

TRABAJO FIN DE GRADO

MODELOS MATEMÁTICOS DE TRANSISTORES DE GRAFENO

TRABAJO FIN DE GRADO PARA
LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE
GRUADO EN INGENIERÍA EN
TECNOLOGÍAS INDUSTRIALES

JUNIO 2024

JAIME DE CARLOS DE CHURRUCA

DIRECTORES DEL TRABAJO FIN DE GRADO:
Pedro Carlos Feijoo Guerra
Pedro Galán del Sastre



Resumen del trabajo

Dentro de la gran evolución que han experimentado los materiales bidimensionales en los últimos 20 años, debido a sus novedosas propiedades, el grafeno ha destacado como posible sustituto para materiales en el ámbito de la electrónica de alta frecuencia.

Tiene una elevada velocidad de saturación de electrones, una alta movilidad de los mismos y un gap energético de valor nulo. Estas, entre otras, hacen del grafeno un gran candidato para la construcción de transistores, que se teoriza que puede llegar a procesar señales con frecuencias de THz.

Desde que se descubrió este material ha habido experimentos que han creado transistores de efecto campo fabricados con grafeno, llegando a resultados interesantes [1]. En la actualidad, el mayor obstáculo para la creación a gran escala de transistores basados en grafeno es la gran dificultad de fabricar grafeno de alta calidad, de manera especial en grandes superficies.

Con este contexto, han sido desarrollados múltiples modelos físicos para los transistores de efecto campo fabricados con grafeno. En este proyecto se ofrece un modelo matemático a uno de estos modelos físicos.

Este modelo físico había sido ya modelizado matemáticamente, con lo que este trabajo ofrece una alternativa a dicho modelo. El programa antiguo presenta algunas limitaciones como el control de los parámetros de cálculo, y de esta manera su rendimiento no está optimizado.

El modelo consiste en la resolución de dos ecuaciones acopladas: la ecuación de Poisson de la electrostática y la ecuación de la conservación de la corriente. El modelo se resolverá mediante el método de diferencias finitas (MDF). La ecuación de Poisson se resolverá mediante la resolución de un sistema de ecuaciones lineales, después de haber establecido las ecuaciones a través del MDF. La ecuación de la continuidad de la corriente se resolverá empleando el método del disparo, de manera que un método de Runge-Kutta de orden 2 sea ejecutado de manera iterativa combinándolo con el método de la secante. El resultado final se obtendrá acoplando ambas ecuaciones gracias a las funciones de optimización de MATLAB. La accesibilidad que permite haber elaborado un código propio, da la opción a realizar posibles revisiones y mejoras de manera sencilla.

El modelo permite el estudio de diversos fenómenos que se dan en estos transistores. Con el programa elaborado, se introduce una nueva herramienta para la investigación y el desarrollo de estos aparatos.

Palabras clave: Transistor de efecto campo, grafeno, silicio, semiconductor, MOSFET, nanotecnología, electrónica, modelización, MATLAB, radiofrecuencia, método de diferencias finitas, bidimensional.

Códigos UNESCO:

1206.01 Construcción de Algoritmos
1206.02 Ecuaciones Diferenciales
1206.08 Métodos Iterativos
2202.01 Conductividad
2203.02 Elementos de Circuitos
2203.07 Circuitos Integrados
2211.25 Semiconductores
2212.01 Campos Electromagnéticos
3307.14 Dispositivos Semiconductores
3307.19 Transistores
3307.92 Microelectrónica. Tecnologías III-V y Alternativas

Índice general

I	INTRODUCCIÓN	5
1.	INTRODUCCIÓN, OBJETIVOS Y ALCANCE DEL PROYECTO	6
1.1.	Partes del transistor y funcionamiento.	6
1.2.	Electrónica de alta frecuencia	8
1.3.	Grafeno	8
1.4.	Modelo físico de un transistor de grafeno	9
1.5.	Objetivos	10
1.6.	Estado del arte	11
1.7.	Evaluación de impactos	11
II	METODOLOGÍA	12
2.	RESOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE POISSON	13
2.1.	Modelo físico	13
2.2.	Aproximación por diferencias finitas	14
2.3.	Modelización	16
2.4.	Construcción del sistema	17
2.5.	Resolución del sistema	19
3.	RESOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE CONTINUIDAD DE LA CORRIENTE	21
3.1.	Introducción	21
3.2.	Aplicación de ecuaciones de física del estado sólido	22
3.3.	Modelización	24
3.4.	Solución propuesta	25
4.	SOLUCIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES ACOPLADAS	27
4.1.	Introducción	27
4.2.	Método de cálculo. Elección del algoritmo óptimo	27
4.3.	Estructura de las simulaciones	28
III	RESULTADOS Y CONCLUSIONES	29
5.	RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN	30
5.1.	Gráficos de I en función de V_D , para diversos V_G	30
5.2.	Gráficos de I en función de V_G , para diversos V_D	30
5.3.	Potencial electroquímico V y potencial electrostático ϕ para distintos valores de V_G	32
5.4.	Polarizaciones de interés	32
5.5.	Métodos de corrección de errores	36
6.	PLANIFICACIÓN TEMPORAL Y PRESUPUESTO	37
6.1.	Planificación temporal:	37
6.2.	Presupuesto:	37

7. ANÁLISIS DE LOS ASPECTOS LEGALES, ÉTICOS Y SOSTENIBLES	38
7.1. Responsabilidad legal	38
7.2. Responsabilidad ética	38
7.3. Contribución a los Objetivos de Desarrollo Sostenible	38
8. CONCLUSIONES	39
BIBLIOGRAFÍA	40
ABREVIATURAS, UNIDADES Y ACRÓNIMOS	42
ÍNDICE DE FIGURAS	43

Parte I

INTRODUCCIÓN

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN, OBJETIVOS Y ALCANCE DEL PROYECTO

En los últimos 20 años, la investigación en materiales bidimensionales ha recibido mucha atención debido a las novedosas propiedades mecánicas, térmicas y eléctricas que presentan. Entre ellos, el grafeno es el candidato más prometedor en aplicaciones de alta frecuencia debido a la alta movilidad que tienen los electrones en su interior [2]. Este trabajo de fin de grado ha consistido en implementar un programa en MATLAB para simular transistores de efecto campo basados en grafeno.

En este primer capítulo pondremos en contexto este trabajo de fin de grado, explicando el estado del arte del campo de investigación de los transistores de efecto campo basados en grafeno.

1.1. Partes del transistor y funcionamiento.

El transistor [3] es un dispositivo activo fundamental en los circuitos microelectrónicos. Mientras que los componentes pasivos simplemente almacenan o disipan energía, los transistores son capaces de amplificar señales y actuar como interruptores, controlando el flujo de corriente eléctrica dentro de un circuito. Esta capacidad de modulación y control es esencial para el funcionamiento de una amplia gama de dispositivos electrónicos, como sistemas de comunicación y sensores.

En los transistores de efecto campo (FET, de las siglas del inglés Field Effect Transistors) más típicos, los de tipo metal-óxido-semiconductor (MOSFET), la parte principal es la estructura puerta-sustrato en la que se induce un campo eléctrico que atrae o repele portadores de carga en el semiconductor. Esta es su característica más importante pues con ello se consigue que la conductividad entre los terminales de fuente y drenador sea variable.

En los FET tenemos cuatro partes:

- Fuente (S)
- Drenador (D)
- Puerta (G)
- Sustrato (B, suele ir conectado a la fuente)

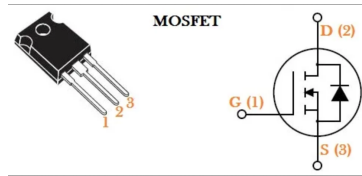


Figura 1.1: (Izquierda) Imagen de un transistor MOSFET disponible comercialmente. (Derecha) Representación gráfica de un MOSFET en el esquema de un circuito [4]

Tenemos en los FET tres tipos de operación:

- En activa (región óhmica): La intensidad que va de fuente a drenador es proporcional a la diferencia de potencial entre estos dos terminales.
- En corte: El transistor impide el paso de la corriente
- En saturación: El transistor permite el paso de la corriente, sin depender de la diferencia de potencial entre fuente y drenador.

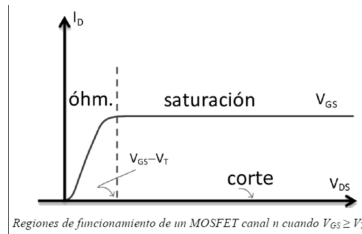


Figura 1.2: Corriente de drenador en función del voltaje drenador-fuente para varios voltajes puerta-fuente

El desarrollo de transistores ha experimentado una evolución significativa desde la invención del transistor de punto de contacto en 1947 [5]. Con el tiempo, las tecnologías de transistores han avanzado hacia dispositivos de mayor rendimiento y menor tamaño, siguiendo la famosa ley de Moore [6]. Entre las diversas tecnologías de transistores, los FETs destacan por su capacidad para ofrecer un control eficiente y preciso del flujo de corriente en un canal semiconductor, lo que los hace indispensables en la fabricación de circuitos integrados.

Los transistores de silicio son actualmente los transistores más utilizados en la electrónica, debido a la abundancia de este material en la naturaleza, su reducido coste y su fácil purificación. Debido a que países como China tienen una grandísima proporción de la producción de silicio a nivel mundial, la Unión Europea está realizando esfuerzos en un desarrollo tecnológico propio, como alternativa a la electrónica basada en silicio, para reducir la dependencia de la UE de otros países.

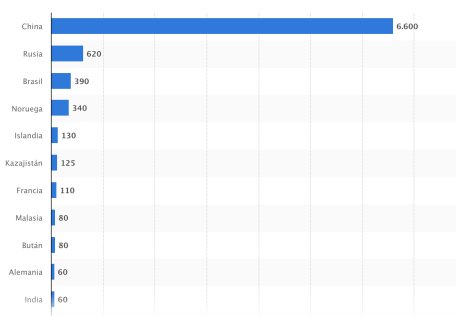


Figura 1.3: Ranking de los principales países productores de silicio 2023 [7]

Además, los transistores de silicio están llegando a sus límites tecnológicos, lo cual es una razón más para la investigación de nuevos materiales como sustituto a este material para la electrónica.

1.2. Electrónica de alta frecuencia

En la actualidad la electrónica de alta frecuencia es fundamental para la generación, transmisión, recepción y procesamiento de ondas electromagnéticas [8]. Su uso es aplicable a las comunicaciones, radares y microondas, entre otras. Entre los dispositivos que trabajan con alta frecuencia encontramos divisores y combinadores de potencia, filtros, acopladores direccionales y circuladores.

Otras aplicaciones de la electrónica de alta frecuencia son las etapas de transmisión y recepción en sistemas de comunicación inalámbricos, sistemas de transmisión inalámbrica de potencia, cosecha de energía electromagnética, sistemas de identificación por radio frecuencia y sistemas de ondas guiadas.

Los transistores de silicio funcionan en la electrónica de alta frecuencia para valores de, como máximo, 30 GHz [8].

La frecuencia de corte de un circuito electrónico es un límite en la respuesta frecuencial de un sistema en el cual la señal que se transmite a través del mismo comienza a reducir su amplitud. La frecuencia máxima de oscilación es el límite de frecuencia a partir de la cual el amplificador no presenta ganancia en potencia. Actualmente, se tiende a buscar una mejora tanto de la frecuencia de corte como de la frecuencia máxima de oscilación. Actualmente, se tiende a buscar una mejora tanto de la frecuencia de corte como de la frecuencia máxima de oscilación.

Actualmente, los FET de alta frecuencia están hechos de silicio o de materiales semiconductores III-V como el fosfuro de indio (InP). Estos últimos materiales son de los que están hechos otros tipos de transistores [9], llamados transistores de alta movilidad de electrones, HEMTs de sus siglas en inglés (High Electron Mobility Transistors). Actualmente, es posible que el grafeno pueda sustituir a estos materiales para la construcción de estos dispositivos. El objetivo es encontrar dispositivos capaces de trabajar a frecuencias del orden de los THz.

