo obtenido a partir del modelo analítico se observa que los resultados muestran cierto grado de similitud cuando los cálculos se realizan a temperatura ambiente. Sin embargo, cuando se simula el dispositivo a baja temperatura, se obtienen unos resultados que, aún manteniendo las características típicas de un diodo túnel en la respuesta I-V, difieren bastante de lo obtenido a partir del simulador analítico. Esto resulta paradójico, ya que al construir el modelo analítico se ha tomado el límite a temperatura 0 K, principalmente tomando la función de Fermi como una función escalón. De esta forma, los resultados obte-

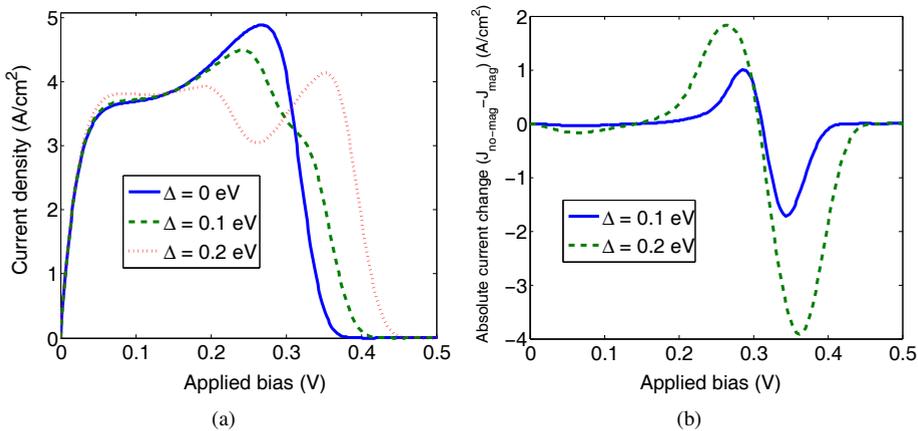


Figura 3.24: (a) Corriente túnel para el diodo (Ga,Mn)As/GaAs. Valores de desdoblamiento $\Delta = 0$, $\Delta = 0,1$ eV y $\Delta = 0,2$ eV. (b) Cambio absoluto de la corriente túnel en un diodo semiferromagnético: diferencia entre el valor de la corriente túnel sin polarización de espín y con desdoblamientos de las banda de valencia de $\Delta = 0,1$ eV (línea continua) y $\Delta = 0,2$ eV (línea discontinua). Resultados obtenidos a partir del simulador numérico considerando una temperatura en torno a 77 K.

nidos analíticamente deberían ser una asíntota para lo obtenido desde el simulador numérico a medida que se reduce la temperatura.

Esta diferencia se hace todavía más patente cuando se comparan los resultados obtenidos para altos niveles de polarización de espín, tanto a alta temperatura (figura 3.25) como a baja temperatura (figura 3.26). En este caso el comportamiento de la corriente cuando se polariza el espín de los portadores es claramente sorprendente ya que la simulación predice un aumento importante de la corriente (en torno al doble respecto de la situación sin polarización de espín) a medida que la polarización del espín de los portadores de carga crece.

Analizando en detalle los resultados obtenidos, se puede observar un desplazamiento del máximo de la corriente túnel hacia mayores valores de tensión aplicada, esto entra en contradicción con lo obtenido en el modelo analítico. Este desplazamiento se produce por dos medios: a través de la disminución de la temperatura o como consecuencia del aumento de la polarización de espín. Por otra parte también se observa como la modulación en la corriente a través del ferromagnetismo se hace más intensa a medida que la temperatura disminuye, algo esperable por dos motivos:

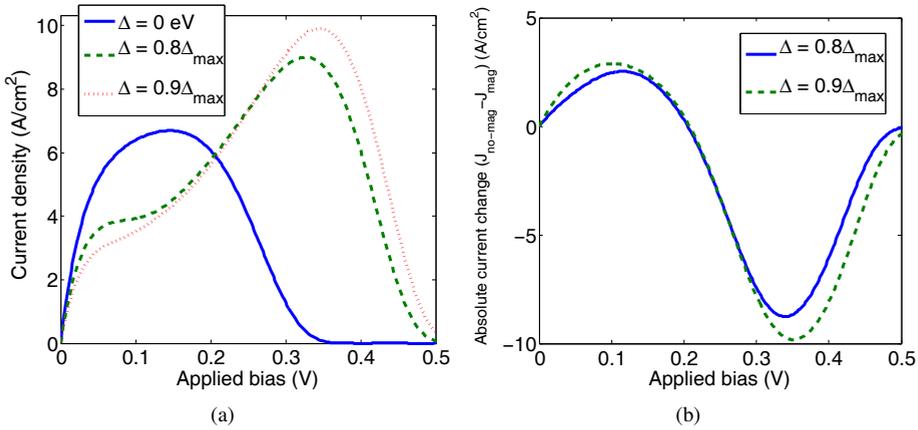


Figura 3.25: Diodo semiferromagnético con alto nivel de polarización: (a) muestra la corriente túnel para valores elevados de la polarización del espín de los huecos, esto es, 80 % (línea discontinua) y 90 % (línea punteada). Al incrementarse la polarización del espín, la corriente túnel disminuye provocando mayores diferencias con la corriente sin polarizar (b). En este caso se dan los desdoblamientos como una cantidad relativa al desdoblamiento máximo que es, para estas condiciones de dopado, de $\Delta_{\max} = 0,48$ eV. Resultados obtenidos a partir del simulador numérico considerando temperatura ambiente.

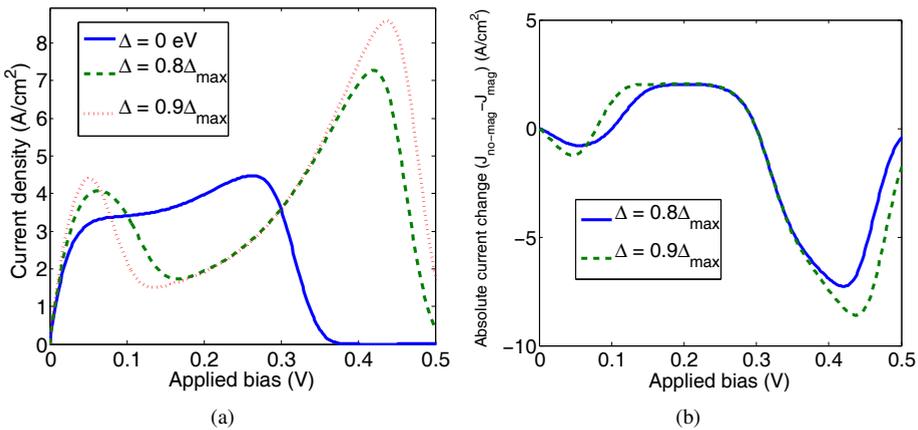


Figura 3.26: Diodo semiferromagnético con alto nivel de polarización: (a) muestra la corriente túnel para valores elevados de la polarización del espín de los huecos, esto es, 80 % (línea discontinua) y 90 % (línea punteada). Al incrementarse la polarización del espín, la corriente túnel disminuye provocando mayores diferencias con la corriente sin polarizar (b). En este caso se dan los desdoblamientos como una cantidad relativa al desdoblamiento máximo que es, para estas condiciones de dopado, de $\Delta_{\max} = 0,48$ eV. Resultados obtenidos a partir del simulador numérico considerando una temperatura en torno a 77 K.

1. A menor temperatura el acoplamiento magnético de los portadores de carga se hace más intenso y por tanto también la polarización del espín.
2. A menor temperatura los portadores tendrán menor energía cinética, lo que conducirá a que se sitúen en estados próximos a los bordes de las bandas de energía y por lo tanto su probabilidad de sufrir un proceso túnel sea mucho más dependiente del nivel de desdoblamiento de las bandas o lo que es equivalente del nivel de polarización de los portadores.

El origen fundamental en las diferencias obtenidas a partir de cada una de las aproximaciones se encuentra claramente en el efecto que estas tienen sobre el cálculo del transporte túnel:

- En el modelo analítico se considera un desdoblamiento constante de las bandas de energía en cada una de las regiones, lo cual provoca que se produzcan solapamientos de las densidades de estados permitidos para tensiones aplicadas más bajas que en el caso del simulador numérico. En este caso, lo que se considera constante es la polarización de espín, por lo que el desdoblamiento de las bandas de energía se reduce a medida que se forma la región vaciamiento. Así, solo con tensiones aplicadas mayores se conseguirá el mismo nivel de solapamiento en el caso analítico.
- La probabilidad de transición túnel en el caso analítico no tiene dependencia alguna con la forma de las bandas de energía y por lo tanto, estos se enfrentan a una barrera de potencial independiente del desdoblamiento de las bandas o de la tensión aplicada, tal y como se observa en las figuras 3.27(a) y 3.27(c). En el caso del simulador numérico el coeficiente de recombinación túnel se actualiza a medida que las bandas de energía se modifican, ya sea por desdoblamiento o por el cambio introducido por la tensión externa, figuras 3.27(b) y 3.27(b) creando una aproximación que se supone más próxima a la realidad.

La combinación de estos dos factores es lo que provoca la disminución de la corriente túnel para bajas tensiones aplicadas y el gran aumento de la corriente en la zona de resistencia negativa, respecto de los valores predichos por el simulador numérico.

Al igual que en el simulador analítico, en los resultados obtenidos a partir de la simulación numérica, las mayores diferencias en la densidad de corriente para cada una de las

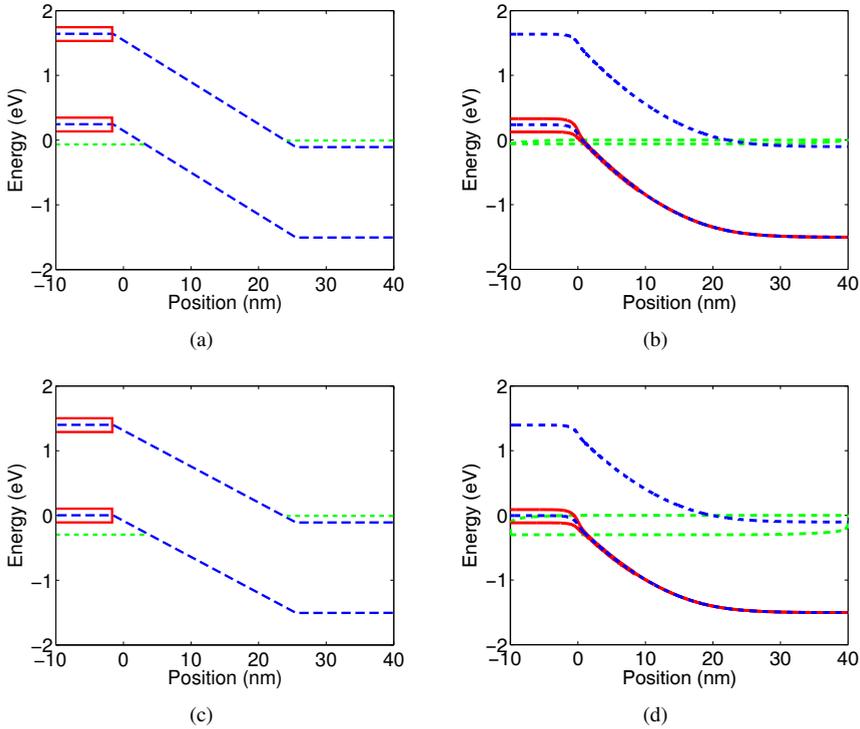


Figura 3.27: Diagramas de bandas de energía en el modelo analítico y el simulador numérico para una unión semi-ferromagnética de (Ga,Mn)As/GaAs para una tensión inferior a $V_P \sim 0,1$ V ($V_A \sim 0,05$ V) (a) y (b), y para una tensión esta en la NRR ($V_A \sim 0,3$ V) (c) y (d), respectivamente. Se muestran las bandas en el diodo no-magnético (líneas azules discontinuas), las nuevas bandas creadas por la polarización de espín (líneas rojas continuas) y los pseudoniveles de Fermi (líneas verdes discontinuas).

configuraciones ocurren en la zona de resistencia negativa. Lo cual concuerda con lo observado en dispositivos experimentales y con lo ya obtenido hasta ahora. A pesar de las diferencias enumeradas anteriormente el modelo analítico tiene todavía gran interés y como se verá en los siguientes apartados, puede aportar información sobre el comportamiento de este tipo de estructuras de forma rápida y sin apenas coste computacional.

3.6. Diodo totalmente ferromagnético

A continuación se analizarán diodos que presentan comportamiento ferromagnético tanto en la zona P como en la zona N. Esto permitirá un mayor control de la corriente túnel y además posibilitará la aparición de la magnetorresistencia túnel (TMR), al poder crear interacciones ferromagnéticas y antiferromagnéticas entre ambos lados del diodo.

3.6.1. Resultados según modelo analítico

En este apartado se van a mostrar los resultados obtenidos para la extensión del modelo propuesto por Holmberg *et al.* [HLN⁺05] para considerar un diodo con propiedades ferromagnéticas en ambos lados de la unión.

Para tratar de obtener la mayor información posible acerca del comportamiento de la corriente túnel y de la magneto-resistencia túnel en esta nueva configuración, se proponen dos distribuciones de los niveles de energía que se muestran en la figura 3.28. En la primera, figura 3.28(a), los portadores alcanzan mayores energías cinéticas de forma secuencial, es decir, los huecos con espín arriba tienen los mayores valores de energía seguidos de los huecos con espín abajo, los electrones con espín abajo y los electrones con espín arriba que tienen los menores valores de energía cinética; es decir, los mayores valores de energía se encuentran en la banda de valencia y los menores en la banda de conducción. En la segunda distribución de energías, figura 3.28(b), se propone una distribución alternativa de los valores de energía cinética entre las dos bandas, es decir, los portadores con mayor energía son los huecos con espín arriba y los electrones con espín abajo, en este orden, y los de menor energía son los huecos con espín abajo y los electrones con espín arriba.

(Ga,Mn)As

Para conseguir estas distribuciones de las bandas de valencia y conducción se han fijado diferentes valores para los desdoblamientos Δ_n y Δ_p . En el diodo de (Ga,Mn)As $\varepsilon_n = 0,1$ eV y $\varepsilon_p = 0,3$ eV. Teniendo esto en cuenta, en el primer caso se han escogido valores pequeños del desdoblamiento de las bandas para garantizar que $E_2 > E_3$. Los valores escogidos son $\Delta_p = 0,2\Delta_p^{\text{máx}}$ y $\Delta_n = 0,2\Delta_n^{\text{máx}}$, esto es, una polarización de espín del 20 % en cada lado. Los valores absolutos de los desdoblamientos en este caso son $\Delta_p \sim 0,1$ eV y $\Delta_n \sim 0,03$ eV. En el segundo caso, es necesario desdoblar las bandas para garantizar que $E_2 < E_3$, es decir, que los electrones para un tipo dado de espín alcancen mayores energías cinéticas que los

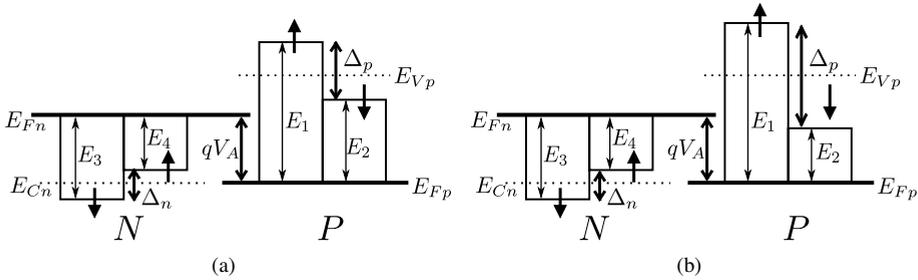


Figura 3.28: Distribución de las bandas de energía. Para calcular la corriente túnel se han empleado dos distribuciones diferentes de los niveles de energía de tal manera que en (a) tenemos un ordenamiento secuencial de los valores de energía cinética de los portadores $E_1 > E_2 > E_3 > E_4$ y en (b) un ordenamiento alternado entre las dos bandas $E_1 > E_3 > E_2 > E_4$.

huecos para otro tipo de espín. Además hay que limitar los desdoblamientos para garantizar que $E_2 > E_4$, para mantener el carácter alternado. En este caso se han escogido valores de desdoblamiento tales que la polarización de espín alcanza el 70% en ambos lados, resultando en valores absolutos de $\Delta_p = 0,3$ eV y $\Delta_n = 0,1$ eV. Notar que este caso podría parecer una situación de polarización total, dado que $\varepsilon_n = 0,1$ eV y $\varepsilon_p = 0,3$ eV; sin embargo, hay que recordar que el nivel de Fermi se va a desplazar a un mayor valor de energía cinética para garantizar la neutralidad de carga (ver apartado 3.2.2).

Los resultados obtenidos para la corriente túnel en ambas configuraciones se muestran en las figuras 3.29, la primera columna muestra los resultados para el ordenamiento secuencial de las energías de las bandas, que corresponde con una polarización de espín del 20%, y la segunda muestra los resultados para el ordenamiento de energías alternado, con polarización de espín del 70%. En cada columna se muestran la respuesta I-V del diodo junto con el valor obtenido para la magnetoresistencia túnel (TMR), figuras 3.29(a) y 3.29(b), y el valor de la diferencia absoluta (ACC) entre la corriente túnel sin y con polarización de espín calculada según la expresión

$$ACC = I_{\text{no-magnética}} - \frac{I_{\text{paralela}} + I_{\text{antiparalela}}}{2}, \quad (3.91)$$

figuras 3.29(c) y 3.29(d).

Claramente se observa como el caso con una mayor polarización de espín conduce a una mayor diferencia entre la configuración paralela y la antiparalela, como era de esperar. En el caso de la configuración paralela el valor de corriente llega a ser mayor incluso que la corrien-

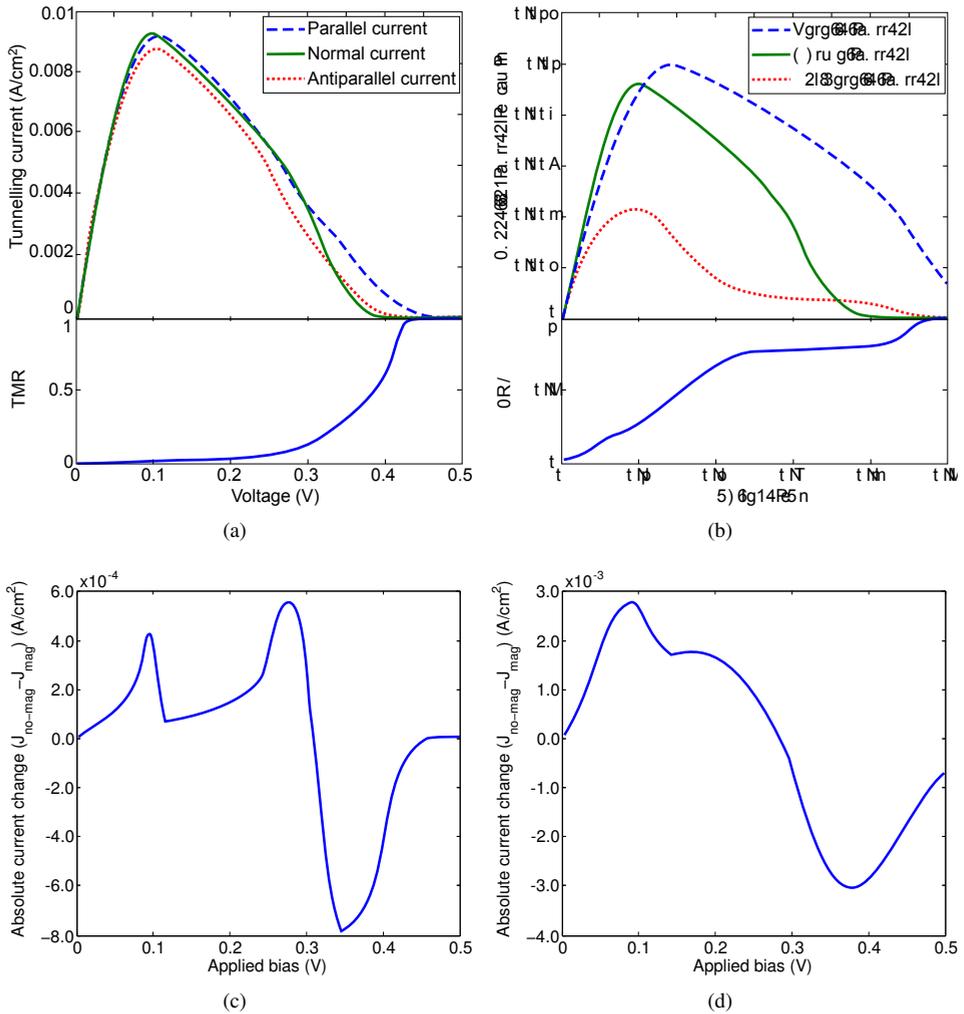


Figura 3.29: Corriente túnel en un diodo de GaAs completamente ferromagnético: (a) y (c) muestran los resultados obtenidos para la corriente túnel, la magnetoresistencia túnel y la variación absoluta de la corriente para la configuración con un bajo nivel de polarización de espín, del 20 %. (b) y (d) muestran los mismos parámetros pero para la configuración con alto nivel de polarización de espín, del 70 %.

te con espín no polarizado en ambos casos, este resultado es razonable por que al desdoblarse las bandas los portadores con espín mayoritario alcanzan mayores energías cinéticas, lo que favorece el incremento del valor de la corriente en la configuración paralela a medida que la tensión aplicada aumenta respecto del valor no polarizado. Además, al crecer la polarización de espín la corriente disminuye en la configuración antiparalela al haber menos portadores disponibles para recombinar. Por otro lado, se observa un desplazamiento del máximo de corriente túnel debido a la modificación de la distribución de estados en la banda de conducción y valencia.

Estos resultados se muestran más claramente a partir de la evolución de la TMR, figuras 3.29(a) y 3.29(b), donde se puede ver la diferencia del valor de la corriente en la configuración paralela y la antiparalela. Es interesante observar como la TMR aumenta progresivamente hasta que la tensión aplicada alcanza el valor intermedio entre V_P y V_V , es decir, alcanza un valor a medio camino de la zona de resistencia negativa. Como ya se ha mencionado antes, los valores posteriores a esa tensión no son fiables, porque ya habría que tener en cuenta las otras contribuciones a la corriente total para obtener un valor real de la TMR; de hecho, es de esperar que a medida que la corriente túnel pierde peso, la diferencia entre las configuraciones paralela y antiparalela disminuya, dando lugar a una TMR decreciente a medida que la tensión aplicada se acerca a V_V y la supera. A pesar de esto, se puede ver que incluso a bajo nivel de polarización es factible obtener valores de la TMR cercanos al 10 %. En el caso de alta polarización la estimación de la TMR sugiere que se pueden obtener fácilmente valores del 80 % en la zona de resistencia negativa. Es interesante también tener en cuenta los valores obtenidos para la TMR para la tensión V_P donde se obtienen valores de en torno al 2 % para baja polarización y al 30 % para alto nivel de polarización de espín.

Las dos últimas figuras, 3.29(c) y 3.29(d), muestra la variación que la magnetización provoca en el valor de la corriente. En principio, se supone que no se puede distinguir entre la configuración paralela y la antiparalela, por lo tanto se promedia el valor de la corriente en ambas configuraciones, para obtener un valor medio de la desviación que la polarización de espín causa en el valor de la corriente túnel. Las variaciones máximas obtenidas son de entorno al 4 % para baja polarización de espín, ocurriendo esta para una tensión intermedia entre V_P y V_V y del 30 % para alta polarización de espín, en este caso el valor máximo ocurre para una tensión V_P . De esta forma es entonces posible observar el efecto de la magnetización en la corriente, aunque esta medida se muestra menos intensa y con un comportamiento menos sistemático que la TMR.

(Zn,Co)O

El ZnO da la oportunidad de estudiar el comportamiento introducido por el ferromagnetismo en condiciones muy diferentes: primero, ahora la unión es N^+P en lugar de P^+N , como ocurre con el (Ga,Mn)As, dado que en este óxido se puede modificar fácilmente la concentración de electrones en la banda de conducción mediante el control del nivel de dopado con Al que actúa como donador. Segundo, se incrementa la diferencia entre las energías de Fermi medidas respecto al borde de las bandas de conducción y valencia, así si para el GaAs la relación típica era 1:3, para el ZnO esta relación puede alcanzar fácilmente valores entre 10:1 y 20:1 dependiendo, por supuesto, de la concentración de portadores con que se trabaje. Tercero, el ZnO es un semiconductor con una banda de energías prohibidas muy ancha, de 3,4 eV, lo que va a favorecer la distinción entre la componente túnel y la corriente de difusión, al crecer esta más lentamente por tener potenciales de contacto más elevados. Y cuarto, existe un creciente interés en el estudio del ZnO debido a las buenas propiedades que presenta para crecer materiales semiconductores magnéticos tipo N y a que se consiguen temperatura de transición ferromagnética, T_C , por encima de la temperatura ambiente en estos materiales [DOM⁺00] [GBB⁺06] [PNI⁺03].

Para realizar los cálculos se han empleado los siguiente conjunto de parámetros obtenidos de [PNI⁺03]: $N_D = 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $E_g = 3,4 \text{ eV}$, $m_e^* = 0,24m_0$ y $m_h^* = 0,59m_0$. De nuevo, se está considerando el límite a bajas temperaturas, $T \rightarrow 0$, y para estos valores de concentración de portadores, suponiendo ionización completa de las impurezas donadoras y aceptoras, las energías de Fermi relativas a los bordes de las bandas son $\varepsilon_n = 0,20 \text{ eV}$ y $\varepsilon_p = 0,017 \text{ eV}$.

Los resultados obtenidos se muestran en la figura 3.30 para las dos configuraciones de energías comentadas anteriormente. Los valores absolutos de los desdoblamientos son de $\Delta_n = 0,06 \text{ eV}$ y $\Delta_p = 0,0005 \text{ eV}$ cuando la polarización de espín es del 20 % y $\Delta_n = 0,2 \text{ eV}$ y $\Delta_p = 0,02 \text{ eV}$ para el 70 % de polarización de espín. En las figuras 3.30(a) y 3.30(b) se puede ver como para este material, los valores de TMR obtenidos para bajas tensiones aplicadas son mayores que en el caso del (Ga,Mn)As. Además, la TMR presenta un comportamiento más estable en la región de resistencia negativa, tomando un valor que se mantiene constante en prácticamente constante en toda la región. Estos resultados hacen pensar que el hecho de que la unión sea altamente asimétrica favorece la observación del efecto del magnetismo en el transporte a través del diodo.

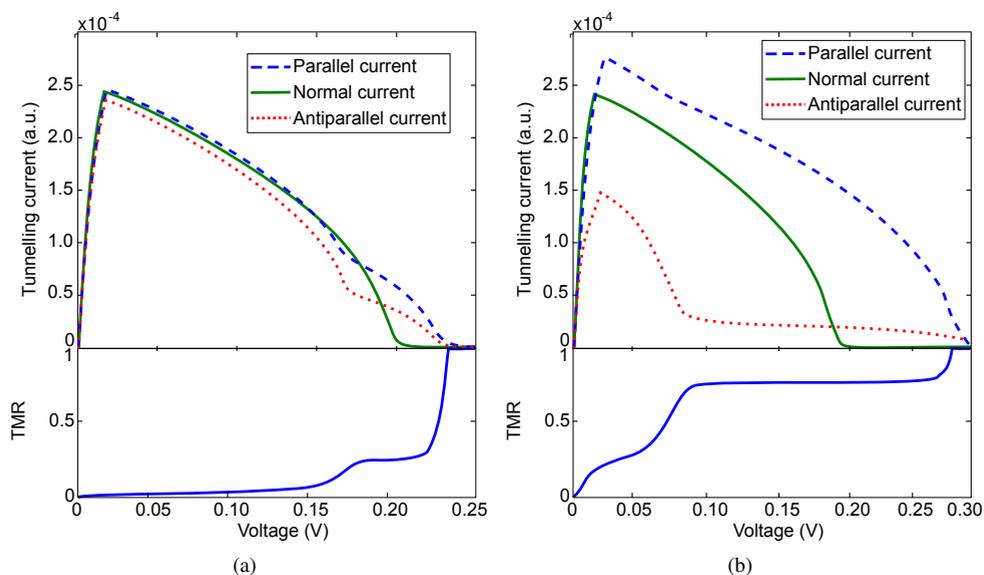


Figura 3.30: Corriente túnel en un diodo de ZnO completamente ferromagnético: (a) muestra los resultados obtenidos para la corriente túnel y la magnetoresistencia túnel para la configuración con un bajo nivel de polarización de espín, del 20 %. (b) muestra los mismos parámetros pero para la configuración con alto nivel de polarización de espín, del 70 %.

3.6.2. Resultados según modelo numérico

A continuación se analizan los resultados obtenidos usando el simulador numérico para el diodo completamente ferromagnético.

En las simulaciones mostradas a continuación se ha supuesto que la polarización de espín permanece constante en cada región del dispositivo. Para analizar las configuraciones paralela y antiparalela, que se corresponden con la interacción ferromagnética y antiferromagnética entre los lados P y N, consideramos que el espín medio conmuta en la región de vaciamiento, donde la concentración de portadores alcanza su mínimo. En esta zona la interacción de intercambio entre las impurezas magnéticas será más débil ya que no hay portadores que medien en el acoplamiento de los momentos magnéticos asociados a las impurezas.

(Ga,Mn)As

La corriente túnel para las configuraciones ferromagnéticas se ha calculado para un conjunto de parámetros adecuados para el GaAs, ver tabla 3.1. Se muestran los resultados en dos casos, cuando $\varepsilon_n = \varepsilon_p$, es decir, cuando ambos lados presentan el mismo nivel de degeneración, y cuando $\varepsilon_n < \varepsilon_p$, la situación más realista cuando hablamos de GaAs dopado con Co o Mn. La temperatura se sitúa en 77 K, un valor estándar en el laboratorio que está por debajo de la temperatura de Curie más alta conocida para el GaAs ferromagnético ($T_C \sim 164$ K). La figura 3.31(a) muestra el diagrama de bandas de energía obtenido para un diodo de GaAs con el mismo nivel de degeneración en cada lado. Se ha escogido $\varepsilon_{n,p} = 0,2$ eV ya que las concentraciones de portadores correspondientes están en el rango de los dispositivos experimentales. Notar que la región de vaciamiento en el lado P es mucho más pequeña debido a la diferencia de un orden de magnitud entre la densidad de estados en la banda de conducción y la banda de valencia, siendo, por lo tanto, necesario un nivel de dopado más alto en esta región P para obtener el mismo nivel de degeneración. En la figura 3.31(a) también se muestra las bandas desdobladas debido a la polarización de espín si se considera una polarización del 90 %. Los límites de las bandas de energía para cada valor de espín pueden ser identificadas usando el esquema de colores mostrado en la figura 3.16. La figura 3.31(b) muestra que la TMR es pequeño cuando la tensión aplicada es menos de $\varepsilon_S/q_e = \text{mín}(\varepsilon_n, \varepsilon_p)/q_e \sim 0,2$ V y crece rápidamente en la región de resistencia negativa, por lo tanto del efecto de la polarización de espín será más fácilmente observable en la zona de resistencia negativa.

La figura 3.32 muestra las densidades de corriente paralela y antiparalela calculadas para diferentes polarizaciones de espín a 77 K, para un diodo con el mismo nivel de degeneración en ambos lados. La tensión aplicada se ha escogido de tal forma que esté en mitad de la zona de resistencia negativa, $V = 0,25$ V, siendo este un valor de compromiso entre el creciente TMR obtenido a partir de las simulaciones y, la posible degeneración de la TMR debido a procesos túnel asistidos por trampas y componentes de difusión que no tenemos en cuenta en nuestras simulaciones. Como era esperado, la TMR muestra mayores valores según crece la polarización de espín y, a esta tensión aplicada, muestra buen acuerdo con los valores predichos a partir de la fórmula de Jullière [Jul75]:

$$\text{TMR} = \frac{2 \times P_{left} \times P_{right}}{1 + P_{left} \times P_{right}}, \quad (3.92)$$

donde P_{left} y P_{right} son los niveles de polarización en los lados izquierdo y derecho de la unión, respectivamente, es decir, en el lado P y en el lado N.

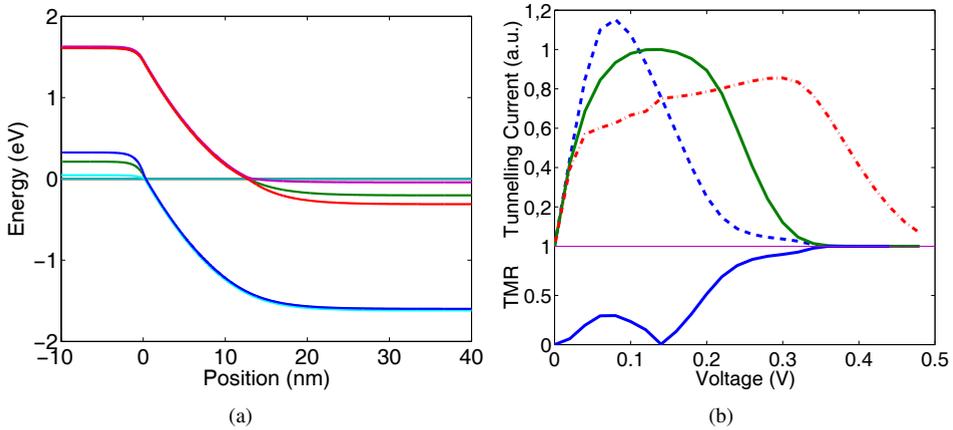


Figura 3.31: (a) Estructura de bandas para un diodo ferromagnético de GaAs con el mismo nivel de degeneración en cada lado, $\varepsilon_{n,p} = 0,2$ eV, lo que corresponde con una concentración de huecos de $1,5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ en la región masiva P y una concentración de electrones de $7,3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ en la región masiva N. (b) Densidad de corriente túnel para un diodo no ferromagnético (línea verde continua), para la configuración paralela (línea discontinua azul) y la configuración antiparalela (línea discontinua y punteada roja); también se muestra la TMR (línea azul continua). Ambos resultados se obtuvieron suponiendo una polarización constante de espín del 90 %.

Aún esperando cierto acuerdo con la predicción de Jullière, estas coincidencias son sorprendentes porque la teoría expuesta por Jullière fue formulada para estructuras túnel compuestas de dos electrodos metálicos y ferromagnéticos (Fe, Co, Pb) con una capa de semiconductor (Ge) en medio actuando como barrera túnel. Además, las medidas en las que se soporta esta teoría fueron hechas a muy bajas temperaturas (4,7 K). Por lo tanto, es razonable esperar un mejor acuerdo entre nuestros resultados y aquellos de Jullière a bajas temperaturas pero nosotros encontramos lo contrario. Quizá fuese necesario más análisis en este sentido para entender mejor este efecto. Sin embargo, es conveniente recordar que nuestra estructura es una unión túnel bipolar (con ambas bandas, conducción y valencia, participando en la conducción), mientras que la estructura analizada por Jullière es un dispositivo unipolar (donde solo la banda de conducción es relevante), y las propiedades de la barrera túnel son muy dependientes del potencial aplicado y el grado de polarización de espín.

