



UGR

Universidad
de Granada

FisyMat

ALGORITMOS ORIENTADOS
AL ESTUDIO Y MODELADO
DE DISPOSITIVOS
ELECTROMAGNÉTICOS EN EL
RANGO DE LOS
TERAHERCIOS

AUTOR:

ENRIQUE MORENO PÉREZ

DIRECTORES:

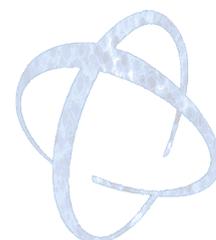
MARIO FERNÁNDEZ PANTOJA

AMELIA RUBIO BRETONES

TESIS

DPT. ELECTROMAGNETISMO Y FÍSICA DE LA MATERIA.

2014



Editor: Editorial de la Universidad de Granada
Autor: Enrique Moreno Pérez
D.L.: GR 2349-2014
ISBN: 978-84-9083-393-3

A Andreas

Agradecimientos

“En algún lugar los desiertos albergan un pozo, eso, es lo que los hace encantadores.” A. de Saint-Exupéry

Deseo manifestar mi gratitud hacia los financiadores de esta tesis (ver página VII):

- Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto TERAHERTZ TECHNOLOGY FOR ELECTROMAGNETIC SENSING APPLICATIONS.
- Junta de Andalucía. Proyecto de Excelencia TERALAB: NUMERICAL LABORATORY FOR DESIGN AND SIMULATION OF THz TECHNOLOGY.

Agradezco el trabajo inestimable de mis directores de tesis Mario y Amelia así como su grado de implicación. También debo dar las gracias a Salvador, Juan Bautista y Fran por sus aportaciones y deseo extender mi gratitud hacia mis compañeros de tesis y otros miembros del departamento. Deseo recordar y agradecer a todas las personas que han contribuido a mi formación, no sólo académica sino como persona. Agradezco infinitamente la paciencia e infinita generosidad de mi familia, especialmente la de mi esposa, por el tiempo que esta tesis le ha robado.

Proyectos que han financiado la tesis

Índice general

1. Introducción	1
1.1. La tecnología de terahercios	2
1.2. Las antenas fotoconductoras basadas en materiales semiconductores . . .	14
1.3. Estructura de la memoria	17
2. Algoritmos de simulación del estado estacionario de una antena fotocon- ductiva.	19
2.1. El modelo físico, sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales a resolver	20
2.1.1. El modelo de difusión y arrastre	23
2.2. La celda de Yee modificada	28
2.3. Aproximación por diferencias finitas del sistema de ecuaciones diferenciales	29
2.4. La movilidad de los portadores de carga	37
2.4.1. Modelos de movilidad	37
2.5. La tasa de recombinación	47
2.5.1. Tiempos de vida de los portadores de carga	50
2.6. Condiciones de contorno	51
2.6.1. Condiciones de contorno de Dirichlet	52
2.6.2. Condiciones de contorno de Neumann	54
2.7. Validación del algoritmo	56
3. Algoritmos para la simulación del régimen transitorio de una antena fotoconductoras modelada por corrientes de difusión y arrastre	63
3.1. El efecto fotoeléctrico y la tasa de generación	65
3.1.1. Forma temporal del pulso láser	65

3.1.2.	Amplitud óptica compleja e intensidad óptica espacial	66
3.1.3.	Intensidad óptica espacio-temporal en un medio material	69
3.1.4.	Eficiencia cuántica y tasa de recombinación superficial	70
3.1.5.	Un modelo para la tasa de generación de portadores de carga	71
3.2.	Esquema FDTD para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales híbrido	73
3.2.1.	Conexión entre el estado estacionario y el transitorio	74
3.2.2.	Los tipos de corrientes	76
3.2.3.	El sistema de ecuaciones diferenciales	77
3.2.4.	El dominio computacional	83
3.2.5.	Las condiciones de contorno	87
3.2.6.	El campo radiado	87
3.2.7.	El efecto de la recepción	89
3.3.	La importancia del modelo de movilidad en el análisis del régimen transitorio	91
3.4.	Validación del algoritmo	93
4.	Estudio mediante algoritmos basados en FDTD de la eficiencia de emi- sión de las antenas fotoconductoras	101
4.1.	Eficiencia de una antenas fotoconductoras	102
4.1.1.	Potencia y energía radiada por una antena fotoconductoras emisora	103
4.1.2.	Potencia y energía suministrada por la fuente de tensión externa .	106
4.1.3.	Potencia y energía suministrada por el láser	108
4.2.	Resultados y análisis	109
4.3.	Validación	118
5.	Algoritmos de emisión-recepción en campo cercano y lejano de la an- tena completa mediante subdominios escalantes	119
5.1.	Algoritmos de recepción: la antena receptora	120
5.1.1.	Caja de iluminación	121
5.1.2.	Aproximación de región fundamental en vacío	122
5.2.	El subdominio receptor	128
5.3.	El subdominio emisor	131
5.4.	Conexión entre subdominios	132