1.3. Grafeno

El grafeno fue aislado por primera vez por los científicos rusos André Geim y Konstantin Novoselov, en la Universidad de Manchester, cuando Geim transfirió grafeno a una superficie de óxido de silicio mediante una cinta adhesiva, que pegó a una pieza de grafito ultrapuro. Esto dio lugar a que en 2010 ganasen tanto él como Novoselov el premio Nobel de la Física, por el aislamiento del material y el estudio de sus propiedades.

La estructura atómica del grafeno ya se había planteado de manera teórica, pero no fue aislada desde el punto de vista práctico hasta que Geim realizó su experimento [10]. Se trata de una capa de grafito, de espesor de una o pocas capas atómicas, con una estructura hexagonal de átomos de carbono, cuyos enlaces tienen hibridación sp^2 . Por tanto, el grafeno es un material cristalino, bidimensional y densamente empaquetado. El grafeno puede encontrarse en una única capa de carbono, en dos capas de carbono (grafeno bicapa) y hasta un máximo de unas 10 capas. Una capa de grafeno tiene un espesor de 0.6 nm, y se considera grafeno cuando tenemos una capa de pocos nanómetros.

Las propiedades del grafeno son muy interesantes desde el punto de vista de la electrónica: [11]

- Resistencia mecánica 200 veces mayor que la del acero
- Flexibilidad muy elevada
- Densidad muy baja, 5 veces menor que la del aluminio
- Conductividad eléctrica y térmica mayor que la del cobre
- Menor resistividad que la plata, lo que reduce el efecto Joule
- Es fotosensible, es decir, puede generar electricidad al ser alcanzado por la luz
- Puede ser dopado para adquirir propiedades diferentes
- Material semiconductor o semimetal

- Elevada movilidad del electrón μ , de hasta $2 \cdot 10^5 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ [12]
- Velocidad de saturación del electrón elevada. Densidad de corriente máxima un millón de veces mayor que la del cobre
- Material bidimensional
- Gap energético igual a 0 para el grafeno de espesor monoatómico. Existe continuidad entre la banda de conducción y de valencia

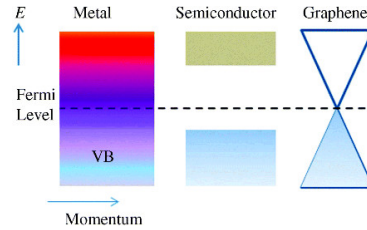


Figura 1.4: Estructura de bandas metales, semiconductores y grafeno monoatómico.

Por estas propiedades se han propuesto un gran número de dispositivos basados en grafeno, como transistores o supercondensadores [13]. Para los transistores, el grafeno puede llegar a mejorar considerablemente su rendimiento. Debido a su elevada movilidad de los electrones, así como su alta velocidad de saturación, desde el campo de vista teórico se estipula que puede llegar a modular frecuencias del orden de THz. En el campo de la electrónica de alta frecuencia sería una mejora muy considerable. Además, el hecho de poder pasar de manera continua de una zona de polarización a otra debido a que no existe gap energético, ha permitido diversas ventajas. La más inmediata es su aplicación como multiplicador de frecuencia. Estos transistores, debido a su funcionamiento gracias a los efectos de campo, sigue las siglas en inglés GFET (Graphene Field Effect Transistor).

Existe una gran dificultad para fabricar grafeno de buena calidad, especialmente en grandes superficies [14]. Esto se debe en parte a la gran delicadeza del proceso de transferencia de sustrato que requiere el proceso. Los dispositivos electrónicos que han sido desarrollados y tienen un correcto funcionamiento, han sido principalmente prototipos de laboratorio, siendo esta la principal traba para su aplicación a la electrónica de alta frecuencia.

1.4. Modelo físico de un transistor de grafeno

Debido a todas las posibles ventajas que ofrece el grafeno como sustituto al silicio en la electrónica moderna, y teniendo en cuenta que los resultados de estos dispositivos son muy favorables, se han desarrollado múltiples modelos físicos de transistores de grafeno [15][16][17][18][19]. Este trabajo de fin de grado ha consistido en implementar en MATLAB un modelo físico inicialmente desarrollado en 2016 [20].

Este modelo consiste en resolver un sistema de dos ecuaciones acopladas: la ecuación de Poisson de la electrostática en un entorno bidimensional; y la ecuación unidimensional de la conservación de la corriente a lo largo de la longitud de la lámina de grafeno. Es un modelo autoconsistente.

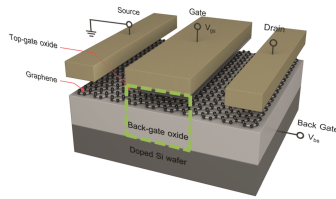


Figura 1.5: Estructura GFET. [20]

Como se verá más adelante en el capítulo 4, para la resolución de estas ecuaciones se necesita una aproximación inicial de la densidad de carga ρ a lo largo del grafeno. Con las dos ecuaciones resueltas se puede calcular un nuevo valor de ρ que deberá coincidir con el primer valor inicial. Tiene por tanto una estructura iterativa.

Este modelo físico, tiene las siguientes limitaciones:

- Es válido siempre y cuando el transistor se mantenga fuera de su región balística. Esto implica que el ancho del canal debe ser más largo que el recorrido libre medio de los portadores en el grafeno, lo cual se estima en torno a 10-100 nm [21]
- No se ha considerado la ionización de impacto
- No se ha considerado la transmisión de energía de altos campos eléctricos a los electrones

La implementación del modelo físico consistía en lo siguiente: se utilizaba para la ecuación de Poisson el conjunto de herramientas de MATLAB *pdetool*, que resuelve de manera automática ecuaciones en derivadas parciales mediante el método de elementos finitos [20]. A continuación, resolvía la ecuación de la continuidad de la corriente mediante un predictor-corrector y resolvía el sistema de ecuaciones con un método autoconsistente, la mezcla de Pulay.

Este modelo funciona, y los resultados fueron analizados y publicados [20]. Sin embargo, la implementación matemática del modelo presenta las siguientes limitaciones desde el punto de vista de cálculo computacional:

- Modelo poco flexible. El modelo no permite la elección del mallado. Éste es elegido de manera automática por la herramienta de cálculo.
- Modelo poco optimizado. Debido a que las herramientas de MATLAB están automatizadas, no da lugar a la optimización del cálculo de cara al tiempo de computación.

Intentando profundizar en el estudio de esta moderna herramienta de la electrónica, cuyo potencial ha sido descrito, este trabajo trata de buscar mejoras para implementar el modelo físico descrito.

El nuevo modelo es un modelo en diferencias finitas. El modelo creado tiene como fortaleza la flexibilidad en los parámetros del problema, así como en el mallado. Es un modelo modificable por el usuario, con código propio, y por tanto accesible, cuyos resultados son consistentes. Además, se ha tratado de mejorar la eficiencia del código, con resultados prometedores.

1.5. Objetivos

Tal y como hemos introducido en apartados anteriores, aquí resumimos los principales objetivos de este trabajo de fin de grado.

1. Crear un código que responda al modelo físico propuesto anteriormente.
2. Mejorar en eficiencia y en control con respecto a la implementación matemática ya existente del modelo.
3. Realizar una memoria explicativa que facilite posibles revisiones al código, y estructurar el código de manera que sea fácil su comprensión y modificación, de cara a futuras actualizaciones y a la utilización del código en futuras simulaciones.

1.6. Estado del arte

Los transistores basados en grafeno ya son competitivos contra otros transistores de radiofrecuencia [9]. A pesar de los buenos resultados de los HEMT, siendo dispositivos disponibles comercialmente, se prevé un gran crecimiento del rendimiento de los GFET en el ámbito de la radiofrecuencia.

Los transistores de grafeno son actualmente un campo de investigación puntero. Por ejemplo, un grupo de investigación de la Universidad de Granada (UGR) investiga nuevas aplicaciones de GFETs, como multiplicadores de frecuencia, pues presenta conducción bipolar [22].

Existen otros modelos desarrollados por la UGR de transistores de esta naturaleza, por su aplicación como biosensores [23].

Otros centros que investigan en este campo son el instituto de investigación en nanotecnología Amo GmbH en Aquisgrán (Alemania) y en la Universidad de Chalmers en Gotemburgo (Suecia) [24][25].

1.7. Evaluación de impactos

Con esta implementación se ha logrado tener pleno control del mallado en la región bidimensional, pudiendo controlar la simplicidad o complejidad de la resolución de manera sencilla. Para ello se ha aprovechado la estructura de la región, ya que, en la resolución de la ecuación de Poisson, se emplea un mallado uniformemente distribuido a lo largo de las dimensiones principales del transistor. Simplifica la comprensión de la resolución numérica, pues existe un código concreto y una detallada explicación del método utilizado en cada etapa. Se apoya con este proyecto a la investigación para la introducción de este material a la electrónica de alta frecuencia.

El grafeno dentro de la electrónica tiene, como se ha descrito anteriormente, un gran potencial en el ámbito de la alta frecuencia. No sólo por motivos de rendimiento y tamaño, sino por motivos de sostenibilidad es interesante la introducción de este material en la industria. Su fácil obtención, pues viene del grafito, y su reducido coste favorece su utilización en cualquier industria en la que sea aplicable.

Parte II

METODOLOGÍA

Capítulo 2

RESOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE POISSON

2.1. Modelo físico

En este capítulo trataremos de resolver la ecuación de Poisson bidimensional de la electrostática. Por la simetría del dispositivo consideraremos que las magnitudes son constantes a lo largo del eje z .

Para resolver esta ecuación, consideraremos conocida la distribución de densidad de carga en todo el dispositivo así como las dimensiones y la permitividad de los materiales. La única incógnita será, entonces, el potencial electrostático.

$$\nabla[\epsilon(x, y)\nabla\phi(x, y)] = \rho(x, y) \quad (2.1)$$

Donde:

- $\phi(x, y)$ es el potencial electrostático.
- $\epsilon(x, y)$ es el tensor de la permitividad dieléctrica del medio, constante en el interior de cada material.

$$\epsilon(x, y) = \begin{pmatrix} \epsilon_x & 0 \\ 0 & \epsilon_y \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

- $\rho(x, y)$ es el valor de la densidad de carga eléctrica. Será de valor 0 en el interior de los óxidos y de valor $(p - n)/t_g$ en el interior del grafeno. Las variables n y p son la densidad de electrones y portadores respectivamente, y t_g el espesor de la capa de grafeno.

Al ser ϵ constante en cada material, podemos concluir lo siguiente: [\[26\]](#)

$$\epsilon_x(x, y)\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \epsilon_y(x, y)\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} = \rho(x, y) \quad (2.3)$$

2.1.1. Dominio

El dominio consiste en un corte transversal del transistor a modelizar. Es una región bidimensional tal y como se muestra en la Figura 2.1. El eje x corresponde con la dirección que va de la puerta trasera a la superior pasando por los óxidos. El eje y va desde la fuente hacia el drenador. Tenemos tres partes diferenciadas:

1. Óxido superior (TO). Óxido de aluminio
2. Óxido inferior (BO). Óxido de silicio
3. Lámina de grafeno (GR).