Los cálculos se repiten para una configuración más realista, esto es, considerando diferentes niveles de degeneración en ambos lados de la unión. En este caso, consideramos las concentraciones de portadores observadas en los experimentos, concentración de huecos de $2,5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ en la región masiva P y concentración de electrones de $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ en

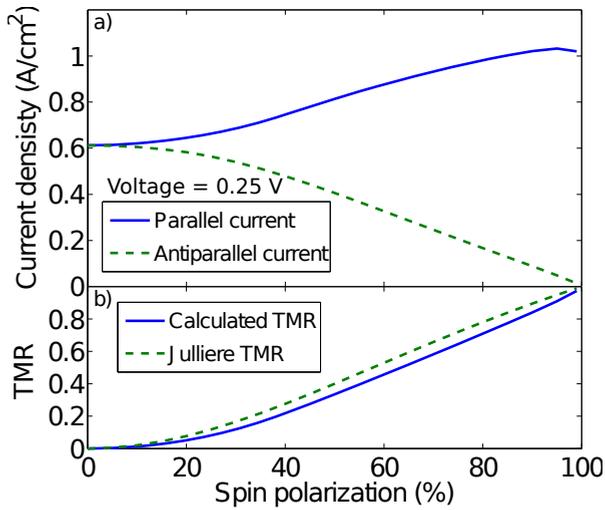


Figura 3.32: Densidades de corriente paralela y antiparalela y la TMR calculadas para diferentes polarizaciones de espín a 77 K para un diodo de GaAs con el mismo nivel de degeneración en ambos lados.

la región masiva N. Esto conduce a unos niveles de degeneración de $\varepsilon_L = \varepsilon_p = 0,3$ eV y $\varepsilon_S = \varepsilon_n = 0,1$ eV. La tensión aplicada seleccionada para extraer la TMR es de nuevo 0,25 V dado que el máximo de la corriente túnel está en torno a 0,1 V y desaparecerá en torno a 0,4 V. Estos resultados se muestran en la figura 3.33.

(Zn,Co)O

En el caso de un diodo basado en ZnO, se ha seguido el mismo procedimiento que en GaAs, pero esta vez usando los parámetros listados en la tabla 3.2. Se muestran los resultados en dos caso: cuando $\varepsilon_n = \varepsilon_p$, es decir, ambos lados con el mismo nivel de degeneración y, cuando $\varepsilon_p < \varepsilon_n$, que es la configuración más realista para ZnO dopado con Co o Mn que es de forma natural un semiconductor tipo N. Además se han realizado los cálculos a una temperatura de 77 K para posibilitar la comparación directa con los resultados obtenidos para el diodo basado en GaAs. Pero en este caso también se han hecho simulaciones a 300 K ya que la temperatura de Curie para el ZnO se espera que sea mayor que la temperatura ambiente. La figura 3.34(a) muestra el diagrama de bandas obtenido para un diodo de ZnO con el mismo nivel de degeneración en ambos lados, que hemos escogido de nuevo $\varepsilon_{n,p} = 0,2$ eV.

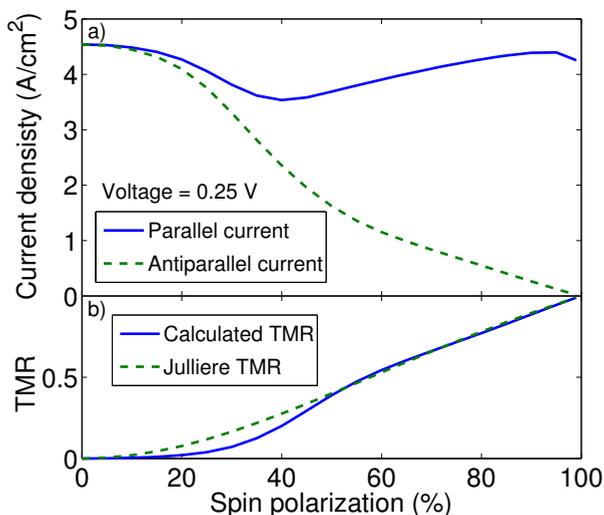


Figura 3.33: Densidades de corriente paralela y antiparalela y la TMR calculadas para diferentes polarizaciones de espín a 77 K para un diodo de GaAs con niveles de degeneración de $\varepsilon_p = 0,3$ eV and $\varepsilon_n = 0,1$ eV

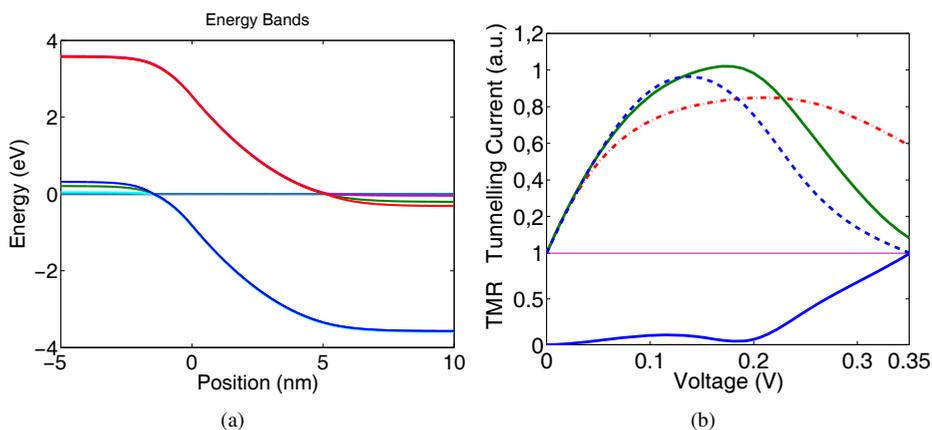
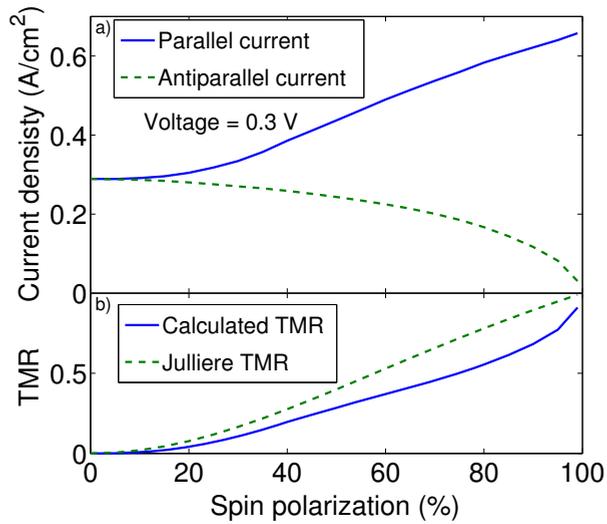


Figura 3.34: (a) Diagrama de bandas para un diodo ferromagnético de ZnO con el mismo nivel de degeneración en ambos lados, $\varepsilon_{n,p} = 0,2$ eV, lo cual corresponde con una concentración de huecos de $1,7 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ en la región masiva P y una concentración del electrones de $6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ en la región masiva N. (b) Densidad de corriente túnel para un diodo no ferromagnético (línea verde continua), para la configuración paralela (línea discontinua azul) y la configuración antiparalela (línea discontinua y punteada roja); también se muestra la TMR (línea azul continua). Ambos resultados se obtuvieron suponiendo una polarización constante de espín del 90 %.

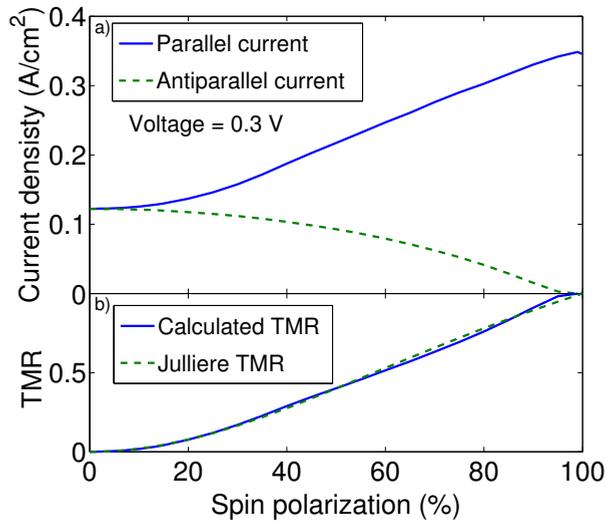
Ahora las regiones de vaciamiento tienen tamaños similares debido a que las densidades de estados en la banda de conducción y en la banda de valencia están más cercanas. De nuevo, la figura 3.34(a) muestra las bandas de energía desdobladas considerando una polarización de espín del 90 %, donde la banda para cada espín puede identificarse usando el esquema de colores mostrado en la figura 3.16. El ZnO posee una banda prohibida más ancha que el GaAs, lo que produce una región de vaciamiento más estrecha y entonces la barrera túnel equivalente también será más estrecha, lo que equivaldría a mayores valores de corriente túnel. Sin embargo, la corriente túnel es proporcional a la raíz cuadrada de las masas túnel de los portadores involucrados, ecuación (3.4), que son difíciles de determinar, lo que hace necesaria su calibración mediante medidas experimentales. Por lo tanto, nuestros resultados están normalizados al valor máximo de la corriente túnel en el caso no magnético porque, además, el valor de la TMR no depende del valor absoluto de las corrientes pero si de la diferencia relativa entre las configuraciones paralela y antiparalela.

Las densidades de corriente en las configuraciones paralela y antiparalela y la TMR para un diodo de ZnO con el mismo nivel de degeneración se muestran en la figura 3.35(a) para una temperatura de 77 K y en la figura 3.35(b) para 300 K. En este caso, la tensión aplicada escogida para extraer la TMR en la zona de resistencia negativa es $V = 0,3$ V ya que el pico en la corriente túnel debería aparecer en torno a 0,2 V y debería hacerse cero en torno a 0,4 V. De nuevo la TMR muestra mayores valores según aumenta la polarización de espín y seguimos teniendo buen acuerdo con los valores predichos a partir de la fórmula de Jullière, especialmente a 300 K donde los resultados de la simulación son prácticamente iguales a los valores predichos. A 77 K la formula de Jullière sobreestima los valores de la TMR siendo mayor el desacuerdo que en el caso del GaAs.

Los calculos se han repetido de nuevo para considerar la configuración más realista en este caso, es decir, correspondiente al caso con diferentes niveles de degeneración en ambos lados de la unión. En este caso las concentraciones de portadores se hacen coincidir con lo observado en los experimentos: un concentración de huecos de $3,1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ en la región masiva P y una concentración de electrones de $1,3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ en la región masiva N, para tener en cuenta el carácter N del ZnO. Estas concentraciones de portadores resultan en niveles de degeneración de $\varepsilon_S = \varepsilon_p = 0,017$ eV y $\varepsilon_L = \varepsilon_n = 0,2$ eV. El valor de tensión seleccionado para extraer la TMR es 0,12 V ya que el máximo de la corriente túnel se espera que ocurra en torno a 0,02 V y que este desaparezca en torno a 0,2 V. Los resultados se muestran en la figura 3.36(a) para simulaciones hechas a 77 K y en la figura 3.36(b) para 300 K.

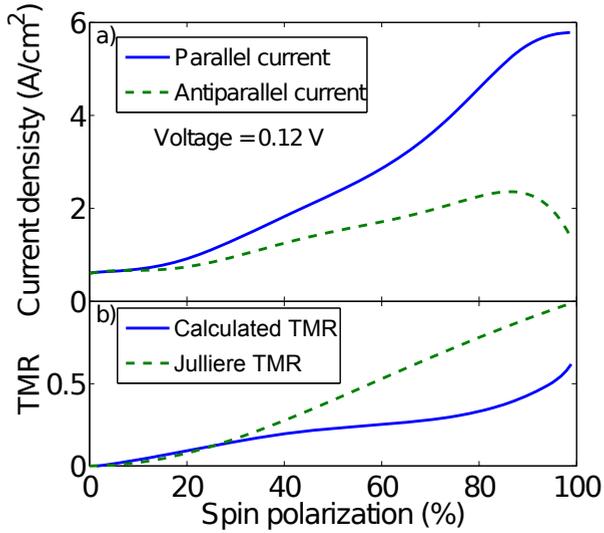


(a)

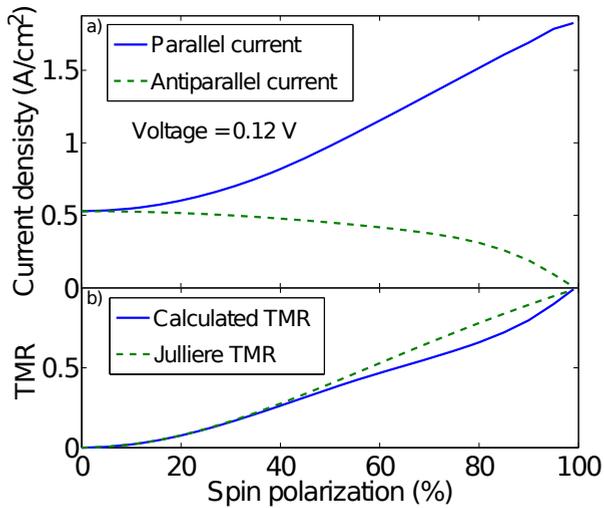


(b)

Figura 3.35: Densidades de corriente paralela y antiparalela y la TMR calculadas para diferentes polarizaciones de espín para un diodo de ZnO con el mismo nivel de degeneración en ambos lados a (a) 77 K y (b) 300 K.



(a)



(b)

Figura 3.36: Densidades de corriente paralela y antiparalela y la TMR, calculadas a diferentes niveles de polarización de espín para un diodo ferromagnético de ZnO con niveles de degeneración de $\epsilon_p = 0,3$ eV y $\epsilon_n = 0,1$ eV a (a) 77 K y (b) 300 K.

Una vez más, los resultados a 300 K muestran mejor acuerdo con la TMR predicha usando la fórmula de Jullière en los dos casos presentados para el ZnO. Además, en el último caso a baja temperatura (figura 3.36(a)) la corriente antiparalela muestra un comportamiento diferente a lo observado en las otras configuraciones: crece de forma continuada con el nivel de polarización de espín hasta que este alcanza un 90 %, a partir de ese momento decrece rápidamente. El origen de este fenómeno es la combinación de tres factores:

1. La distribución en la energía de los portadores en la banda de valencia y en la banda de conducción viene descrita por la función de Fermi-Dirac. Entonces, a bajas temperaturas la energía cinética de los portadores disminuye y provoca que estos ocupen estados cercanos a los bordes de las bandas de energía, lo que los hace más disponibles a sufrir procesos túnel, que se verá reflejado en el incremento del factor de solapamiento entre la bandas tal y como se describe en la ecuación (3.10).
2. La baja concentración de huecos en el lado P produce un nivel de degeneración muy inferior respecto al valor en el lado N, tal y como se observa en la figura 3.37. En esta situación, ambas bandas de valencia en el lado P estarán completamente solapadas con la banda de conducción en el lado N a partir de tensiones de algo más de 0,02 V, dependiendo del nivel de polarización de espín.
3. La variación de la corriente túnel con la polarización de espín a una polarización dada y a bajas temperaturas ya no estará controlada por el factor de solapamiento pero si por la probabilidad de transición túnel. Los procesos túnel para los portadores con espín mayoritario se favorecen a medida que aumenta la polarización de espín al hacerse la barrera túnel más estrecha debido al desdoblamiento de la banda.

Por lo tanto, en un diodo con una elevada diferencia entre los niveles de degeneración a cada lado de la unión y a baja temperatura, las corrientes en ambas configuraciones, la paralela y la antiparalela, deben aumentar a medida que aumenta la polarización de espín. Sin embargo, a partir de determinado nivel de polarización, el desdoblamiento producido en el lado con menor degeneración es suficientemente intenso para que los estados de energía permitidos para la transición túnel ya no estén solapados en la configuración antiparalela y a una tensión aplicada dada. Esto produce la disminución de la corriente en la configuración antiparalela cuando la polarización de espín es lo suficientemente elevada.

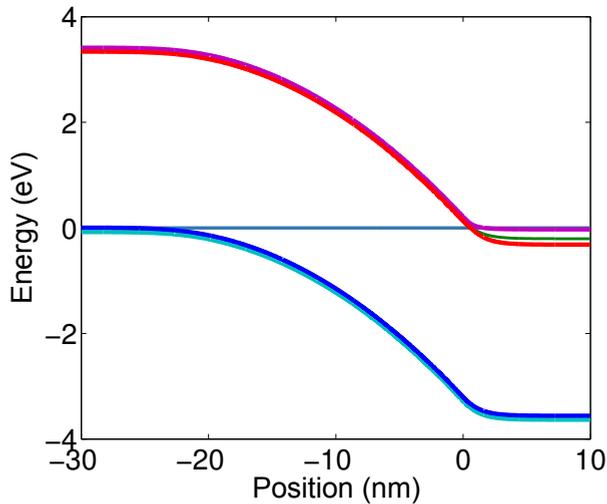


Figura 3.37: Diagrama de bandas de energía para un diodo ferromagnético con diferentes niveles de degeneración en cada lado, $\varepsilon_S = \varepsilon_P = 0,017$ eV y $\varepsilon_L = \varepsilon_N = 0,2$ eV, lo que corresponde con una concentración de huecos de $3,1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ en la región masiva P y una concentración de electrones de $1,3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ en la región masiva N.

3.6.3. Análisis de la dependencia de la TMR con la temperatura

Para analizar la dependencia de la TMR con la temperatura, se repiten los cálculos empleando el simulador numérico para diferentes temperaturas, en un rango entre 30 K y 100 K. La figura 3.38 muestra la evolución de la corriente túnel en la configuración paralela y la configuración antiparalela y el correspondiente valor de la TMR para diferentes temperaturas. La corriente túnel se ha medido a una tensión aplicada de 0,35 V, valor situado en la mitad de la región de resistencia negativa ya que es en esa zona donde se espera que el valor de TMR sea máximo, como ya se ha explicado anteriormente. La TMR tiende a saturar en un 60 % a bajas temperaturas y cae hasta desaparecer a medida que la temperatura se aproxima o va más allá de la temperatura de Curie (~ 110 K) propia del material con que se construya la unión PN ferromagnética. Esto era de esperar, si se tiene en cuenta el comportamiento del desdoblamiento de las bandas de energía con la temperatura mostrado en la figura 3.11.

La TMR tiende a saturar su valor en la región de resistencia negativa, tal y como se puede ver en la figura 3.39(a) y en la figura 3.39(b) donde la TMR es prácticamente constante para tensiones aplicadas en la región de resistencia negativa. En la figura 3.39(b) también se muestra como el valor de la TMR en la región de resistencia negativa es una cota superior en la

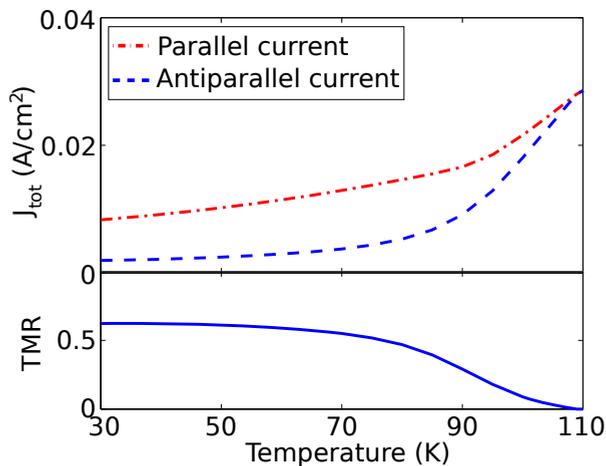


Figura 3.38: Dependencia con la temperatura de la densidad de corriente y de la TMR calculados cuando la tensión aplicada es 0,35 V.

evolución de la TMR para tensiones aplicadas más bajas. En la figura 3.39(b) se observa que la señal TMR es más fuerte a medida que nos desplazamos a tensiones aplicadas mayores en la zona de resistencia negativa. Sin embargo, hay que recordar que estos valores en la zona final de la resistencia negativa y más allá no son reales, ya que la TMR tiende a degradarse a tensiones aplicadas altas debido a la corriente de difusión que apenas está influenciada por el desdoblamiento de las bandas. Por lo tanto, lo que se considera el valor máximo de la TMR es una solución de compromiso entre su incremento debido al desdoblamiento de la corriente túnel y su disminución debido a la corriente de difusión, tal y como ya se comentó en apartados anteriores.

También es interesante mencionar que la corriente en la configuración paralela siempre tiene un valor más alto que en la configuración antiparalela para una misma tensión aplicada de $\sim 0,15$ mV. Para esta tensión aplicada, el solapamiento en energía entre las distribuciones de portadores en los lados P y N alcanza su máximo para la configuración paralela y, por lo tanto, los portadores de carga con menor energía comienzan a dominar el comportamiento de la corriente túnel. A partir de este momento, la configuración paralela comienza a generar corriente túnel mayores que la configuración antiparalela.

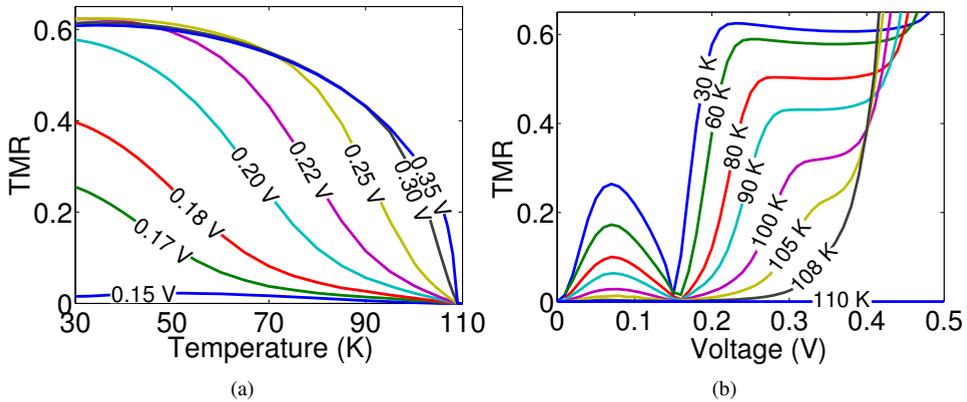


Figura 3.39: (a) Variación de la TMR con la temperatura para diferentes tensiones aplicadas en la unión PN. (b) Variación de la TMR con el potencial aplicado en la unión PN para diferentes temperaturas.

Dependencia TMR con la concentración de portadores

Para analizar la dependencia de la TMR con la concentración de portadores se ha empleado un unión PN de GaAs ferromagnético y se ha calculado la corriente túnel en un rango de temperaturas entre 0 K y la temperatura de Curie, T_C , del material para la concentración dada. La TMR se ha evaluado a partir de las curvas características I-V en el punto en que sistemáticamente se observa un mayor valor de la TMR, esto es, para un potencial aplicado $V_a = \frac{\min(\varepsilon_n, \varepsilon_p) + \varepsilon_n + \varepsilon_p}{2q_e}$. Este valor está situado a medio camino en la zona de resistencia negativa en la curva de corriente para diodo sin polarización de espín, como en análisis anteriores.

Los resultados obtenidos para tres de las configuraciones evaluadas se muestran en la figura 3.40, escogidos como los más significativos: un diodo simétrico (línea verde punteada) en el cual la concentración de portadores en cada lado del diodo es la misma con lo que ambos lados tienen el mismo valor de temperatura crítica $T_C = 110$ K, un diodo P⁺N en el cual $T_C = 110$ K en el lado P y $T_C = 27$ K en el lado N y un diodo PN⁺ donde $T_C = 110$ K en el lado P y $T_C = 139$ K en el lado N. El valor de T_C en el lado P se ha fijado a 110 K.

De los resultados obtenidos se pueden extraer varias conclusiones: Los valores más elevados de la TMR se obtienen para temperaturas cercanas a 0 K, lo cual es una consecuencia de la dependencia de la magnetización y por lo tanto del desdoblamiento con la temperatura, tal y como se muestra en la figura 3.11. La configuración más favorable para obtener valores altos de la TMR resulta ser el diodo P⁺N, aunque está restringido a valores bajos de temperatura,

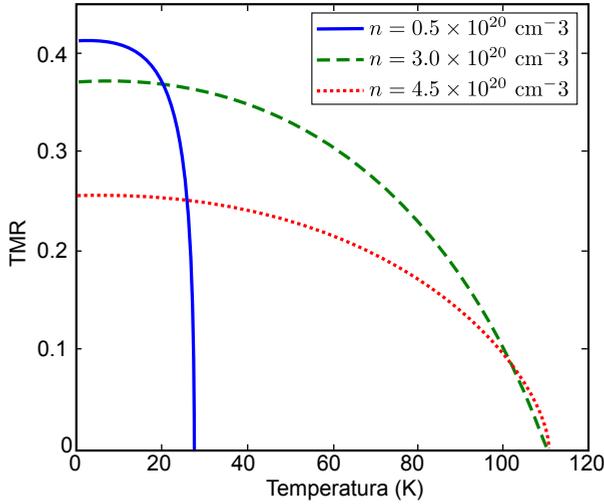


Figura 3.40: Dependencia de la TMR para diferentes niveles de dopado en el lado N. El dopado en el lado P está fijado a $3 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ el cual corresponde con una temperatura de Curie $T_C = 110 \text{ K}$. Las temperaturas críticas en el lado N son 27 K (línea continua y azul), 110 K (línea a trazos y verde) y 139 K (línea de trazos y puntos y roja)

porque el lado N pierde sus propiedades ferromagnéticas para temperatura mayores que 27 K y por lo tanto la TMR deja de ser observable dado que requiere que ambos lados presenten polarización de espín.

La configuración PN^+ conduce a bajos valores de TMR incluso para temperaturas próximas a 0 K. Esto puede explicarse en términos de la baja polarización del espín de los portadores en el lado N, en el cual el valor máximo de desdoblamiento que se obtiene es algo menos de 0,1 eV para $T \rightarrow 0 \text{ K}$ y la energía cinética de los portadores de más alta energía es en torno a 0,4 eV, con lo que solamente una pequeña parte de los portadores están polarizados. La configuración simétrica parece ser la mejor configuración para obtener buenos valores de la TMR para un rango más amplio de temperaturas.

Otro resultado interesante obtenido es que en la configuración simétrica, la dependencia de la TMR con la temperatura tiene la forma $TMR \propto (T_C^n - T^n)$. En particular, para la concentración de portadores que corresponde con una temperatura crítica $T_C = 110 \text{ K}$ para todo el dispositivo se obtiene que la constante $n = 3$.

3.7. Heteroestructura GaAs/ZnO

Esta parte del trabajo se centra en el análisis de una supuesta estructura formada por la unión de una capa tipo P de GaAs y una capa tipo N de ZnO ambas dopadas con impurezas metálicas (Mn,Co) que añaden el comportamiento ferromagnético además de contribuir con portadores a cada material. Este tipo de estructura tiene mucho interés debido al hecho de que el GaAs ferromagnético es tipo P de forma natural y el ZnO es un semiconductor de tipo N, independientemente del dopado. Por lo tanto, el poder hacer una heterounión de estos dos materiales haría posible la unión PN totalmente ferromagnética. A continuación se van a mostrar y analizar los resultados obtenidos para la corriente túnel y la TMR a partir del modelo analítico para la heterounión descrito en la sección 3.4 y del simulador numérico. Se va a estudiar su dependencia con nivel de polarización de espín de los portadores de carga y la tensión aplicada.

Se han usado los siguientes parámetros: $E_g = 1,4$ eV, $\chi = 4,07$ eV, $\epsilon_r = 13,2$, $m_n^* = 0,06m_0$ y $m_p^* = 0,5m_0$ para el GaAs y $E_g = 3,4$ eV, $\chi = 4,20$ eV, $\epsilon_r = 8,6$, $m_n^* = 0,24m_0$ y $m_p^* = 0,59m_0$ para el ZnO [PNI⁺03]. Los niveles de dopado son 10^{20} cm⁻³ en el lado N y $3 \cdot 10^{20}$ cm⁻³ en el lado P. Los cálculos se han realizado considerando una polarización de espín del 70 % y la temperatura está establecida a 77 K.

Las figuras 3.41(a) y 3.41(b) muestran el diagrama de bandas de energía obtenidos a partir del modelo analítico y del simulador numérico, respectivamente, para la configuración indicada. En la figura 3.41(b) se observa como el desdoblamiento en las bandas desaparece al reducirse la concentración de portadores en la zona de vaciamiento, frente a lo que ocurre en el simulador analítico donde se ha considerado un desdoblamiento de las bandas de energía constante por simplicidad.

Las figuras 3.42(a) y 3.42(b) muestran la corriente túnel y la TMR obtenidos a partir del modelo analítico y del simulador numérico respectivamente. Se incluyen de nuevo las curvas obtenidas en el caso no ferromagnético y las obtenidas a partir de las configuraciones paralela y antiparalela. La curva característica I-V muestra que de nuevo en la zona de resistencia negativa, es decir, para tensiones aplicadas entre 0,2 V y 0,4 V, la TMR alcanza los valores más altos. Tomando un punto a medio camino en la zona de resistencia negativa, tensión aplicada de 0,3 V, el modelo analítico predice una señal más intensa que el simulador numérico para la TMR: 50 % en el caso analítico y 40 % en el caso numérico. Esto se puede explicar teniendo en cuenta el desdoblamiento constante empleado en el modelo analítico que reduce la barrera túnel respecto al modelo numérico, proporcionando mayores valores de corriente

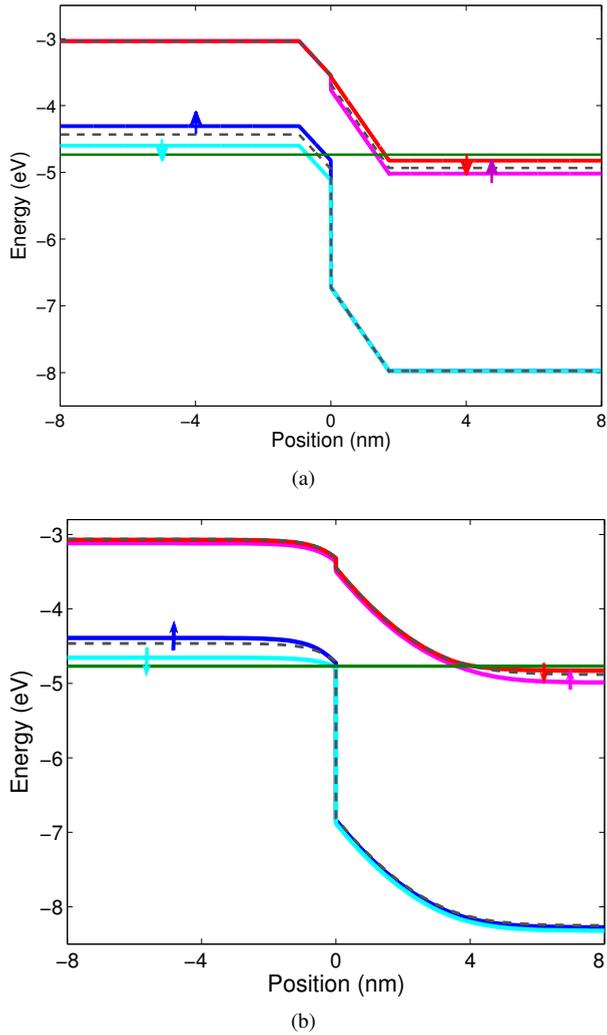
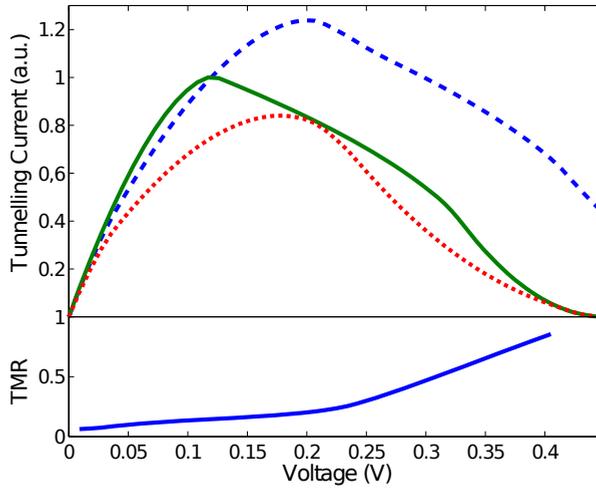
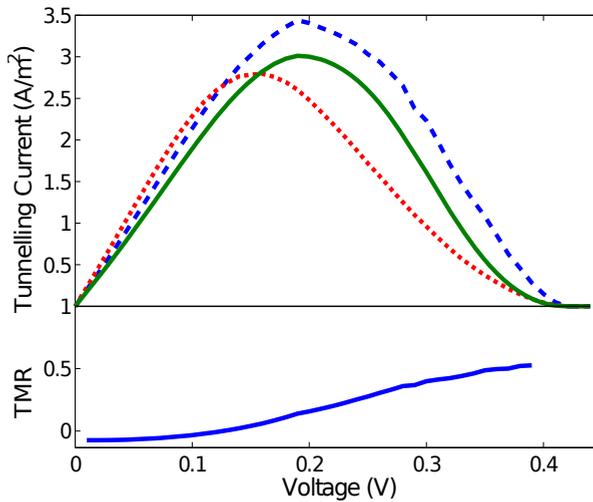


Figura 3.41: Diagrama de bandas de energía para una heterounión de GaAs (lado P) y ZnO (lado N) obtenidas a partir del (a) modelo analítico y del (b) simulador numérico. En ambos casos se considera una polarización de espín del 70 %.



(a)



(b)

Figura 3.42: Densidad de corriente túnel para un diodo no ferromagnético (línea verde continua), para la configuración paralela (línea discontinua azul) y la configuración antiparalela (línea punteada roja); también se muestra la TMR (línea azul continua) para GaAs (lado P) y ZnO (lado N) obtenidas a partir del (a) modelo analítico y del (b) simulador numérico. En ambos casos se considera una polarización de espín del 70 %.

túnel en la configuración paralela. De nuevo, la TMR para tensiones aplicadas no debe ser tomado en consideración debido a que otras componentes de la corriente (túnel asistido por huecos o corriente de difusión) están ganando peso y estas no dependen o tienen una dependencia mucho menor con el desdoblamiento de las bandas de energía. En cualquier caso, los valores obtenidos para la TMR en la región de interés en la zona de resistencia negativa están en el mismo rango que aquellos obtenidos en medidas experimentales para uniones túnel magnéticas resonantes [CZP09].

En este caso el modelo analítico ofrece resultados más optimistas en cuanto al TMR que el simulador numérico. Sin embargo, el resultado obtenido por este último para la TMR se puede considerar más exacto debido a que involucra una descripción más completa de la fenomenología en la heterounión conduciendo a un resultado que se espera más acorde con la realidad.

3.8. Válvula de espín: estructuras PiP y NiN

En esta parte del trabajo se muestran resultados de la simulación de un tipo de estructura diferente a lo estudiado hasta ahora. En este caso se trata de obtener la respuesta I-V de una unión túnel magnética (MTJ) usando de nuevo el simulador numérico. Se estudia el comportamiento eléctrico de una MTJ formada por dos electrodos ferromagnéticos de $(\text{Zn},\text{Co})\text{O}$ y una barrera intermedia de ZnO . En este caso el simulador solo resolverá el sistema acoplado formado por la ecuación de Poisson y dos ecuaciones de continuidad una para obtener la concentración de electrones con espín arriba y otra para obtener la concentración de electrones con espín abajo. En este caso la concentración de huecos se asume constante e igual al valor de equilibrio al tratarse de un dispositivo con transporte monopolar. Además los términos de recombinación túnel se han adaptado para considerar el transporte túnel intrabanda y la polarización de espín de los electrones y la relajación de espín. Los resultados obtenidos se comparan con resultados experimentales existentes para este dispositivo en un rango que va desde los 4 K hasta la temperatura ambiente [SLZP07].