5.4.1. Estructura de onda plana	135
5.5. Resultados	136
6. Algoritmos para la simulación del régimen transitorio de dispositivos modelados por las ecuaciones magnetohidrodinámicas	139
6.1. Introducción	140
6.2. El modelo magnetohidrodinámico	141
6.3. Conexión entre el estado estacionario y el régimen transitorio	146
6.4. El algoritmo DH-FDTD	152
6.4.1. Discretización temporal	155
6.4.2. La discretización espacio-temporal	157
6.4.3. Condiciones de contorno	178
6.5. Estabilidad	180
6.6. Conjetura teórica Dember-Lorentz-Hall	182
7. Conclusiones	185
I. Notas Matemáticas	187
I.a. La derivada central, hacia delante y hacia atrás de primer orden	188
I.a.1. La derivada central de primer orden	188
I.a.2. Derivada hacia delante y hacia atrás de primer orden	189
I.a.3. Derivada central de primer orden aproximada con un error de $O(\Delta_t^4)$	190
I.b. Producto \odot	191
I.c. Condiciones de contorno de Neumann	191
I.d. Solución aplicando el método numérico de Gauss-Seidel	195
II. Notas Matemáticas	199
II.a. Funciones especiales	200
II.a.1. La función hermite-gausiana	200
II.a.2. La función laguerre-gausiana	200
II.b. Estimación de FWHM espacial	200
II.c. Magnitudes empleadas en la discretización de las ecuaciones diferenciales	200
II.c.1. El operador de Bernoulli \mathbb{B}	203
II.c.2. Las matrices de Bernoulli y otras magnitudes auxiliares	204

II.d. Los coeficientes $\bar{C}^a(\vec{r}, t)$ y $\bar{C}^b(\vec{r}, t)$ en la región fotoactiva	205
II.e. Divergencia de la densidad de corriente	207
III. Notas Matemáticas	209
III.a. Tensor de masas efectivas	210
III.b. Movilidades efectivas	211
III.c. Tiempos efectivos de colisión $\bar{\gamma}_n$ y $\bar{\gamma}_p$	211
III.c.1. El operador inversión φ	212
III.d. Deducción de los coeficientes de la discretización temporal de las ecuaciones magnetohidrodinámicas	212
Bibliography	217

1

Introducción

1.1. La tecnología de terahercios	2
1.2. Las antenas fotoconductoras basadas en materiales semi-conductores	14
1.3. Estructura de la memoria	17