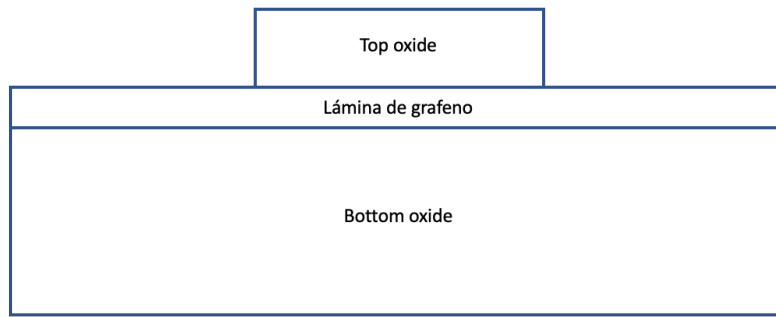


Figura 2.1: Dominio bidimensional donde se resuelve la ecuación de Poisson

2.1.2. Condiciones de contorno

En este dominio tenemos unas condiciones Dirichlet (voltaje impuesto V_S, V_G, V_D, V_B) en cada uno de los cuatro terminales eléctricos del GFET (fuente, puerta superior, drenador y puerta trasera, respectivamente) y condiciones Neumann homogéneas en el resto de fronteras del dominio.

En la figura 2.2 se puede ver las diferentes fronteras del dominio en las que se aplican condiciones de tipo Dirichlet y Neumann, así como las dimensiones que definen el transistor.

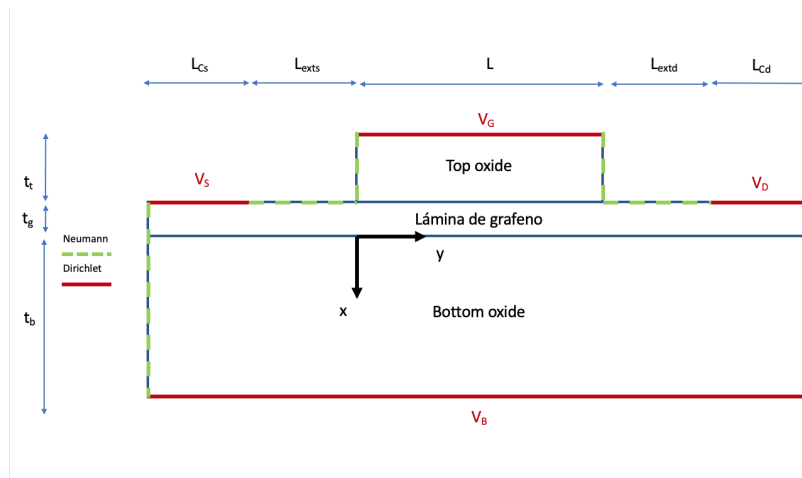


Figura 2.2: Dimensiones del dominio

2.2. Aproximación por diferencias finitas

2.2.1. Mallado

Tomamos un mallado, con un número finito de puntos y equiespaciados en y en el dominio. En el eje x haremos variar el paso según el material. Como se ve en la figura, en el grafeno crearemos un mallado más fino.

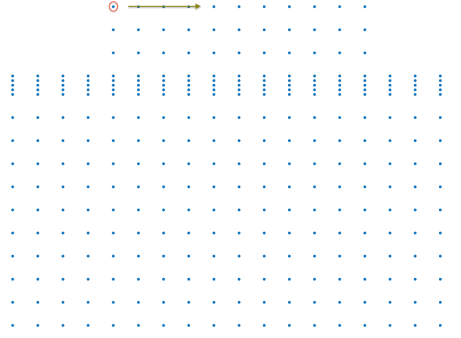


Figura 2.3: Mallado

2.2.2. Notación indicial

Hemos dividido el dominio bidimensional según el mallado explicado, quedando de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + \Delta x_k \\ y_{j+1} &= y_j + \Delta y \end{aligned}$$

Donde k representa las distintas regiones del transistor, diferenciando así los valores de Δx en cada material.

Notaremos $\phi_{i,j} \approx \phi(x_i, y_j)$ como una aproximación del valor de ϕ en el punto (x_i, y_j) .

2.2.3. Polinomio de Taylor. Aproximación de la segunda derivada

Interior del dominio

Para calcular la solución de la ecuación de Poisson hemos tenido en cuenta el desarrollo en serie de Taylor del potencial eléctrico.

$$\phi(x + \Delta x, y) = \phi(x, y) + \frac{\partial \phi}{\partial x}(x, y)\Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(x, y)\Delta x^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}(x, y)\Delta x^3 + \mathcal{O}(\Delta x^4) \quad (2.4)$$

$$\phi(x - \Delta x, y) = \phi(x, y) - \frac{\partial \phi}{\partial x}(x, y)\Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(x, y)\Delta x^2 - \frac{1}{6} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}(x, y)\Delta x^3 + \mathcal{O}(\Delta x^4) \quad (2.5)$$

Sumando la ecuaciones (2.4) + (2.5)

$$\phi(x + \Delta x, y) + \phi(x - \Delta x, y) = 2\phi(x, y) + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(x, y)\Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^4) \quad (2.6)$$

Y despejando $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(x, y)$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(x, y) = \frac{\phi(x + \Delta x, y) - 2\phi(x, y) + \phi(x - \Delta x, y)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (2.7)$$

Podemos afirmar entonces, procediendo de manera idéntica para la derivada segunda con respecto a y

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}(x, y) = \frac{\phi(x, y + \Delta y) - 2\phi(x, y) + \phi(x, y - \Delta y)}{\Delta y^2} + \mathcal{O}(\Delta y^2) \quad (2.8)$$

De esta manera, sustituyendo las expresiones (2.7) y (2.8) en la ecuación (2.3), y eliminando los términos $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ y $\mathcal{O}(\Delta y^2)$ obtenemos la ecuación:

$$\epsilon_x \frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \epsilon_y \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\Delta y^2} = \rho(x_i, y_j) \quad (2.9)$$

que es válida en el interior de cada subdominio.

Condiciones de frontera

Para las condiciones de frontera tipo Neumann, podemos utilizar el polinomio de Taylor, en una frontera con $y = \text{constante}$.

$$\phi(x_{i+1}, y_j) = \phi(x_i, y_j) + \frac{\partial \phi}{\partial x}(x_i, y_j) \Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (2.10)$$

siendo (x_i, y_j) el punto sobre la frontera. Como $\frac{\partial \phi}{\partial x}(x_i, y_j) = 0$:

$$\phi(x_{i+1}, y_j) = \phi(x_i, y_j) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (2.11)$$

Contacto entre materiales dispares

Por último, necesitamos tener en cuenta los puntos que hacen frontera entre dos materiales. Consideramos que no hay densidad superficial de carga libre en las fronteras entre el grafeno y los aislantes. Por tanto, el campo desplazamiento debe ser continuo a través de la frontera. Tendremos en cuenta que, en general, el campo desplazamiento $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$ y que $\vec{E} = -\nabla \phi$.

Además, por la simetría del problema podemos asumir que sólo existe componente x en el vector desplazamiento eléctrico.

En las expresiones siguientes expresamos el cambio de material de los hipotéticos materiales 1 y 2.

$$\begin{aligned} D_{1x} &= D_{2x}, \\ \epsilon_{1x} E_{1x} &= \epsilon_{2x} E_{2x}, \\ \epsilon_{1x} \left(\frac{-\partial \phi}{\partial x} \right)_1 &= \epsilon_{2x} \left(\frac{-\partial \phi}{\partial x} \right)_2, \\ \epsilon_{1x} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x_1} &= \epsilon_{2x} \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x_2}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$-\frac{\epsilon_{1x}}{\Delta x_1} \phi_{i-1} - \frac{\epsilon_{2x}}{\Delta x_2} \phi_{i+1} + \left(\frac{\epsilon_{1x}}{\Delta x_1} + \frac{\epsilon_{2x}}{\Delta x_2} \right) \phi_i = 0.$$

Se tiene en cuenta que en distintos materiales, se puede tener distinto paso en el eje x . De esta manera, en el material 1 tenemos un paso Δx_1 y en el material 2 un paso Δx_2 .

2.3. Modelización

Para cada punto del dominio (x_i, y_j) , fuera de la frontera, tenemos una ecuación de aproximación, de la forma

$$\epsilon_x \frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \epsilon_y \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\Delta y^2} = \rho(x_i, y_j) \quad (2.13)$$

En los puntos de la frontera tipo Dirichlet, tenemos ecuaciones de la forma

$$\phi_{i,j} = V_\lambda \quad (2.14)$$

Donde λ puede referirse a la puerta superior, puerta trasera, fuente ó drenador. En los puntos de la frontera Neumann homogénea, tenemos ecuaciones de la forma

$$\phi_{i+1,j} = \phi_{i,j} \Leftrightarrow \phi_{i+1,j} - \phi_{i,j} = 0 \quad (2.15)$$

o bien

$$\phi_{i,j+1} = \phi_{i,j} \Leftrightarrow \phi_{i,j+1} - \phi_{i,j} = 0 \quad (2.16)$$

dependiendo si la frontera es perpendicular al eje x o y , respectivamente.

Finalmente, para los puntos situados en la frontera entre dos materiales haremos uso de la expresión final (2.12):

$$-\frac{\epsilon_{1x}}{\Delta x_1} \phi_{i-1} - \frac{\epsilon_{2x}}{\Delta x_2} \phi_{i+1} + \left(\frac{\epsilon_{1x}}{\Delta x_1} + \frac{\epsilon_{2x}}{\Delta x_2} \right) \phi_i = 0 \quad (2.17)$$

De esta manera, tenemos un número n de valores finitos del potencial electrostático en el dominio, y el mismo número n de ecuaciones lineales asociadas a cada punto. Buscaremos entonces expresar este sistema de ecuaciones de la siguiente manera:

$$\mathbf{M}\Phi = \mathbf{v} \quad (2.18)$$

Donde:

- \mathbf{M} : Matriz $n \times n$ con los coeficientes del sistema
- Φ : Vector dimensión n con las incógnitas $\phi_{i,j}$
- \mathbf{v} : Vector dimensión n que reúne los términos independientes.

La matriz \mathbf{M} y el vector \mathbf{v} , nacen de las ecuaciones (2.13) - (2.17)

2.4. Construcción del sistema

Trataremos de resolver el sistema propuesto usando MATLAB.

2.4.1. Generación del mallado

Una vez introducidos las dimensiones del sistema, discretizaremos el dominio, tanto en el número de nodos en el eje x (n_x) como en el eje y (n_y).

De esta manera, determinaremos fácilmente el mallado, con su respectivo paso Δx y Δy para cada material. Determinaremos también el número de nodos en el eje x e y para cada región definida en Figura 2.4 ($n_x^{(p)}$ y $n_y^{(p)}$, donde p es la región del dominio).

Esto simplificará el recorrido por la matriz \mathbf{M} y el vector \mathbf{v} .

2.4.2. Construcción de la matriz \mathbf{M}

En la matriz \mathbf{M} de dimensión $n \times n$ construida, tendremos en cada fila los coeficientes de la ecuación del punto correspondiente.

$$\begin{array}{l} \text{Ecuación 1} \\ \text{Ecuación 2} \\ \vdots \\ \text{Ecuación n} \end{array} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & m_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdot & \cdot & \cdot & m_{nn} \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

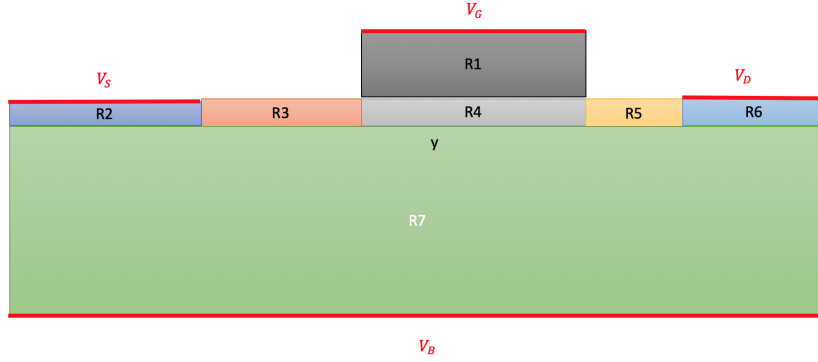


Figura 2.4: Regiones del dominio

Es importante tener en cuenta el orden en el que se toman los puntos. En este modelo se ha comenzado en la esquina superior izquierda de la región R1 (marcada con un círculo rojo de la figura 2.3), como el punto número 1, y a partir de ese punto en orden creciente siguiendo el sentido de la flecha amarilla de la misma figura.