La estructura simulada se muestra en la figura 3.43, se trata de un corte transversal de la multiunión $(\text{Zn},\text{Co})\text{O}$ (50 nm)/ ZnO (4 nm)/ $(\text{Zn},\text{Co})\text{O}$ (25 nm). La estructura está formada por dos electrodos ferromagnéticos que actúan como filtros polarizadores del espín del electrón y una capa intermedia de material aislante, ZnO puro, que actúa como barrera túnel. En este escenario, se espera que la señal TMR persista más allá de la temperatura ambiente y, por

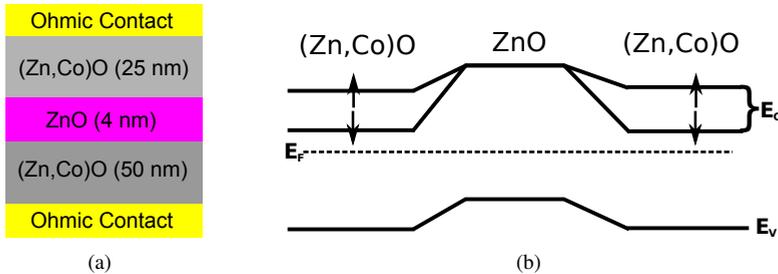


Figura 3.43: (a) Representación esquemática de la unión túnel magnética simulada de ZnO. (b) Desdoblamiento de la banda de conducción en los electrodos ferromagnéticos de (Zn,Co)O.

lo tanto, que esta MTJ pueda emplearse como un sensor del espín inyectado desde uno de los electrodos de (Zn,Co)O a través de la barrera túnel midiendo la corriente túnel espín-polarizada que circula a través del dispositivo. Del trabajo experimental previo [SLZP07], los electrodos son depositados mediante un proceso de pulverización catódica asistida por radiofrecuencia, su composición es $(\text{Zn}_{0,94},\text{Co}_{0,06})\text{O}$ y presentan una resistividad de $\sim 1,7 \times 10^{-2} \Omega\text{cm}$ [SPL⁺07], que se corresponde con una concentración de electrones de $\sim 3,7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, suponiendo que la movilidad de estos es $\mu_n \sim 100 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. La capa de ZnO intrínseco, crecida mediante pulverización catódica reactiva, muestra una resistividad de $\sim 10^7 \Omega\text{cm}$ [SGZ⁺06].

Para ejecutar las simulaciones se han empleado los parámetros para el ZnO listados en la tabla 3.2 que describen de forma adecuada la mayor parte de las observaciones experimentales y son consistentes con los datos presentes en la literatura [ARL⁺99, OAL⁺05]. El simulador resuelve de forma autoconsistente la ecuación de Poisson y dos ecuaciones de continuidad para los electrones, una para cada espín. La corriente se calcula de forma separada teniendo en cuenta el espín de los portadores debido a que la distribución de estados para un valor dado de espín está desplazada respecto de la otra en las capas ferromagnéticas. Este desplazamiento en el espacio de energías proviene del desdoblamiento de las banda de conducción debido al ferromagnetismo inducido por las impurezas magnéticas (Co) añadidas al semiconductor. Este efecto también puede verse incrementando introduciendo la muestra en un campo magnético que creará magnetizaciones más elevadas. Al aumentar la magnetización también aumenta la polarización de espín de los portadores y por lo tanto el desdoblamiento en energías de la banda de conducción y de la distribución de estados permitidos en esta.

En las simulaciones aquí mostradas se han considerado diferentes valores para el nivel de polarización del espín del electrón. Estas polarizaciones de espín pueden provenir tanto de la magnetización espontánea de la muestra o del resultado de aplicar diferentes campos magnéticos al dispositivo. Para cada nivel de polarización de espín se calcula la corriente a través del dispositivo para tensiones aplicadas a los electrodos ferromagnéticos de entre -2 y 2 voltios. Para tener una mejor medida del efecto del ferromagnetismo en este dispositivo, también se calcula la señal TMR para cada una de las tensiones aplicadas y polarizaciones de espín. En este caso no existe una configuración paralela y una antiparalela, como en los dispositivos anteriores, al tratarse de un dispositivo simétrico respecto a la barrera túnel. Por lo tanto se introduce una nueva definición para la TMR que mide la diferencia relativa entre la corriente cuando el dispositivo presenta polarización de espín respecto del dispositivo sin polarización de espín, es decir, la situación tradicional donde la cantidad de portadores con espín arriba y abajo es la misma. Así la TMR queda como

$$\text{TMR} = \frac{R(P) - R(0)}{R(0)} \times 100 \%, \quad (3.93)$$

donde $R(P)$ y $R(0)$ son las resistencias eléctricas para los casos con polarización de espín y no polarizado, respectivamente, a un tensión aplicada dada. El nivel de polarización de espín se define como la diferencia relativa entre las concentraciones de electrones con espín arriba y abajo y se calcula como

$$P = \frac{|n^\uparrow - n^\downarrow|}{(n^\uparrow + n^\downarrow)} \times 100 \% \quad (3.94)$$

La figura 3.44 muestra la banda de conducción para la estructura simulada a 4 K en dos situaciones diferentes: una unión túnel no magnética (línea azul) y una unión magnética con los dos electrodos ferromagnéticos (líneas discontinuas). Para obtener este diagrama de bandas se considera una concentración de electrones de $3,7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Debido a la baja temperatura y al alto nivel de dopado, el semiconductor muestra un nivel de degeneración muy alto. Además debido a la difusión de portadores dentro de la capa intrínseca intermedia la barrera de potencial es relativamente baja. Debido a esta situación, se puede asumir que la corriente estará dominada por la componente de arrastre, entonces como primera aproximación no se considera la limitación de la corriente túnel en la barrera de potencial, lo cual es más realista a medida que el dispositivo se somete a mayores tensiones aplicadas. Además se supone que ambas componentes de espín difunden igualmente hacia la capa intrínseca y, por lo tanto, el nivel de polarización de espín se conserva a lo largo de todo el dispositivo.

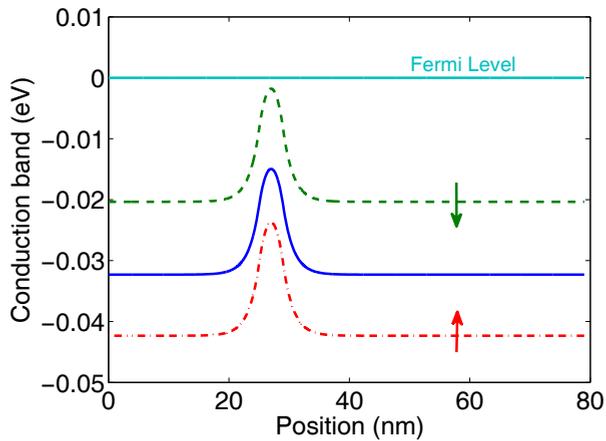


Figura 3.44: Banda de conducción en el equilibrio para una MJT a una temperatura de 4 K. La línea continua corresponde con la configuración no ferromagnética (magnetización neta nula) y las dos líneas discontinuas se obtienen considerando una polarización de espín de los electrones del 50 %.

La figura 3.45(a) muestra la dependencia de la TMR con el nivel de polarización del espín de los electrones a 4, 20, 50 y 100 K, lo que se corresponde con el análisis del comportamiento de la TMR bajo diferentes campos magnéticos aplicados y temperaturas. La TMR se muestrea a “voltaje medio” ($V_{1/2}$), es decir, las tensión aplicada para la cual la mitad de la TMR todavía permanece, en nuestro caso $V_{1/2} \sim 0,05$ V. Una característica común es que todas las curvas muestran TMR positivas y que es necesaria una polarización de espín, en torno al 80 %, para alcanzar el nivel de saturación de la TMR. Este comportamiento confirma lo que los experimentos mostraban, sin embargo los valores obtenidos para la TMR son mucho más bajos que los obtenidos en el experimento. Nuestros resultados también recogen el comportamiento simétrico de la TMR con la dirección del campo magnético, ya que la forma en que se obtiene la TMR no tiene en cuenta la dirección del espín mayoritario, solamente la relación entre las concentraciones de espín.

En la figura 3.45(b) se muestra el comportamiento casi lineal de la característica I-V de la MTJ en el rango ± 2 V en las dos configuraciones: cuando no hay polarización de espín y con una polarización de espín del 50 %, ambas a una temperatura de 4 K. La no linealidad de la respuesta I-V es producida por la presencia de la barrera de potencial en la capa intrínseca, ya que esta no está presente en la curva I-V de una capa de (Zn,Co)O que si es completamente lineal [GOP⁺98]. Comparado con la corriente medida en el experimento, nuestro valores

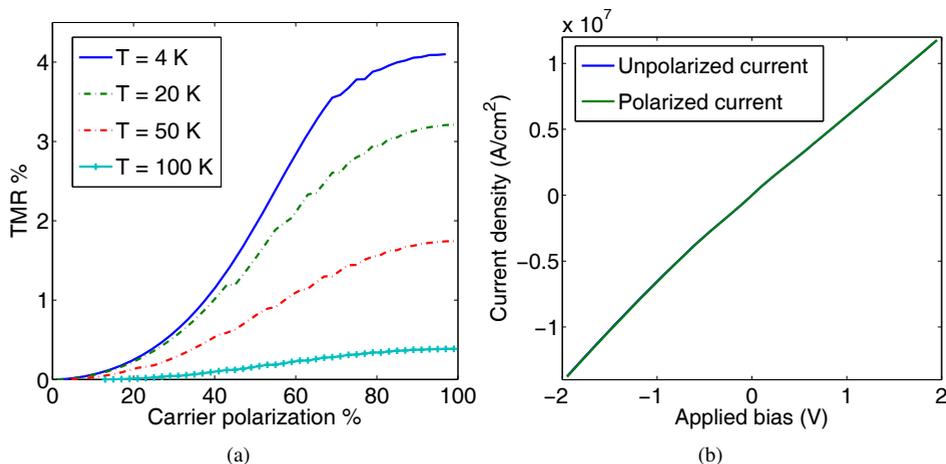


Figura 3.45: (a) TMR de las MTJ calculada para una tensión aplicada de $V_{1/2} \sim 0,05$ V a temperaturas de 4, 20, 50 y 100 K. (b) Característica I-V de la MTJ cuando no hay polarización de espín y para una polarización de espín del 50 %. Ambas figuras se obtienen considerando una concentración de electrones de $3,7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ en los electrodos de (Zn,Co)O.

son varios ordenes de magnitud más altos. Esto puede ser debido a la combinación de varios factores: un valor de movilidad de los electrones inadecuado para este material, que la concentración de portadores libres está sobrestimada o la existencia de resistencias serie asociadas a contactos con los aparatos de medida externos. Además, si la corriente túnel se añade a la corriente total se obtendrán valores de corriente todavía mayores, especialmente a baja tensiones aplicadas. Por lo tanto, entendemos que es necesario un análisis más en profundidad para comprender los mecanismos de conducción en este tipo de estructuras.

A partir de la ligera diferencia en las curvas I-V obtenidas para cada polarización de espín se puede obtener la respuesta de la TMR a diferentes tensiones aplicadas y para diferentes temperaturas, estos resultados se muestran en la primera la columna de la figura 3.46, en la cual

$$\text{TMR} = \frac{R(P = 50\%) - R(0)}{R(0)} \times 100\%. \quad (3.95)$$

En la segunda columna se muestran las medidas experimentales de la TMR para este dispositivo obtenidas por Song *et al.* [SGZ⁺06].

Se observa que la TMR decrece rápidamente con la tensión aplicada y simétricamente con respecto al signo de la tensión aplicada. Ambas, la señal TMR y la relación señal ruido

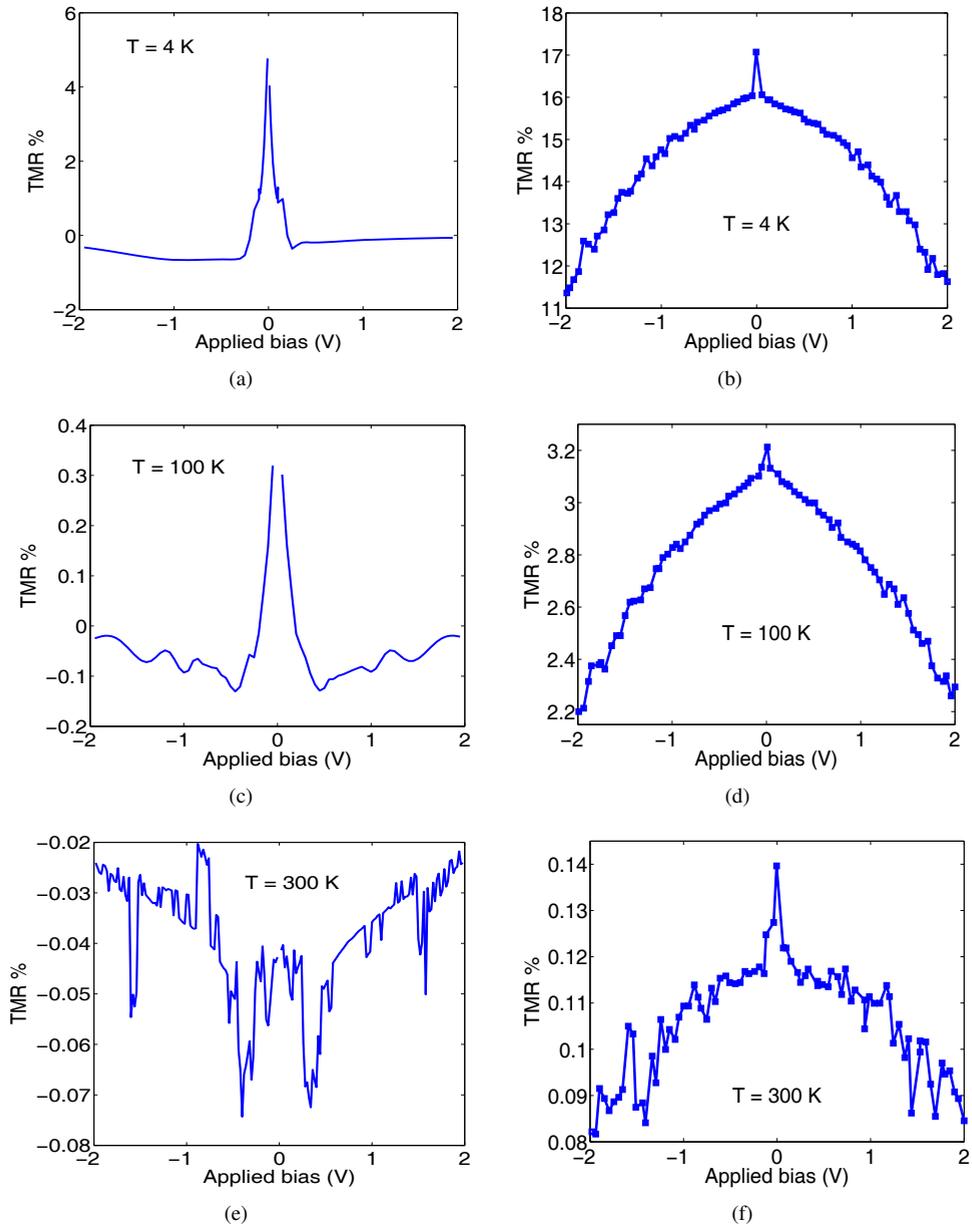


Figura 3.46: Dependencia de la TMR con la tensión aplicada a la MJT. Resultados obtenidos de la simulación y resultados experimentales [SLZP07] a 4 K (a) y (b), a 100 K (c) y (d) y a 300 K (e) y (f), respectivamente.

decrecen rápidamente a medida que la temperatura crece. Estos resultados preliminares están en acuerdo con las medidas experimentales; sin embargo, los valores obtenidos para la TMR son algo más bajos (hasta un orden de magnitud en el peor caso) que los obtenidos en el dispositivo experimental. Debido a su rápida disminución, el comportamiento parabólico, observado en los resultados experimentales, no está tan claro en la simulación especialmente para valores de la tensión aplicada más allá de 0,5 V. Esto conduce a una fuerte dependencia de la TMR con la tensión aplicada y por lo tanto valores muy bajos del “voltaje medio” ($V_{1/2}$). Además, los experimentos han mostrado que la señal TMR debe ser medible a temperatura ambiente, pero a partir de nuestros resultados esta señal está completamente oculta debida al ruido introducido por los cálculos en el simulador.

En cuanto a la rápida disminución de la TMR en las simulaciones frente a lo que se observa en el experimento, se podría esperar que en el dispositivo experimental no toda la tensión caiga en la unión NiN. Así, buena parte de esta tensión aplicada se perdería en resistencias serie introducidas por los elementos de contacto lo cual es coherente con lo observado experimentalmente en otros dispositivos similares basados en DMS, donde la señal TMR se destruye cuando el campo eléctrico aplicado externamente alcanza cierto valor [JNOA09, JNO⁺10].

En resumen, se puede decir que esta primera aproximación para la simulación de una MTJ empleando el modelo de arrastre y difusión permite predecir bien alguna de las características de la respuesta I-V y la TMR. Se ha simulado y obtenido el mismo comportamiento que en el experimento, especialmente a bajas temperaturas, sin embargo los valores absolutos de los parámetros simulados difieren cada vez más a medida que la temperatura se acerca a la temperatura ambiente y la tensión aplicada aumenta. Esto hace pensar que el modelo de arrastre y difusión no es suficiente para extraer conclusiones del comportamiento de este tipo de dispositivos y es necesario intentar aproximaciones diferentes.

Conclusiones

El avance de la electrónica actual hacia la integración del procesado de datos, la tecnología de almacenamiento y de sensores y emisores de luz polarizada para la transferencia de información es teóricamente posible usando semiconductores magnéticos diluidos. La teoría y los experimentos realizados hasta ahora, sugieren que semiconductores dopados con metales de transición son buenos candidatos para este cometido, y entre los más estudiados están el (Ga,Mn)As, el (Ga,Mn)N y los óxidos semiconductores TiO_2 y ZnO dopados con Co, Mn, Cr o V. Existe un intenso trabajo para conseguir que estos materiales mantengan su ferromagnetismo intrínseco más allá de la temperatura ambiente. El objetivo final es crear nuevos dispositivos desarrollados a partir de estos materiales y que produzcan señales que se puedan medir a temperatura ambiente.

Por otro lado el hecho de simular dispositivos electrónicos se ha convertido en una herramienta que ha permitido el análisis de la viabilidad de diferentes diseños de circuitos. Esto ha permitido descartar opciones no óptimas con lo que ello conlleva en reducción de costes, tanto al minimizar el tiempo empleado en las fases de diseño como al evitar numerosos y costosos experimentos.

En esta tesis se muestran y aplican mecanismos útiles para la simulación de sistemas construidos con materiales ferromagnéticos, adaptando el modelo de arrastre y difusión para incluir el nuevo grado de libertad introducido por la polarización neta de momento de espín del electrón en los DMSs, tanto de forma intrínseco como inducida por campos magnéticos externos. Se muestran tanto el trabajo teórico necesario para realizar la simulación del comportamiento de diferentes dispositivos como los resultados obtenidos a partir de la aplicación de estas técnicas en dichos dispositivos. Además, la simulación numérica se acompaña de modelos analíticos mucho más simples que permiten una evaluación más rápida, aunque quizá menos precisa, del comportamiento de estos dispositivos. Ambas herramientas constituyen

un conjunto de utilidades que permiten la simulación de este tipo de dispositivos con un coste computacional bajo o muy bajo (las simulaciones duran unos minutos en el caso de los modelos analíticos y en torno a los 30 minutos usando el simulador numérico).

En particular se han simulado una unión PN con un lado ferromagnético y con ambos lados ferromagnéticos, construidas empleando ZnO y GaAs con magnetización neta. También se ha simulado una heterounión PN formada por un lado P de GaAs y un lado N de ZnO. Por último se ha estudiado el comportamiento de una unión túnel NiN formada por dos electrodos de ZnO dopados con Co y una barrera intermedia de ZnO intrínseco.

Para abordar este problema se ha dividido el trabajo en tres etapas: el análisis teórico necesario para el modelo analítico, la implementación del simulador numérico y, por último, la simulación de los dispositivos enumerados anteriormente.

Modelos analíticos

El desarrollo de los modelos analíticos para analizar el comportamiento de los diferentes dispositivos ferromagnéticos, se ha realizado a partir del trabajo previo de Holmberg *et al.* [HLN⁺05]. En este trabajo se analiza el comportamiento de una unión PN de GaAs donde su lado P es ferromagnético. El trabajo realizado en esta parte ha consistido en tratar de reproducir el comportamiento predicho por ellos y extender el modelo analítico propuesto para una unión PN completamente ferromagnética y una heterounión donde el lado P y el N son de diferentes semiconductores ferromagnéticos.

En el caso de la unión PN se ha extendido el modelo propuesto por Holmberg *et al.* [HLN⁺05] para considerar la polarización de espín de los portadores (electrones y huecos) en ambos lados de la unión ferromagnética. Esta polarización de espín se ha parametrizado en términos del desdoblamiento de las bandas de energía (conducción y valencia) para cada valor de espín. A partir de estas bandas desdobladas se ha procedido a calcular el coeficiente de transmisión túnel a través de la unión PN y por lo tanto la corriente túnel, considerando una barrera de potencial triangular entre la región P y la región N. Este modelo se ha desarrollado para el límite a temperatura de 0 K por simplicidad en las expresiones obtenidas y teniendo en cuenta la alta degeneración de los semiconductores involucrados debido a los elevados niveles de dopado típicos de los semiconductores ferromagnéticos. Además se ha modelado el transporte túnel en una heterounión en la que se han incluido las discontinuidades en el campo eléctrico y los límites de las bandas de energía en la zona de vaciamiento de la heterounión. En este caso se ha supuesto una variación lineal de las bandas de energía en la zona de vacia-

miento para obtener la forma de la barrera de potencial que ven los portadores y a partir de la cual se integra de nuevo el coeficiente túnel y la corriente túnel.

Para el análisis de la influencia del ferromagnetismo en la característica I-V de las uniones se ha empleado la figura de merito conocida como magnetorresistencia túnel (TMR, por sus siglas en inglés). La TMR mide la diferencia relativa entre las corrientes túnel en dos configuraciones extremas: una corresponde a la situación en la que ambos lados de la unión presentan una magnetización relativa paralela o, equivalentemente, una interacción ferromagnética y la otra corresponde con la situación en la que la magnetización relativa entre el lado P y el lado N de la unión son antiparalelas o, en este caso, presenta una interacción antiferromagnética. La señal asociada a la TMR es una magnitud que permite comparar el efecto de diferentes niveles de polarización del momento magnético de espín de los portadores y diferentes concentraciones de portadores en los semiconductores que forman los electrodos ferromagnéticos de las uniones.

Simulador numérico basado en arrastre y difusión

Para obtener una caracterización más realista de los dispositivos basados en semiconductores magnéticos se ha desarrollado un simulador numérico basado en el modelo de arrastre y difusión, que toma como entrada un conjunto completo de parámetros físicos de los materiales que forman el dispositivo a simular. El simulador resuelve numéricamente la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de electrones y huecos, empleando el método de diferencias finitas y la aproximación de Scharfetter-Gummel para discretizar esas ecuaciones diferenciales. Las ecuaciones algebraicas no lineales resultantes se resuelven empleando el método de Newton y los sistemas de ecuaciones construidos se resuelven mediante resolutores directos provistos por la librería SuperLU [Li05, LDG⁺99, DEG⁺99] que implementa el método de descomposición LU o por la librería *Gnu Scientific Library* [GDT⁺09] que implementa una variación del método de descomposición de Cholesky.

El simulador permite obtener las características eléctricas en régimen estacionario y para pequeña señal de dispositivos túnel. Para esto se ha incluido un modelo de recombinación túnel no local que tiene en cuenta la distribución espacial y energética de los portadores involucrados en los procesos de recombinación túnel interbanda y una forma más realista de la barrera de potencial que los portadores atraviesan durante el proceso túnel. También se ha incluido el modelo de emisión termoiónica para el análisis de las densidades de portadores y densidad de corriente en las interfaces de las heterouniones ferromagnéticas.

Además para contemplar la polarización de espín, se ha diferenciado el valor de espín de los portadores de carga, de tal manera que el simulador resuelve dos ecuaciones de continuidad para electrones y dos ecuaciones de continuidad para huecos, una para cada valor de espín, respectivamente. También se ha modificado el modelo no local de recombinación túnel para tener en cuenta el desdoblamiento de las bandas de energía asociadas a cada valor de espín de los portadores.

Se ha comprobado el correcto funcionamiento del simulador comparando los resultados obtenidos para uniones PN, no ferromagnéticas y altamente degeneradas, de GaAs y ZnO a partir de nuestro simulador y los simuladores comerciales Sentaurus Device de Synopsys y Atlas de Silvaco. Además se han comparado los resultados del simulador con medidas experimentales para una unión PN (Ga,Mn)As/GaAs, es decir con solo el lado P ferromagnético, existentes en la literatura.

Simulación de las estructuras

Una vez implementados y validados los diferentes simuladores se ha procedido a la simulación de las estructuras de interés. En el análisis realizado de los resultados obtenidos se ha comprobado como tanto los modelos analíticos sencillos o la simulación por arrastre y difusión ofrecen resultados fiables que permiten predecir el comportamiento de este tipo de estructuras. En particular se han obtenido resultados muy prometedores en la simulación de uniones PN y una buena predicción del comportamiento relativo de la barrera túnel.

Para estudiar el efecto de añadir la variable espín en la simulación de estructuras ferromagnéticas se ha comprobado lo siguiente:

- La corriente túnel obtenida para la unión PN (Ga,Mn)As/GaAs concuerda con las medidas experimentales ofrecidas por Holmberg *et al.* [HLN⁺05].
- La TMR obtenida para la unión PN totalmente ferromagnética sigue la ley experimental propuesta para uniones multicapa de metales ferromagnéticos propuesta por Jullière [Jul75]. Esta ley se toma como una referencia válida ante la ausencia de datos experimentales, ya que el transporte se produce por efecto túnel y la estructura es similar en las dos configuraciones (unión semiconductor o unión metálica).
- Se ha analizado el comportamiento de la TMR con la temperatura y se ha encontrado un ley polinómica que describe el comportamiento de esta variable con la temperatura.

Esta ley es coherente con la dependencia de las propiedades ferromagnéticas con la temperatura.

Por último se ha simulado una estructura barrera túnel tipo NiN, es decir, dos electrodos ferromagnéticos construidos con (Zn,Co)O tipo N y una barrera túnel intermedia de ZnO intrínseco. Se ha obtenido la característica I-V y la dependencia de la TMR con la tensión aplicada para diferentes niveles de polarización de espín en los electrodos ferromagnéticos. Se ha podido simular la misma dependencia de la TMR con la magnetización de las capas ferromagnéticas o, lo que es lo mismo, con el nivel de polarización de espín de los electrones que atraviesan esta estructura, especialmente a bajas temperaturas. Sin embargo, los valores absolutos de los parámetros simulados difieren cada vez más a medida que la temperatura se acerca a la temperatura ambiente y la tensión aplicada aumenta. Esto hace pensar que la teoría introducida por el modelo de arrastre y difusión no es suficiente para extraer conclusiones del comportamiento de este tipo de dispositivos y será necesario intentar aproximaciones diferentes.

En resumen, se concluye que el modelo de arrastre y difusión aporta herramientas de simulación de gran utilidad en el estudio de estructuras espintrónicas basadas en uniones PN de semiconductores con propiedades ferromagnéticas. Esto permitirá predecir nuevas potencialidades de nuevos dispositivos o nuevos materiales en este tipo de dispositivos usando estas herramientas.

Trabajo futuro

El trabajo futuro, que este proyecto de tesis abre, puede agruparse en dos líneas principales: la mejora del simulador actual para incluir una caracterización mejor de los semiconductores ferromagnéticos y la adición de nuevas funcionalidades para simular otras características propias de estos dispositivos.

En cuanto a la primera parte, sería de interés añadir la capacidad de simular materiales con una estructura de bandas compleja de manera que se pudiera contemplar el efecto de distribuciones de estados en la banda de energías prohibidas que son de especial relevancia en los óxidos semiconductores. Además sería interesante añadir modelos para tratar la relajación de espín, que conducen a la destrucción de la señal TMR, especialmente a altas temperaturas o a elevadas tensiones aplicadas. También tiene enorme interés el analizar y tratar de modelar el efecto que tienen las distintas interfaces entre los materiales que forman la estructura en

la transmisión de la polarización de espín de un electrodo ferromagnético a otro. Por último, también parece de interés el conectar el simulador con simuladores de materiales basados en técnicas atomísticas, como *Density Functional Theory* (DFT) o *Variable Range Hopping* (VRH), que proveen de propiedades de materiales sin depender de evidencia experimental.

La principal de las funcionalidades a añadir en el simulador sería la capacidad de simular la emisión y absorción de luz polarizada en dispositivos basados en semiconductores magnéticos. En particular, simular la inyección espín mediante la generación a partir de luz polarizada y la emisión de luz polarizada debido a la recombinación de pares electrón hueco con su espín polarizada. Experimentalmente ya se ha encontrado mediante medidas de dicroísmo óptico que la luz emitida posee polarización circular levógira o dextrógira en función del espín de los portadores involucrados en la emisión de los fotones. Sería de gran interés reproducir este efecto mediante la simulación y poder caracterizar dispositivos LED contruidos a partir de estos materiales.

APÉNDICE A

DEVELOPMENT OF TOOLS FOR THE SIMULATION OF DEVICES BASED ON MAGNETIC SEMICONDUCTORS

A.1. Analytical model for spin polarized tunneling in a ferromagnetic Zener diode

Diluted magnetic semiconductors (DMS) are considered to be new generation materials with the most potential for the future develop of new spintronic technologies and new spin based device applications. DMSs provide simultaneous control on the flow of the carrier charge and spin [AO02]. Spintronics is motivated by the belief that spin signal processing may yield advantages in terms of processing speed, power consumption or device density. Since the prediction of high Curie temperature DMSs, based on III-V semiconductors [DOM⁺00], the search of such materials is receiving much attention as they are cornerstone for the develop of spintronics.

DMS provide a mechanism for combining memory and logic functions [PAN⁺03] and much effort is currently put into in developing suitable materials [Cha06, JSM⁺06]. In an optimally doped DMS the density of carriers is approximately half that of the density of magnetic ions which is usually between 5% and 15% [JSM⁺06, MKM⁺07]. Carriers at this density will have Fermi energies ~ 0.1 eV and so be degenerate at room temperature.

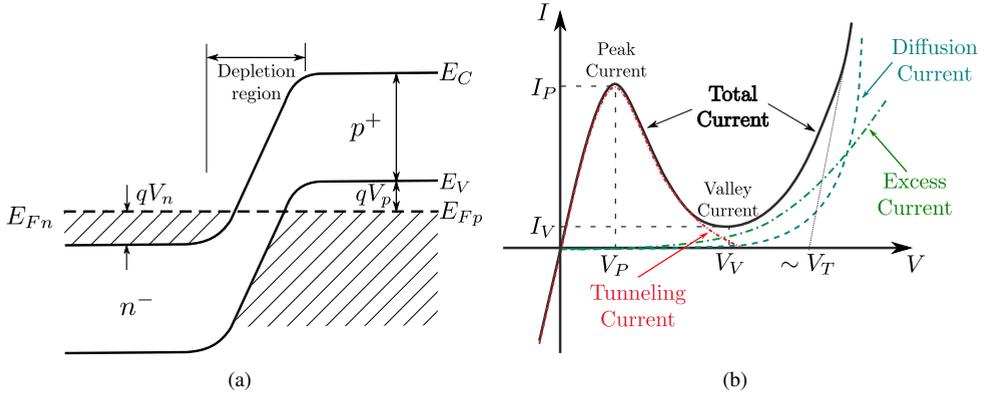


Figure A.1: (a) Tunnel diode band diagram and (b) typical I-V characteristic, showing the three contributions to the total current: tunnel, excess and diffusion currents.

A PN junction between two degenerate semiconductors is known as a tunneling or Zener diode. The energy band diagram a degenerate PN junction is shown in figure A.1(a). The current through a Zener diode as a function of voltage rises to a maximum and then falls to a minimum before rising exponentially [SN06]. This is due to three effects: the tunneling current which rises to a maximum at a low voltage and then falls to zero as a function of applied voltage (this fall is known as the negative resistance region), a current due to the carriers making transitions to defect states in the gap, known as the valley current and finally the thermal current. All the contributions to the current apart from the tunneling current are known as the excess current which is not spin dependent so we concentrate on the tunneling current in this work. It is important to keep in mind that the tunneling current is only relevant where it dominates over the excess current. The typical I-V characteristic and the current components of a Zener diode are shown in figure A.1(b). Zener diodes have many applications [SN06] and adding magnetic functionality would enable many more devices to be constructed such as magnetic switching of microwave devices.

The theory of the behavior of a diode where one side is ferromagnetic has been developed in detail [HLN⁺07]. Zener tunneling has been observed in a ferromagnetic-nonmagnetic (GaMn)As/GaAs heterostructure [SKMD07], the tunneling current has a high spin polarization that is observed optically [DLR⁺04, vdLEA⁺10]. The voltage dependence of the tunneling current in a spin-polarized Zener diode is well fitted by the theory of a non-magnetic diode [HLN⁺07].

The well established DMS occurs with one type of carrier. One of the most investigated materials is the III-V material (GaMn)As in which the Mn ion provides a localized spin $S = 5/2$ and also contributes a hole [JSM⁺06]. The holes are degenerate and strongly polarized at low temperatures [HLN⁺07, DLR⁺04]. So far the ferromagnetic III-V doped materials are all P type but there is much effort to find a compatible N type ferromagnetic semiconductor [MKM⁺07, DJL⁺11, HAM⁺12]. Magnetic properties have been seen in a number of magnetically doped oxides, particularly ZnO, TiO₂ and SnO₂ [Cha06, NNY⁺10, SPQ⁺09, EGHM⁺10], all of which occur as N type semiconductors. The ferromagnetism gives a characteristic signal in the magnetic circular dichroism (MCD) at the ZnO band gap that has been interpreted in terms of a spin split conduction band [NBI⁺06]. Even though there are experimental evidence of P type ZnO, it is extremely difficult to dope and the samples show very low conductivity and still they are not in the Zener regime [DZY⁺11, HSC⁺12]. There is growing interest in the developing of magnetic tunnel junctions based on (Zn_{1-x}Co_x)O with different barriers [SLZP07, CZP09] because of its high Curie temperature and promising magnetotransport [FTY05, KOL⁺04b, XBZ⁺06].

There is much effort based on both ZnO and GaAs to make a ferromagnetic PN junction, thus it is opportune to calculate the properties of such a diode so as to determine the parameter range for each component that will give the optimal performance in a device. In addition, a Zener diode structure will be a useful diagnostic tool to determine the spin polarization of a ferromagnetic DMS when combined in a junction with one that has been well characterized. We evaluate the tunneling asymmetry for an ideal junction with arbitrary spin polarization on each side and compute how it would depend on the voltage across the junction. The calculations are performed assuming that the spin is conserved across the barrier and taking the low temperature limit using appropriate values for the carrier densities. There are several effects that would degrade the performance such as the occurrence of a magnetic dead layer near the boundary or because depolarization may occur in the barrier; hence the values calculated here are a maximum that could be expected.