1.1. La tecnología de terahercios

La región submilimétrica del espectro electromagnético, también llamada de los terahercios (THz), nos proporciona una ventana desde la que extraer información de la materia con una idiosincrasia única, que la hacen tremendamente útil por sus potenciales aplicaciones. Una de las fundamentales es la espectroscopía en el dominio del tiempo THz-TDS, que se ocupa del estudio de la interacción entre la materia y un campo electromagnético y que en la región submilimétrica presenta ventajas sobre otras zonas del espectro. Ventajas porque permite extraer información de la materia empleando nuestro conocimiento sobre el campo. Una de las formas de diálogo más sintética y elocuente establecida por la espectroscopía en el dominio del tiempo son las denominadas técnicas de imaging. Realmente el uso de la tecnología basada en la interacción entre la materia y el espectro de THz no es tan reciente, ya a principios de 1970 comenzó a usarse la espectrometría en el submilimétrico para estudiar la composición química del medio interestelar en trabajos pioneros. Proyectos como ALMA (Atacama Large Millimeter/sub-millimeter Array), operativo desde 2011 y, fuera de la atmósfera, el observatorio Herschel de la Agencia Espacial Europea, que recogiendo datos desde 2009 hasta 2013 y utilizaba la banda de $(55 - 672\mu m)$, hacen evidente que esta tecnología está relativamente madura en aplicaciones como la espectrometría espacial y otros entornos muy concretos donde hay un gran ausente, el aire húmedo. No obstante, más allá de estos usos de ámbito no civil, es una tecnología poco desarrollada. Como su potencial es enorme, desde mediados de 1980 ha experimentado un paulatino incremento y en los últimos años el interés de la comunidad científica ha ido creciendo como se desprende de la gráfica de tendencias 1.1.

Una de las principales motivaciones de esta gráfica de tendencias son las propiedades asociadas a la interacción de la radiación en THz con la materia:

I) se trata de una radiación no ionizante. Debido a la baja energía asociada, los rayos T, “seudónimo” de los haces fotónicos con dualidad ondulatoria cuyas frecuencias caen en la banda de los terahercios, no son capaces de inducir reacciones fotoquímicas sobre el tejido vivo. En cualquier caso la energía absorbida por la materia viva sólo incrementa su temperatura, y las fuertes resonancias de absorción parecen poco probables². Esta propiedad abre una puerta hacia su potencial aplicabilidad en el sector médico³.