Discutiremos únicamente los valores no nulos de esta matriz.

Punto en el interior del dominio

Si tomásemos el punto k en el interior del dominio (no frontera), el coeficiente m_{kk} sería el siguiente:

$$m_{kk} = -\frac{2\epsilon_x}{\Delta x^2} - \frac{2\epsilon_y}{\Delta y^2} \quad (2.20)$$

acorde a la expresión (2.13)

Los coeficientes $m_{k,k+1}$, $m_{k,k-1}$ son inmediatos.

$$m_{k,k+1} = m_{k,k-1} = \frac{\epsilon_y}{\Delta y^2} \quad (2.21)$$

Para el resto de coeficientes no nulos, hemos de tener en cuenta que hay un cambio de fila para los coeficientes $\phi_{i+1,j}$ y $\phi_{i-1,j}$, por lo que tendremos que sumar el número de nodos presentes en cada fila. A este número lo llamaremos $n_{fila}^{(p)}$.

De esta manera, los coeficientes no nulos son $m_{k,k-n_{fila}^{(p)}}$ y $m_{k,k+n_{fila}^{(p)}}$, de la siguiente manera:

$$m_{k,k-n_{fila}^{(p)}} = m_{k,k+n_{fila}^{(p)}} = \frac{\epsilon_x}{\Delta x^2} \quad (2.22)$$

Nota:

$$\begin{aligned} n_{fila}^{(1)} &= n_y^{(1)} \\ n_{fila}^{(l)} &= n_y^{(7)} \text{ Para } l=2,3,\dots,7. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Punto en la frontera del dominio

1. Frontera Dirichlet

Según la expresión (2.14), tenemos lo siguiente:

$$m_{kk} = 1 \quad (2.24)$$

2. Frontera Neumann

Según las expresiones (2.15) y (2.16) podemos tener diversas opciones, según la posición y la orientación de la frontera:

$$\begin{aligned} \text{(Regiones 1 y 7 izquierda)} \quad m_{kk} &= -1; m_{k,k+1} = 1 \\ \text{(Regiones 1 y 7 derecha)} \quad m_{kk} &= -1; m_{k,k-1} = 1 \\ \text{(Regiones 3 y 5)} \quad m_{kk} &= -1; m_{k,k+n_{fila}^p} = 1 \end{aligned} \quad (2.25)$$

Punto de contacto entre materiales

Según la expresión (2.17) tenemos los siguientes valores:

$$\begin{aligned} m_{kk} &= \frac{\epsilon_1}{\Delta x_1} + \frac{\epsilon_2}{\Delta x_2} \\ m_{k,k-n_{fila}^{(p)}} &= -\frac{\epsilon_1}{\Delta x_1} \\ m_{k,k+n_{fila}^{(p)}} &= -\frac{\epsilon_2}{\Delta x_2} \end{aligned} \quad (2.26)$$

2.4.3. Construcción del vector \mathbf{v}

Punto en el interior del dominio

Según la expresión (2.13), las componentes del vector de términos independientes serán:

$$v_k = \rho(x_i, y_j) \quad (2.27)$$

Punto en la frontera del dominio

1. Frontera Dirichlet

Según la expresión (2.14), tenemos lo siguiente:

$$v_k = V_\lambda \quad (2.28)$$

2. Frontera Neumann

Según las expresiones (2.15) y (2.16), concluimos que en cualquier caso tenemos lo siguiente:

$$v_k = 0 \quad (2.29)$$

3. Frontera entre materiales

Según la expresión (2.17), quedaría:

$$v_k = 0 \quad (2.30)$$

2.5. Resolución del sistema

Una vez obtenidas \mathbf{M} y \mathbf{v} , procedemos a la obtención del vector Φ , para lo cual utilizamos la barra invertida de MATLAB.

De esta forma tenemos el resultado del sistema, pero en forma de vector, y sin embargo nos interesa el resultado del vector en función de x e y . Necesitamos entonces reorganizar los valores de Φ .

Un ejemplo de resolución sería el siguiente:

Se implementa el modelo de solución de la ecuación (2.3) en un dominio bidimensional como el definido por la Figura 2.1, cuyas dimensiones son las siguientes:

Espesor del óxido superior	t_t	30 nm
Espesor del grafeno	t_g	0.6 nm
Espesor del óxido inferior	t_g	300 nm
Longitud del óxido superior (R1)	L	500 nm
Longitud de contacto con la fuente (R2)	LCs	50 nm
Longitud de contacto con el drenador (R6)	LCs	50 nm
Longitud de la región R3	$Lexts$	100 nm
Longitud de la región R5	$Lextd$	100 nm

Siendo las constantes físicas relevantes de los materiales las siguientes:

Permitividad del óxido superior	ϵ_{TO}	$5,9\epsilon_0$
Permitividad del óxido inferior	ϵ_{BO}	$3,9\epsilon_0$
Permitividad del grafeno	ϵ_{GR}	$\begin{pmatrix} 3,3 & 0 \\ 0 & 9 \end{pmatrix} \epsilon_0$

Las condiciones de frontera Neumann homogéneas se fijan en los tramos de la frontera ya descritos (Figura 2.2). Las condiciones de frontera Dirichlet son las siguientes, según han sido representadas en la Figura 2.2:

Voltaje en la fuente	V_S	0 V
Voltaje en el drenador	V_D	0 V
Voltaje en la puerta	V_G	1 V
Voltaje en el sustrato	V_B	1 V

Los datos del mallado (Figura 2.3) son los siguientes:

Número de nodos en y	n_y	60
Número de nodos en x para el grafeno	n_{GRx}	7
Cociente entre Δx_{Resto} y $\Delta x_{Grafeno}$	α	100

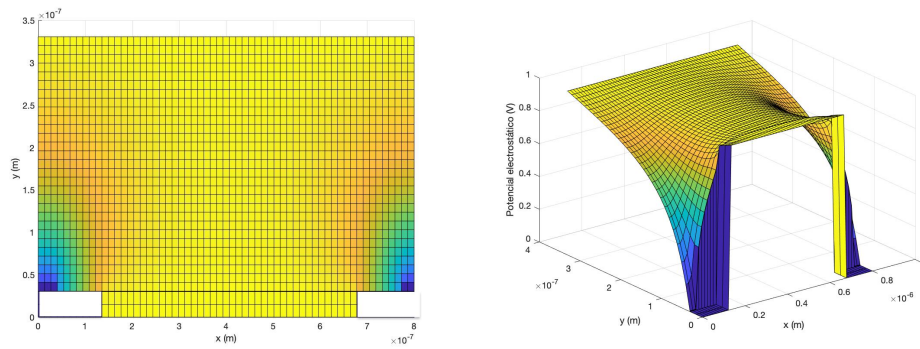


Figura 2.5: Solución propuesta

Capítulo 3

RESOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE CONTINUIDAD DE LA CORRIENTE

3.1. Introducción

En este capítulo analizaremos la corriente longitudinal que circula a través del grafeno mediante el estudio de la física del estado sólido.

3.1.1. Descripción del problema

Nuestro objetivo es hallar el potencial electroquímico $V(y)$ a lo largo del grafeno. Por las condiciones de simetría del problema, V se considera constante a lo largo del eje z . De esta manera, sólo tenemos que calcular el valor de V en una dimensión del dominio.

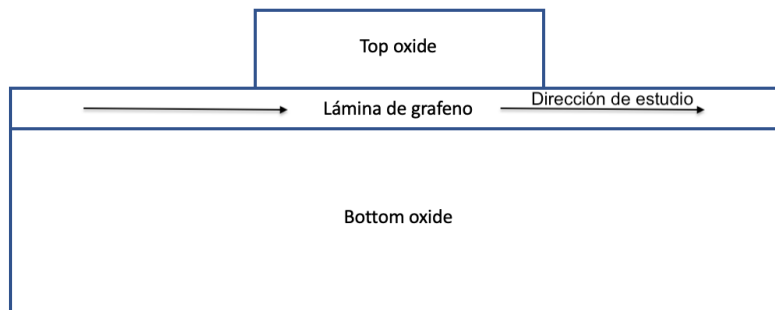


Figura 3.1: Dominio

Partiremos del vector de potencial electrostático ϕ a lo largo del eje longitudinal del grafeno calculado resolviendo la ecuación de Poisson que se ha explicado en el capítulo 2.

3.2. Aplicación de ecuaciones de física del estado sólido

3.2.1. Ecuación diferencial

Comenzaremos por la ecuación que une la densidad de corriente \vec{J} con el potencial eléctrico [26]:

$$\vec{J} = \sigma \cdot (-\nabla V) \quad (3.1)$$

Es relevante mencionar que la ecuación (3.1) no tiene las dimensiones convencionales donde la densidad de corriente se expresa en forma de A/m^2 , pues al contar con un material bidimensional, esta magnitud viene dada en A/m .

Por otro lado, el gradiente es unidimensional, y V depende sólo de y , lo cual nos lleva de la expresión anterior a lo siguiente:

$$J = \sigma \cdot \left(-\frac{dV}{dy} \right) \quad (3.2)$$

Tomamos el convenio de corriente de drenador positiva para voltajes de drenador positivos. Esto implica un cambio en la referencia convencional del flujo de corriente, y por tanto un cambio de signo:

$$J = \sigma \frac{dV}{dy} \quad (3.3)$$

Definimos I como la corriente que va de la fuente al drenador y W el ancho del transistor a lo largo del eje z . Recordando las dimensiones de la densidad de corriente por tratarse de un material bidimensional tenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} I &= J \cdot W \\ I &= \sigma \frac{dV}{dy} \cdot W \end{aligned} \quad (3.4)$$

Definimos ahora n como la concentración de electrones en la banda de conducción por unidad de superficie, y p como la concentración de portadores en la banda de valencia. Sabemos que la corriente I debe ser constante a lo largo del eje y debido a la conservación de la carga.

Tenemos la expresión de semiconductores [1]:

$$\sigma = q(n + p)\mu \quad (3.5)$$

De las expresiones (3.4) y (3.5) podemos obtener la ecuación diferencial que vamos a tener que resolver.

$$\frac{dV}{dy} = \frac{I}{W\mu(n + p)q} \quad (3.6)$$

Se definirán en una sección posterior las condiciones de frontera de esta ecuación.

3.2.2. Variables de la ecuación diferencial

De la ecuación (3.6), los únicos valores que dependen de V o de y son μ , n y p . En el caso de μ , se puede aproximar su valor experimentalmente de la siguiente manera [27]:

$$\mu = \frac{\mu_0}{\sqrt[\gamma]{1 + \left| \frac{\mu_0}{v_{sat}} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|^\gamma}} \quad (3.7)$$

Donde:

- γ es un parámetro experimental que depende del material. En el caso del grafeno, es razonable tomar $\gamma = 2$, que modela la saturación de velocidad de los portadores de carga (electrones o huecos) [27].
- μ_0 es el valor de μ para campos eléctricos bajos, cuando el comportamiento es lineal.
- v_{sat} es la velocidad de saturación de los electrones y huecos en el grafeno, que hemos considerado constante en este trabajo.