The theory of the voltage dependence of the current through a Zener diode at low temperatures is well known [SN06]. The two important quantities are the Fermi energies for the electrons and the holes, $\epsilon_n = qV_n$ and $\epsilon_p = qV_p$, where V_n and V_p are defined in figure A.1(a). In general one is larger than the other so following Kane [Kan61] we define a large and a small Fermi energy ϵ_L and ϵ_S . In the theory it is immaterial whether it is the electron or the hole Fermi energy that is the largest. Figure The typical I-V characteristic of a Zener diode

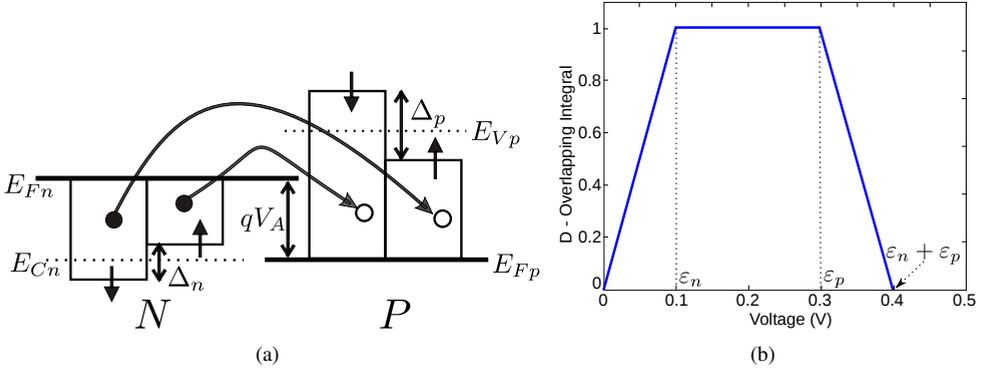


Figure A.2: (a) Schematic density of states for a Zener diode and the possible tunneling transitions. Tunneling can occur when the bias voltage causes the electron and hole density of states to overlap. The overlapping integral sets the number of states available for direct tunneling, in this case when $\varepsilon_L = \varepsilon_p = 0.3\text{eV}$ and $\varepsilon_S = \varepsilon_n = 0.1\text{eV}$ (b).

is show in figure In figure A.2(a) we show a schematic density of states for a Zener diode and the possible tunneling transitions. In figure A.2(b) the effective density of states for the overlap integral for the cases where $\varepsilon_L = 0.3$ eV and $\varepsilon_S = 0.1$ eV which are appropriate for GaAs.

The tunneling current was calculated for a range of parameters appropriate to GaAs namely a band gap $E_{gap} = 1.4$ eV and effective masses $m^* = 0.5m_e$ [HLN⁺07]. We note that value of the smaller Fermi energy $\varepsilon_S = 0.1$ eV dominates the behavior of the tunneling current at low applied voltage. The effective density of states shown in figure A.2(b) has a change of slope at ε_S ($= 0.1$ eV in this example) and the tunneling has a strong maximum near at $\varepsilon_S = 0.1$ eV. Since it is desirable to look for polarization dependence of the tunneling current near where the total tunneling current is a maximum it is clear that any change in the *smaller* of the two Fermi energies will be important. When the bands are spin split there will be two energies characterizing the occupation for each band because of the band splitting [HLN⁺07, GBB⁺06] $\varepsilon_L^\pm \equiv \varepsilon_L \pm \Delta^L/2$ and $\varepsilon_S^\pm \equiv \varepsilon_S \pm \Delta^S/2$, where Δ^L and Δ^S are the spin splitting of the two bands. The maximum value of $\Delta^{L,S}$ occurs when the band is fully polarized, these are defined as Δ_{max}^L and Δ_{max}^S . The Fermi energies are adjusted so that the total number of carriers stays constant as Δ changes. The ratio Δ/Δ_{max} is related to the spin

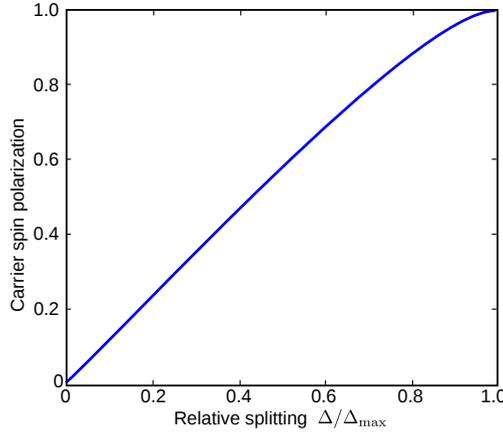


Figure A.3: Relation between the relative spin splitting Δ/Δ_{\max} and the polarization P .

polarization for each band defined as

$$P = \frac{|n^\uparrow - n^\downarrow|}{n^\uparrow + n^\downarrow}; \quad (\text{A.1})$$

clearly $P = 1$ when $\Delta/\Delta_{\max} = 1$ and $P = 0$ when $\Delta/\Delta_{\max} = 0$. The relation between these quantities is shown in figure A.3, for parabolic bands the relation is approximately linear.

The spin splitting, Δ , is caused by the exchange interaction between the localized spins of the transition metal dopants and the mobile carriers. The spin splitting of the N and P bands are proportional to $\alpha \langle S^z \rangle$ and $\beta \langle S^z \rangle$, respectively, where $\langle S^z \rangle$ is the average spin of the transition metal ions. Theoretically it is expected that $\alpha > 0$ for all transition metal ions and that the sign of β is usually negative but depends on the particular transition metal ion used as the dopant [GBB⁺06]. It is convenient here to refer to the majority and minority spin bands with Fermi energies $\varepsilon_L^\pm \equiv \varepsilon_L \pm \Delta^L/2$ and $\varepsilon_S^\pm \equiv \varepsilon_S \pm \Delta^S/2$ respectively and to note that changing the direction of the magnetization of either of the DMS will reverse the spin directions associated with these bands.

The tunneling occurs between the two majority and the two minority bands; $\varepsilon_L^+ \rightarrow \varepsilon_S^+$ and $\varepsilon_L^- \rightarrow \varepsilon_S^-$ or, if the relative magnetization of the layers is reversed, between majority and minority bands; $\varepsilon_L^+ \rightarrow \varepsilon_S^-$ and $\varepsilon_L^- \rightarrow \varepsilon_S^+$ for convenience we call these currents $I_p(V)$ and $I_{ap}(V)$ respectively. The voltage dependence of $I_p(V)$ and $I_{ap}(V)$ are shown in figure A.4 for different values of the spin splitting with the GaAs parameters. The value of Δ (and polarization) was measured for the hole band and found to be $\sim 0.7\Delta_{\max}$ [HLN⁺07, DLR⁺04], so this value is

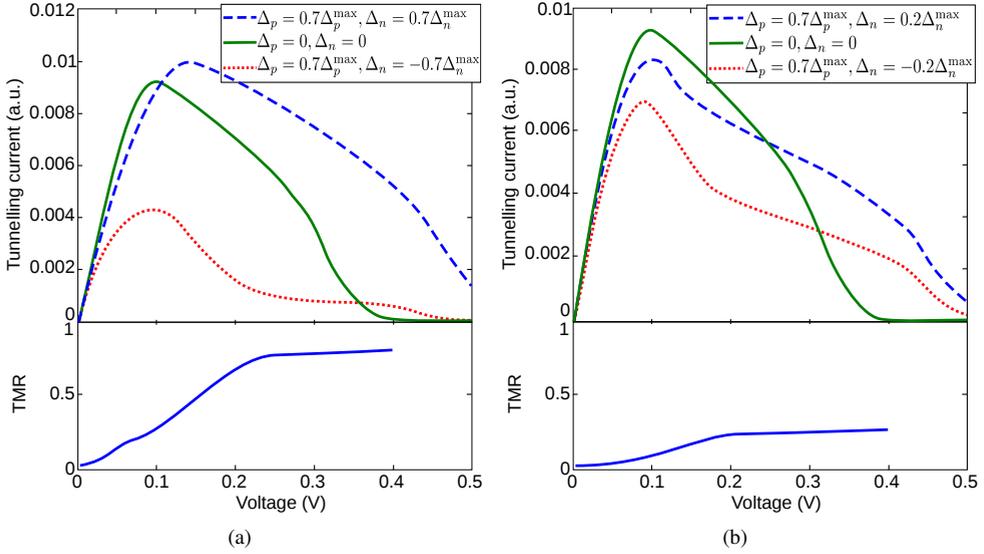


Figure A.4: The tunneling current for and TMR for (Ga,Mn)As with the splitting of the P band of $\Delta^L/\Delta_{\max}^L = 0.7$ (as observed experimentally [HLN⁺05]), the splitting of the N band is $\Delta^S/\Delta_{\max}^S = 0.7$ in (a) and is $\Delta^S/\Delta_{\max}^S = 0.2$ in (b). The tunneling currents for I_p and I_{ap} are given as well as the current for zero spin splitting. The Jullière values for the TMR are 0.65 (a) and 0.25 (b).

combined with an assumed splitting of the N band of 0.7 and 0.2 of its maximum value. These are interesting parameters because the large value of Δ_L is sufficient to bring the energy of the spin-down Fermi energy for holes below the Fermi energy for spin up electrons even though there are more holes than electrons. A particularly large tunneling magnetoresistance (TMR) occurs when the exchange splitting is large enough to invert the order of Fermi energies in this way. The way that $I_p(V)$ and $I_{ap}(V)$ depend on voltage follow from the changes in the two bands and, therefore, a study of these currents will also give useful information on the spin split Fermi energies.

If a Zener diode with both sides ferromagnetic is taken around a hysteresis loop it should show a butterfly loop with TMR,

$$\text{TMR} = \frac{|I_p(V) - I_{ap}(V)|}{I_p(V) + I_{ap}(V)} \times 100\% \quad (\text{A.2})$$

as a function of field because the magnetizations of the two components would be parallel at large fields but would be antiparallel at some intermediate field value [Jul75]. In the unlikely

event of both sides being 100% polarized both ε_L^- and ε_S^- are zero and $I_{ap}(V)$ would vanish leading to TMR = 100% at all voltages in the tunneling regime. The magnitude of the TMR is small at voltages below the smallest Fermi energy: $\varepsilon_S^- \equiv \varepsilon_S - \Delta^L/2$, so the effect is best seen in the negative resistance region.

The calculations were repeated using parameters appropriate for ZnO: we used $E_{gap} = 3.4$ eV, $m_e^* = 0.24m_0$ and $m_h^* = 0.59m_0$ and took carrier densities of $n = 5 \times 10^{20}$ cm⁻³ and $p = 5 \times 10^{18}$ cm⁻³ which gave Fermi energies of $\varepsilon_n = 0.2$ eV and $\varepsilon_p = 0.017$ eV at low temperatures. This corresponds to a larger difference between the electron and hole density than was used for GaAs. We present representative results in figure A.5 for parameters: $\frac{\Delta^L}{\Delta_{max}} = 0.7$, $\frac{\Delta^S}{\Delta_{max}} = 0.2$ in figure A.5(a) and $\frac{\Delta^L}{\Delta_{max}} = 0.2$, $\frac{\Delta^S}{\Delta_{max}} = 0.7$ in figure A.5(b). The plots of the TMR are cut off at $0.2eV$ because the total tunneling current is becoming small. The values of the TMR are strongly voltage dependent and smaller than those given by the Jullière formula,

$$\text{TMR} = \frac{2P_{left}P_{right}}{1 + P_{left}P_{right}}. \quad (\text{A.3})$$

The results derived here will act as a guide to what should be expected in an experiment. In this case there was a very large ratio in the number of carriers and so the effects of the splitting in the majority band are important. The spin splitting of the minority carriers gives a TMR signal below the peak of the tunneling current. This is demonstrated by figure A.5(a) and figure A.5(b) which show the different signals when one band is strongly polarized, $\Delta/\Delta_{max} = 0.7$, and the other more weakly polarized, $\Delta/\Delta_{max} = 0.2$. The effects of spin splitting are always weak when the voltage is below the value required for the peak current unless the minority band is strongly polarized as in figure A.5(b). The TMR signal increases in the negative resistance region and becomes much larger when the spin splitting of the carriers with the larger Fermi energy is sufficient to make the two spin up Fermi energies larger (or smaller) than the Fermi energies corresponding to spin down. The apparently large values of the TMR obtained at high voltages are unphysical because the valley current will dominate in this region.

A.2. TMR dependence on the temperature

Dilute magnetic semiconductors (DMS) are showing good characteristics at rising temperatures and new DMS are being developed to achieve spin control at room temperature [JSM⁺06]. In many cases the carrier density is low so the electrons will not be degenerate

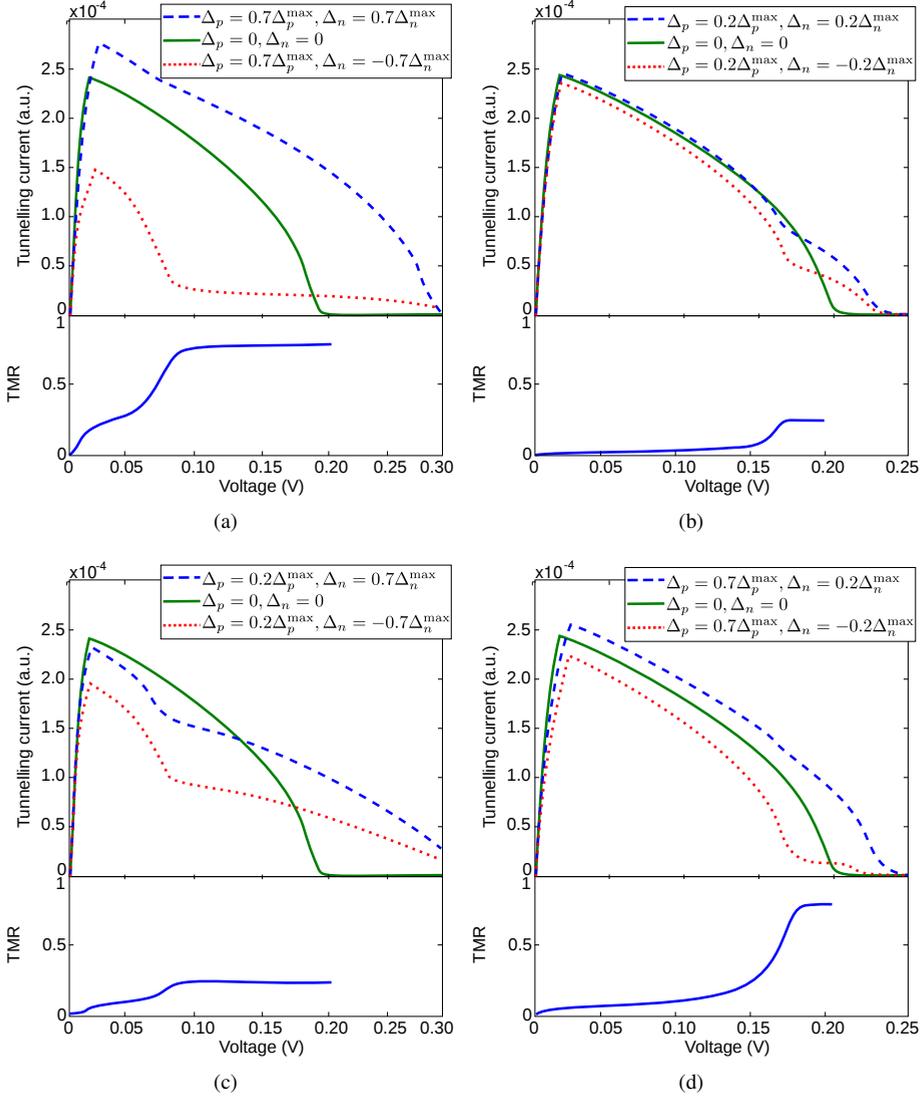


Figure A.5: The tunneling current for and TMR for ZnO with the splitting of the P (Δ^L) and N (Δ^S) bands in (a) $\Delta^L/\Delta_{\max}^L = 0.7$, $\Delta^S/\Delta_{\max}^S = 0.2$; in (b) $\Delta^L/\Delta_{\max}^L = 0.2$, $\Delta^S/\Delta_{\max}^S = 0.7$. The tunneling currents for I_p and I_{ap} are given as well as the current for zero spin splitting. The assumed carrier densities are given in the text. The Jullière values for the TMR are 0.25 for (a) and (b).

at room temperature but ZnO doped with both aluminum and a magnetic metal, cobalt or manganese is ferromagnetic with a high carrier density [XBZ⁺06]. There are also reports of ferromagnetic properties at room temperature in P type ZnO doped with small concentrations (< 1%) of Mn [KNG05].

A PN junction of two highly degenerated semiconductors makes a Zener tunneling diode which has many applications [SN06] and adding magnetic functionality would enable more devices such as magnetic switching of microwave devices. Using the previously developed analytical model [CnG07] for a both-sided-ferromagnetic diode, we add the necessary theory to consider the temperature dependence of the tunneling current and, hence, the tunneling magnetoresistance (TMR).

The current through a tunneling diode has three components [SN06]: the tunneling current, the excess current and the diffusion current. The tunneling current rises to a maximum at low voltage, about the lowest of the distances between the Fermi level and the conduction band in the N side (ε_n/q_e) and the valence band in the P side (ε_p/q_e). Then it falls to zero when bias increases over $(\varepsilon_n + \varepsilon_p)/q_e$. This fall in the I-V curve is known as negative resistance region and is produced by the overlapping of the density of carrier functions in both P and N sides.

Tunneling transport

The tunneling of carriers through the bandgap is an important part of the carrier transport in highly doped PN junctions. There are two tunneling mechanisms: the direct transition from band to band and the trap assisted tunneling. The basic principles of the band-to-band tunneling were explained by Kane [Kan61]. The tunneling probability, obtained from the WKB approximation, is given by

$$T_t \simeq \exp \left[-2 \int_u^l |\kappa(x)| dx \right], \quad (\text{A.4})$$

where $\kappa(x)$ is the wave vector associated to the carrier near the barrier, u and l are the classical turning points in the potential barrier and x is in the charge transport direction. The tunneling current is described as follows [Kan61]:

$$J_t \propto \int_{E_C}^{E_V} [F_C(E) - F_V(E)] T_t g_C(E) g_V(E) dE, \quad (\text{A.5})$$

where T_t is assumed to be equal for both directions, $F_C(E)$ and $F_V(E)$ are the Fermi-Dirac distribution functions and $g_C(E)$ and $g_V(E)$ are the density of states. Equation (A.5) shows

that the tunneling current depends on the tunneling probability T_t as well as a supply function of electrons and holes, described by the density of carriers in each band.

Mean field theory in (III,Mn)V alloys

The effect of the exchange interaction between the charge carriers and the localized magnetic moments on the energy band structure and the transport properties can be estimated by using a perturbation theory [LK03]. The total Hamiltonian describing the free carrier and magnetic subsystems in the DMS is given by

$$H_{tot} = H^{(1)} + H_{exch} + H_m, \quad (\text{A.6})$$

where $H^{(1)}$ gives the carrier energies in the spin-polarized band, H_{exch} takes account of the interaction between the free carriers and the magnetic ions and H_m the interaction between magnetic ions and the Zeeman energy when an external magnetic field is applied.

A first order correction of the band energies due to the exchange potential can be obtained, assuming external magnetic field, this is, no paramagnetic behavior of the material. The first order correction can be written as [LK03]:

$$E_{k\sigma} = E_{be}^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{\Delta}{2} (\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow}), \quad (\text{A.7})$$

where $\Delta = xJ_{exch}\langle S^z \rangle$ is the first-order band splitting. In the mean field approximation, the average spin polarization of the magnetic moments, $\langle S^z \rangle$, is given by $x\langle S^z \rangle = xS B_S(y)$ where x is the Mn ions concentration and $B_S(y)$ is the Brioullin function for the spin quantum number S with $y = g_L\mu_B S B_{eff}/K_B T$ and B_{eff} is the effective molecular field.

Figure A.6 shows the calculated band splitting at $B = 0$ T for (GaMn)As where $J_{exch}^{pd} = 1.4$ eV, $m_h^* = 0.5m_0$, $T_C = 110$ K and $S = 5/2$. We see how the ferromagnetism effects disappear for temperatures over T_C and the splitting rises and saturates to a maximum value for low temperatures. The resulting band diagram at $T = 0$ K is shown in figure A.7. There are two conduction/valence band edges, one for electrons/holes with spin up and for electrons/holes with spin down. The tunneling occurs between the two majority and the two minority bands or, if the relative magnetization of the layer is reversed, between the majority and the minority bands. We call these currents parallel current $I_p(V)$ and antiparallel current $I_{ap}(V)$.

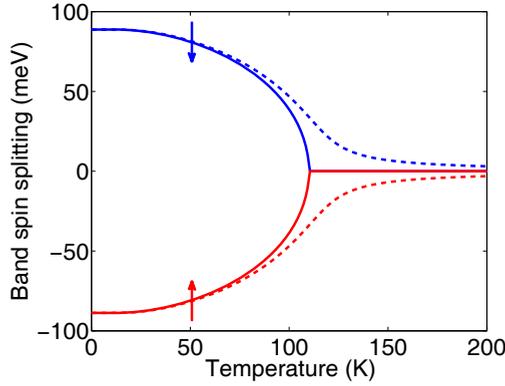


Figure A.6: Temperature dependence of the band edge in (Ga,Mn)As at $B = 0$ T (continuous line) and at $B = 4$ T (dashed line) showing the band splitting of the majority carrier when $T_C = 110$ K.

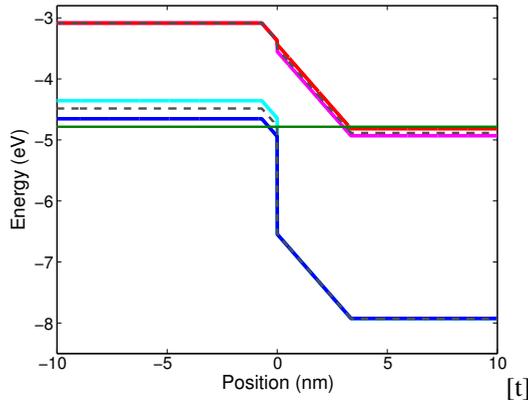


Figure A.7: Band diagram for a (Ga,Mn)As diode at equilibrium. The dotted lines are the bands when the spin polarization is zero ($p = 3 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ and $n = 0.7 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$).

Results

The tunneling current has been calculated for a theoretical GaAs diode, ferromagnetic on both sides in a range of temperatures between 0 K and T_C . Typical I-V curves are shown in figure A.8(a), where the current through a non spin-polarized diode (solid line) and for the parallel and antiparallel configuration can be seen. The TMR was evaluated at applied bias

$$V_a = \frac{\min(\varepsilon_n, \varepsilon_p) + \varepsilon_n + \varepsilon_p}{2q_e}, \quad (\text{A.8})$$

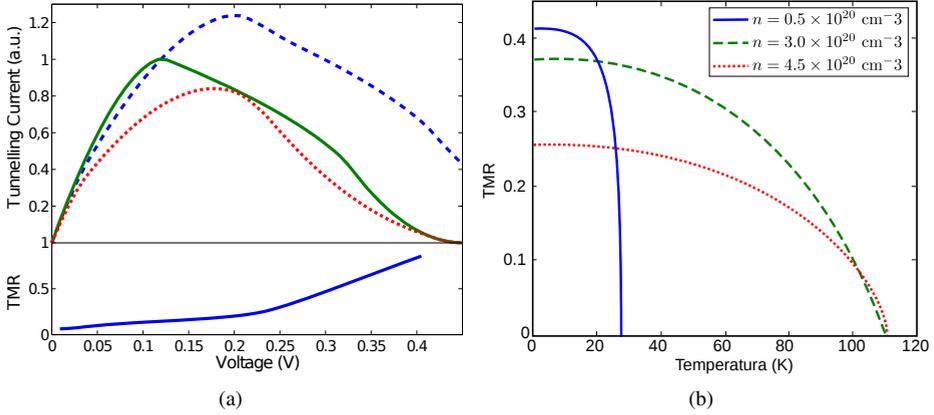


Figure A.8: (a) Tunneling current and TMR when the splittings of the P band and N band are near to 0.1 eV. The parallel (dashed, blue) and the antiparallel (dot-dashed, red) configurations are given as well as the current for zero spin-splitting (continuous, green). (b) TMR dependence on the temperature for different N side doping levels. The doping in the P side is fixed to $3 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ which correspond with $T_C = 110 \text{ K}$. The Curie temperatures in the N side are 27 K (continuous, blue), 110 K (dashed, green) and 139 K (dot-dashed, red).

which is half way between the maximum and zero tunneling current biases for a non spin-polarized diode. This bias value has been chosen because for higher values the TMR is expected to be lower because the excess and thermal current become important and they are not spin dependent. For lower biases the TMR is lower as can be seen in figure A.8(a), since the tunneling current is dominated by the overlapping of high energy states which are less dependent on the splitting.

We sample the value of the TMR at different temperatures to analyze its dependence at low and near T_C temperatures. Results from three of the evaluated configurations are shown in figure A.8(b) as the most significant: a symmetric diode (dashed green line) where the carrier concentration in each side of the diode is the same so they have the same $T_C = 110 \text{ K}$, a P⁺N diode with $T_C = 110 \text{ K}$ in the P side and $T_C = 27 \text{ K}$ in the N side and a PN⁺ diode where $T_C = 110 \text{ K}$ in the P side and $T_C = 139 \text{ K}$ in the N side. We have fixed the T_C in the P side because it is the highest Curie temperature achieved for GaAs at the moment.

Several remarks can be extracted from figure A.8(b). The highest values of the TMR are obtained for temperatures near 0 K, which is a consequence of the dependence of the magnetization and therefore of the splitting on the temperature as shown in figure A.6. The most favorable configuration to obtain high TMR values is the P⁺N diode, although it is constrained

to low temperature values, because for $T > 27$ K the N side loses its ferromagnetic properties and the TMR is no longer observable because it requires that both sides are ferromagnetic. PN⁺ configuration shows low values of TMR, even at 0 K. This can be explained from the low polarization of the carriers in the N side where the maximum possible splitting is less than 0.1 eV at temperatures near 0 K and the kinetic energy of the higher energy carriers is around 0.4 eV; therefore, only a small part of the carriers are polarized. The symmetric configuration seems to be the best configuration to see good values of TMR in the widest range of temperatures.

Another interesting result from our calculations was that, in a symmetric configuration, the TMR dependence on the temperature has the form

$$\text{TMR} \propto (T_C^n - T^n). \quad (\text{A.9})$$

In particular, for a carrier concentration level that correspond with $T_C = 110$ K, $n = 3$.

We extended our previous developed analytical model to add the temperature dependence of the ferromagnetic properties of the DMSs. We found that the TMR has a strong dependence on the temperature as well as on the relative doping values of both diode sides. We conclude that the best configuration to see high TMR values at high temperatures will be a symmetric diode. However, the highest values of TMR can be achieved from non-symmetric configurations that guarantee high polarization level of the carriers in, at least, one of the diode sides; but these values of the TMR are constrained to low temperatures.

A.3. Numerical simulation of Zener tunnel junctions

We developed analytical [CnG07] and numerical models [CnAGGL09] to study the transport in ferromagnetic Zener diodes. Using these models we have predicted the dependence of the tunneling current on the mean magnetization of the system and we have evaluated the tunneling magnetoresistance (TMR) in a theoretical both-sided-ferromagnetic diode with different spin-polarization ratios.

In the numerical models, the charge and spin transport is simulated using the drift-diffusion model [ZFE06, MG09]. Our simulator solves the Poisson and the electron and hole continuity equations self-consistently using the finite difference technique. The tunneling current is added to the total current using a generation-recombination term. This term has been modified to take into account the different spin of the carriers and therefore which of the

tunneling assisted generation-recombination processes are allowed depending on the spin of the involved carriers.

Simulator structure

Figure A.9 shows the main steps of our in-house simulator which accounts for the tunneling current through the device as it is the main contribution to the TMR in Zener diodes. Our simulator solves the Poisson equation coupled with the electron and hole continuity equations. It adds a tunneling generation/recombination term to the continuity equations which is explained in next section. This term is very sensitive to the shape of the energy band edges in two ways: the band edges determine the tunneling probability as the potential barrier changes with them and also to the local electric field that is affecting to the carrier that is suffering the tunneling process. Therefore, the model to obtain the spin-split energy bands will be a sensitive factor in the final obtained TMR.

Our simulator has been developed to deal with degenerate semiconductor based devices. Both GaAs and ZnO doped with Mn or Co show high carrier concentration, having the Fermi energy level in the carrier energy band instead of the band-gap. Therefore, we had to implement modifications on the drift-diffusion model of the current through the device to consider degeneration, thus avoiding the exponential approximation of the Fermi function in the carrier density calculation [SOK94].

The expressions for the electron and hole currents are obtained from the Boltzman transport equation (BTE) using a number of simplifications:

$$\vec{J}_n = -q_e \mu_n n \nabla \phi_n \quad (\text{A.10})$$

$$\vec{J}_p = -q_e \mu_p p \nabla \phi_p, \quad (\text{A.11})$$

where ϕ_n, ϕ_p are the Fermi pseudo-potentials and μ_n, μ_p are the mobilities for electrons and holes respectively.

The equations for the carrier currents can be expressed in terms of a drift term plus a diffusion term using the carrier concentration formula, e.g. for electrons, assuming parabolic bands:

$$n = N_C F_{1/2}(\eta_n), \quad (\text{A.12})$$

where

$$\eta_n = \frac{E_{Fn} - E_C}{k_B T} \quad (\text{A.13})$$

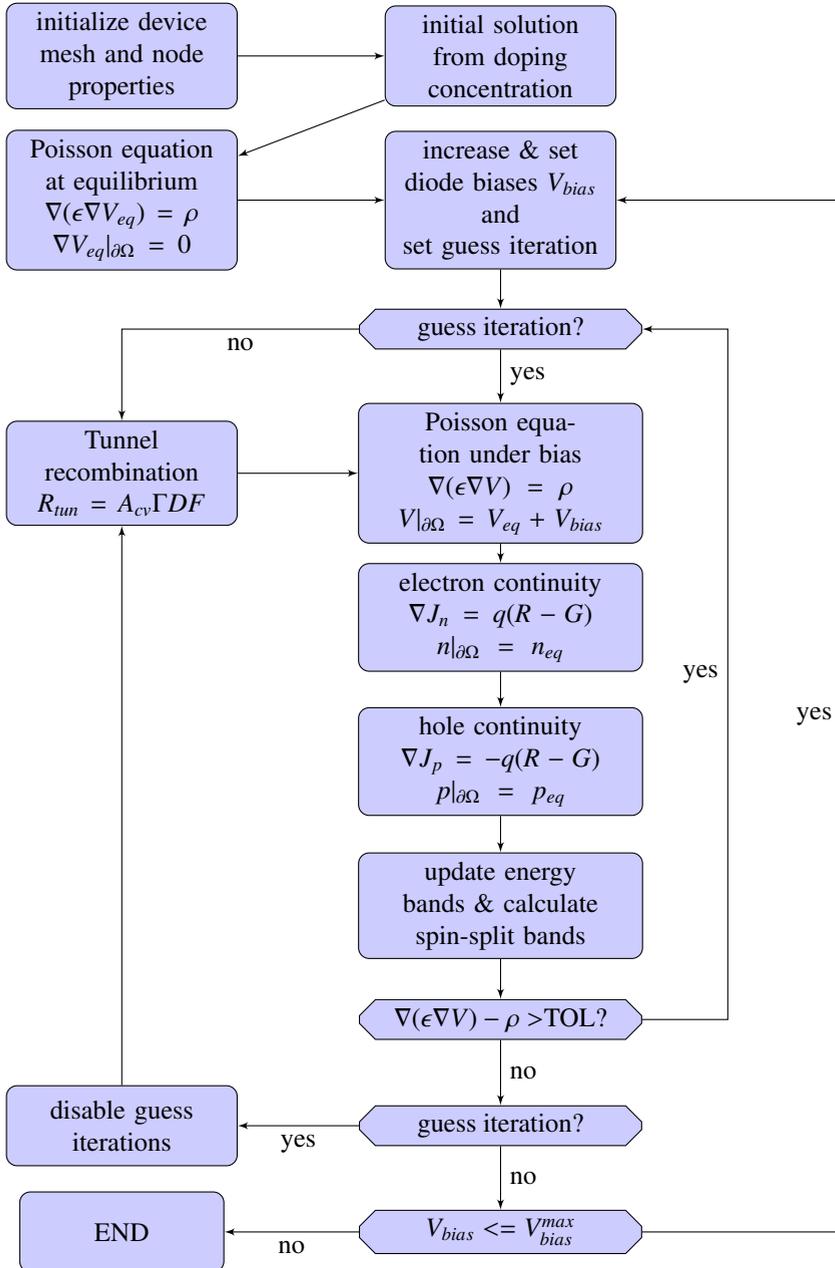


Figure A.9: General flow chart of our in-house simulator.

and $F_{1/2}(\eta_n)$ is the complete Fermi integral of index 1/2 for the electrons in the conduction band.

The carrier concentration gradient can be expressed as

$$\nabla n = N_C \nabla F_{1/2}(\eta_n) = N_C F_{-1/2}(\eta_n) \nabla \eta_n = N_C F_{-1/2}(\eta_n) \frac{\nabla E_{Fn} - \nabla E_C}{k_B T}, \quad (\text{A.14})$$

where the derivative of the complete Fermi-Dirac integral of order 1/2, $F_{1/2}(\eta_n)$, is calculated using the following property of the complete Fermi-Dirac integral of index ν , $F_\nu(\eta)$, is

$$\frac{d}{d\eta} F_\nu(\eta) = F_{\nu-1}(\eta), \quad (\text{A.15})$$

and

$$F_\nu = \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \int_0^\infty \frac{t^\nu}{\exp(t-x)+1} dt \quad (\text{A.16})$$

where $\Gamma(\nu+1)$ is the gamma function.

Using that $E_{Fn} = -q_e \phi_n$,

$$-q_e \nabla \phi_n = \frac{k_B T}{N_C F_{-1/2}(\eta_n)} \nabla n + \nabla E_C, \quad (\text{A.17})$$

therefore the electron current expression (A.10) can be reformulated as

$$\vec{J}_n = \mu_n n \left(\frac{k_B T}{N_C F_{-1/2}(\eta_n)} \nabla n + \nabla E_C \right) = \quad (\text{A.18})$$

$$= \mu_n \left(\frac{F_{1/2}(\eta_n)}{F_{-1/2}(\eta_n)} k_B T \nabla n + n \nabla E_C \right), \quad (\text{A.19})$$

and using a similar procedure we can obtain the hole current expression

$$\vec{J}_p = -\mu_p \left(\frac{F_{1/2}(\eta_p)}{F_{-1/2}(\eta_p)} k_B T \nabla p - p \nabla E_V \right). \quad (\text{A.20})$$

In the previous equations, ∇E_C and ∇E_V are the local electric field in the device and the factors $\frac{F_{1/2}(\eta_n)}{F_{-1/2}(\eta_n)}$, $\frac{F_{1/2}(\eta_p)}{F_{-1/2}(\eta_p)}$ can be interpreted as correction factors to the diffusion coefficients to account for the local degeneration level of the semiconductor.