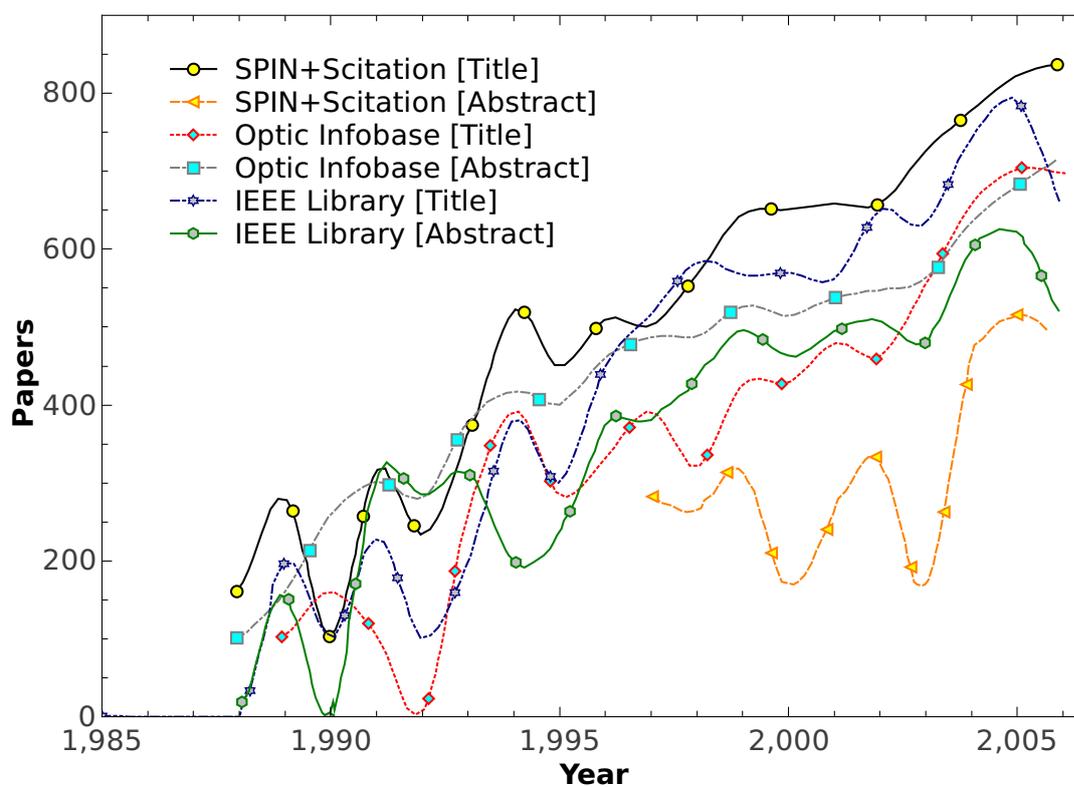


Figura 1.1: Número de publicaciones que contienen la palabra terahercio en el sumario o en el título tomadas de las bases de datos bibliográficos IEEE Library, SPIN+Scitation y Optic Infobase. Todos los datos presentes en esta tabla han sido recopilados en un mismo trabajo que analiza la tendencia del interés acerca de este campo¹.

II) **usa procedimientos de detección coherentes que permiten conocer simultáneamente la fase y amplitud asociadas a la radiación electromagnética.** Esto implica conocer directamente el coeficiente de absorción y el índice de refracción de una muestra, así como la permitividad eléctrica compleja sin requerir ningún análisis de Kramers-Kroning⁴⁻⁶.

III) **los rayos T son absorbidos severamente por las sustancias polares como el agua (como se puede ver en la figura 1.4) y reflejados fuertemente por los metales.** Estas propiedades imponen limitaciones para algunas potenciales aplicaciones⁷, como se verá mas adelante, pero al mismo tiempo los hacen tremendamente útiles

para otras⁸⁻¹⁰.

IV) la energía vibracional, rotacional y de translación molecular de ciertas moléculas se extiende en el rango de los terahercios^{5,11}. La vibración intermolecular de ciertas moléculas también muestra características espectrales propias en la banda de los terahercios^{5,9}.

V) los dieléctricos son transparentes a los rayos T^{5,6}, así como los semiconductores intrínsecos.

Estas propiedades de la tecnología de THz-TDS, el desarrollo de láseres y tecnologías de carácter fotónico, son el origen de las potenciales aplicaciones que han motivado el creciente interés mostrado en la figura 1.1 como se ha comentado anteriormente. Enumerar las aplicaciones que ya son una realidad, que están bajo un intenso estudio o que simplemente se sugieren por su potencialidad es una tarea que excede los objetivos esta introducción. Aquí simplemente se resumen algunas que han motivado y justifican esta tesis. La figura 1.3 ayuda a ilustrar algunas de esas aplicaciones.

Una de las aplicaciones basada en THz-TDS imaging, que deriva de la propiedad V, ha permitido identificar a través de la firma del autor una obra realizada por Goya. El mapa de píxeles realizado por medio de THz-TDS imaging, y que es mostrado en la figura 1.2, ha revelado la firma realizada en carboncillo bajo la pintura, algo que los rayos X no habían revelado. La propiedad de los rayos T para atravesar los dieléctricos y adquirir información (imágenes) de “capas profundas” es la clave de este trabajo que ha sido ratificado por varios equipos independientes¹². Los autores del mismo sugieren que además de esta información morfológica y compositiva sobre la obra, se podrían conocer los componentes pictóricos con los que se realizó la pintura. Simplemente se necesitaría desarrollar una base de datos de perfiles de absorción de rayos T por pinturas de las cuales se conozca la composición química para realizar una comparación, y establecer que pigmentos fueron empleados para elaborar la pintura con la que esta hecha la obra. Esta información, además de arrojar conocimiento sobre los medios de la época y la accesibilidad cromática, es de vital interés en restauración, pues permitiría restaurar las obras con la misma pintura con la que originalmente se realizó el trabajo sin agresiones sobre éste.

Es muy amplia la literatura que recoge las aplicaciones en seguridad que la propiedad