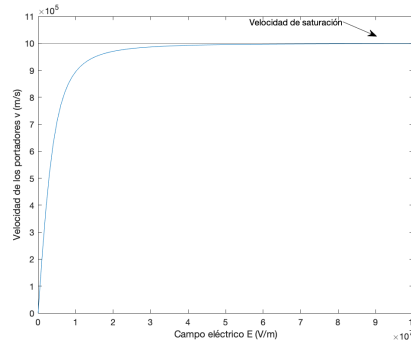


Figura 3.2: Gráfico $v(E) = \mu(E) \cdot E$

Para n y p , tenemos las siguientes fórmulas, de la estadística de Fermi-Dirac, que se deducen de la estructura de bandas del grafeno y de la estadística de Fermi-Dirac que siguen electrones y huecos[10]:

$$\begin{aligned} n &= N_G \cdot \mathcal{F}_1 \left(\frac{E_F - E_D}{\kappa_B \cdot T} \right) \\ p &= N_G \cdot \mathcal{F}_1 \left(\frac{E_D - E_F}{\kappa_B \cdot T} \right) \\ N_G &= \frac{2}{\pi} \left(\frac{\kappa_B \cdot T}{\hbar \cdot \nu_F} \right)^2 \end{aligned} \quad (3.8)$$

donde:

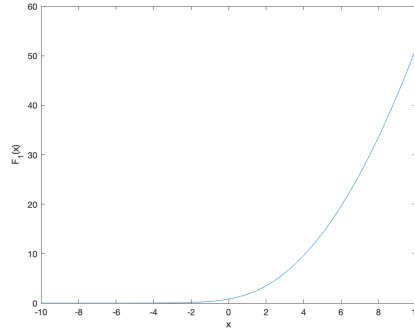
- $\mathcal{F}_i(x)$ es la integral completa de Fermi-Dirac.

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_i(x) &= \frac{1}{\Gamma(i+1)} \int_0^\infty \frac{t^i}{e^{t-x} + 1} dt \\ \mathcal{F}_1(x) &= -\text{Li}_2(-e^x) \end{aligned} \quad (3.9)$$

siendo Li la función polilogarítmica y Γ la función Gamma de Euler. La integral de Fermi-Dirac de orden 1, $\mathcal{F}_1(x)$, se puede observar en la Figura 3.3.

- E_F es la energía de Fermi: $E_F = -qV$.
- E_D es la energía de Dirac: $E_D = -q\phi$.
- κ_B es la constante de Boltzmann.
- T es la temperatura del medio, que se ha considerado constante de valor 300 K.
- \hbar es la constante de Planck reducida: $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.
- ν_F es la velocidad de Fermi, que es una constante con origen en la estructura de bandas del grafeno.

Aquí hemos tenido en cuenta que el cuasi nivel de Fermi de huecos y electrones es el mismo, ya que el tiempo de recombinación de portadores es muy bajo [28].

Figura 3.3: $\mathcal{F}_1(x)$

3.3. Modelización

Tomaremos un mallado equiespaciado a lo largo de nuestro dominio longitudinal. En cada punto del mallado conocemos $\phi(y)$ en el punto medio de la lámina de grafeno, lo cual hemos sacado en la solución de la ecuación de Poisson.

Para el valor de la integral de Fermi-Dirac, se utilizará la función *fermi* del servicio de intercambio de ficheros de MATLAB, que aproxima mediante la regla de los trapecios la integral en cuestión [29].

3.3.1. Aproximación de las derivadas y cálculo de las magnitudes

Usaremos la aproximación de la primera derivada mediante diferencias finitas centradas de segundo orden:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta y} \quad (3.10)$$

En el caso de los límites laterales, usaremos:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_i &\approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta y} \text{ en el caso de límite derecho (diferencias finitas regresivas)} \\ \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_i &\approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta y} \text{ en el caso de límite izquierdo (diferencias finitas progresivas)} \end{aligned} \quad (3.11)$$

De esta manera tenemos:

$$\begin{aligned} \mu_i &= \frac{\mu_0}{\sqrt{1 + \left|\frac{\mu_0}{v_{sat}} \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_i\right|^2}} \\ n_i &= N_G \cdot \mathcal{F}_1\left(\frac{-qV_i + q\phi_i}{\kappa_B \cdot T}\right) \\ p_i &= N_G \cdot \mathcal{F}_1\left(\frac{-q\phi_i + qV_i}{\kappa_B \cdot T}\right) \end{aligned} \quad (3.12)$$

En cada expresión únicamente es desconocida V_i . Por tanto, en la ecuación diferencial (3.6) son únicamente desconocidas $V(y)$ (y su derivada) e I .

3.3.2. Método de resolución

Tenemos entonces una ecuación con la siguiente forma (ver Figura 2.2):

$$\begin{cases} \frac{dV}{dy}(y) &= f(V, y, I) & (L_{Cs} < y < L - L_{Cd}) \\ V(L_{Cs}) &= V_S \\ V(L - L_{Cd}) &= V_D \end{cases}$$

Este tipo de ecuaciones pueden ser resueltas mediante los modelos de Runge-Kutta, teniendo en cuenta que I trabaja como parámetro dentro del método del disparo que se explicará más adelante. En este trabajo usaremos un esquema de 2º orden, conocido como el método de Heun, con el siguiente tablero de Butcher:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline 1 & 1 \\ \hline & \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \end{array}$$

Figura 3.4: Método de Heun

$$\begin{cases} k_1 = f(V_i, y_i) \\ k_2 = f(V_i + k_1 * \Delta y, y_i + \Delta y) \\ V_{i+1} = V_i + \frac{\Delta y}{2}(k_1 + k_2) \end{cases}$$

El valor V_0 es igual al potencial en la entrada (V_S). De esta manera, tenemos un valor con el que comenzar las iteraciones en el método de Heun.

Sin embargo, el valor a la salida debe ser igual a V_D , lo cual únicamente lo será para un valor del parámetro I concreto. Como las ecuaciones presentes en nuestro modelo son no lineales, la resolución del modelo no se puede resolver mediante un sistema de ecuaciones en forma matricial.

Por esto, se implementará el método del disparo, de manera que se irá variando la intensidad de corriente I , hasta que el valor de la salida del método iterativo de Heun coincida con V_D , con un error aceptable. La intensidad I se hará variar mediante el método de la secante.

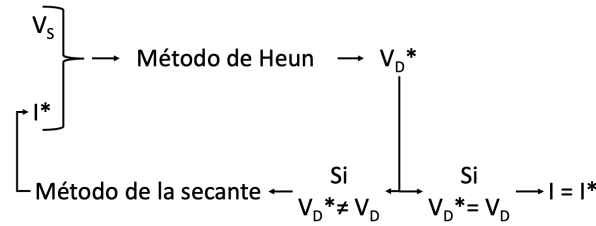


Figura 3.5: Procedimiento de cálculo para la ecuación de la continuidad de la corriente

3.4. Solución propuesta

Se resuelve la ecuación (3.6) en el dominio unidimensional definido en la Figura 3.1, donde $y \in (50nm, 450nm)$. Se ha programado este método para una distribución del potencial electrostático ϕ visible en la Figura 3.6.

La solución que se representa es el potencial electroquímico V , teniendo como entrada el potencial electrostático ϕ y los datos de la tabla siguiente:

Variable	Nombre de la variable	Valor
Voltaje en la fuente	V_S	0 V
Voltaje en el drenador	V_D	1 V
Número de nodos en y	n_y	60
Movilidad de los electrones en reposo	μ_0	$0,2 \text{ m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$
Velocidad de saturación	v_{sat}	10^6 ms^{-1}
Velocidad de Fermi	ν_F	10^6 ms^{-1}
Ancho del transistor a lo largo del eje z	W	100 nm

Para poder programar el método de la secante, es necesario que existan dos valores iniciales de la función objetivo, por lo que se tendrá que partir de dos valores de I diferentes. En este modelo estos valores serán 0.4 y 1.4. El valor de la intensidad calculado para esta entrada de datos es de $I = 3,25 \cdot 10^{-5} \text{ A}$.

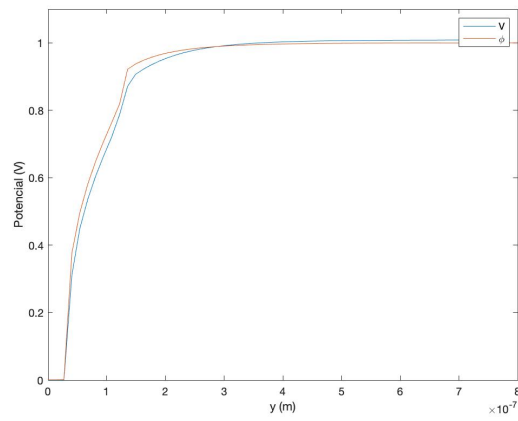


Figura 3.6: Potencial electroquímico y potencial electrostático a lo largo del eje y

Capítulo 4

SOLUCIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES ACOPLADAS

4.1. Introducción

Una vez que hemos explicado la resolución de la ecuación de Poisson en el dominio bidimensional del transistor, y la ecuación diferencial ordinaria unidimensional en la lámina de grafeno, debemos obtener la solución del sistema de ecuaciones acopladas.

Podemos obtener la densidad de carga a lo largo de la lámina de grafeno con la siguiente fórmula:

$$\rho(y) = \frac{-q}{t_g} \cdot [n(y) - p(y)] \quad (4.1)$$

De esta manera, introduciremos un valor inicial de $\rho(y)$ en la ecuación de Poisson, de la que obtendremos $\phi(y)$ en la lámina de grafeno. Con la ecuación de la conservación de la corriente obtendremos $V(y)$. Finalmente podremos calcular una nueva densidad de carga a través de la ecuación (4.1), donde n y p se calculan mediante las ecuaciones (3.11) a través de $\phi(y)$ y $V(y)$. Se tiene entonces una única variable de entrada, que es ρ , con una salida del sistema que ha de coincidir con dicha entrada. Se define entonces la función g que calcula la distribución ρ y cuya variable de entrada es a su vez la distribución de carga ρ .

4.2. Método de cálculo. Elección del algoritmo óptimo

El problema planteado anteriormente es un problema de punto fijo, en el que tenemos la función $g(\rho)$ que se quiere igualar a la propia variable ρ . Para calcular la distribución de carga ρ , se puede emplear el método de punto fijo más simple, en el que mediante un proceso iterativo, calculamos $\rho^{i+1} = g(\rho^i)$. Para las pruebas realizadas, este método de cálculo no converge. Es, sin embargo, una forma rápida y eficaz de obtener unos valores aproximados de la intensidad de corriente que circula a través de la lámina de grafeno.

Debido a que el método anterior no converge, se ha tratado de minimizar el error cuadrático medio (siglas en inglés MSE, Mean Squared Error), teniendo en cuenta que tenemos una función de ρ discretizada:

$$MAE^i = \sum_{j=1}^{n_y} (\rho_j^i - \rho_j^{i-1}) \quad (4.2)$$

Siendo n_y el número de nodos en el eje y , y el subíndice j hace referencia a cada uno de los nodos en el mismo eje. El superíndice i hace referencia al número de iteraciones.

Esta función requiere de un algoritmo de optimización para minimizar funciones. Se pueden emplear las funciones de MATLAB *fmincon* y *fminsearch*.

Debido a que ambos algoritmos llevan mucho tiempo de computación, se emplea otro algoritmo de optimización, *fsolve*, que en vez de minimizar el MSE, resuelve ecuaciones del tipo $\vec{H}(\vec{x}) = 0$. Definimos entonces la función \vec{H} :

$$H(\rho) = g(\rho) - \rho = 0 \quad (4.3)$$

Este algoritmo es el que mejor responde ante este problema, y calcula la distribución de la densidad de carga discreta.