The equations for the drift-diffusion model, obtained from the BTE, are quite limited due to the considered simplifications. They are only valid when the electric field takes relatively low values. Moreover, although we have included a degeneration factor to consider high carrier concentrations, this approximation is very limited because parabolic bands are considered in the BTE simplification and this becomes false as the degeneration increases. However,

bearing in mind that we are in the limit of the domain of validity of the drift-diffusion model, we still have performed the simulations using this model because of the computational low-cost of the calculations and also because it still can give some important insight into the behavior of such ferromagnetic devices.

The simulator initially solves the Poisson equation using Neuman boundary conditions to obtain a first solution to the electrostatic potential and carrier concentrations. After this, it performs two external iterations to solve the Poisson equation and the electron and hole continuity equations self-consistently, using Dirichlet boundary conditions: in the first iteration it solves those three equations without considering tunneling to obtain a first approach to the solution under a certain bias. In the second iteration, it will add the tunneling current as a recombination term to the continuity equations to obtain the final solution. This solution in two steps adds stability to the convergence of the resolution of the system of three differential equations.

A general iteration of the simulator consists of the solution of these three equations:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla(\epsilon\nabla V) = q_e(p - n + N_D^+ - N_A^-) \\ \nabla\vec{J}_n = q_e(R_{tun}^{e^\uparrow-h^\downarrow} + R_{tun}^{e^\downarrow-h^\uparrow}) \\ \nabla\vec{J}_p = -q_e(R_{tun}^{e^\uparrow-h^\downarrow} + R_{tun}^{e^\downarrow-h^\uparrow}) \end{array} \right\} \quad (\text{A.21})$$

where ϵ is the dielectric constant, V the electrostatic potential, N_D^+ the concentration of ionized donor impurities, N_A^- the concentration of ionized acceptor impurities, $R_{tun}^{e^\uparrow-h^\downarrow}$ the tunneling recombination term of spin-up electrons with spin-down holes and $R_{tun}^{e^\downarrow-h^\uparrow}$ the tunneling recombination term of spin-down electrons with spin-up holes. The model used in the calculation of these two terms is explained in next section. Finally, after solving those three equations, the energy bands are updated and the spin-splitting energy is recalculated using the model explained later on this section.

Tunneling recombination term

The tunneling of carriers through the band-gap is an important part of the carrier transport in highly doped PN junctions. There are two tunneling mechanisms: the direct transition from band to band and the trap assisted tunneling. The basic principles of the band-to-band tunneling were explained by Kane [Kan61]. The tunneling probability at a energy level (E),

obtained from the Wentzel-Kramers-Brioullin (WKB) two-band approximation, is given by

$$\Gamma_t \approx \exp \left[-2 \int_l^u |\kappa(x)| dx \right], \quad (\text{A.22})$$

where $\kappa(x)$ is the evanescent wave vector associated to the carrier near the barrier and u and l are the classical turning points in the potential barrier, defined by the band edges as shown in figure A.10,

$$\kappa(x) = \frac{\kappa_e \kappa_h}{\sqrt{\kappa_e^2 + \kappa_h^2}} \quad (\text{A.23})$$

and

$$\kappa_e = \frac{1}{i\hbar} \sqrt{2m_0 m_e (E - E_C)} \quad (\text{A.24})$$

$$\kappa_h = \frac{1}{i\hbar} \sqrt{2m_0 m_h (E_V - E)} \quad (\text{A.25})$$

with E_C and E_V the conduction and valence band edge energy in the classical turning points, respectively. The combination of the two electron and hole wave vector ensures that the tunneling is electron like near the conduction band, hole like near the valence band and mixed around mid-bandgap energies.

The tunneling current density is described as follows:

$$J_{tun} = \frac{q}{\pi\hbar} \int \Gamma(E) \rho_t [f_u(E + E_t) - f_l(E + E_t)] dE dE_t \quad (\text{A.26})$$

where $\rho_t = \frac{\sqrt{m_e^* m_h^*}}{2\pi\hbar^2}$ is the 2-dimensional density of states related to the two transversal wave-vectors, and f_l and f_u are the Fermi-Dirac functions evaluated using the pseudo-Fermi level for the majority carrier at the position of classical turning points [Kan61].

The integral over the transversal energy E_t can be solved considering that the total energy of the carrier must be in the range $E_{lower} \leq E + E_t \leq E_{upper}$, see figure A.10. The tunneling current for an energy range ΔE is

$$\Delta J_{tun}(E) = \frac{q k_B T \sqrt{m_e^* m_h^*}}{2\pi^2 \hbar^3} \times \Gamma(E) \times D(E) \times \Delta E, \quad (\text{A.27})$$

where $D(E)$ evaluates the energy overlapping of the carriers at each side of the junction, measuring the number of carriers available to tunnel with energy E through the depletion region from a classical turning point l to u or vice versa. It can be expressed as

$$D(E) = \log \left\{ \frac{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fl}-E}{k_B T}\right) \right]}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fu}-E}{k_B T}\right) \right]} \times \frac{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fu}-E-E_{max}}{k_B T}\right) \right]}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fl}-E-E_{max}}{k_B T}\right) \right]} \right\}. \quad (\text{A.28})$$

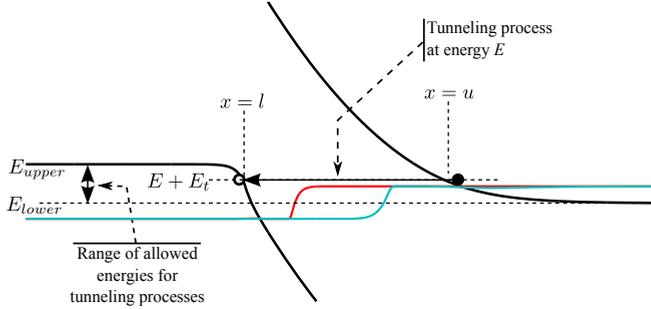


Figure A.10: Schematic representation of a tunneling process at energy E . The figure shows the classical turning points ($x = u$ and $x = l$), the range of allowed energies and the electron and hole pseudo-Fermi levels (red and blue lines, respectively) which inform about the filling of the conduction and valence band, respectively.

In this expression $E_{\max} = \min(E - E_{\text{lower}}, E_{\text{upper}} - E)$ is the maximum transversal energy, E_t , corresponding to a specific value of the energy “component” in the transport direction, E , and E_{Fl} and E_{Fu} are the values of the pseudo-Fermi levels of the majority carrier at the turning point l and u respectively.

The tunneling current can be added to the electron and hole continuity equations as a non-local generation-recombination term (R_{tun}) using that

$$R_{\text{tun}}^u = \frac{1}{q} \nabla J_{\text{tun}} = \frac{1}{q} \frac{dJ_{\text{tun}}}{d\psi} \nabla \psi = \left[\frac{dJ_{\text{tun}}}{dE} \times \mathcal{E} \right]_u \quad (\text{A.29})$$

where ψ is the electrostatic potential, $\mathcal{E} = -\nabla \psi$ is the electric field, and $E_C = -q\psi$ is equal to the energy of the carrier in the turning point, i.e., $E = E_C(x = u)$. And using a similar analysis in the other turning point, the tunnel recombination term in the turning points for a given energy is

$$R_{\text{tun}}^{l,u} = \frac{qk_B T \sqrt{m_e^* m_h^*}}{2\pi^2 \hbar^3} \times \Gamma^{l,u} \times \mathcal{E}^{l,u} \times D^{l,u}. \quad (\text{A.30})$$

Tunneling in Atlas

One of the two tools compared with our in-house developed simulator is Atlas [Atl10] from Silvaco. This simulator solves the Poisson’s equation, the continuity equations, the transport equations using the drift-diffusion and the energy balance transport models.

The non-local tunneling current model is implemented following the same equations as explained before. The main difference from our simulator is that Atlas calculates tunneling

current using equation (A.27) and then injects the obtained current in the classical turning points $x = u$ and $x = l$. However, we calculated the recombination term in equation (A.30) and then we added it to the continuity equations. We found that this approach is more stable for the convergence of the solution of the continuity equations, allowing larger degenerations and therefore larger carrier concentrations in the semiconductors.

Tunneling in Sentaurus Device

The other tool compared with our simulator is Sentaurus Device [sen10] from Synopsys. This simulator also solves the Poisson's equation, the continuity equations and the transport equations obtained from the drift-diffusion model, the thermodynamic model [Wac89] or the hydrodynamic model. It can also solve temperature equations for the lattice and carriers.

The non-local tunneling current model also evaluates the total current that flows to the conduction band in point $x = u$ from the valence band at position $l < u$. Sentaurus Device calculates a recombination rate for the valence-band electrons with energy E at a point $x = l$ (or, the generation rate of holes at $x = l$) due to the tunneling processes to or from the conduction band at $x = u$ as

$$\begin{aligned}
 G_{CV}(u, l, E) - R_{CV}(u, l, E) &= \\
 &= \frac{qA_{CV}}{2qk_B} \vartheta \left[E - E_V(l) \frac{dE_V}{dl} \Big|_l \right] \vartheta \left[E - E_C(u) \frac{dE_C}{du} \Big|_u \right] \times \\
 &\times \Gamma_{CV}(u, l, E) \times [T_p(l) - T_n(u)] \times \\
 &\times \left\{ \left[1 + \exp \left(\frac{E - E_{F,u}}{k_B T_n(u)} \right) \right]^{-1} - \left[1 + \exp \left(\frac{E - E_{F,l}}{k_B T_p(l)} \right) \right]^{-1} \right\}, \quad (A.31)
 \end{aligned}$$

where A_{CV} is a fitting parameter (also called the effective Richardson constant), T_p and T_n are the carrier temperatures, $\vartheta(x, y) = \delta(x)|y|\Theta(y)$ and Γ_{CV} is the tunneling probability obtained from the WKB approximation, as described in equation (A.22). The current density of electrons that tunnel from the valence band at all points above $x = l$ to the conduction band at a point $x = u$ is obtained integrating over the recombination rate:

$$J_{CV}(u) = \int_u^\infty \int_{-\infty}^\infty [G_{CV}(u, x, E) - R_{CV}(u, x, E)] dE dx, \quad (A.32)$$

and from an analogous analysis the tunneling from the conduction band to the valence band (J_{VC}) is obtained.

Table A.1: Suitable parameters for GaAs.

Parameter	Value
Band gap energy (E_g)	1.4 eV
Electron affinity (χ)	4.2 eV
Dielectric constant (static ϵ)	$13.2\epsilon_0$
Dielectric constant (optical ϵ)	$3.5\epsilon_0$
Electron effective mass (m_e^*)	$0.067m_0$
Hole effective mass (m_h^*)	$0.47m_0$
Effective density of states in conduction band (N_c)	$4.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
Effective density of states in valence band (N_v)	$8.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Electron mobility (μ_n)	$8500 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$
Hole mobility (μ_p)	$400 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$

Therefore, Sentaurus Device uses a different approach to evaluate the transversal momentum of the carriers that are involved in a tunneling process. It is not explicit in the expression of the tunneling current but it is accounted for through the double integral over the energy and space. Moreover, the Sentaurus Device uses the carrier temperatures instead of the lattice temperature to calculate the tunneling recombination. Our simulator and Atlas assume that both temperatures are the same.

Tunneling current results

First of all, we simulated the I-V characteristic of a GaAs and a ZnO tunnel junctions using Atlas [Atl10] from Silvaco and Sentaurus Device [sen10] from Synopsys, two standard commercial tools. The results were compared with those from our simulator in order to check its performance. The calculations were done using the parameters listed in table A.1 for GaAs and in table A.2 for ZnO which describe well most experimental observations and are consistent with the data presented in literature [VMRM01, JSM⁺06, ARL⁺99, OAL⁺05].

Figure A.11 shows results for the tunneling current in a GaAs diode with constant doping levels of $N_A = 2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ in the P side and $N_D = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ in the N side and a ZnO diode with $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ and $N_D = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. These values are in the range of the typical concentration levels in a ferromagnetic diode. The values are also chosen to have the same relation between the distances of the Fermi level to the band edged but having a majority of holes in the GaAs diode and a majority of electrons in the ZnO as it occurs naturally in

Table A.2: Suitable parameters for ZnO. $E\parallel c$ means parallel polarization and $E\perp c$ perpendicular polarization of the electric field to the optical axis.

Parameter	Value
Band gap energy (E_g)	3.3 eV
Electron affinity (χ)	4.1 eV
Dielectric constant (static ϵ)	$E\perp c$ $7.6\epsilon_0$
	$E\parallel c$ $8.5\epsilon_0$
Dielectric constant (optical ϵ)	$E\perp c$ $3.6\epsilon_0$
	$E\parallel c$ $3.7\epsilon_0$
Electron effective mass (m_e^*)	$0.27m_0$
Hole effective mass (m_h^*)	$0.54m_0$
Effective density of states in conduction band (N_c)	$3.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Effective density of states in valence band (N_v)	$1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
Electron mobility (μ_n)	$100 - 300 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$
Hole mobility (μ_p)	$0.1 - 6 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$

ferromagnetic GaAs and ZnO, which are naturally P type and N type, respectively, when they are doped with magnetic impurities.

The results from the simulations run at different temperatures show the same band diagram obtained from our simulator and the commercial versions. The band diagram obtained is shown in figures A.11(a) and A.11(b). However, the tunneling current presents different behaviors depending on the tool. The results at 300 K, figure A.11(c) for GaAs and figure A.11(d) for ZnO, show quite similar behavior between our simulator and Atlas, as we expected because we use an equivalent model for the tunneling current. Sentaurus results are different because it uses a different approximation to treat the transversal energies and can lead to the larger tunneling current near to the valley voltages.

At low temperatures the tunneling current has different behavior for the three simulators, figure A.11(e) for GaAs and figure A.11(f) for ZnO. The strange behavior of our simulator at very low voltages, in the ZnO diode, comes from instabilities in the numerical solvers that did not allow to obtain a solution with an error level low enough in some of the configurations. However, the instabilities tend to disappear rapidly as the bias rises and approaches to the peak value.

The differences in the electric response obtained from our simulator or Atlas and the obtained from Sentaurus can be explained in terms of the overlapping factors employed by every

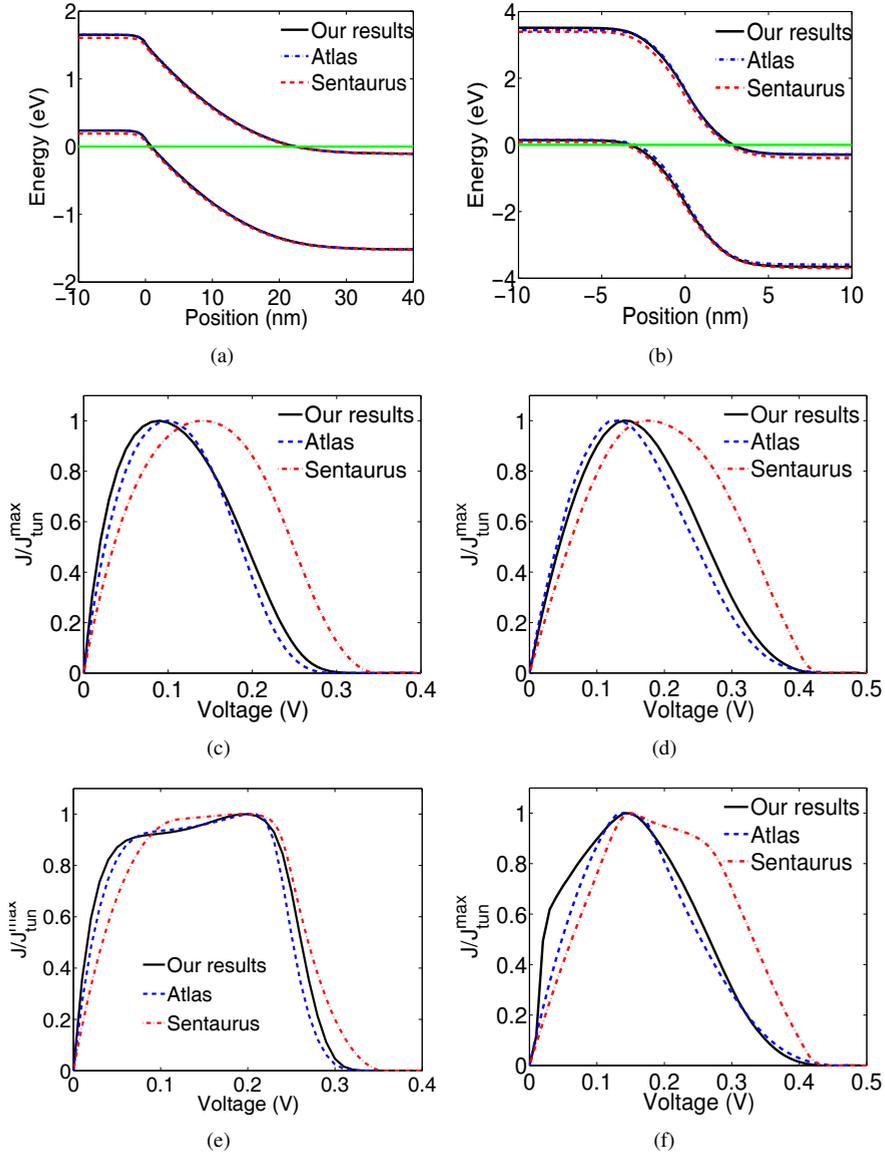


Figure A.11: Simulation of tunnel diodes based on GaAs with constant doping levels of $N_A = 2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ and $N_D = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ and ZnO with $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ and $N_D = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. The figures show the band diagram for GaAs (a) and for ZnO (b), the tunneling current for GaAs (c) and ZnO (d) at room temperature; and the tunneling current for GaAs (e) and ZnO (f) at 77 K. The calculations were performed using three different tools: our in-house simulator, Atlas and Sentaurus.

simulator. All of them obtain the tunneling current as a multiplication of the tunnelling probability, $\Gamma(E)$, times the overlapping factor, $D(E)$:

$$\Delta J_{tun}(E) \propto \Gamma(E) \times D(E) \times \Delta E. \quad (\text{A.33})$$

The overlapping factors gather the information relative to the energy of the particles involved in the tunneling process and the overlapping between the valence band in the P side of the diode and the conduction band in the N side of the diode. In our simulator and the commercial tool Atlas, the overlapping factor is calculated using the following expression:

$$D(E) = \log \left\{ \frac{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fl}-E}{k_B T}\right) \right]}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fu}-E}{k_B T}\right) \right]} \times \frac{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fu}-E-E_{max}}{k_B T}\right) \right]}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fl}-E-E_{max}}{k_B T}\right) \right]} \right\}. \quad (\text{A.34})$$

where E_{max} is the maximum energy due to momentum transversal components of the particle involved in the tunneling process, E is the component of the energy in the transport direction, and E_{Fl} and E_{Fu} are the Fermi pseudolevel values in the borders of the tunneling barrier.

In the commercial tool Sentaurus, the overlapping factor is defined as:

$$D(E) = \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_{Fu}}{k_B T}\right) \right]^{-1} - \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_{Fl}}{k_B T}\right) \right]^{-1}, \quad (\text{A.35})$$

where E is, in this case, the total energy of the particle involved in the tunneling process.

A different treatment of the carrier energy can be directly observed from the expressions of the overlapping factor. In figure A.12 we present the integral of the overlapping factors over the allowed energies for different biases. Here, can be clearly observed the origin of the large differences in the I-V characteristics obtained from Sentaurus and Atlas (or our simulator).

The small differences in the results obtained for the I-V characteristic obtained from our simulator and Atlas can have different origins. Mainly, the different response are produced because of mismatching in the material parametrization in both simulators. Even when we input the same set of initial parameters, small variations in the density of states, the effective masses or the band-gap, for example, lead to relatively important variations in the charge density or in the energy value of the Fermi pseudolevels. These differences are even more important in the depletion region of the diodes, which will affect in the results for the tunneling current obtained from the simulators.

We note that the value of the smaller relative Fermi energy ε_S , ε_n for GaAs and ε_p for ZnO, determines the maximum tunneling current for a bias ε_S/q_e . Since it is desirable to look for polarization dependence of the tunneling current near the voltage where the total tunneling

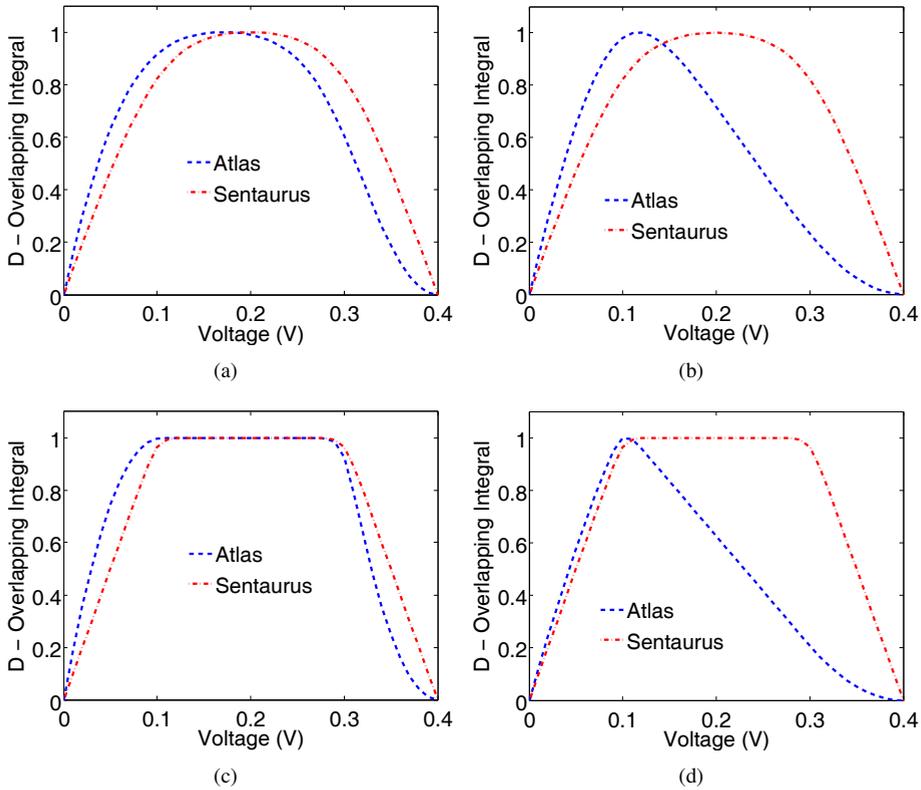


Figure A.12: Integral of the overlapping factor over the tunneling allowed energies for different biases. We used the expression for the overlapping factors in Sentaurus and Atlas. The curves are obtained for GaAs and for ZnO at 300 K (a) y (b), and at 77 K (c) y (d), respectively.

current is maximum it is clear that any change in the smallest of the two Fermi energies will drive the TMR behavior in the junction.

With these results, we want to show that the different implementations of the non-local tunneling current model lead to very different results making it impossible to calibrate our simulator using commercial tools. Another important reason to not be worried about these differences is that when the band splits due to the ferromagnetism, the tunneling current becomes very dependent on the model that is used to simulate the spin polarization in the depletion region of the junction. Therefore, the results from our simulator are considered valid because, despite the differences among the three tools, they all show the same behavior for

the results of the tunneling current and the obtained values of the peak and valley biases are in agreement with the prediction of Kane's model for the tunneling current [Kan61].

Spin split bands

The effect of the exchange interaction between the charge carriers and the localized magnetic moments on the energy band structure and the transport properties can be estimated by using a perturbation theory [LK03]. A first order correction of the band energies due to the exchange potential can be written as:

$$E_{\mathbf{k}\sigma} = E_{be}^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{\Delta}{2} (\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow}), \quad (\text{A.36})$$

where $\Delta = xJ_{exch}\langle S^z \rangle$ is the first-order band splitting. In the mean field approximation, the average spin polarization of the magnetic moments, $\langle S^z \rangle$, is given by $x\langle S^z \rangle = xS B_S(y)$, where x is the concentration of Mn ions and $B_S(y)$ is the Brioullin function for the spin S .

Figure A.6 shows the calculated band splitting of the band edge for (GaMn)As using this first order approach of the exchange interaction with $J_{exch}^{pd} = 1.4 \text{ eV}$, $m^* = 0.5m_0$, $T_C = 110 \text{ K}$ and $S = 5/2$. The band splitting disappears for temperatures over T_C at $B = 0$ and rises to a maximum value for low temperatures.

When the bands edges are spin-split, there are two different characteristic energies [HLN⁺07, GBB⁺06] for the occupations for each spin $\varepsilon_n^\sigma = E_{Fn} - E_C^\sigma = E_{Fp} - E_C \pm \Delta_n/2$ and $\varepsilon_p^\sigma = E_V^\sigma - E_{Fp} = E_V \pm \Delta_p/2 - E_{Fp}$, with $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$. The tunneling occurs between the two majority and the two minority bands or, if the relative magnetization of the layer is reversed, between the majority and the minority bands, see figure A.13. We call these currents antiparallel current $I_{ap}(V)$, figure A.13(a), and parallel current $I_p(V)$, figure A.13(b), respectively. The tunneling recombination term is reevaluated for each spin-band obtaining four recombination terms related with the $e^\uparrow-h^\downarrow$ and the $e^\downarrow-h^\uparrow$ recombinations. The maximum value of $\Delta_{n,p}$ occurs when the band is fully polarized. The Fermi energies are adjusted so that the total number of carriers stays constant as Δ changes. The spin polarization for each band defined as:

$$P = \frac{|n^\uparrow - n^\downarrow|}{(n^\uparrow + n^\downarrow)}; \quad (\text{A.37})$$

clearly $P = 1$ when the band is fully spin-polarized and $P = 0$ when the band is unpolarized.

To calculate the spin splitting we assume that the total carrier concentration remains constant when the spin is polarized, $n^0 = n^\uparrow + n^\downarrow$ and $p^0 = p^\uparrow + p^\downarrow$, where n^0 and p^0 are the electron

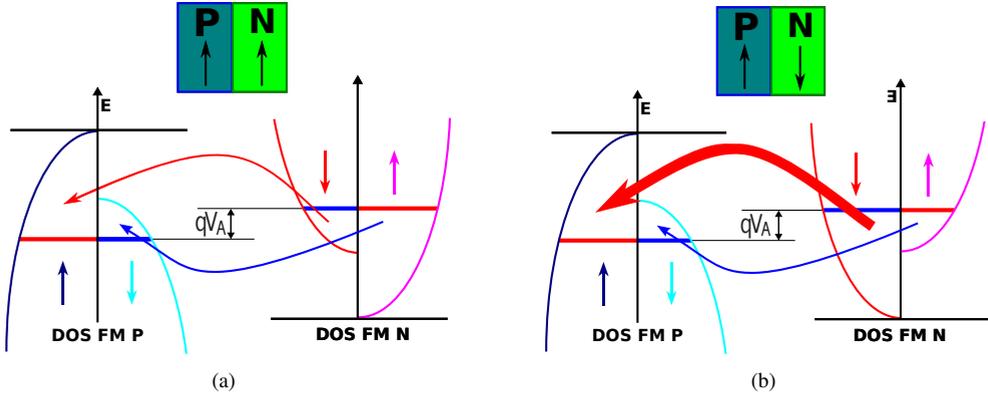


Figure A.13: Schematic representation of the spin-split bands for the antiparallel (a) and parallel (b) configuration. The arrows show the tunnel recombination processes.

and hole concentrations with no spin polarization. In this work we have made the assumption that the spin polarization ratio is conserved in each device region. To study the ferromagnetic and the antiferromagnetic interactions between the P and N sides, which correspond to the antiparallel and parallel configurations, we considered that the spin flip occurs in the depletion region, in the point where the carrier concentration reaches its minimum, because in that point the carrier mediated exchange interaction has to be weaker.

Results for GaAs

The tunneling current in the ferromagnetic case was calculated for a range of parameters appropriate to GaAs, see table A.1. We show the results in two cases, when $\epsilon_n = \epsilon_p$, i.e., when both sides have the same degeneration levels, and when $\epsilon_n < \epsilon_p$, the more realistic configuration for Co or Mn doped GaAs. We considered a temperature of 77 K, a standard lab temperature well below the largest known Curie temperature for ferromagnetic GaAs ($T_C \sim 164$ K). Figure A.14(a) shows the obtained band diagram for a diode with the same degeneration level in each side. We have chosen $\epsilon_{n,p} = 0.2$ eV as the carrier concentrations are in the range of experimental devices. Note that the depletion region on the P side is much smaller as the density of states in the valence band is one order of magnitude higher than in the conduction band, and therefore larger doping is necessary to achieve the same degeneration level. Figure A.14(a) also shows the spin-split bands obtained considering

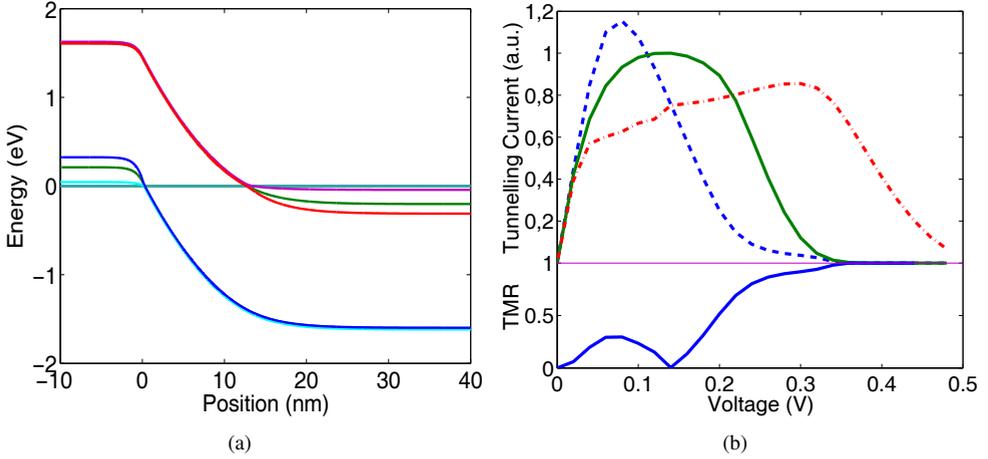


Figure A.14: (a) Band structure for a ferromagnetic GaAs diode with the same degeneration level in each side, $\varepsilon_{n,p} = 0.2$ eV, which corresponds with hole concentration of $1.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ in the P neutral region and a electron concentration of $7.3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ in the N neutral region and (b) the tunneling current density for a non-ferromagnetic diode (continuous green line), for the parallel configuration (dashed blue line) and for antiparallel configuration (dot-dashed red line); the TMR (continuous blue line) is also presented. Both results are obtained assuming a constant spin-polarization ratio of 90%.

a carrier spin-polarization of 90%. The band for each spin can be identified using the color schema shown in figure A.13. Figure A.14(b) shows that the TMR has small values when the bias is less than $\varepsilon_S/q_e = \min(\varepsilon_n, \varepsilon_p)/q_e \sim 0.2$ V and it quickly increases its value in the NRR, therefore, the effect of the spin polarization is easier to see in the NRR.

Figure A.15(a) shows the parallel and antiparallel current densities, calculated at different spin-polarization ratios at 77 K for a diode with same degeneration levels in both sides. The bias was chosen to be halfway down the NRR, $V = 0.25$ V, to have a trade-off between the rising TMR at larger biases that we obtained from our simulations, and the possible degradation of the TMR due to trap assisted tunneling and diffusion current that we did not account for in our simulations. As expected, the TMR shows higher values as the carrier polarization increases and also, at this bias, has good agreement with the predicted values from Jullière formula [Jul75], see equation (A.3).

Even though we expected some agreement with Jullière's prediction, these coincidences are surprising because Jullière's theory was formulated for thin film tunnel structures composed of two ferromagnetic metallic electrodes (Fe, Co, Pb) with a semiconductor layer (Ge)

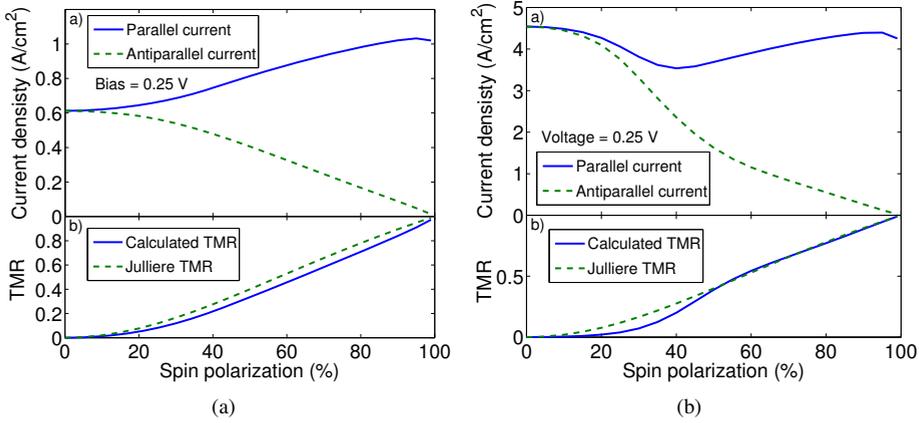


Figure A.15: (a) Parallel and the antiparallel current densities and TMR, calculated at different spin-polarization ratios at 77 K for a GaAs diode with same degeneration levels (0.2 eV) in both sides and (b) with degeneration levels of $\varepsilon_p = 0.3$ eV and $\varepsilon_n = 0.1$ eV

in the middle which acts as tunnel barrier. Moreover, the measurements that supported this theory were made at very low temperatures (4.7 K). Therefore, it would be reasonable to see a better match between our results and Jullière's at lower temperatures, but we found the opposite. Further work in this direction will be performed to gain better understanding of these phenomena. However, we want to recall that our structure is a bipolar tunnel junction (both the valence and conduction bands participate in the conduction), while Jullière's structure is a unipolar device (only the conduction band is relevant), and the tunneling barrier properties are very dependent on the bias and spin-polarization degree.

The calculations were repeated for a more realistic configuration, this is, considering different degeneration levels in each side of the junction. In this case we considered carrier concentrations observed in experiments, a hole concentration of $2.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ in the P neutral region and an electron concentration of $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ in the N neutral region, which means degenerations levels of $\varepsilon_L = \varepsilon_p = 0.3$ eV and $\varepsilon_S = \varepsilon_n = 0.1$ eV. The selected bias to extract the TMR is again $V = 0.25$ as the maximum of the tunneling current is around 0.1 V and it disappears at 0.4 V. The results are shown in figure A.15(b).

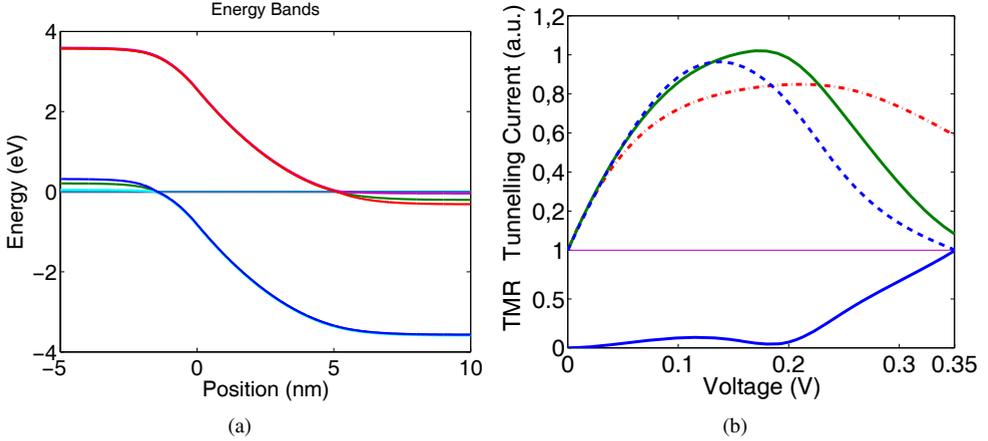


Figure A.16: (a) Band structure for a ferromagnetic ZnO diode with the same degeneration level in each side, $\varepsilon_{n,p} = 0.2$ eV, which corresponds with hole concentration of $1.7 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ in the P neutral region and a electron concentration of $6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ in the N neutral region and (b) the tunneling current density for a non-ferromagnetic diode (continuous green line), for the parallel configuration (dashed blue line) and for antiparallel configuration (dot-dashed red line); the TMR (continuous blue line) is also presented. Both results are obtained assuming a constant spin-polarization ratio of 90%.

Results for ZnO

The same procedure was followed to simulate the diode based on ZnO, using the parameters listed in table A.2. We show the results in two cases, when $\varepsilon_n = \varepsilon_p$, this is when both sides have the same degeneration levels, and when $\varepsilon_p < \varepsilon_n$, the more realistic configuration for Co or Mn doped ZnO as it is naturally a N type semiconductor. Now, we considered a temperature of 77 K to make the comparison between GaAs and ZnO results possible, but we have also made simulation at 300 K as the Curie temperature for ZnO is expected to be larger than room temperature. Figure A.16(a) shows the obtained band diagram for a diode with the same degeneration level in each side, we have chosen again $\varepsilon_{n,p} = 0.2$ eV.

Now the depletion regions are more similar as the density of states in valence and conduction bands are closer to each other. Again, figure A.16(a) also shows the spin-split bands obtained considering a carrier spin-polarization of 90%, the band for each spin can be identified using the color schema show in figure A.13. The wider band-gap of the ZnO leads to a much narrower depletion region, and therefore the equivalent tunneling barrier is also narrower, i.e., larger values of the tunneling current. However, the tunneling current is proportional to the square root of the tunneling masses of the involved carriers (see equation A.27), which are

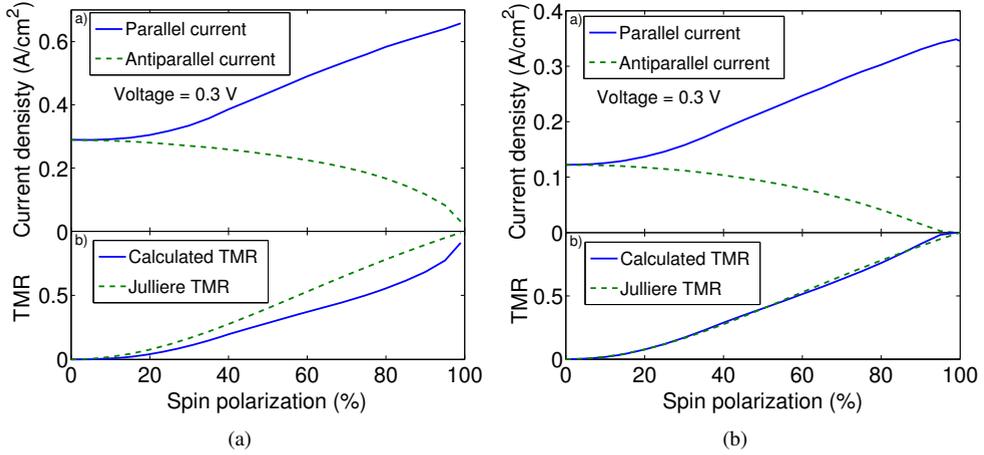


Figure A.17: Parallel and the antiparallel current densities and TMR, calculated at different spin-polarization ratios for a ZnO ferromagnetic diode with same degeneration levels in both sides at (a) 77 K and (b) 300 K.

difficult to determine, hence the tunneling current need to be calibrated from experimental measurements. Therefore, our results are normalized to the maximum tunneling current value in the non-ferromagnetic case because the TMR value does not depend on the absolute value but on the relative difference between the parallel and the antiparallel configurations.

The parallel and the antiparallel current densities and the TMR for a ZnO diode with same degeneration levels in both sides are shown in figure A.17(a) at a temperature of 77 K and figure A.17(b) at 300 K. Now the bias halfway bias down the NRR is chosen to be $V = 0.3$ V as the peak tunneling current occurs at a bias closer to 0.2 V. Again the TMR shows higher values as the carrier polarization increases and also has good agreement with the predicted values by Jullière's formula, especially at 300 K where the result from simulation is equal to the predicted values. At 77 K the Jullière's formula overestimates the TMR having a larger difference than in the GaAs case.

The calculations were repeated for the more realistic configuration, i.e., considering different degeneration levels in each side of the junction. In this case we considered the carrier concentrations observed in experiments, a hole concentration of $3.1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ in the P neutral region and an electron concentration of $1.3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ in the N neutral region, to observe the N character of the ZnO. These carrier concentrations result in degenerations levels of $\varepsilon_S = \varepsilon_p = 0.017 \text{ eV}$ and $\varepsilon_L = \varepsilon_n = 0.02 \text{ eV}$. The selected bias to extract the TMR is

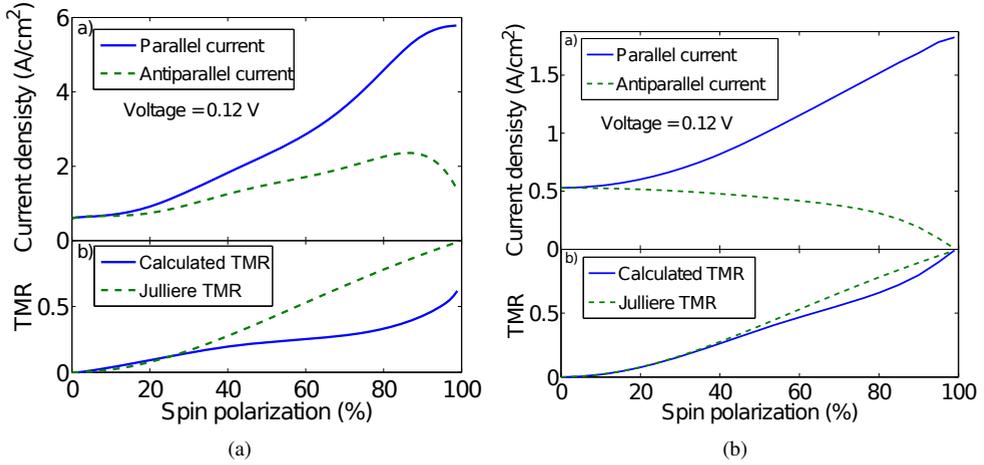


Figure A.18: The parallel and the antiparallel current densities and TMR, calculated at different spin-polarization ratios for a ZnO ferromagnetic diode with degeneration levels of $\varepsilon_p = 0.3$ eV and $\varepsilon_n = 0.1$ eV at (a) 77 K and (b) 300 K.

again 0.12 V as the maximum of the tunneling current is around 0.05 V and it disappears at 0.2 V. The results are shown in figure A.18(a) for simulations done at 77 K and in A.18(b) for 300 K.

Once more, the results at 300 K show better agreement with the TMR predicted using Jullière's formula in both cases presented. Moreover, in the last case at low temperature (figure A.18(a)) the antiparallel current shows a different behavior from previous configurations. It starts rising as the spin polarization ratio goes up until a 90% ratio is reached and then decreases rapidly. We found that this anomaly is produced by the combination of three factors:

1. The energy distribution of the carriers in the valence band and in the conduction band is described by the Fermi-Dirac function. Therefore, at low temperatures the carrier kinetic energy drops and lead to higher occupancy of the states close to the energy band edges. As a consequence, there will be more carriers available for tunneling processes leading to an increment of the overlapping factor between the energy bands, as described in equation (A.28).
2. The low hole concentration in the P side is associated with a lower degeneration level if compared with the N side, as it can be seen in figure A.19. In this situation, the overlapping between both valence bands in the P side and the conduction bands in the

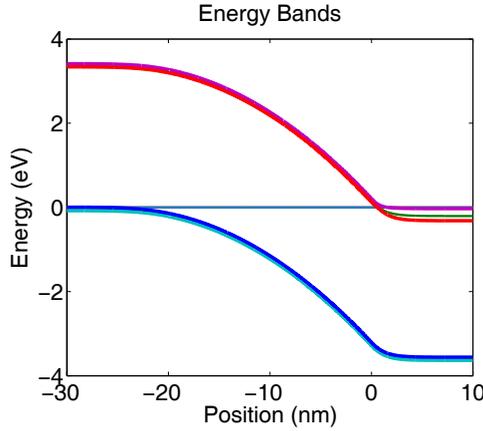


Figure A.19: Band structure for a ferromagnetic ZnO diode with the different degeneration level in each side, $\varepsilon_S = \varepsilon_p = 0.017$ eV and $\varepsilon_L = \varepsilon_n = 0.02$ eV, which corresponds with a hole concentration of $3.1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ in the P neutral region and an electron concentration of $1.3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ in the N neutral region.

N side will be complete for biases larger than around 0.02 V, depending on the spin polarization level.

3. The variation of the tunneling current with the spin polarization at some bias and at low temperature is no longer controlled by the overlapping factor but by the tunnel probability. The tunneling processes for carriers with majority spin will be favored as the spin polarization increases because the tunneling barrier will become narrower due to the band splitting.

Therefore, in a diode with a large difference in the degeneration levels in each side of the junction, and at low temperature, the currents in both configurations, parallel and antiparallel, will increase as the spin polarization level rises. However, at certain spin polarization level, the band splitting in the less degenerated side will be enough to avoid overlapping with the tunneling allowed states in the more degenerated side at some bias. Therefore, the tunneling current will diminish for higher spin polarization level in the antiparallel configuration.

Temperature dependence of the TMR from numerical simulations

While the analytical model was developed for temperatures near 0 K, the numerical simulator also allows us to run simulations at different temperatures. Here we show a detailed

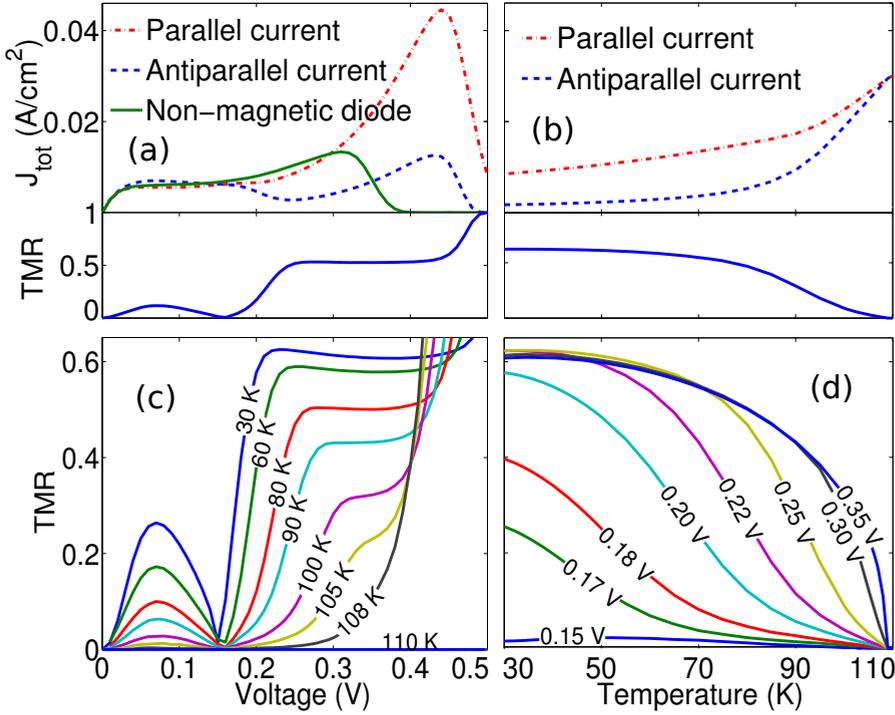


Figure A.20: (a) Current density and TMR dependence on the bias voltage for 77 K. (b) Current density and TMR dependence on the device temperature at 0.35 V. (c) TMR variation with the temperature for different characteristic biases. (d) TMR variation with the bias for different temperatures.

analysis of the tunneling current and the effect of temperature and bias on the TMR thanks to the improvement of the band spin-splitting model by adding the dependence of the spontaneous magnetization with the temperature.

To analyze the dependence of the TMR on the temperature, the calculations were repeated for different temperatures between 30 K and 110 K. Fig. A.20(b) shows the evolution of the tunneling current in the parallel and antiparallel configurations, and the corresponding TMR for different temperatures. The tunneling current corresponds to a bias of 0.35 V, chosen in the middle of the NRR as we expected the TMR maximum value in this range[CnG07]. The TMR shows saturation at low temperatures around 60% and it falls down and disappears as the temperature goes near and further of the Curie Temperature (~ 110 K). This is what we expected from the change of the band splitting with the temperature, Fig. A.13(b).

The TMR tends to saturate its value in the NRR, this can be seen in Fig. A.20(c) and A.20(d) where the TMR is almost constant for biases in the NRR. Fig. A.20(c) also shows how the TMR in the NRR acts an upper bound in the TMR evolution for low biases. In Fig. A.20(d) we observed that the TMR signal is stronger for higher voltages in the NRR; however, we have to find a trade-off between this increase and the degradation of the TMR at high biases associated to other current components. It is also worth mentioning that the parallel current always becomes larger than the antiparallel current at the same bias, $V_A \sim 0.15$ V. At this voltage, the energy overlapping between the carrier distributions in the P and N sides reaches its maximum in the parallel configuration and therefore the lowest energy carriers start to dominate the tunneling current. In this moment, the parallel configuration begins to generate larger currents than the antiparallel one.

Summary

We showed the results from the simulations performed for GaAs and ZnO ferromagnetic diodes. Firstly we showed how different available simulators offer very different results for the tunneling current even when they implement the same non-local model for the direct tunneling current, but using different approaches. We showed the results obtained for the tunneling current from the commercial tools Atlas from Silvaco and Sentaurus Device from Synopsys and they were compared with the results obtained from our in-house simulator. Secondly, we added the effect of the ferromagnetism on the carrier spin-polarization that our simulator accounts for using a spin-splitting of the band edges driving to two different energy bands depending on which carrier spin we consider. We compared the results obtained for the tunneling current in ferromagnetic GaAs and ZnO diodes under different magnetization levels and at different relevant temperatures using the TMR signal.

We compared our results with Jullière's formula and we found good agreement at room temperature even though it was formulated for low temperature. Further work should be performed to gain better understanding of these phenomena in our device. However, due to the large number of variables participating on the value of the TMR (valence band and conduction band polarization, temperature, biases and electron and hole concentrations), we considered the numerical simulation that we have proposed here a more general way to predict the TMR in this kind of structures. Additionally, it offers a trade-off between the more simplistic analytical methods, such as Jullière's formula, and those based on ab-initio calculations, like

density functional calculations and non-equilibrium Green's functions [WLG07], which are much more computationally expensive.

From the results shown before for GaAs and ZnO ferromagnetic diodes, it seems that the wider band-gap of the ZnO diode leads to lower TMR under the same conditions even when the tunneling current is more intense in the ZnO. However the TMR behavior at room temperature for ZnO shows a better agreement with the TMR values predicted using the Jullière's formula for both cases, same degeneration level and different degeneration level in the N and P sides. We have shown that larger band-gap materials could show lower TMRs; however, the possibility to operate wide band-gap DMSs at room temperatures may provide larger values of the TMR at room temperature.

The results derived here will act as a guide to what should be expected in an experiment. They also intend to be a temperature and voltage parametrization of the behavior of a future device based on a ferromagnetic PN junction. The TMR becomes more intense for growing voltages and saturates in the NRR and also at low temperatures. Study of the voltage dependence of the tunneling current will give detailed information on the relative size of the spin polarization of the carriers in each band.

A.4. Simulation of the tunneling transport in ferromagnetic GaAs/ZnO heterojunctions

In this section we focus on the analysis of a theoretical GaAs/ZnO PN junction doped with magnetic impurities to study the dependence of the charge and spin transport on the spin polarisation of the charge carriers. The analytical model [CnG07] is based on Kane's theory [Kan61] and the numerical simulator [CnAGL13] solves the drift-diffusion equations modified to consider the spin polarization. These two models allow us to predict the behaviour of the tunnel magnetoresistance (TMR) with the applied bias and temperature variation.

Analytical model

We have extended the analytical model developed in this work to calculate the I-V characteristic model of a heterojunction. This extended model take into account the different properties of the material in each side of the junction, considering the possible discontinuities of the variables in the interface. Also it calculates the I-V characteristic at different temperatures than 0 K.

The doping levels of the material are established by fixing the distances between the Fermi level and the edges of the conduction band in the N side (ε_p) and the valence band in the P side (ε_n). Also we choose an energy reference in $E_F = E_{F,p} = 0$. Therefore, the edge of the valence band in the P side is at energy

$$E_{V,p} = E_{F,p} + \varepsilon_p = \varepsilon_p \quad (\text{A.38})$$

and the edge of conduction band

$$E_{C,p} = E_{V,p} + E_{g,p}, \quad (\text{A.39})$$

in the neutral N region, the edge of the conduction band is defined by

$$E_{C,n} = q_e V_A - \varepsilon_n \quad (\text{A.40})$$

and subtracting the band-gap we obtain the energy level of the valence band

$$E_{V,n} = E_{C,n} - E_{g,n} \quad (\text{A.41})$$

where V_A is the diode bias. The built-in potential is V_{bi}

$$q_e V_1 = \chi_p + E_{g,p} + \varepsilon_p \quad (\text{A.42})$$

$$q_e V_2 = \chi_n - \varepsilon_n \quad (\text{A.43})$$

$$V_{bi} = |V_1 - V_2| \quad (\text{A.44})$$

where χ_p and χ_n are the electronic affinity and V_1 and V_2 are the energy distances between the vacuum level and the Fermi level in the P and N neutral regions, respectively.

The width of the depletion region $WD = WD_1 + WD_2$, considering an abrupt junction of two uniformly doped semiconductor is defined by

$$WD_1 = \sqrt{\frac{2n_n \varepsilon_{s,p} \varepsilon_{s,n} (V_{bi} - V_A)}{q_e p_p (p_p \varepsilon_{s,p} + n_n \varepsilon_{s,n})}}, \quad (\text{A.45})$$

$$WD_2 = \sqrt{\frac{2p_p \varepsilon_{s,p} \varepsilon_{s,n} (V_{bi} - V_A)}{q_e n_n (p_p \varepsilon_{s,p} + n_n \varepsilon_{s,n})}}, \quad (\text{A.46})$$

where WD_1 and WD_2 are the depletion region widths in the P and N sides, respectively, $\varepsilon_{s,p}$ and $\varepsilon_{s,n}$ are the dielectric constants of the semiconductors in the P and N sides, and p_p and n_n

are the hole and electron concentrations in the P and N neutral regions, which can be obtained from the Fermi integral

$$p_p = N_{V,p} F_{1/2} \left(\frac{\epsilon_p}{k_B T} \right) \quad (\text{A.47})$$

$$n_n = N_{C,n} F_{1/2} \left(\frac{\epsilon_n}{k_B T} \right) \quad (\text{A.48})$$

A band diagram for the heterojunction can be obtained from the previous parameters, as shown in figure A.21. The following equations define the energy band edges assuming a linear variation of the potential in the depletion region. The conduction band edge is given by

$$E_C(x) = \begin{cases} E_{V,p} + E_{g,p} & \text{if } x < -WD_1 \\ -\epsilon_{s,p} \frac{V_{bi}-V_A}{WD_1+WD_2} (x + WD_1) + E_{V,p} + E_{g,p} & \text{if } -WD_1 \leq x < 0 \\ -\epsilon_{s,n} \frac{V_{bi}-V_A}{WD_1+WD_2} (x - WD_2) + E_{C,n} & \text{if } 0 \leq x < WD_2 \\ E_{C,n} & \text{if } x \geq WD_2 \end{cases} \quad (\text{A.49})$$

and the valence band edge is defined by

$$E_V(x) = \begin{cases} E_{V,p} & \text{if } x < -WD_1 \\ -\epsilon_{s,p} \frac{V_{bi}-V_A}{WD_1+WD_2} (x + WD_1) + E_{V,p} & \text{if } -WD_1 \leq x < 0 \\ -\epsilon_{s,n} \frac{V_{bi}-V_A}{WD_1+WD_2} (x - WD_2) + E_{C,n} - E_{g,n} & \text{if } 0 \leq x < WD_2 \\ E_{C,n} - E_{g,n} & \text{if } x \geq WD_2 \end{cases} \quad (\text{A.50})$$

Tunnel factor: Classical turning points

The classical turning points (figure A.21) in the potential barrier can be calculated from the previous expressions of the band edges. The turning point in the valence band edge is

$$r_1(E) = \begin{cases} r_1^+ & \text{if } r_1^+ > 0 \text{ y } r_1^- > 0 \\ r_1^- & \text{if } r_1^+ < 0 \text{ y } r_1^- < 0 \\ 0 & \text{if } r_1^+ \geq 0 \text{ y } r_1^- \leq 0 \end{cases} , \quad (\text{A.51})$$

where

$$r_1^+ = -\frac{1}{\epsilon_{s,n}} \frac{WD_1 + WD_2}{V_{bi} - V_A} (E - E_{C,n} + E_{g,n}) + WD_2, \quad (\text{A.52})$$

$$r_1^- = -\frac{1}{\epsilon_{s,p}} \frac{WD_1 + WD_2}{V_{bi} - V_A} (E - E_{V,p}) - WD_1, \quad (\text{A.53})$$

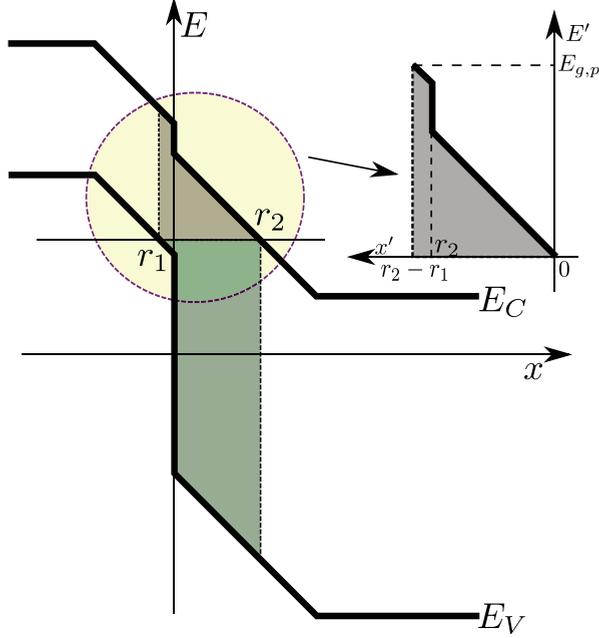


Figure A.21: Schematic diagram of the tunneling barrier and necessary parameters to calculate the tunneling probability in the GaAs/ZnO heterojunction.

and the turning point in the conduction band edge is

$$r_2(E) = \begin{cases} r_2^+ & \text{if } r_2^+ > 0 \text{ y } r_2^- > 0 \\ r_2^- & \text{if } r_2^+ < 0 \text{ y } r_2^- < 0 \\ 0 & \text{if } r_2^+ \geq 0 \text{ y } r_2^- \leq 0 \end{cases}, \quad (\text{A.54})$$

where

$$r_2^+ = -\frac{1}{\epsilon_{s,n}} \frac{WD_1 + WD_2}{V_{bi} - V_A} (E - E_{C,n}) + WD_2, \quad (\text{A.55})$$

$$r_2^- = -\frac{1}{\epsilon_{s,p}} \frac{WD_1 + WD_2}{V_{bi} - V_A} (E - E_{V,p} - E_{g,p}) - WD_1, \quad (\text{A.56})$$

Tunnel factor: New tunnel probability

The tunnel probability from the WKB approximation is

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \int_{r_2(E)}^{r_1(E)} |k(x, E)| dx \right], \quad (\text{A.57})$$

and under parabolic band approximation

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \int_{r_2(E)}^{r_1(E)} \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar} (E_C - E)} dx \right], \quad (\text{A.58})$$

and doing the change of variable in figure A.21

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \int_0^{|r_2(E) - r_1(E)|} \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar} E_C} dx \right]. \quad (\text{A.59})$$

The tunneling probability for the heterojunction can be obtained using the equations for the band edges and for the turning points. If the interface between material is at $r = 0$, the tunneling probability has three different expressions depending on the relative position of the turning points r_1 and r_2 . Then, if $r_1(E) < 0$ y $r_2(E) > 0$:

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \left(\int_0^{r_2(E)} \sqrt{\frac{2m_n^*}{\hbar^2} q_e \mathcal{E}_n x} dx + \int_{r_2(E)}^{|r_2(E) - r_1(E)|} \sqrt{\frac{2m_p^*}{\hbar^2} (q_e \mathcal{E}_p x + \Delta\chi)} dx \right) \right], \quad (\text{A.60})$$

that integrating over x

$$T_t(E) \sim \exp \left\{ -\frac{4\sqrt{2}}{\hbar} \left[\sqrt{m_n^*} q_e \mathcal{E}_n r_2(E)^{3/2} + \frac{\sqrt{m_p^*}}{q_e \mathcal{E}_p} [q_e \mathcal{E}_p |r_2(E) - r_1(E)| - \Delta\chi]^{3/2} - [q_e \mathcal{E}_p r_2(E) - \Delta\chi]^{3/2} \right] \right\}. \quad (\text{A.61})$$

The second possibility happens when $r_1(E) > 0$ and $r_2(E) > 0$:

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \int_0^{|r_2(E) - r_1(E)|} \sqrt{\frac{2m_n^*}{\hbar^2} q_e \mathcal{E}_n x} dx \right], \quad (\text{A.62})$$

that integrating over x

$$T_t(E) \sim \exp \left[-\frac{4\sqrt{2}}{\hbar} \sqrt{m_n^* q_e \mathcal{E}_n} |r_2(E) - r_1(E)|^{3/2}(E) \right]. \quad (\text{A.63})$$

And the third possibility, when $r_1(E) < 0$ and $r_2(E) < 0$, is:

$$T_t(E) \sim \exp \left[-2 \int_0^{|r_2(E)-r_1(E)|} \sqrt{\frac{2m_p^*}{\hbar^2} (q_e \mathcal{E}_p x + \Delta\chi)} dx \right], \quad (\text{A.64})$$

that integrating over x

$$T_t(E) \sim \exp \left[-\frac{4\sqrt{2m_p^*}}{\hbar q_e \mathcal{E}} [q_e \mathcal{E}_p |r_2(E) - r_1(E)| - \Delta\chi]^{3/2} \right], \quad (\text{A.65})$$

where for all the three previous expressions $\mathcal{E}_p = -\epsilon_{s,p} \frac{V_{bi}-V_A}{\text{WD}_1+\text{WD}_2}$ and $\mathcal{E}_n = -\epsilon_{s,n} \frac{V_{bi}-V_A}{\text{WD}_1+\text{WD}_2}$ is the electric field in the depletion region of the P and N sides, respectively.

Spin-split bands

The hole concentration p_p and the electron concentration n_n previously obtained from the relative Fermi energies ε_p y ε_n , equations (A.47) and (A.48), are used now to calculate the carrier concentrations, with different charge and spin, from the spin polarization ratios assumed in the P region \mathcal{R}_p and in the N region \mathcal{R}_n . Therefore, the hole concentrations are:

$$p_p^\uparrow = p_p \frac{\mathcal{R}_p + 1}{2}, \quad (\text{A.66})$$

$$p_p^\downarrow = p_p \frac{1 - \mathcal{R}_p}{2}, \quad (\text{A.67})$$

and the electron concentrations

$$n_n^\uparrow = n_n \frac{\mathcal{R}_n + 1}{2}, \quad (\text{A.68})$$

$$n_n^\downarrow = n_n \frac{1 - \mathcal{R}_n}{2}. \quad (\text{A.69})$$

From this concentrations we calculate the energy distance between the Fermi level and each split band. The split relative Fermi energies in the P neutral region are

$$\varepsilon_p^\uparrow = k_B T F_{-1/2} \left(2 \frac{p_p^\uparrow}{N_{V,p}} \right), \quad (\text{A.70})$$

$$\varepsilon_p^\downarrow = k_B T F_{-1/2} \left(2 \frac{p_p^\downarrow}{N_{V,p}} \right), \quad (\text{A.71})$$

The split relative Fermi energies in the N neutral region are

$$\varepsilon_n^\uparrow = k_B T F_{-1/2} \left(2 \frac{n_n^\uparrow}{N_{C,n}} \right), \quad (\text{A.72})$$

$$\varepsilon_n^\downarrow = k_B T F_{-1/2} \left(2 \frac{n_n^\downarrow}{N_{C,n}} \right). \quad (\text{A.73})$$

Using these energy distances we obtain the new parameters to calculate the new spin-split band diagram. The new edges for the valence bands in the P neutral region are

$$E_{V,p}^\sigma = E_{F,p} + \varepsilon_p^\sigma = \varepsilon_p^\sigma \quad (\text{A.74})$$

and the conduction bands

$$E_{C,p}^\sigma = E_{V,p}^\sigma + E_{g,p}. \quad (\text{A.75})$$

And the new edges for the spin-split conduction band in the N neutral region are

$$E_{C,n}^\sigma = q_e V - \varepsilon_n^\sigma \quad (\text{A.76})$$

and the valence bands

$$E_{V,n}^\sigma = E_{C,n}^\sigma - E_{g,n}. \quad (\text{A.77})$$

Gathering all together we obtain the functions that define the spin-split band edges. The conduction bands are defined by

$$E_C^\sigma(x) = \begin{cases} E_{V,p}^\sigma + E_{g,p} & \text{if } x < -WD_1 \\ -\varepsilon_{s,p} \frac{V_{bi}-V_A}{WD_1+WD_2} (x + WD_1) + E_{V,p}^\sigma + E_{g,p} & \text{if } -WD_1 \leq x < 0 \\ -\varepsilon_{s,n} \frac{V_{bi}-V_A}{WD_1+WD_2} (x + WD_2) + E_{C,n}^\sigma & \text{if } 0 \leq x < WD_2 \\ E_{C,n}^\sigma & \text{if } x \geq WD_2 \end{cases} \quad (\text{A.78})$$

and the valence bands

$$E_V^\sigma(x) = \begin{cases} E_{V,p}^\sigma & \text{if } x < -WD_1 \\ -\varepsilon_{s,p} \frac{V_{bi}-V_A}{WD_1+WD_2} (x + WD_1) + E_{V,p}^\sigma & \text{if } -WD_1 \leq x < 0 \\ -\varepsilon_{s,n} \frac{V_{bi}-V_A}{WD_1+WD_2} (x + WD_2) + E_{C,n}^\sigma & \text{if } 0 \leq x < WD_2 \\ E_{C,n}^\sigma - E_{g,n} & \text{if } x \geq WD_2 \end{cases} \quad (\text{A.79})$$

where $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

These new bands are now employed in the calculation of the classical turning points and the tunnel probability to obtain the tunneling current in the parallel and antiparallel configuration, and lastly, to calculate the TMR for each spin polarization.

Transport equations in the numerical simulator

The numerical simulator solves the Poisson equation and the continuity equations consistently with the spin split bands calculated in each point of the device. The drift-diffusion equations

$$\nabla J_n = -q_e(R_{c \rightarrow v}^\uparrow + R_{c \rightarrow v}^\downarrow) \quad (\text{A.80})$$

and

$$\nabla J_p = q_e(R_{c \rightarrow v}^\uparrow + R_{c \rightarrow v}^\downarrow) \quad (\text{A.81})$$

are modified to consider the degenerate case using a correction factor $\xi(\eta) = \frac{F_{1/2}(\eta)}{F_{-1/2}(\eta)}$ to take account of the degeneration level:

$$J_n = \mu_n [\xi(\eta_n)k_B T \nabla n + n \nabla E_C] \quad (\text{A.82})$$

and

$$J_p = -\mu_p [\xi(\eta_p)k_B T \nabla p - p \nabla E_V]. \quad (\text{A.83})$$

The carrier concentration, $n = n^\uparrow + n^\downarrow$ and $p = p^\uparrow + p^\downarrow$, is calculated using the Fermi integral, $n^\sigma = \frac{N_c}{2} F_{1/2}(\eta_n^\sigma)$ and $p^\sigma = \frac{N_v}{2} F_{1/2}(\eta_p^\sigma)$ and $\eta_n^\sigma = (E_{Fn} - E_C^\sigma)/k_B T$ and $\eta_p^\sigma = (E_{Fp} - E_V^\sigma)/k_B T$.

Thermionic emission

The properties of the materials change abruptly in the interface created in the depletion region. This produce potential barriers that the drift-diffusion model is unable to treat correctly. To simulate the heterojunction diodes we need to use the emission-diffusion model [Rho82, SN06] using the formulation proposed in [Lop94]. This model accounts for the different effective mass in each side of the heterojunction interface. Also it assumes that all the charge transport is perpendicular to the interface plane as shown in figure A.22. In this figure, x_j is the interface position, E_m y E^* are the energy levels that define the energy barrier height in the conduction band (ΔE_C) and $\Delta E_V = E_V(x_j^+) - E_V(x_j^-)$ is value in energy of the valence band discontinuity. The positions with superscripts $^+$ and $^-$ refer to the right and left side of the discontinuity.

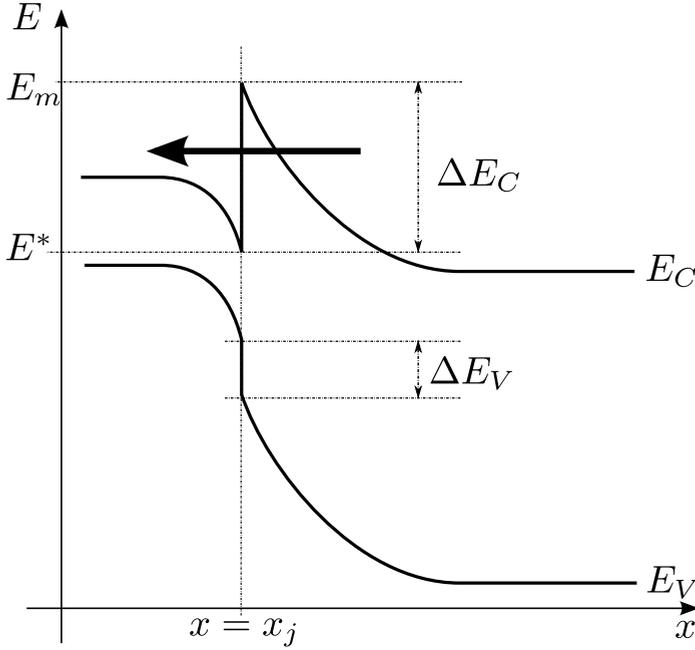


Figure A.22: Band diagram in an abrupt heterojunction.