En la tabla siguiente se exponen los tiempos de cálculo de cada algoritmo para los valores $V_S = 0V$, $V_D = 0$, $V_B = 0V$ y $V_G = 1V$:

Algoritmo	Tiempo de cálculo (s)
fmincon	>5000
fminsearch	3560
fsolve, trust-region dogleg	391
fsolve, trust-region	157
fsolve, Levenberg-Marquardt	770

Figura 4.1: Tiempo de cálculo en función del algoritmo

En la tabla anterior se observa que el algoritmo más eficiente es la solución de la ecuación 4.3 mediante el algoritmo de MATLAB *fsolve* (*trust-region*). Este es, por tanto, el algoritmo empleado para realizar los cálculos del modelo.

Es importante mencionar que este algoritmo corre el riesgo de quedarse en un mínimo local, dependiendo del punto inicial de cálculo que definamos. Para evitar esto, se ha puesto un límite al tamaño del paso de la variable objetivo que se puede realizar para cada iteración. Si se llega a este reducido límite sin que la función $H(\rho)$ haya llegado a un valor suficientemente pequeño, lo más probable es que el algoritmo haya llegado a un mínimo local y no se esté mejorando el resultado. Por ello, si se llega a las circunstancias descritas, se realiza una pequeña perturbación del punto inicial de cálculo.

4.3. Estructura de las simulaciones

Una vez elegido el algoritmo para el cálculo de ρ , se han realizado una serie de simulaciones de manera consecutiva: la diferencia de potencial V_G se ha ido variando desde -2 hasta 2 voltios, con un paso de 0.5 V. En cada uno de estos casos, se ha ido variando V_D desde 0 hasta 1 V, con un paso de 0.05 V. Los valores de V_S y V_B se han mantenido en todos los casos a 0.

Comenzando en $V_D = 0V$, dado un valor de V_G , se inicializa con una densidad de carga nula ($\rho(y) = 0$). Se obtiene mediante *fsolve* y las variables del problema una distribución de la densidad de carga. Para la obtención del siguiente punto de cálculo (sumando 0.05 V a V_D), se utiliza la distribución de carga calculada para el caso anterior como punto inicial para el cálculo numérico. Calculamos, entonces, $\rho_{r,s}$ con la distribución $\rho_{r,s-1}$ (salvo cuando $s = 1$, en cuyo caso, como ya se ha mencionado, se emplea $\rho(y) = 0$). De esta manera, se van calculando las distintas distribuciones de densidad de carga para cada conjunto de condiciones de frontera V_D y V_G .

$V_G(V) \backslash V_D(V)$	0	0.05	0.1	...	1
-2	$\rho_{1,1}$	$\rho_{1,2}$	$\rho_{1,3}$...	$\rho_{1,21}$
-1.5	$\rho_{2,1}$	$\rho_{2,2}$	$\rho_{2,3}$...	$\rho_{2,21}$
...
1.5	$\rho_{8,1}$	$\rho_{8,2}$	$\rho_{8,3}$...	$\rho_{8,21}$
2	$\rho_{9,1}$	$\rho_{9,2}$	$\rho_{9,3}$...	$\rho_{9,21}$

Figura 4.2: $V_S = 0$ V, $V_B = 0$ V

Con los valores de la densidad de carga distribuida para cada polarización, se pueden calcular el resto de variables relevantes del sistema. Los resultados de salida del algoritmo implementado para cada polarización (V_S , V_D , V_G , V_B) son: $\rho(y)$, $\phi(x, y)$, $V(y)$ e I .

Parte III

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Capítulo 5

RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

5.1. Gráficos de I en función de V_D , para diversos V_G

Una vez elaborado y ejecutado el código, se muestran en este capítulo los resultados del mismo.

Según la teoría de los FET, la diferencia de potencial entre la base y la puerta afecta a la intensidad que fluye a través del transistor. Trataremos de comprobar si esto es cierto en nuestro modelo. El gráfico muestra la corriente en función del voltaje V_D , para cada V_G que ha sido estudiado.

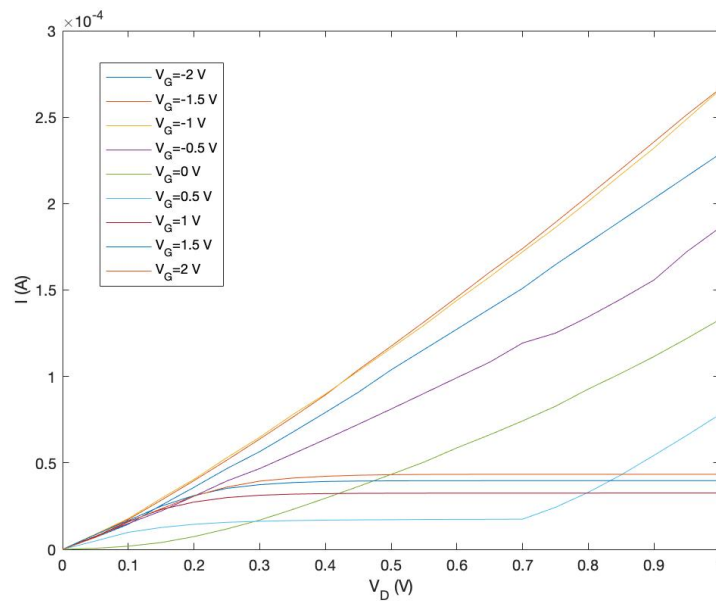
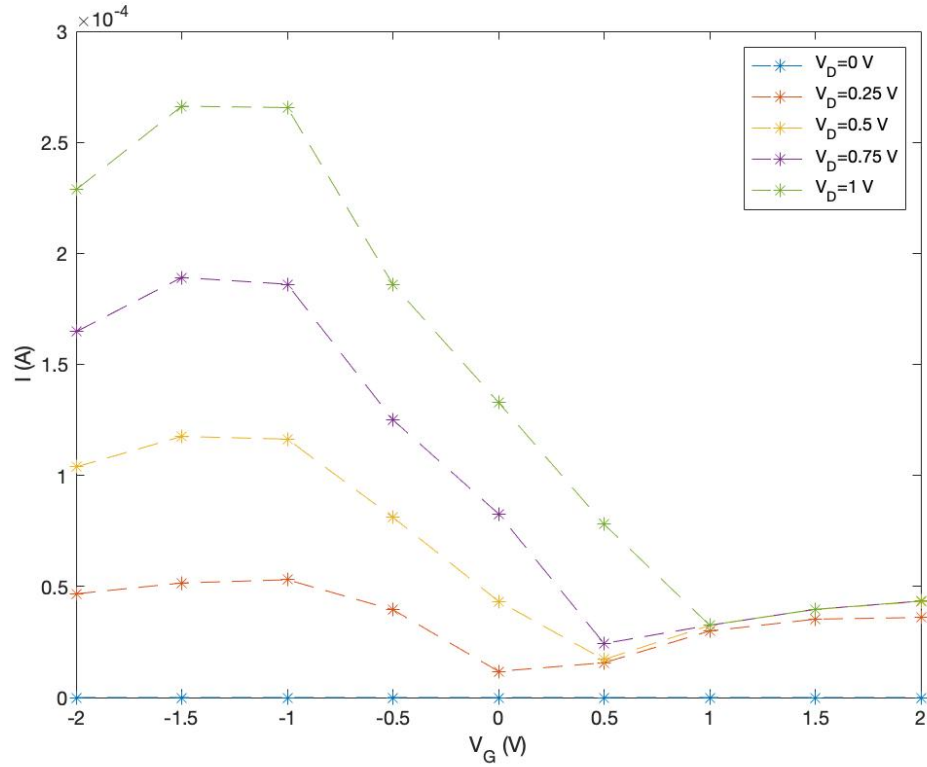


Figura 5.1: $I(V_D)$

En la gráfica, para valores positivos de V_G , se aprecian tanto las pendientes iniciales de la región óhmica, como las intensidades a las que se saturan. Los resultados son los esperables comparados con otros modelos y medidas experimentales. [20] [9] [23] [2]

5.2. Gráficos de I en función de V_G , para diversos V_D

En esta gráfica se muestra otra forma de analizar las distintas polarizaciones, en función de V_G en vez de V_D . Las distintas curvas reflejan distintos valores de V_D .


 Figura 5.2: $I(V_G)$

Variables utilizadas:

Variable	Nombre de la variable	Valor
Espesor del óxido superior	t_t	30 nm
Espesor del grafeno	t_g	0.6 nm
Espesor del óxido inferior	t_b	300 nm
Longitud del óxido superior (R1)	L	500 nm
Longitud de contacto con la fuente (R2)	LCs	50 nm
Longitud de contacto con el drenador (R6)	LCs	50 nm
Longitud de la región R3	$Lexts$	100 nm
Longitud de la región R5	$Lextd$	100 nm
Permitividad del óxido superior	ϵ_{TO}	$5,9\epsilon_0$
Permitividad del óxido inferior	ϵ_{BO}	$3,9\epsilon_0$
Permitividad del grafeno	ϵ_{GR}	$\begin{pmatrix} 3,3 & 0 \\ 0 & 9 \end{pmatrix} \epsilon_0$
Número de nodos en y	n_y	60
Número de nodos en x para el grafeno	n_{GRx}	7
Cociente entre Δx_{Resto} y $\Delta x_{Grafeno}$	α	100
Movilidad de los electrones en reposo	μ_0	$0,2 \text{ m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$
Velocidad de saturación	v_{sat}	10^6 ms^{-1}
Velocidad de Fermi	v_F	10^6 ms^{-1}
Ancho del transistor a lo largo del eje z	W	100 nm
Valores iniciales del método del disparo	I_1, I_2	0 A, 1 A

5.3. Potencial electroquímico V y potencial electrostático ϕ para distintos valores de V_G .

En las siguientes gráficas se representan la evolución de ϕ y V para distintos valores de polarización. Manteniendo constante $V_D = 1$, se modifica el valor de V_G para analizar el comportamiento de la lámina de grafeno. Se han resaltado las distintas zonas de la lámina que se observan en la Figura 2.4.

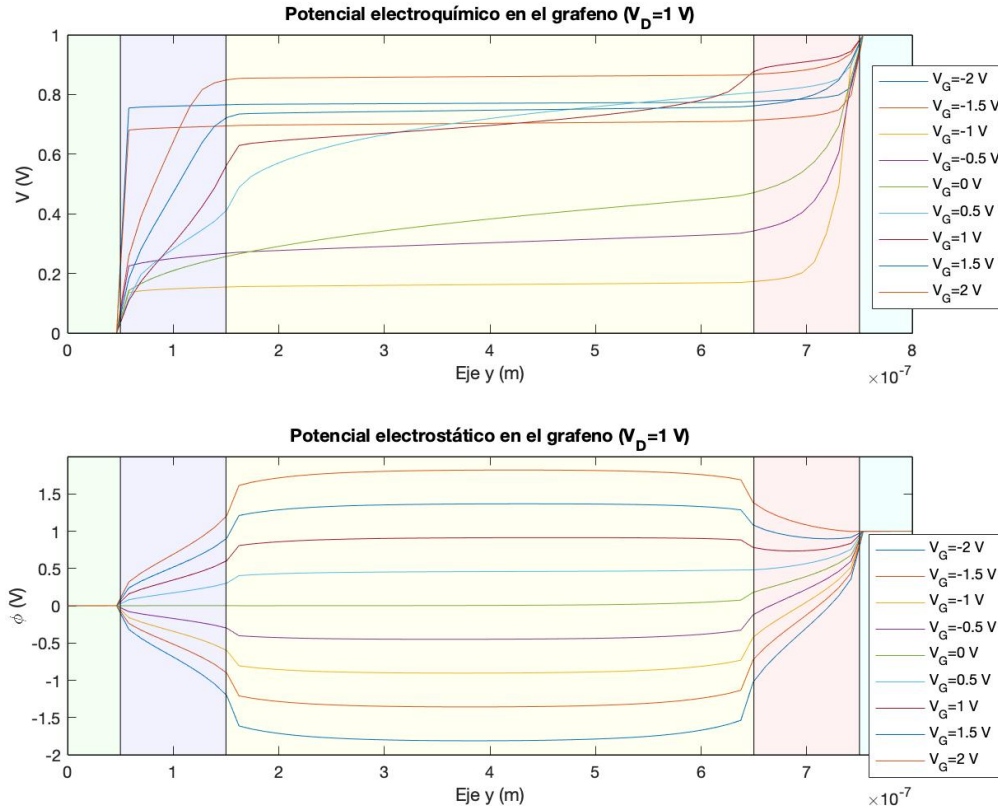


Figura 5.3: Potencial electrostático y electroquímico en la lámina de grafeno

5.4. Polarizaciones de interés

Se muestran ahora ciertas polarizaciones interesantes.