The density of current is from this model is defined as:

$$J_n = -q_e v_{nef} \left[\frac{N_{c2}}{N_{c1}} n(x_j^-) - n(x_j^+) \exp\left(-\frac{\Delta E_C}{k_B T}\right) \right], \quad (\text{A.84})$$

where v_{nef} is the effective velocity of the carriers:

$$v_{nef} = \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m^*}} (1 + p_t), \quad (\text{A.85})$$

and p_t a tunnel transmission term through the potential barrier produced by the property discontinuities. p_t is calculated as

$$p_t = \frac{1}{k_B T} \int_{E^*}^{E_m} T(E) \exp\left(\frac{E_m - E}{k_B T}\right) dE, \quad (\text{A.86})$$

where $T(E)$ is the tunneling probability. From WKB approximation [Kan61]:

$$T(E) = \exp\left(\frac{-4\pi\sqrt{2m^*}}{h} \int_x^{x_j} \sqrt{E_C(x) - E} dx \Theta(E_m - E)\right), \quad (\text{A.87})$$

where $\Theta(x)$ Heaviside function.

Also the hole current can be obtained. In the case show in figure A.22 there is no tunneling barrier for holes, therefore, the hole current due to thermionic emission is:

$$J_p^{et} = q_e v_{pef} \left[\frac{N_{v2}}{N_{v1}} p(z_j^-) - p(z_j^+) \exp\left(-\frac{\Delta E_v}{k_B T}\right) \right], \quad (\text{A.88})$$

where v_{pef} is the hole effective velocity:

$$v_{pef} = \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m^*}}. \quad (\text{A.89})$$

Boundary conditions

New boundary conditions are added to the simulator to considered the different material interface. These new boundary conditions connect the variable value at each side of the interface.

The first boundary condition is about the continuity of the electrostatic potential:

$$\psi(x_j^-) = \psi(x_j^+). \quad (\text{A.90})$$

Next, the new boundary conditions for the charge density:

$$J_n(x_j^-) - J_n(x_j^+) = q_e \left(R_l + \int_{x_j^-}^{x_j} R(x_j^-) dx + \int_{x_j}^{x_j^+} R(x_j^+) dx \right) \quad (\text{A.91})$$

and

$$J_p(x_j^-) - J_p(x_j^+) = -q_e \left(R_l + \int_{x_j^-}^{x_j} R(x_j^-) dx + \int_{x_j}^{x_j^+} R(x_j^+) dx \right), \quad (\text{A.92})$$

which are different than those when the properties were continuous:

$$n(x_j^-) = n(x_j^+) \quad (\text{A.93})$$

and

$$p(x_j^-) = p(x_j^+). \quad (\text{A.94})$$

Results

We use the following parameters: $E_g = 1.4$ eV, $\chi = 4.07$ eV, $\epsilon_r = 13.2$, $m_n^* = 0.06m_0$ and $m_p^* = 0.5m_0$ for GaAs and $E_g = 3.4$ eV, $\chi = 4.20$ eV, $\epsilon_r = 8.6$, $m_n^* = 0.24m_0$ and $m_p^* = 0.59m_0$

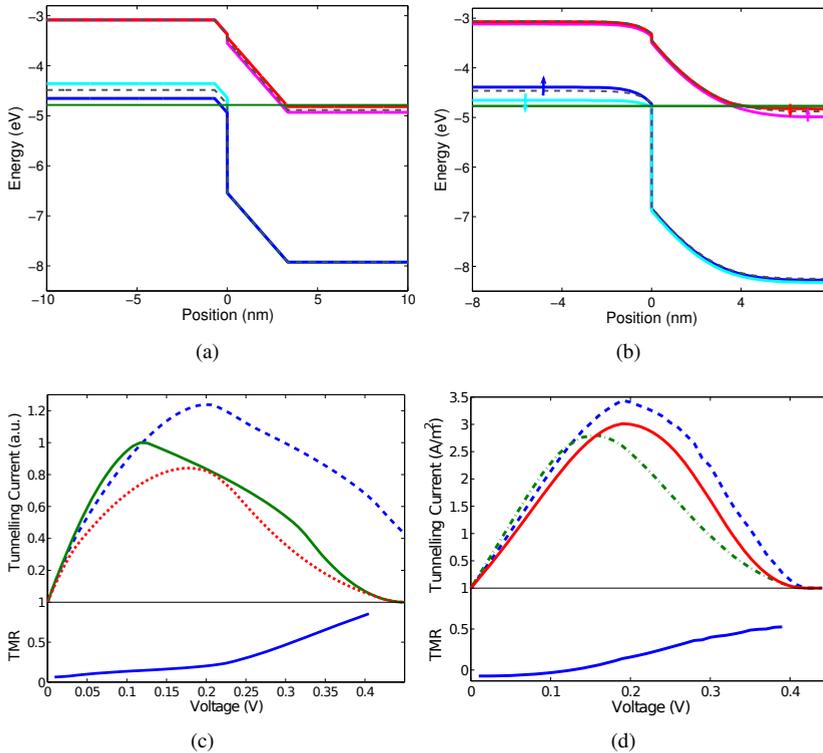


Figure A.23: Simulation results from the analytical model (a), (c) and the drift-diffusion simulator (b), (d). Energy band diagram and together the I-V characteristic and the TMR. In both the analytical and numerical case the spin polarisation ratio is 70%.

suitable for ZnO [PNI⁺03]. The doping levels are 10^{20} cm^{-3} in the N-side and $3 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ in the P-side. The calculations were done considering a 70% of spin polarization and the temperature was set to 77 K.

Figures A.23(a) and A.23(b) show the energy band diagram obtained from the analytical model and the numerical simulator, respectively. In figure A.23(b) it is possible to see how the splitting disappears as the carrier concentration drops in the depletion region. The analytical model does not show this because the splitting is constant.

Figures A.23(c) and A.23(d) show the tunneling current and TMR from the analytical model and the numerical simulator, respectively. The red solid line is the tunneling current in a non ferromagnetic diode and the blue dashed line and the green dot-dashed line are the tunneling current for the parallel and antiparallel configurations. The I-V characteristic

shows that in the region where the diode is showing negative resistance, in biases between 0.2 V and 0.4 V, the TMR reaches the highest values. Half way in the negative resistance region, bias ~ 0.3 V, the analytical model shows a higher value of the TMR, $\sim 50\%$, than in the drift-diffusion model, $\sim 40\%$. This can be explained by the constant splitting in the analytical model that reduces the tunneling-barrier width with respect to the numerical model, giving larger values of the parallel tunneling current. The TMR for larger biases can not be considered because other components of the current (defect assisted or thermal current) have to be taken into account. The values of the TMR are in the same range as experimental values in resonant MTJs [CZP09].

The analytical model is giving more optimistic results for the TMR than the numerical model. However, the numerical model allows a more precise description of the tunneling current and its dependence on the spin splitting that leads to more realistic results.

A.5. Simulation of electron transport in magnetic tunnel junctions

One of the most popular DMS systems, zinc oxide doped with transitional magnetic metals, $(\text{Zn,Co})\text{O}$, is being studied extensively because of its Curie temperature T_C well above room temperature and its promising magneto-optical and magnetotransport properties. Moreover, nowadays there is a growing interest in the study of complex structures based in this material, such as magnetic tunnel junctions (MTJs), to analyze the influence of spin polarization on the charge transport. This kind of structures is well studied using the popular DMS $(\text{Ga,Mn})\text{As}$, but the operation of such a device is restrained to very low temperatures (< 30 K) due to the low Curie temperature (~ 110 K).

The tunneling magnetoresistance (TMR) has been measured experimentally in magnetic GaAs and ZnO based MTJs. This parameter provides information about the spin polarization rate within the DMSs, and a measure of the quality of spin injection from magnetic to non-magnetic semiconductors. The experimental measurements of the TMR ($\sim 50\%$) in ZnO based MTJs shows that they could be applied to develop magnetoresistive random access memories (MRAM) or hard-disk read heads [SLZP07].

In this section we present the results of the simulations done for a $(\text{Zn,Co})\text{O}/\text{ZnO}/(\text{Zn,Co})\text{O}$ MTJ to obtain the I-V spin dependent characteristic and the TMR. The simulations are done using an in-house simulator that solves the coupled system

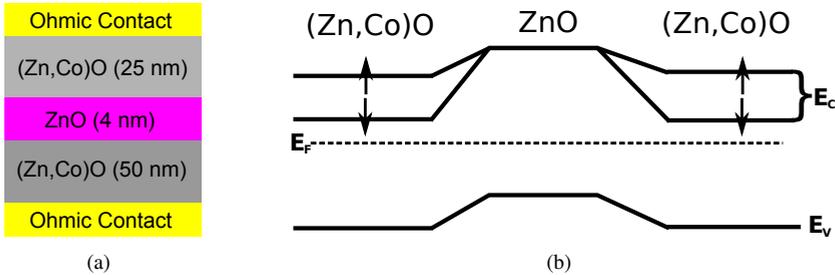


Figure A.24: (a) Schematic representation of the simulated magnetic tunnel junction based in ZnO. Schematic representation of the expected band diagram. (b) Ferromagnetic electrodes should show conduction band splitting for each electron spin because of the N type nature of the ZnO doped with cobalt.

comprised of the Poisson equation and two spin dependent continuity equations for the electron current density using a finite difference discretization. The recombination terms in the continuity equation are also modified to take into account the spin polarization, and they include the tunnel transport mechanisms and the spin relaxation processes. The results are compared with previous experimental results obtained for a range of temperatures between 4 K and room temperature [SLZP07].

Device structure and simulation

The simulated structure is shown in figure A.24 and it displays a cross-sectional view of (Zn,Co)O (50 nm)/ZnO (4 nm)/(Zn,Co)O (25 nm) junctions. The structure comprises two (Zn,Co)O ferromagnetic electrodes, which act as electron spin filters, and a narrow layer of pure insulating ZnO that works as tunneling barrier. In this scenario, the TMR is expected to persist even over room temperatures, and this MTJ structure can provide a sensor for the spin injection from one of the (Zn,O)Co electrodes to the ZnO layer, detected by measuring the spin polarized tunneling into the other ferromagnetic electrode. Following previous experimental work [SLZP07], the $(\text{Zn}_{0.94}, \text{Co}_{0.06})\text{O}$ electrodes, deposited by RF magnetron sputtering, show a resistivity of $\sim 1.7 \times 10^{-2} \Omega\text{cm}$ [SPL+07], which corresponds with a electron density of $\sim 3.7 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$, if the electron mobility is assumed to be $\mu_n \sim 100 \text{cm}^2/\text{Vs}$. The ZnO intrinsic layer, grown by reactive magnetron sputtering, shows a resistivity of $\sim 10^7 \Omega\text{cm}$ [SGZ+06].

To run the simulations, we have used the parameters listed in Table A.2 for ZnO which describe well most experimental observations and are consistent with the data presented in

literature [ARL⁺99, OAL⁺05]. The shift of the state distribution originated from the splitting of the conduction band due to the ferromagnetism induced by the magnetic ions (Co) added to the semiconductor is shown in figure A.25. This effect can also be enhanced by immersing the sample in a magnetic field, as it will induce higher values in the magnetization of the sample. As the magnetization value becomes higher the spin polarization of the carriers will be more important and therefore the splitting of the bands will be larger.

For the purpose of our simulations, we consider different values of the ratio of the electron spin polarization. They can be the effect of spontaneous ferromagnetism or different applied magnetic fields. For each spin polarization ratio we calculate the current through the device in a range of applied biases between -2 and 2 Volts. For a better understanding of the effect of the ferromagnetism we also calculate the TMR for different biases and spin polarization ratios. The TMR is defined as

$$\text{TMR \%} = 100 \times \frac{R(P) - R(0)}{R(0)}, \quad (\text{A.95})$$

where $R(P)$ and $R(0)$ are resistances for the spin polarized and the non-polarized cases, respectively, at the same bias. The spin polarization ratio is defined as the relative difference between the spin up and down electron concentrations, this is

$$P = \frac{|n^\uparrow - n^\downarrow|}{n^\uparrow + n^\downarrow}. \quad (\text{A.96})$$

Results

Figure A.25 shows the obtained conduction band for the simulated structure at 4 K in two different situations, a non-ferromagnetic MTJ (solid blue line) and a MJT with two ferromagnetic electrodes (dashed lines). To obtain this band structure a electron concentration of $n = 3.7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ is supposed. Due to the low temperature, the semiconductor shows a large degeneration level and also because of the carrier diffusion into the intrinsic medium layer the tunnel barrier is relatively low. Because of those two effects we assume that the electron current is dominated by the drift component, therefore in this first approach we do not consider the tunneling current through the device. This assumption becomes more realistic as the device is subjected to higher biases. Here we are also supposing that both spin components diffuse equally into the intrinsic layer, then the spin polarization ratio is conserved through the whole device.

Figure A.26(a) shows the dependence of the TMR on the polarization ratio of the electron spin at 4, 20, 50 and 100 K, at different spin-polarization ratios, which is equivalent to different

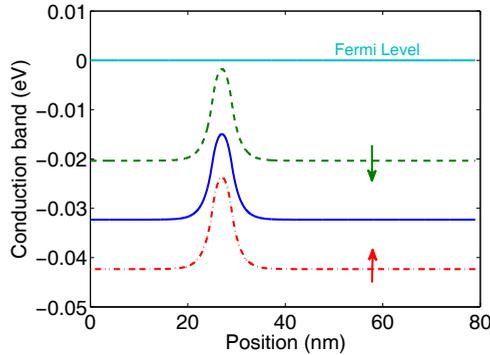


Figure A.25: Conduction band in equilibrium of the MJT at a temperature of 4 K. The solid line correspond to a non-ferromagnetic configuration (no magnetization), and the two dashed lines are obtained considering a spin-polarization ratio of $P = 50\%$.

magnetic fields applied to the device. The TMRs are calculated at “half voltage” $V_{1/2}$, the bias for which half of the TMR remains, in our case $V_{1/2} \sim 0.05$ V. A common feature is that all the curves show positive TMR and also the need of large spin polarization to reach TMR saturation value, over 80%. These behavior confirms what experiment shows but the obtained TMR values are much lower than the experimentally obtained. Our results also agree with the symmetrical behavior of the TMR with the magnetic field direction, as the calculated TMR does not account for the dominant spin direction, only the relation between the spin concentrations.

Figure A.26(b) shows the quasi-linear current-voltage (I-V) characteristics of the MTJ up to ± 2 V under no spin polarization and for a spin polarization of $P = 50\%$ at 4 K. The expected non-linearity comes from the presence of the potential barrier introduced by the intrinsic layer, compared the linear response of a single layer of (Zn,Co)O [GOP⁺98]. Compared with the experimental measured current, our current density is several orders of magnitude larger. This can be consequence of a badly chosen value for the electron mobility, or the carrier concentration guessing made for the ferromagnetic electrodes. Moreover, if the tunneling current is added to the total current will lead to even higher values. Therefore, further work is needed to determine proper values of the carrier mobility and densities.

On the basis of the slightly different I-V curves obtained for each polarization, TMR vs bias is plotted at different temperatures in the first column of the figure A.27, where

$$\text{TMR \%} = 100 \times \frac{R(P = 50\%) - R(0)}{R(0)}. \quad (\text{A.97})$$

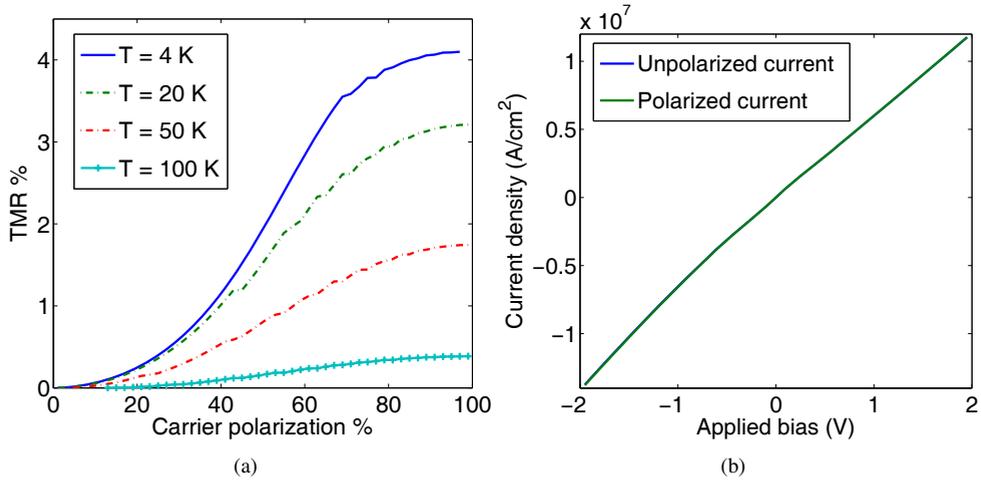


Figure A.26: (a) TMR curves of the junctions calculated for a bias $V_{1/2}$ at temperatures of 4, 20, 50 and 300 K. (b) I-V characteristic of the MJT under no spin polarization and a spin polarization of $P = 50\%$. Both figures are obtained considering a total electron concentration of $n = 3.7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ in the (Zn,Co)O electrodes.

The second column shows the experimental measurements of the TMR provided by Song *et al.* [SGZ⁺06].

It is found that the TMR ratio decreases symmetrically with respect to the sign of the applied bias. Both the TMR ratio and the signal-to-noise ratio drastically decrease with increasing temperature. These preliminary results agree with the experimental measurements; however, the values of the TMR ratio are lower (up to one order of magnitude in the worst case) than those obtained in a real device and, though they show the quick drop at low biases, the parabolic behavior for large biases is not present. This leads to a very strong dependence of the TMR with the bias and therefore very low values of the half voltage ($V_{1/2}$). Moreover, the experiments have shown that the TMR signal is measurable at room temperatures, but from our results it is completely hidden by the noise of the calculations.

The quick drop of the TMR in the simulations compared with experiment can be explained in terms of series resistances present in the real device. Therefore, most of the applied bias drop in the contact elements, which is consistent with other observations in similar devices, where the TMR signal is destroyed after certain values of the external electric field is reached [JNOA09, JNO⁺10].

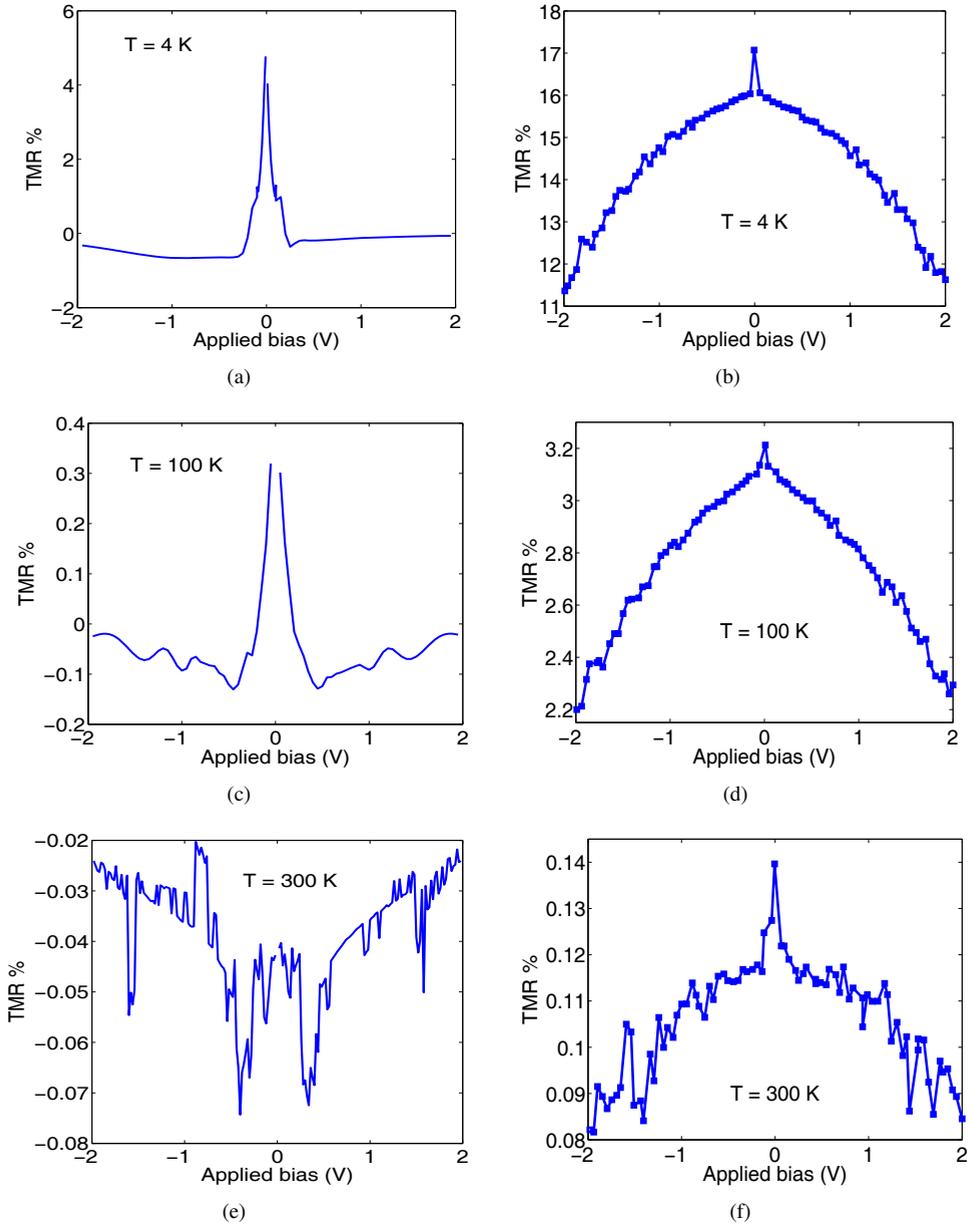


Figure A.27: Bias dependence of the TMR. Results from simulation (first column) and experimental measurements [SLZP07] (second column) at 4 K (a) and (b), at 100 K (c) and (d) and at 300 K (e) and (f), respectively.

In conclusion, modeling MTJ using drift-diffusion approach seems to predict properly some of the I-V characteristics. TMR has showed the expected behavior from experiment, especially at low temperatures. We have simulated the strong dependence on the temperature and the bias, but though they behave as experimental measurements, they must be dramatically reduced to obtain proper values of the TMR at room temperatures and large biases.

Moreover, the absolute values of the current and TMR obtained from the simulations are far from the experimental values. Future work will be done to determine the influence of the tunnel current through the intrinsic layer as it can be more dependent on the spin polarization.

On the basis of the slightly different I-V curves obtained for each polarization, TMR vs bias is plotted at different temperatures in figure A.27, where

$$\text{TMR \%} = 100 \times \frac{R(P = 50\%) - R(0)}{R(0)}, \quad (\text{A.98})$$

It is found that the TMR ratio decreases symmetrically with respect to the sign of the applied bias. Both the TMR ratio and the signal-to-noise ratio drastically decrease with increasing temperature. These preliminary results agree with the experimental measurements; however, the values of the TMR ratio are much lower than those obtained in a real device and, though they show the quick drop at low biases, the parabolic behavior for large biases is not present. This leads to a very strong dependence of the TMR with the bias and therefore very low values of the half voltage. Moreover, the experiments have shown that the TMR signal is measurable at room temperatures, but from our results it is completely hidden by the noise of the calculations.

Conclusions

The development of new electronics towards the integration of the data processing, the storage technology and polarized light sensors and emitters is nowadays theoretically possible byways of the diluted magnetic semiconductors. The theory and the experimental data developed up to the present days suggest that semiconductors doped with transition metals are one of the best candidates to this task. Among the most analyzed materials are the (Ga,Mn)As, the (Ga,Mn)N and the semiconductor oxides TiO₂ and ZnO doped with Co, Mn, Cr or V. There is an intense work to achieve room temperature intrinsic ferromagnetism with these materials. The final aim is to develop new devices from these materials that maintain measurable signals at room temperature.

On the other hand, the ability of simulate electronic devices is nowadays a powerful tool that allows the viability analysis of new different designs of circuits or devices. Therefore, non viable options can be rejected before further in-lab analysis, which leads to a huge reduction in the development time in the design stages as well as avoiding the necessity of a number of really expensive lab experiments.

In the thesis report we show and apply the different mechanisms useful to the simulation of systems made of ferromagnetic semiconductors. We adapted the drift-diffusion model to include a new degree of freedom: The spin momentum polarization of the electron in the DMSs, when it appears intrinsically as well as when it is induced by external magnetic fields. We show the theoretical work done to be able to simulate different devices together with results obtained from applying these new models in such devices. Moreover, the numerical simulation is complemented with analytic models much more simplistic that allow an evaluation of the device behavior in a faster but maybe less precise fashion. They both together provide a set of tools to simulate the suggested devices with a low or very low computational

cost (from 1-3 minutes in the case of the analytic models to around 30 minutes to complete an I-V characterization using the numerical simulator).

Particularly, we simulated a PN junction with one ferromagnetic side and with both sides ferromagnetic, using material parameters of both ZnO and GaAs with a net magnetization. Also, we simulated a PN heterojunction of P type GaAs and N type ZnO. Finally, we analyzed the behavior of a NiN tunnel junction made of two ferromagnetic ZnO electrodes doped with Co and an intrinsic ZnO barrier placed in between of both electrodes.

To deal with this problem we divided the task in three stages: the theoretical analysis needed for the analytic models, the implementation of the numerical simulator and, lastly, the simulation of the devices before enumerated.

Analytic models

To develop the analytic models to study the behavior of different ferromagnetic devices, we started from a previous work from Holmberg *et al.* [HLN⁺05]. In this work they analyzed the electric characteristic of a GaAs PN junction where the P side is ferromagnetic by doping it with Mn. Therefore, in the very first part of our work we reproduced the behavior predicted by them using our own models. Once we achieved this, we extended the proposed analytic model for a full ferromagnetic PN junction and a PN heterojunction made of different ferromagnetic semiconductors.

We extended the model proposed by Holmberg *et al.* [HLN⁺05] for a PN junction to include the spin polarization of the charge carriers (electrons and holes) in both sides of the ferromagnetic junction. The spin polarization is added in terms of the splitting of the energy bands (conduction and valence) for each spin value. From these split bands we calculated the tunnel transmission probability through the PN junction depletion region and, therefore, the tunneling electric current. The depletion region of the junction is modeled as a triangular potential barrier between the P and N sides. We developed this model in low temperature limit, $T \rightarrow 0$, to simplify the formula obtained and, also, we accounted for the high degeneration levels in this kind of semiconductor due to the large doping concentration typical of the DMSs. In addition, we modeled the tunneling transport through a PN heterojunction which includes the possible discontinuity in the P side and N side interface of the energy bands limits and the electric field. In this last case, we opted for a lineal approximation of the energy bands in the depletion region, as an extension of the triangular barrier previously proposed, to calculate the

tunneling potential barrier. Using this new approximated barrier we integrate the tunneling coefficient and the tunneling current for the PN heterojunction.

To analyze the influence of the ferromagnetism in the I-V characteristic of the PN junctions we used a figure of merit known as tunneling magnetoresistance (TMR). The TMR measures the relative difference between the current in two limit configurations: One when both sides of the junction have parallel relative magnetization, or ferromagnetic interaction between layers, and another when the magnetization of the junction sides is antiparallel, or antiferromagnetic interaction between layers. The signal associated to the TMR is a quantity that allows to compare the effect of different levels of the spin magnetic momentum of the charge carriers and also to analyze configurations with different carrier concentrations in the ferromagnetic electrodes of the junctions.

Drift-diffusion numerical simulator

To obtain a more realistic characterization of the DMS based devices we developed a numerical simulator using the drift-diffusion model, which takes a whole set of physical parameters from the materials that constitute the device simulated as input. The simulator solves the Poisson equation and the continuity equations of electrons and holes, using the finite-difference method and the Scharfetter-Gummel approximation for the discrete form of those differential equations. The obtained algebraic non-linear equations are solved employing the Newton method. The system of algebraic equations are solved using direct solvers provided by the library SuperLU [Li05, LDG⁺99, DEG⁺99], which implements the LU decomposition method, or the library GNU Scientific Library [GDT⁺09], which implements a variation of the Cholesky decomposition method.

The simulator allows to obtain the electric characteristic at small signal and stationary regime of tunneling devices. We included a non-local tunneling recombination model that accounts the spatial and energetic distribution of the carriers involved in the inter-band tunneling recombination processes. By solving the Poisson equation we obtain a more realistic potential barrier in the depletion region for the carriers that go through it in the tunneling processes. Also we included the thermionic emission model to analyze the density of carrier and density of current in the interfaces of the ferromagnetic heterojunctions.

Moreover, we split the continuity equations for electrons and holes for each value of the carriers spin to take into account the spin polarization. Therefore, our simulator solves two electron and two hole continuity equations, for spin up and down, respectively. Also, we mod-

ified the non-local recombination model to evaluate all the recombination processes between the split energy bands associated with each spin value.

We test the correct response of our simulator by comparing our outputs with those obtained from the well established tools Sentaurus Device from Synopsys and Atlas from Silvaco. We compare the results obtained for non-magnetic and highly degenerated PN junctions using the same sets of parameters for GaAs and ZnO in every simulator. In addition, we compared the results from our simulator with experimental measures for a PN junction (Ga,Mn)As/GaAs from literature, a PN junction with a ferromagnetic P side.

Device simulation

Once we have implemented and validated our different simulators we proceed with the simulation of the proposed structures. In our analysis of the results we check that both the analytic models and the numerical drift-diffusion simulator provide reliable data which allows to predict the response of this kind of structures. In particular, we found very promising results for PN junctions and the prediction of the tunnel current.

To study the effect of adding the spin variable in the drift-diffusion simulation of ferromagnetic structures we check the following points:

- The tunneling current obtained for the (Ga,Mn)As/GaAs PN junction is in agreement with the experimental measures offered by Holmberg *et al.* [HLN⁺05].
- The TMR obtained for the full ferromagnetic PN junction also obeys the experimental law for multilayer junctions of ferromagnetic metals proposed by Jullière [Jul75]. We use this law as a valid reference because of the current lack of experimental results and the similarity between both structures: In both the transport is dominated by tunnel processes and the tunneling barrier is formed by the junction of two material with different properties (semiconductors or metals).
- We analyzed the behavior of the TMR at different temperatures and we found a polynomial law which describes the TMR dependence on the temperature. This law is in agreement with the dependence on the temperature of the ferromagnetic properties.

Finally, we simulated a NiN tunnel barrier. This structure is composed of two ferromagnetic electrodes, made of N type (Zn,Co)O, and a in-between tunneling barrier of intrinsic

ZnO. We obtained the I-V characteristic and the TMR dependence on the applied bias for different levels of polarization of the spin in the ferromagnetic electrodes. We observed the same dependence of the TMR with the temperature as the magnetization or, similarly, with the spin polarization of the electrons, especially at low temperatures. However, the absolute value of the TMR is lower than the obtained from the experiments and this difference increases as we approach room temperature. From this result, we think that the theory from drift-diffusion model is not enough to predict the behavior of such devices and new approaches will be necessary.

In summary, we conclude that the drift-diffusion model is still in some cases a good approximation and it provides useful simulation tools to analyze spintronic devices based on semiconductor PN junctions with ferromagnetic properties. By this means, it will be possible to predict new possibilities of new devices or new materials in this kind of devices using the provided set of tools.

Future work

The future work, that this thesis project opens, can be gather in two main lines: the improvement of the current simulator to include more precise characterization of the ferromagnetic semiconductors, and the addition of new functions to allow the simulation of other typical characteristics in this kind of devices.

About the first line, it will be of highly interest to add the ability to simulate complex bands structure allowing to include the effect of state distribution in the prohibited bands. This is specially interesting in the semiconducting oxides, such as ZnO. Other possibility, would be to add the necessary models to deal with the spin relaxation, which could produce the destruction of the TMR signal, specially at high temperatures and large biases. Also, the analysis of the effect on the spin transmission of the different interfaces between materials in the device. Lastly, it would be also interesting to connect this simulator with material simulator based on atomistic or ab-initio methods, such as Density Functional Theory (DFT) or Variable Range Hopping (VRH). This methods would provide a material particularization without needing experimental work.

The main function to be add to the simulator is the ability of simulating the emission and absorption of polarized light in this kind of devices. Particularly, to be able to simulate the spin injection by means of carrier generation stimulated using polarized light or the polarized

light emission due to the recombination of spin-polarized electron-hole pairs. It has been proved from experiment, using optical dichroism measures, the emission of circularly polarized light, levorotating or dextrorotating depending on the spin of the carriers involved in the photon emission. It will be of great interest to simulate this effect and then make possible to characterize LED devices made of DMSs.

Bibliografía

- [Aha96] A. Aharoni. *Introduction to the theory of ferromagnetism*. Oxford University Press, New York, 1996.
- [AJBM01] M. Abolfath, T. Jungwirth, J. Brum, y A. H. MacDonald. Theory of magnetic anisotropy in $(\text{III}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{V}$ ferromagnets. *Physical Review B*, 2001, vol. 63, núm. 5, p. 54418.
- [AMA11] M. Aldegunde, A. Martinez, y A. Asenov. Non-equilibrium Green's function analysis of cross section and channel length dependence of phonon scattering and its impact on the performance of Si nanowire field effect transistors. *Journal of Applied Physics*, 2011, vol. 110, núm. 9.
- [Ant93] H. M. Antia. Rational function approximations for Fermi-Dirac integrals. *Astrophysical Journal Supplement Series*, 1993, vol. 84, p. 101-108.
- [AO02] H. Akinaga y H. Ohno. Semiconductor spintronics. *IEEE Transactions On Nanotechnology*, 2002, vol. 1, núm. 1, p. 19-31.
- [ARL⁺99] J. D. Albrecht, P. P. Ruden, S. Limpijumnong, W. R. L. Lambrecht, y K. F. Brennan. High field electron transport properties of bulk ZnO. *Journal of Applied Physics*, 1999, vol. 86, núm. 12, p. 6864.
- [ARV10] S. Ahmed, C. Ringhofer, y D. Vasileska. An effective potential approach to modeling 25 nm MOSFET devices. *Journal of Computational Electronics*, 2010, vol. 9, núm. 3-4, p. 197-200.
- [Atl10] *ATLAS User's Manual*. Silvaco, Inc., Santa Clara, 2010.

- [BA10] M. Baudrit y C. Algora. Tunnel diode modeling, including nonlocal trap-assisted tunneling: A focus on III–V multijunction solar cell simulation. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2010, vol. 57, núm. 10, p. 2564–2571.
- [BAY+03] F. Bufler, Y. Asahi, H. Yoshimura, C. Zechner, A. Schenk, y W. Fichtner. Monte Carlo simulation and measurement of nanoscale n-MOSFETs. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 2003, vol. 50, núm. 2, p. 418-424.
- [BBC07] G. Bouzerar, R. Bouzerar, y O. Cépas. Superexchange induced canted ferromagnetism in dilute magnets. *Physical Review B*, 2007, vol. 76, núm. 14, p. 144419.
- [BBF+88] M. Baibich, J. Broto, A. Fert, F. Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, y J. Chazelas. Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices. *Physical Review Letters*, 1988, vol. 61, núm. 21, p. 2472-2475.
- [Beh08] A. Behan. *Characterisation of doped ZnO Thin Films for spintronic applications*. PhD thesis, University of Sheffield, 2008.
- [BLCY04] J. Bian, X. Li, L. Chen, y Q. Yao. Properties of undoped n-type ZnO film and N-In codoped p-type ZnO film deposited by ultrasonic spray pyrolysis. *Chemical Physics Letters*, 2004, vol. 393, núm. 1-3, p. 256-259.
- [Cha06] S. A. Chambers. Ferromagnetism in doped thin-film oxide and nitride semiconductors and dielectrics. *Surface Science Reports*, 2006, vol. 61, p. 345-381.
- [Cha10] S. A. Chambers. Epitaxial Growth and Properties of Doped Transition Metal and Complex Oxide Films. *Advanced Materials*, 2010, vol. 22, núm. 2, p. 219-248.
- [CKS99] W. W. Chow, S. W. Kock, y M. Sargent III. *Semiconductor Laser Physics*. Springer, Berlin Heidelberg New York, 1999.
- [CnAGGL09] E. Comesaña, M. Aldegunde, G. A. Gehring, y A. J. Garcia-Loureiro. Numerical simulation of a ferromagnetic spin-polarised diode. En *2009 Spanish Conference on Electron Devices*, p. 160–163, Santiago de Compostela, España, 2009. IEEE.