En la gráfica titulada "Densidad de carga", se muestra ρ .

En la gráfica titulada "Potencial electrostático", se muestra el resultado que da el modelo para ϕ en el dominio bidimensional, como calculado a través del método explicado en el Capítulo 2.

Por último, el gráfico "Potencial electroquímico y potencial electrostático en el grafeno", representa el valor de $V(y)$, calculado gracias al método explicado en el Capítulo 3, junto con el valor de ϕ a lo largo de la lámina de grafeno.

Se muestran gráficas de diversas simulaciones:

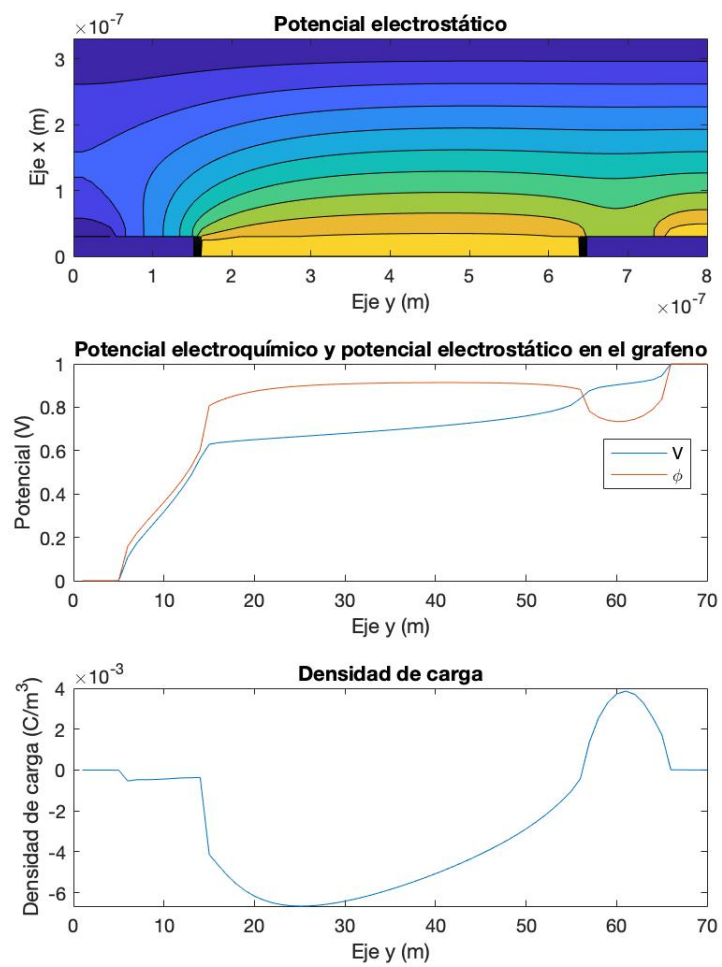
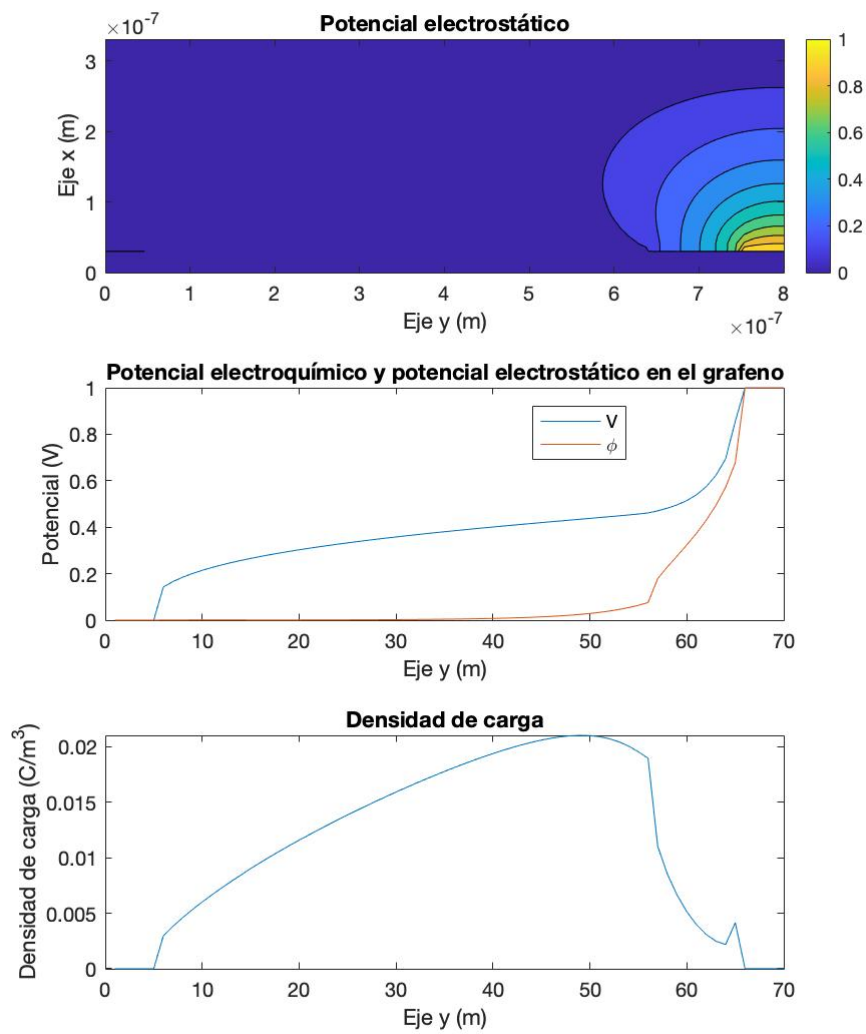
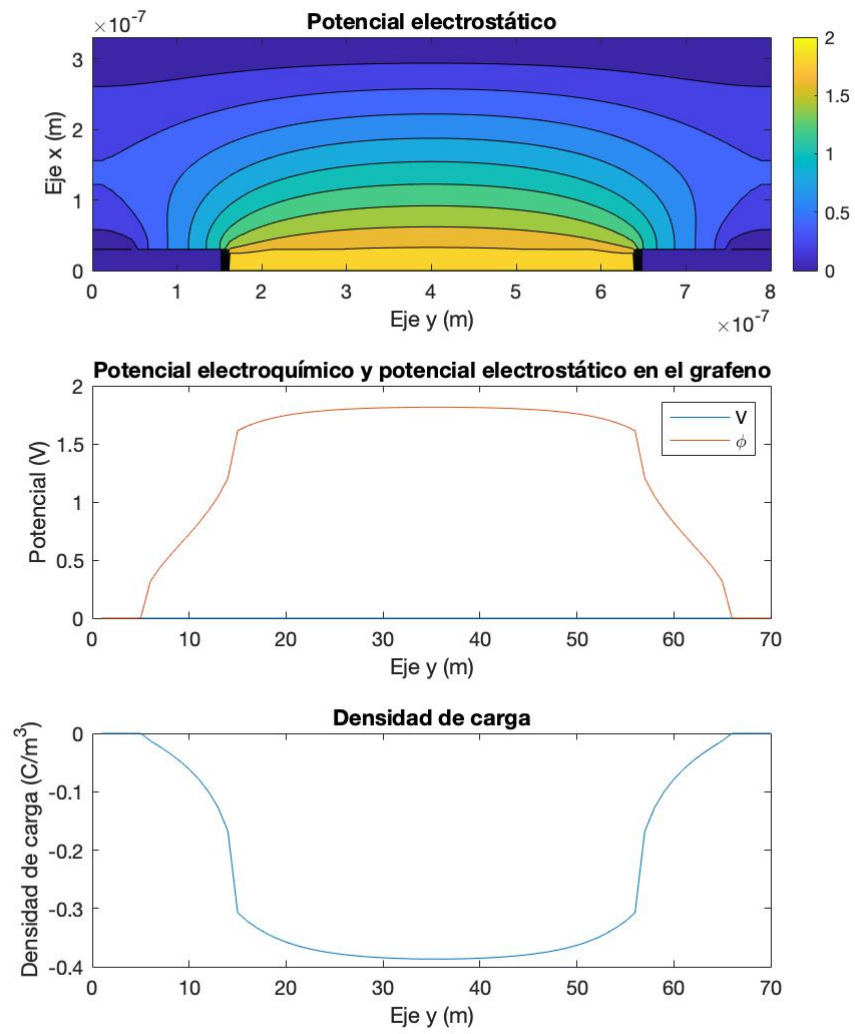


Figura 5.4: $V_D = 1V$; $V_G = 1V$

Figura 5.5: $V_D = 1V$; $V_G = 0V$


 Figura 5.6: $V_D = 0V$; $V_G = 2V$

5.5. Métodos de corrección de errores

Es importante tener capacidad de corrección, en caso de que los resultados de un modelo con distintos datos no reproduzcan el comportamiento de los GEFT. Si se percibe que alguno de los métodos de comprobación no cumple las condiciones necesarias para considerar como aceptable el resultado, el código permite mejorar la precisión de los resultados de las siguientes maneras:

- Aumentar la densidad de puntos de mallado.
- Disminuir el error aceptable para *fsolve*. Está fijado en 10^{-6} .
- Cambiar el tamaño mínimo del paso para *fsolve*. Muchas veces, los resultados no son buenos porque se ha interrumpido la ejecución porque el tamaño del paso era demasiado pequeño. Si se disminuye este parámetro, el programa podrá seguir ejecutando.
- Aumentar el número de evaluaciones de la función de *fsolve*. Se ha introducido por defecto un valor relativamente reducido por la existencia recurrente de mínimos locales. En el caso de no dar buenos resultados, es posible que necesite un mayor número de iteraciones para dar un resultado más atinado.
- Modificar la tolerancia que determina el final del método del disparo.
- Ampliar el valor del parámetro de optimización interno de *fsolve* llamado *TypicalX*. Esto induce un aumento del tamaño del paso del algoritmo de optimización, lo cual suele ser positivo para este modelo, tanto para garantizar la convergencia, como para mejorar la rapidez con la que converge.

Capítulo 6

PLANIFICACIÓN TEMPORAL Y PRESUPUESTO

6.1. Planificación temporal:

- Fecha de inicio del trabajo: 01/02/2024
- Fecha de entrega de la memoria: 23/06/2024
- Fecha de fin del trabajo: 30/06/2024

Se incluye el diagrama de Gantt de las actividades realizadas a lo largo de los 5 meses de trabajo (21 semanas).

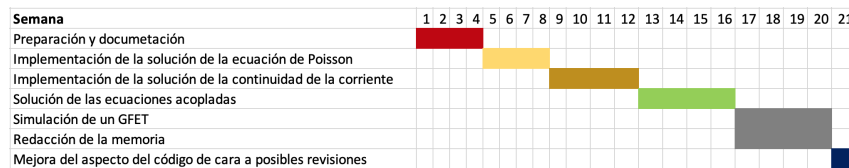


Figura 6.1: Diagrama de Gantt

6.2. Presupuesto:

- Trabajo del alumno:
 - Número de meses: 5
 - Importe de la beca: 355,20€/mes
 - Presupuesto del trabajo del alumno: **1776€**
- Trabajo de los directores:
 - Número de directores: 2
 - Número aproximado de horas dedicadas por los directores: 10
 - Precio aproximado del trabajo de los directores: 60€/hora
 - Presupuesto aproximado del trabajo de los directores: **1200€**
- Licencia MATLAB Student: **69€**

Presupuesto total: 3045€

Capítulo 7

ANÁLISIS DE LOS ASPECTOS LEGALES, ÉTICOS Y SOSTENIBLES

En este proyecto, los resultados están orientados a la innovación tecnológica, profundamente arraigados a la práctica de la ingeniería y al progreso como sociedad. El desarrollo de la electrónica de alta frecuencia, que es lo que este proyecto pretende apoyar, podrá tener grandes impactos sobre el mundo profesional, y por tanto en la sociedad futura.

7.1. Responsabilidad legal

Se declara que todo lo que se ha hecho en este trabajo es legal.

7.2. Responsabilidad ética

Se ha tratado de contribuir al desarrollo tecnológico, y así contribuir a la sociedad desde la ciencia.

Se ha respetado el trabajo de los investigadores, cuyo trabajo ha sido la base de este proyecto, refiriendo debidamente sus artículos y libros.

7.3. Contribución a los Objetivos de Desarrollo Sostenible

Este trabajo contribuye al noveno Objetivo de Desarrollo Sostenible (ODS): Industria, innovación e infraestructura.

Debido al impacto que puede tener en el desarrollo de la electrónica de alta frecuencia, con este trabajo se aporta a la innovación tecnológica.



Figura 7.1: ODS 9

Capítulo 8

CONCLUSIONES

Vistos los resultados de los modelos, podemos concluir que el trabajo cumple con los objetivos del proyecto, que ha sido implementar en MATLAB un modelo físico de transistores de grafeno.

El código resuelve de manera satisfactoria la ecuación de Poisson en un dominio bidimensional y la ecuación de continuidad de la corriente, que es una ecuación diferencial ordinaria unidimensional de primer orden. Para la ecuación de Poisson se ha utilizado un sistema de ecuaciones lineales basado en el método de diferencias finitas, y para la ecuación diferencial, el método del disparo con un Runge-Kutta de orden 2, y el método de la secante para llegar a la solución. El control del código es muy profundo, pues complementándose con esta memoria, es sencillo entender cada operación del mismo. Se ha tratado de que el código sea fácilmente manipulable para que sus usuarios controlen todos los parámetros necesarios de manera precisa.

Los tiempos de computación de la nueva implementación son elevados, pues cada punto de polarización tarda en ser calculado en torno a 3 minutos, debido a que se ejecutan gran cantidad de funciones en una única polarización. También se debe a la alta carga de computación del algoritmo de optimización *fsolve*. Las demás partes del código son tremendamente eficaces. Prueba de ello es el tiempo de ejecución del programa, sin tener que optimizar el error de la densidad de carga, que es inferior a un segundo. Es, sin embargo, difícil comparar la eficiencia ya descrita del modelo presente con la del modelo predecesor, ya que el modelo anterior utilizaba una estructura diferente para el GFET.

En general, las características de este modelo son muy positivas, y cumple con todos los objetivos que se propusieron al inicio del proyecto.

Bibliografía

- [1] S.Morozov D.Jiang Y.Zhang S.Dubonos I.Grigorieva K.Novoselov, A.Geim and A.Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696), Octubre 2004.
- [2] Muh-Dey Wei Eyyub Baskent Chun-Yu Fan Burkay Uzlu Kun-Ta Wang Andreas Hemmetter Zhenxing Wang Daniel Neumaier Max C. Lemme Mohamed Saeed, Paula Palacios and Renato Negra. Graphene-based microwave circuits: A review. *Advanced materials*, 34(2108473), diciembre 2021.
- [3] Y. Tsividis y C. McAndrew. The mos transistor 3rd edition. *Oxford University press*, 2012.
- [4] Transistores.info, <https://transistores.info/principios-y-funcionamientos-del-mosfet/>. *Principios y Funcionamientos del Mosfet*.
- [5] W.H. Brattain J. Bardeen. Three-electrode circuit element utilizing semiconductive materials. *US Patent*, (US2524035A), 1950.
- [6] G. Moore. Cramming more components onto integrated circuits. *Electronics magazine*, 38(8), 1965.
- [7] Statista, <https://es.statista.com/estadisticas/600220/paises-lideres-en-la-produccion-de-silicio-a-nivel-mundial/>. *Ranking de los principales países productores de silicio a nivel mundial en 2023*.
- [8] Jon B Hagen. *Radio-Frequency Electronics*. Cambridge, 2009.
- [9] Francisco G. Ruiz Javier Noe Ramos-Silva Anibal Pacheco-Sanchez-Mari Carmen Pardo Alejandro Toral-Lopez Andrés Godoy Eloy Ramírez-García David Jiménez Enrique G. Marin Francisco Pasadas, Alberto Medina-Rull. Exploiting ambipolarity in graphene field-effect transistors for novel designs on high-frequency analog electronics. *Small*, 19(49), Agosto 2023.
- [10] Philip R. Wallace. The band theory of graphite. *Physical Review*, 71(9), 1947.
- [11] F. Shwierz. Graphene and beyond: two-dimensional materials for transistor applications. *Proceedings SPIE*, 9467(2108473), Mayo 2015.
- [12] E Pop E Dorgan, MH Bae. Mobility and saturation velocity in graphene on sio2. *Applied Physics Letters*, 97(082112), 2010.
- [13] Mingqiang Bao Rui Cheng Jingwei Bai-Yuan Liu Yongquan Qu-Kang L. Wang Yu Huang Xiangfeng Duan Lei Liao, Yung-Chen Lin. High-speed graphene transistors with a self-aligned nanowire gate. *Nature*, 467(7313), 2010.
- [14] Joseph E. Meany Les Johnson. *Graphene: The Superstrong, Superthin, and Superversatile Material That Will Revolutionize the World*. Prometheus Books, 2018.
- [15] Andrea F. Young Natalia Baklitskaya Noah J. Tremblay Colin Nuckolls-Philip Kim Inanc Meric†, Cory R. Dean† and Kenneth L. Shepard. Channel length scaling in graphene field-effect transistors studied with pulsed current-voltage measurements. *Nano Lett.*, 11(3), 2011.
- [16] Han Wang; Allen Hsu; Jing Kong; Dimitri A. Antoniadis; Tomas Palacios. Compact virtual-source current-voltage model for top- and back-gated graphene field-effect transistors. *IEEE*, 58(5), 2011.
- [17] David Jimenez. Explicit drain current, charge and capacitance model of graphene field-effect transistors. *IEEE*, 58(12), 2011.

- [18] S. A. Thiele; J. A. Schaefer; F. Schwierz. Modeling of graphene metal-oxide-semiconductor field-effect transistors with gapless large-area graphene channels. *Journal of Applied Physics*, 107(094505), 2010.
- [19] James G. Champlain. A first principles theoretical examination of graphene-based field effect transistors. *Journal of Applied Physics*, 109(084515), 2011.
- [20] Pedro C Feijoo. Short channel effects in graphene-based field effect transistors targeting radio-frequency applications. *2D Materials*, 3(2), Junio 2016.
- [21] Marcus Freitag Wenjuan Zhu, Vasili Perebeinos and Phaeton Avouris. Carrier scattering, mobilities, and electrostatic potential in monolayer, bilayer, and trilayer graphene. *Physical Review*, 80(235402), Diciembre 2009.
- [22] F. Pasadas M. D. Ganeriwala F. G. Ruiz D. Jiménez A. Godoy A. Toral-Lopez, E. G. Marin. Reconfigurable frequency multipliers based on graphene field-effect transistors. *Discover nano*, 18(123), Octubre 2023.
- [23] Enrique G. Marin Alberto Medina-Rull Alejandro Toral-Lopez Juan Cuesta-Lopez Francisco G. Ruiz Lassaad El Mir Andrés Godoy Francisco Pasadas, Tarek El Grou. Compact modeling of two-dimensional field-effect biosensors. *Sensors*, 23(4), Febrero 2023.
- [24] S. Abadal et al. Graphene-based wireless agile interconnects for massive heterogeneous multi-chip processors. *IEEE Wireless Communications*, 30(4), 2023.
- [25] A. Vorobiev K. Jeppson J. Isberg M. Asad, S. Majdi and J. Stake. Graphene fet on diamond for high-frequency electronics. *IEEE Electron Device Letters*, 43(2), 2022.
- [26] Joseph A. Edminister. *Electromagnetismo*. McGraw Hill, 1992.
- [27] Jing Guo Jyotsna Chauhan. High-field transport and velocity saturation in graphene. *Applied Physics Letter*, 95(023120), 2009.
- [28] Pedro C. Feijoo, Ferney A. Chaves, and David Jiménez. Recombination time in drift-diffusion models of graphene field-effect transistors. In *2023 14th Spanish Conference on Electron Devices (CDE)*, pages 1–4, 2023.
- [29] MATLAB Central File Exchange, <https://es.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/13616-fermi>. *Fermi*, 2024. Mohankumar Nandagopal.

Abreviaturas, unidades y acrónimos

FET: Transistores de efecto campo (Field Effect Transistors)
GFET: Transistores de efecto campo de grafeno. (Graphene Field Effect Transistors)
MOSFET: Transistores de efecto campo metal-óxido-sustrato. (Metal Oxide Sustrate Field Effect Transistors)
MDF: Método de Diferencias Finitas.
S: Fuente. (Source)
D: Drenador
G: Puerta. (Gate)
B: Sustrato (Body). HEMT: Transistores de alta movilidad de electrones. (High Electron Mobility Transistors)
UGR: Universidad de Granada.
TO: Óxido superior. (Top Oxide)
BO: Óxido inferior. (Bottom Oxide)
GR: Lámina de grafeno.
ODS: Objetivo de Desarrollo Sostenible

m: metros
cm: centímetros
nm: nanómetros
GHz: gigahercios
THz: terahercios
V: voltios
A: amperios
s: segundos
C: culombios

Índice de figuras

1.1. (Izquierda) Imagen de un transistor MOSFET disponible comercialmente. (Derecha) Representación gráfica de un MOSFET en el esquema de un circuito [4]	7
1.2. Corriente de drenador en función del voltaje drenador-fuente para varios voltajes puerta-fuente	7
1.3. Ranking de los principales países productores de silicio 2023 [7]	7
1.4. Estructura de bandas metales, semiconductores y grafeno monoatómico.	9
1.5. Estructura GFET. [20]	10
2.1. Dominio bidimensional donde se resuelve la ecuación de Poisson	14
2.2. Dimensiones del dominio	14
2.3. Mallado	15
2.4. Regiones del dominio	18
2.5. Solución propuesta	20
3.1. Dominio	21
3.2. Gráfico $v(E) = \mu(E) \cdot E$	23
3.3. $\mathcal{F}_1(x)$	24
3.4. Método de Heun	25
3.5. Procedimiento de cálculo para la ecuación de la continuidad de la corriente	25
3.6. Potencial electroquímico y potencial electrostático a lo largo del eje y	26
4.1. Tiempo de cálculo en función del algoritmo	28
4.2. $V_S = 0$ V, $V_B = 0$ V	28
5.1. $I(V_D)$	30
5.2. $I(V_G)$	31
5.3. Potencial electrostático y electroquímico en la lámina de grafeno	32
5.4. $V_D = 1$ V; $V_G = 1$ V	33
5.5. $V_D = 1$ V; $V_G = 0$ V	34
5.6. $V_D = 0$ V; $V_G = 2$ V	35
6.1. Diagrama de Gantt	37
7.1. ODS 9	38



POLITÉCNICA

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES
UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID

José Gutiérrez Abascal, 2. 28006 Madrid
Tel.: 91 336 3060
info.industriales@upm.es

www.industriales.upm.es