- [CnAGL09] E. Comesaña, M. Aldegunde, y A. J. Garcia-Loureiro. Tunneling magnetoresistance dependence on the temperature in a ferromagnetic Zener diode. En *Journal of Physics: Conference Series - 16th International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (EDISON 16)*, volume 193, p. 012104, Montpellier, France, 2009.
- [CnAGL11] E. Comesaña, M. Aldegunde, y A. Garcia-Loureiro. Spin-polarized transport in a full magnetic pn tunnel junction. *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 98, núm. 19, p. 192507.
- [CnAGL13] E. Comesaña, M. Aldegunde, y A. Garcia-Loureiro. Simulation of the spin polarization and the charge transport in Zener tunnel junctions based on ferromagnetic GaAs and ZnO. *Computer Physics Communications*, 2013, vol. 184, núm. 3, p. 746-756.
- [CnAGLG10] E. Comesaña, M. Aldegunde, A. García-Loureiro, y G. A. Gehring. Simulation of the tunnelling transport in ferromagnetic GaAs/ZnO heterojunctions. En *Journal of Physics: Conference Series - 2nd Workshop on Theory, Modelling and Computational Methods for Semiconductors*, volume 242, p. 012015, York, Reino Unido, 2010.
- [CnG07] E. Comesaña y G. A. Gehring. Spin polarised tunnelling in a ferromagnetic Zener diode. *Applied Physics Letters*, 2007, vol. 91, p. 142510.
- [CnGL09] E. Comesaña y A. Garcia-Loureiro. Numerical simulation of a degenerated ZnO diode. En *Encuentro Anual de la Red Española de Micro y Nanosistemas*, p. 28, Sevilla, España, 2009. IBERNAM.
- [CnGL11] E. Comesaña y A. Garcia-Loureiro. Simulación y modelado de la magnetorresistencia en uniones magnéticas túnel multicapa. En *Workshop en Microsistemas y Nanotecnología y Asamblea Anual IBERNAM*, p. 28, Gran Canaria, España, 2011. IBERNAM.
- [CnGLA11] E. Comesaña, A. Garcia-Loureiro, y M. Aldegunde. Simulation of electron transport in magnetic tunnel junctions using the drift-diffusion model. En *2011*

- Spanish Conference on Electron Devices*, p. 1–4, Palma de Mallorca, España, 2011. IEEE.
- [Cra77] J. Crangle. *The Magnetic Properties of Solids*. Edward Arnold, London, 1977.
- [CSM01] A. Chattopadhyay, S. D. Sarma, y A. J. Millis. Transition Temperature of Ferromagnetic Semiconductors: A Dynamical Mean Field Study. *Physical Review Letters*, 2001, vol. 87, núm. 22, p. 227202.
- [CZP09] G. Chen, F. Zeng, y F. Pan. Enhanced spin injection and voltage bias in (Zn,Co)O/MgO/(Zn,Co)O magnetic tunnel junctions. *Applied Physics Letters*, 2009, vol. 95, núm. 23, p. 232508.
- [Dat00] S. Datta. Nanoscale device modeling: the Green's function method. *Superlattices and Microstructures*, 2000, vol. 28, núm. 4, p. 253 - 278.
- [DEG⁺99] J. W. Demmel, S. C. Eisenstat, J. R. Gilbert, X. S. Li, y J. W. H. Liu. A supernodal approach to sparse partial pivoting. *SIAM J. Matrix Analysis and Applications*, 1999, vol. 20, núm. 3, p. 720-755.
- [Dem97] J. Demmel. *Applied numerical linear algebra*. EngineeringPro collection. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM, 3600 Market Street, Floor 6, Philadelphia, PA 19104), 1997.
- [DJL⁺11] Z. Deng, C. Jin, Q. Liu, X. Wang, J. Zhu, S. Feng, L. Chen, R. Yu, C. Arguello, T. Goko, F. Ning, J. Zhang, Y. Wang, A. Aczel, T. Munsie, T. Williams, G. Luke, T. Kakeshita, S. Uchida, W. Higemoto, T. Ito, B. Gu, S. Maekawa, G. Morris, y Y. Uemura. Li(Zn,Mn)As as a new generation ferromagnet based on a I-II-V semiconductor. *Nature communications*, 2011, vol. 2, p. 422.
- [DK70] T. A. Demassa y D. P. Knott. The prediction of tunnel diode voltage-current characteristics. *Solid-State Electronics*, 1970, vol. 13, núm. 2, p. 131-138.
- [DLR⁺04] P. V. Dorpe, Z. Liu, W. V. Roy, V. F. Motsnyi, M. Sawicki, G. Borghs, y J. D. Boeck. Very high spin polarization in GaAs by injection from a (Ga,Mn)As Zener diode. *Applied Physics Letters*, 2004, vol. 84, núm. 18, p. 3495-3497.

- [DOM⁺00] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, y D. Ferrand. Zener model description of ferromagnetism in zinc-blende magnetic semiconductors. *Science*, 2000, vol. 287, núm. 5455, p. 1019-1022.
- [DOM01] T. Dietl, H. Ohno, y F. Matsukura. Hole-mediated ferromagnetism in tetrahedrally coordinated semiconductors. *Physical Review B*, 2001, vol. 63, núm. 19, p. 195205.
- [DRPD02] P. Damle, T. Rakshit, M. Paulsson, y S. Datta. Current-voltage characteristics of molecular conductors: two versus three terminal. *Nanotechnology, IEEE Transactions on*, 2002, vol. 1, núm. 3, p. 145-153.
- [DZY⁺11] M. Ding, D. Zhao, B. Yao, B. Li, Z. Zhang, y D. Shen. The p-type ZnO film realized by a hydrothermal treatment method. *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 98, núm. 6, p. 062102.
- [EGHM⁺10] A. Espinosa, M. García-Hernández, N. Menéndez, C. Prieto, y A. de Andrés. Ferromagnetism in SnO₂-based multilayers: Clustering of defects induced by doping. *Physical Review B*, 2010, vol. 81, núm. 6.
- [Esa58] L. Esaki. New phenomenon in narrow germanium p-n junctions. *Physical Review*, 1958, vol. 109, núm. 2, p. 603-604.
- [FCE⁺94] L. Forro, O. Chauvet, D. Emin, L. Zuppiroli, H. Berger, y F. Lévy. High mobility n-type charge carriers in large single crystals of anatase (TiO₂). *Journal of Applied Physics*, 1994, vol. 75, núm. 1, p. 633.
- [FGB⁺95] A. Fert, P. Grunberg, A. Barthelemy, F. Petroff, y W. Zinn. Layered magnetic structures: interlayer exchange coupling and giant magnetoresistance. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 1995, vol. 140-144, p. 1-8.
- [FTY05] T. Fukumura, H. Toyosaki, y Y. Yamada. Magnetic oxide semiconductors. *Semiconductor Science and Technology*, 2005, vol. 20, núm. 4, p. S103-S111.
- [FW03] A. L. Fetter y J. D. Walecka. *Quantum theory of many-particle systems*. Dover Publications, cop., Mineola (New York), 2003.
- [Gar94] C. Gardner. The quantum hydrodynamic model for semiconductor devices. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 1994, vol. 54, núm. 2, p. 409-427.

- [GBB⁺06] G. A. Gehring, H. J. Blythe, A. J. Behan, A. M. Fox, R. M. Ibrahim, A. Mokhtari, y J. R. Neal. *Spintronic materials and technology*, volume 14 of *Series in material science and engineering*, cap. 1, p. 3–37. Taylor & Francis, 2006.
- [GDT⁺09] M. Galassi, J. Davies, J. Theiler, B. Gough, G. Jungman, P. Alken, M. Booth, y F. Rossi. *GNU Scientific Library reference manual*. Network Theory Ltd, 3^a edición, 2009. <http://www.gnu.org/software/gsl/>.
- [GLKA05] A. García-Loureiro, K. Kalna, y A. Asenov. Efficient three-dimensional parallel simulations of PHEMTs. *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields*, 2005, vol. 18, núm. 5, p. 327–340.
- [GOP⁺98] K. Ghosh, S. B. Ogale, S. P. Pai, M. Robson, E. Li, I. Jin, Z.-W. Dong, R. L. Greene, R. Ramesh, T. Venkatesan, y M. Johnson. Positive giant magnetoresistance in a $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{SrTiO}_3/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ heterostructure. *Applied Physics Letters*, 1998, vol. 73, núm. 5, p. 689.
- [Gum64] H. K. Gummel. A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1964, vol. 11, núm. 10, p. 455-465.
- [HAM⁺12] P. N. Hai, L. D. Anh, S. Mohan, T. Tamegai, M. Kodzuka, T. Ohkubo, K. Hono, y M. Tanaka. Growth and characterization of n-type electron-induced ferromagnetic semiconductor (In,Fe)As. *arXiv*, 2012, vol. 1209.0250.
- [HH91] J. Hook y H. Hall. *Solid State Physics*. John Wiley & Sons, 2^a edición, 1991.
- [HKK92] G. A. M. Hurkx, D. B. M. Klaassen, y M. P. G. Knauers. A new recombination model for device simulation including tunneling. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1992, vol. 39, núm. 2, p. 331-338.
- [HLN⁺05] H. Holmberg, N. Lebedeva, S. Novikov, J. Ikonen, P. Kuivalainen, M. Malfait, y V. V. Moshchalkov. Large magnetoresistance in a ferromagnetic GaMnAs/GaAs Zener diode. *Europhysics Letters*, 2005, vol. 71, núm. 5, p. 811-816.

- [HLN⁺07] H. Holmberg, N. Lebedeva, S. Novikov, P. Kuivalainen, M. Malfait, y V. V. Moshchalkov. Electrical transport in Mn-doped GaAs pn-diodes. *Physica Status Solidi (a)*, 2007, vol. 204, p. 791-804.
- [HLPB08] M. Hermle, G. Létay, S. P. Philipps, y A. W. Bett. Numerical simulation of tunnel diodes for multi-junction solar cells. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2008, vol. 16, núm. 5, p. 409-418.
- [Hob10] B. Hoberman. The Emergence of Practical MRAM. Technical report, Crocus Technology, 2010. <http://www.crocus-technology.com/pdf/BHGSAArticle.pdf>.
- [HSC⁺12] Y.-J. Huang, M.-F. Shih, C.-P. Chou, K.-Y. Lo, y S.-Y. Chu. Fabrication of p-type ZnO films grown on arsenic-implanted silicon via thermal diffusion at various substrate temperatures. *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, 2012, vol. 1, núm. 6, p. P276–P278.
- [HSH04] N. H. Hong, J. Sakai, y A. Hassini. Ferromagnetism at room temperature with a large magnetic moment in anatase V-doped TiO₂ thin films. *Applied Physics Letters*, 2004, vol. 84, núm. 14, p. 2602.
- [HSST99] T. Hayashi, H. Shimada, H. Shimizu, y M. Tanaka. Tunneling spectroscopy and tunneling magnetoresistance in (Ga,Mn)As ultrathin heterostructures. *Journal of Crystal Growth*, 1999, vol. 201-202, p. 689-692.
- [IHA⁺08] S. Ikeda, J. Hayakawa, Y. Ashizawa, Y. M. Lee, K. Miura, H. Hasegawa, M. Tsunoda, F. Matsukura, y H. Ohno. Tunnel magnetoresistance of 604 % at 300 K by suppression of Ta diffusion in CoFeB/MgO/CoFeB pseudo-spin-valves annealed at high temperature. *Applied Physics Letters*, 2008, vol. 93, núm. 8, p. 082508.
- [ISL⁺98] M. Jeong, P. M. Solomon, S. E. Laux, H. S. P. Wong, y D. Chidambarrao. Comparison of raised and Schottky source/drain MOSFETs using a novel tunneling contact model. En *Proc. International Electron Devices Meeting IEDM '98 Technical Digest*, p. 733–736, 1998.

- [JALM99] T. Jungwirth, W. A. Atkinson, B. H. Lee, y A. H. MacDonald. Interlayer coupling in ferromagnetic semiconductor superlattices. *Physical Review B*, 1999, vol. 59, núm. 15, p. 9818-9821.
- [JAY⁺02] S. W. Jung, S. J. An, G. C. Yi, C. U. Jung, S. I. Lee, y S. Cho. Ferromagnetic properties of $Zn_{1-x}Mn_xO$ epitaxial thin films. *Applied Physics Letters*, 2002, vol. 80, núm. 24, p. 4561.
- [JFK⁺01] Z. Jin, T. Fukumura, M. Kawasaki, K. Ando, H. Saito, T. Sekiguchi, Y. Z. Yoo, M. Murakami, Y. Matsumoto, T. Hasegawa, y H. Koinuma. High throughput fabrication of transition-metal-doped epitaxial ZnO thin films: A series of oxide-diluted magnetic semiconductors and their properties. *Applied Physics Letters*, 2001, vol. 78, núm. 24, p. 3824.
- [JL89] C. Jacoboni y P. Lugli. *The Monte Carlo method for semiconductor device simulation*. Springer-Verlag, 1989.
- [JNO⁺10] L. X. Jiang, H. Naganuma, M. Oogane, K. Fujiwara, T. Miyazaki, K. Sato, T. J. Konno, S. Mizukami, y Y. Ando. Magnetotransport properties of CoFeB/MgO/CoFe/MgO/CoFeB double barrier magnetic tunnel junctions with large negative magnetoresistance at room temperature. En *Journal of Physics: Conference Series - International Conference on Magnetism (ICM 2009)*, volume 200, p. 052009, Karlsruhe, Alemania, 2010.
- [JNOA09] L. Jiang, H. Naganuma, M. Oogane, y Y. Ando. Large tunnel magnetoresistance of 1056% at room temperature in MgO based double barrier magnetic tunnel junction. *Applied Physics Express*, 2009, vol. 2, núm. 8, p. 083002.
- [JR83] C. Jacoboni y L. Reggiani. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors applications to covalent materials. *Reviews of Modern Physics*, 1983, vol. 55, p. 645-705.
- [JSM⁺06] T. Jungwirth, J. Sinova, J. Mašek, J. Kučera, y A. H. MacDonald. Theory of ferromagnetic (III,Mn)V semiconductors. *Reviews of Modern Physics*, 2006, vol. 78, núm. 3, p. 809.

- [Jul75] M. Jullière. Tunneling between ferromagnetic films. *Physics Letters A*, 1975, vol. 54, p. 225-226.
- [Kan61] E. O. Kane. Theory of tunneling. *Journal of Applied Physics*, 1961, vol. 32, núm. 1, p. 83-91.
- [KFP08] J. Kefi-Ferhane y A. Poncet. Deterministic simulation of transport in MOSFETs by coupling Wigner, Poisson and Schrodinger equations. *Physica Status Solidi A - Applications and Materials Science*, 2008, vol. 205, núm. 11, p. 2518-2521. 3rd International Conference on Micro-Nanoelectronics, Nanotechnology and MEMs, Atenas, Grecia, 2007.
- [Kim04] S. S. Kim. Heteroepitaxial growth behavior of Mn-doped ZnO thin films on Al₂O₃ (0001) by pulsed laser deposition. *Journal of Applied Physics*, 2004, vol. 95, núm. 2, p. 454.
- [Kim09] D. Kim. *Theoretical performance evaluations of NMOS double gate FETs with high mobility materials: Strained III-V, Ge and Si*. PhD thesis, Stanford University, 2009.
- [KKK⁺02] J. H. Kim, H. Kim, D. Kim, Y. E. Ihm, y W. K. Choo. Magnetic properties of epitaxially grown semiconducting Zn_{1-x}Mn_xO thin films by pulsed laser deposition. *Journal of Applied Physics*, 2002, vol. 92, núm. 10, p. 6066.
- [KLK⁺02] J. H. Kim, J. B. Lee, H. Kim, D. Kim, Y. Ihm, y W. K. Choo. Characteristics of cobalt-doped zinc oxide thin films prepared by pulsed laser deposition. *IEEE Transactions on Magnetics*, 2002, vol. 38, núm. 5, p. 2880-2882.
- [KNG05] K. R. Kittilstved, N. S. Norberg, y D. R. Gamelin. Chemical Manipulation of High-Tc Ferromagnetism in ZnO Diluted Magnetic Semiconductors. *Physical Review Letters*, 2005, vol. 94, núm. 14, p. 147209.
- [Kol04a] S. Kolesnik. Structural and magnetic properties of transition metal substituted ZnO. *Journal of Applied Physics*, 2004, vol. 95, núm. 5, p. 2582.
- [KOL⁺04b] D. C. Kundaliya, S. B. Ogale, S. E. Lofland, S. Dhar, C. J. Metting, S. R. Shinde, Z. Ma, B. Varughese, K. V. Ramanujachary, L. Salamanca-Riba, y

- T. Venkatesan. On the origin of high-temperature ferromagnetism in the low-temperature-processed Mn-Zn-O system. *Nature materials*, 2004, vol. 3, núm. 10, p. 709–14.
- [KSKS80] K. Kaski, J. Sinkkonen, P. Kuivalainen, y T. Stubb. Free-carrier absorption of radiation in magnetic semiconductors due to spin-disorder scattering. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1980, vol. 13, núm. 28, p. 5233.
- [LDG+99] X. Li, J. Demmel, J. Gilbert, iL. Grigori, M. Shao, y I. Yamazaki. SuperLU Users' Guide. Technical Report LBNL-44289, 1999. <http://crd.lbl.gov/~xiaoye/SuperLU/>.
- [LHEC88] B. E. Larson, K. C. Hass, H. Ehrenreich, y A. E. Carlsson. Theory of exchange interactions and chemical trends in diluted magnetic semiconductors. *Physical Review B*, 1988, vol. 37, núm. 8, p. 4137-4154.
- [Li05] X. S. Li. An overview of SuperLU: Algorithms, implementation, and user interface. *Transactions on Mathematical Software*, 2005, vol. 31, núm. 3, p. 302-325.
- [LJM+97] M. Linnarsson, E. Janzén, B. Monemar, M. Kleverman, y A. Thilderkvist. Electronic structure of the GaAs:Mn_{Ga} center. *Physical Review B*, 1997, vol. 55, núm. 11, p. 6938-6944.
- [LK03] N. Lebedeva y P. Kuivalainen. Modeling of ferromagnetic semiconductor devices for spintronics. *Journal of Applied Physics*, 2003, vol. 93, núm. 12, p. 9845-9864.
- [Loo01] D. Look. Recent advances in ZnO materials and devices. *Materials Science and Engineering: B*, 2001, vol. 80, núm. 1-3, p. 383-387.
- [Lop94] J. M. Lopez González. *Contribución al estudio de los transistores bipolares de heterounión*. PhD thesis, Universitat Politècnica de Catalunya, 1994.
- [Mar86] P. A. Markowich. *The stationary semiconductor device equations (Computational microelectronics)*. Springer-Verlag, 1986.
- [Mea66] C. Mead. Metal-semiconductor surface barriers. *Solid-State Electronics*, 1966, vol. 9, núm. 11-12, p. 1023-1033.

- [MG86] A. Mauger y C. Godart. The magnetic, optical, and transport properties of representatives of a class of magnetic semiconductors: The europium chalcogenides. *Physics Reports*, 1986, vol. 141, núm. 2-3, p. 51-176.
- [MG09] M. I. Miah y E. M. Gray. Spin drift–diffusion transport and its applications in semiconductors. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 2009, vol. 13, núm. 5-6, p. 99–104.
- [MKM+07] J. Mašek, J. Kudrnovský, F. Máca, B. L. Gallagher, R. P. Campion, D. H. Gregory, y T. Jungwirth. Dilute moment n-type ferromagnetic semiconductor Li(Zn,Mn)As. *Physical Review Letters*, 2007, vol. 98, núm. 6, p. 67202.
- [MMS+01] Y. Matsumoto, M. Murakami, T. Shono, T. Hasegawa, T. Fukumura, M. Kawasaki, P. Ahmet, T. Chikyow, S. Koshihara, y H. Koinuma. Room-temperature ferromagnetism in transparent transition metal-doped titanium dioxide. *Science*, 2001, vol. 291, núm. 5505, p. 854-6.
- [NBI+06] J. R. Neal, A. J. Behan, R. M. Ibrahim, H. J. Blythe, M. Ziese, A. M. Fox, y G. A. Gehring. Room-temperature magneto-optics of ferromagnetic transition-metal-doped ZnO thin films. *Physical Review Letters*, 2006, vol. 96, núm. 19, p. 197208.
- [NNY+10] A. Ney, V. Ney, S. Ye, K. Ollefs, T. Kammermeier, T. Kaspar, S. Chambers, F. Wilhelm, y A. Rogalev. Magnetism of Co doped ZnO with Al codoping: Carrier-induced mechanisms versus extrinsic origins. *Physical Review B*, 2010, vol. 82, núm. 4.
- [NP73] L. W. Nagel y D. O. Pederson. Simulation program with integrated circuit emphasis (spice). En *16th Midwest Symposium on Circuit Theory*, Ontario, Canada, 1973.
- [OAL+05] U. Özgür, Y. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov, S. Doğan, V. Avrutin, S.-J. Cho, y H. Morkoç. A comprehensive review of ZnO materials and devices. *Journal of Applied Physics*, 2005, vol. 98, núm. 4, p. 041301.
- [Ohn98] H. Ohno. Making nonmagnetic semiconductors ferromagnetic. *Science*, 1998, vol. 281, núm. 5379, p. 951-956.

- [Ohn99] H. Ohno. Properties of ferromagnetic III-V semiconductors. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 1999, vol. 200, núm. 1-3, p. 110-129.
- [OKR+98] J. Okabayashi, A. Kimura, O. Rader, T. Mizokawa, A. Fujimori, T. Hayashi, y M. Tanaka. Core-level photoemission study of $(\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{As}$. *Physical Review B*, 1998, vol. 58, núm. 8, p. R4211-R4214.
- [OMD+00] T. Omiya, F. Matsukura, T. Dietl, Y. Ohno, T. Sakon, M. Motokawa, y H. Ohno. Magnetotransport properties of $(\text{Ga},\text{Mn})\text{N}$ investigated at low temperature and high magnetic field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2000, vol. 7, núm. 3-4, p. 976-980.
- [OMO01] H. Ohno, F. Matsukura, y Y. Ohno. Spin-dependent phenomena in ferromagnetic/nonmagnetic III-V heterostructures. *Solid State Communications*, 2001, vol. 119, núm. 4-5, p. 281-289.
- [PAN+03] S. J. Pearton, C. R. Abernathy, D. P. Norton, A. F. Hebard, Y. D. Park, L. A. Boatner, y J. D. Budai. Advances in wide bandgap materials for semiconductor spintronics. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 2003, vol. 40, p. 137-168.
- [Pie87] R. Pierret. *Advanced semiconductor fundamentals*. Modular series on solid state devices. Addison-Wesley Pub. Co., 1987.
- [PKJ+04] J. H. Park, M. G. Kim, H. M. Jang, S. Ryu, y Y. M. Kim. Co-metal clustering as the origin of ferromagnetism in Co-doped ZnO thin films. *Applied Physics Letters*, 2004, vol. 84, núm. 8, p. 1338.
- [PKM00] J. H. Park, S. K. Kwon, y B. I. Min. Electronic structures of III-V based ferromagnetic semiconductors: half-metallic phase. *Physica B: Condensed Matter*, 2000, vol. 281-282, p. 703-704.
- [PNI+03] S. J. Pearton, D. P. Norton, K. Ip, Y. W. Heo, y T. Steiner. Recent progress in processing and properties of ZnO. *Superlattices and Microstructures*, 2003, vol. 34, p. 3-32.
- [PZA+13] A. Pham, Y. B. Zhang, M. H. N. Assadi, A. B. Yu, y S. Li. Ferromagnetism in $\text{ZnO}:\text{Co}$ originating from a hydrogenated Co-O-Co complex. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2013, vol. 25, núm. 11, p. 116002.

- [Rho82] E. Rhoderick. Metal-semiconductor contacts. *IEE Proceedings I (Solid-State and Electron Devices)*, 1982, vol. 129, p. 1-14.
- [RK54] M. A. Ruderman y C. Kittel. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. *Physical Review*, 1954, vol. 96, núm. 1, p. 99-102.
- [SCK⁺09] M. Sawicki, D. Chiba, A. Korbecka, Y. Nishitani, J. A. Majewski, F. Matsukura, T. Dietl, y H. Ohno. Experimental probing of the interplay between ferromagnetism and localization in (Ga,Mn)As. *Nature Physics*, 2009, vol. 6, núm. 1, p. 22-25.
- [Sel84] S. Selberherr. *Analysis and simulation of semiconductor devices*. Springer-Verlag/Wien, 1984.
- [sen05] *Sentaurus Device manual, X-2005-10*. Synopsys Inc., Mountain View, 2005.
- [sen10] *Sentaurus Device user guide, D-2010.03*. Synopsys, Inc., Mountain View, 2010.
- [SG69] D. L. Scharfetter y H. K. Gummel. Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1969, vol. 16, núm. 1, p. 64-77.
- [SGR⁺03] P. Sharma, A. Gupta, K. V. Rao, F. J. Owens, R. Sharma, R. Ahuja, J. M. O. Guillen, B. Johansson, y G. A. Gehring. Ferromagnetism above room temperature in bulk and transparent thin films of Mn-doped ZnO. *Nature materials*, 2003, vol. 2, núm. 10, p. 673-7.
- [SGZ⁺06] C. Song, K. Geng, F. Zeng, X. Wang, Y. Shen, F. Pan, Y. Xie, T. Liu, H. Zhou, y Z. Fan. Giant magnetic moment in an anomalous ferromagnetic insulator: Co-doped ZnO. *Physical Review B*, 2006, vol. 73, núm. 2, p. 024405.
- [SH00] S. Sanvito y N. A. Hill. Ground state of half-metallic zinc-blende MnAs. *Physical Review B*, 2000, vol. 62, núm. 23, p. 15553-15560.
- [SICn⁺13] N. Seoane, G. Indalecio, E. Comesaña, A. J. Garcia-Loureiro, M. Aldegunde, y K. Kalna. Three-dimensional simulations of random dopant and metal-

- gate workfunction variability in an In_{0.53}Ga_{0.47}As GAA MOSFET. *IEEE Electron Device Letters*, 2013, vol. 34, núm. 2, p. 205-207.
- [SKD⁺10] K. Sato, J. Kudrnovský, P. H. Dederichs, O. Eriksson, I. Turek, B. Sanyal, G. Bouzerar, H. Katayama-Yoshida, V. A. Dinh, T. Fukushima, H. Kizaki, y R. Zeller. First-principles theory of dilute magnetic semiconductors. *Reviews of Modern Physics*, 2010, vol. 82, núm. 2, p. 1633-1690.
- [SKMD07] P. Sankowski, P. Kacman, J. Majewski, y T. Dietl. Spin-dependent tunneling in modulated structures of (Ga,Mn)As. *Physical Review B*, 2007, vol. 75, núm. 4.
- [SLZP07] C. Song, X. J. Liu, F. Zeng, y F. Pan. Fully epitaxial (Zn,Co)O/ZnO/(Zn,Co)O junction and its tunnel magnetoresistance. *Applied Physics Letters*, 2007, vol. 91, núm. 4, p. 042106.
- [SMT⁺99] J. Szczytko, W. Mac, A. Twardowski, F. Matsukura, y H. Ohno. Antiferromagnetic p-d exchange in ferromagnetic (Ga_{1-x}Mn_x)As epilayers. *Physical Review B*, 1999, vol. 59, núm. 20, p. 12935-12939.
- [SN06] S. M. Sze y K. K. Ng. *Physics of semiconductor devices*. John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, US, 3^a edición, 2006.
- [SNS57] R.-Y. Sah, R. N. Noyce, y W. Shockley. Carrier generation and recombination in p-n junctions and p-n junction characteristics. *Proceedings of the IRE*, 1957, vol. 45, núm. 9, p. 1228-1243.
- [SOK94] D. Schroeder, T. Ostermann, y O. Kalz. Comparison of transport models for the simulation of degenerate semiconductors. *Semiconductor Science and Technology*, 1994, vol. 9, núm. 4, p. 364-369.
- [SP03] D. J. Singh y D. A. Papaconstantopoulos, editors. *Electronic structure and magnetism of complex materials*, volume 54 of *Springer Series in Materials Science*. Springer-Verlag, 2003.
- [SPL⁺07] C. Song, S. N. Pan, X. J. Liu, X. W. Li, F. Zeng, W. S. Yan, B. He, y F. Pan. Evidence of structural defect enhanced room-temperature ferromagnetism in Co-doped ZnO. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2007, vol. 19, núm. 17, p. 176229.

- [SPQ⁺09] A. Serrano, E. Pinel, A. Quesada, I. Lorite, M. Plaza, L. Pérez, F. Jiménez-Villacorta, J. de La Venta, M. Martín-González, J. Costa-Krämer, J. Fernandez, J. Llopis, y M. García. Room-temperature ferromagnetism in the mixtures of the TiO₂ and Co₃O₄ powders. *Physical Review B*, 2009, vol. 79, núm. 14.
- [SR52] W. Shockley y W. T. Read. Statistics of the recombinations of holes and electrons. *Physical Review*, 1952, vol. 87, p. 835–842.
- [SSTP99] J. Szczytko, K. Świątek, A. Twardowski, y M. Palczewska. Mn impurity in (Ga_{1-x}Mn_x)As epilayers. *Physical Review B*, 1999, vol. 60, núm. 11, p. 8304-8308.
- [STK01] H. Saeki, H. Tabata, y T. Kawai. Magnetic and electric properties of vanadium doped ZnO films. *Solid State Communications*, 2001, vol. 120, núm. 11, p. 439-443.
- [TCH⁺04] I. T. Tang, H. J. Chen, W. C. Hwang, Y. C. Wang, M. P. Houn, y Y. H. Wang. Applications of piezoelectric ZnO film deposited on diamond-like carbon coated onto Si substrate under fabricated diamond SAW filter. *Journal of Crystal Growth*, 2004, vol. 262, núm. 1-4, p. 461-466.
- [TP01] E. Tsymbal y D. Pettifor. Perspectives of giant magnetoresistance. *Solid State Physics*, 2001, vol. 56, p. 113-239.
- [UTK01] K. Ueda, H. Tabata, y T. Kawai. Magnetic and electric properties of transition-metal-doped ZnO films. *Applied Physics Letters*, 2001, vol. 79, núm. 7, p. 988.
- [vdLEA⁺10] G. van der Laan, K. Edmonds, E. Arenholz, N. Farley, y B. Gallagher. Valence-state model of strain-dependent Mn L(2,3) x-ray magnetic circular dichroism from ferromagnetic semiconductors. *Physical Review B*, 2010, vol. 81, núm. 21, p. 214422.
- [VFLC04] M. Venkatesan, C. Fitzgerald, J. Lunney, y J. Coey. Anisotropic ferromagnetism in substituted zinc oxide. *Physical Review Letters*, 2004, vol. 93, núm. 17, p. 15-18.
- [VMRM01] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, y L. R. Ram-Mohan. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, 2001, vol. 89, núm. 11, p. 5815.

- [VSA⁺12] R. Valin, C. Sampedro, M. Aldegunde, A. Garcia-Loureiro, N. Seoane, A. Godoy, y F. Gamiz. Two-dimensional Monte Carlo simulation of DGSOI MOSFET misalignment. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2012, vol. 59, núm. 6, p. 1621-1628.
- [VSD⁺07] M. Venkatesan, P. Stamenov, L. S. Dorneles, R. D. Gunning, B. Bernoux, y J. M. D. Coey. Magnetic, magnetotransport, and optical properties of Al-doped Zn_{0.95}Co_{0.05}O thin films. *Applied Physics Letters*, 2007, vol. 90, núm. 24, p. 242508.
- [VTS⁺97] R. D. Vispute, V. Talyansky, R. P. Sharma, S. Choopun, M. Downes, T. Venkatesan, K. A. Jones, A. A. Iliadis, M. Asif Khan, y J. W. Yang. Growth of epitaxial GaN films by pulsed laser deposition. *Applied Physics Letters*, 1997, vol. 71, núm. 1, p. 102.
- [Wac89] G. Wachutka. An extended thermodynamic model for the simultaneous simulation of the thermal and electrical behaviour of semiconductor devices. En *Proceedings of the Sixth International Conference on the Numerical Analysis of Semiconductor Devices and Integrated Circuits (NASECODE VI)*, p. 409, Dublin, Irlanda, 1989.
- [Whi07] R. M. White. *Quantum theory of magnetism*, volume 32 of *Springer series in solid-state sciences*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2007.
- [WLG07] D. Waldron, L. Liu, y H. Guo. Ab initio simulation of magnetic tunnel junctions. *Nanotechnology*, 2007, vol. 18, núm. 42, p. 424026.
- [WSF01] A. Wettstein, A. Schenk, y W. Fichtner. Quantum device-simulation with the density-gradient model on unstructured grids. *IEEE Transactions On Electron Devices*, 2001, vol. 48, núm. 2, p. 279-284.
- [WTT⁺03] Z. Wang, J. Tang, L. D. Tung, W. Zhou, y L. Spinu. Ferromagnetism and transport properties of Fe-doped reduced-rutile TiO_{2-δ} thin films. *Journal of Applied Physics*, 2003, vol. 93, núm. 10, p. 7870.
- [XBZ⁺06] X. H. Xu, H. J. Blythe, M. Ziese, A. J. Behan, J. R. Neal, A. Mokhtari, R. M. Ibrahim, A. M. Fox, y G. A. Gehring. Carrier-induced ferromagnetism in n-

- type ZnMnAlO and ZnCoAlO thin films at room temperature. *New Journal of Physics*, 2006, vol. 8, núm. 8, p. 135.
- [Ypm95] T. Ypma. Historical development of the Newton–Raphson method. *SIAM Review*, 1995, vol. 37, núm. 4, p. 531-551.
- [Zen51] C. Zener. Interaction between the d-shells in the transition metals. II. Ferromagnetic compounds of manganese with perovskite structure. *Physical Review*, 1951, vol. 82, núm. 3, p. 403-405.
- [ZFE06] I. Zutic, J. Fabian, y S. C. Erwin. Bipolar spintronics: Fundamentals and applications. *IBM Journal of Research and Development*, 2006, vol. 50, núm. 1, p. 121–139.
- [ZWK⁺00] Y. Zhao, J. Watling, S. Kaya, A. Asenov, y J. Barker. Drift diffusion and hydrodynamic simulations of Si/SiGe p-MOSFETs. *Materials Science and Engineering: B*, 2000, vol. 72, núm. 2-3, p. 180-183.