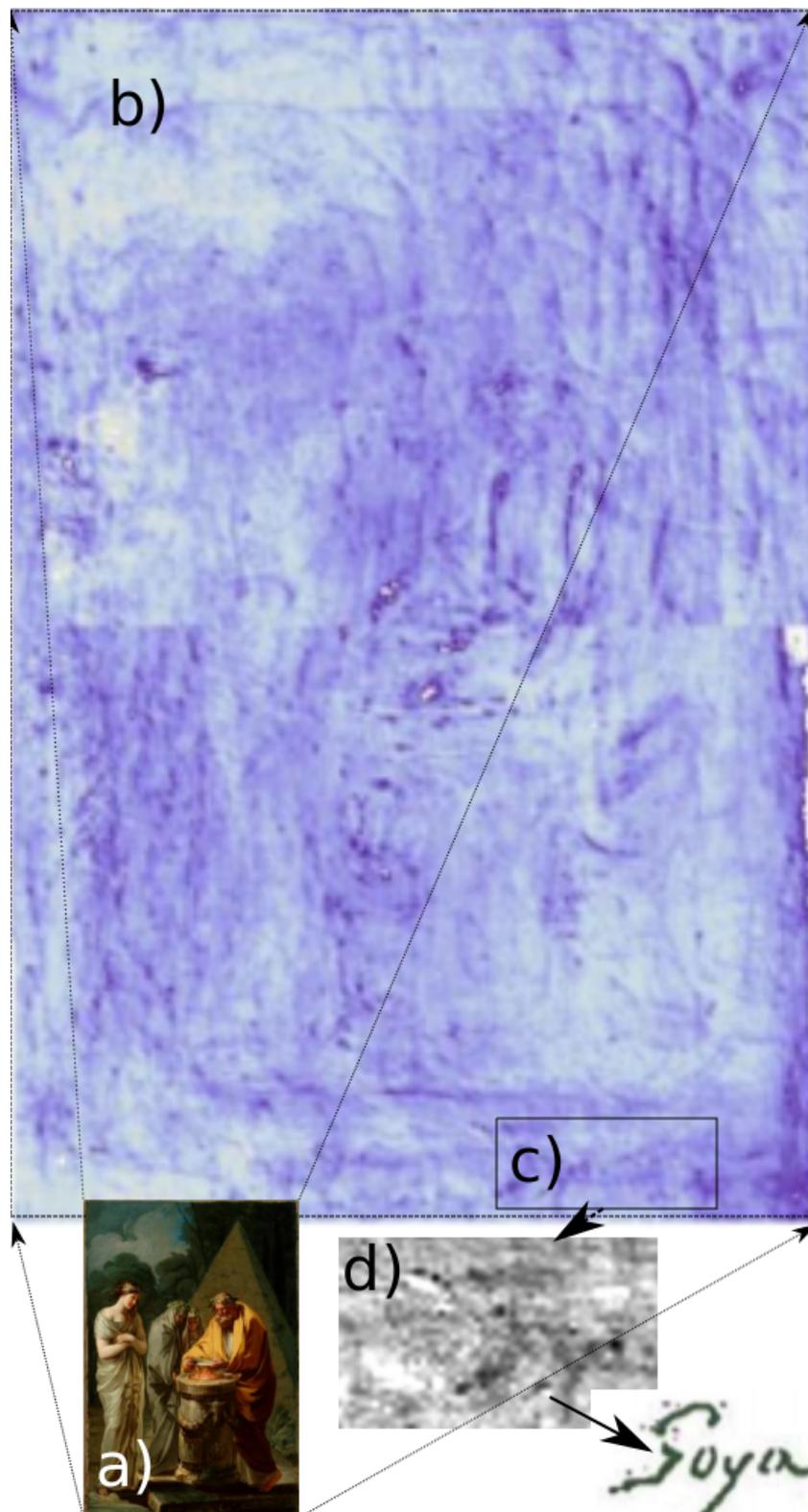


Figura 1.2: a) Imagen en el visible. b) Conversión al visible de la imagen tomada con rayos T. c) Área de la pintura donde se ha descubierto la firma. d) Ampliación de la región que contiene la firma.

V le confiere a la tecnología de THz-TDS^{5,6,13}. El observar a través de objetos que son opacos al visible, como plásticos, tejidos, envoltorios, otorga a futuros escáneres de THz grandes ventajas. Por citar un ejemplo de potencial aplicación, en los aeropuertos, se podrían instalar escáneres de rayos T que facilitarían explorar el contenido de las maletas y discernir entre agua, un explosivo¹⁴, un narcótico¹⁵ o un líquido inflamable⁵ (de acuerdo con las propiedades III, IV y V).

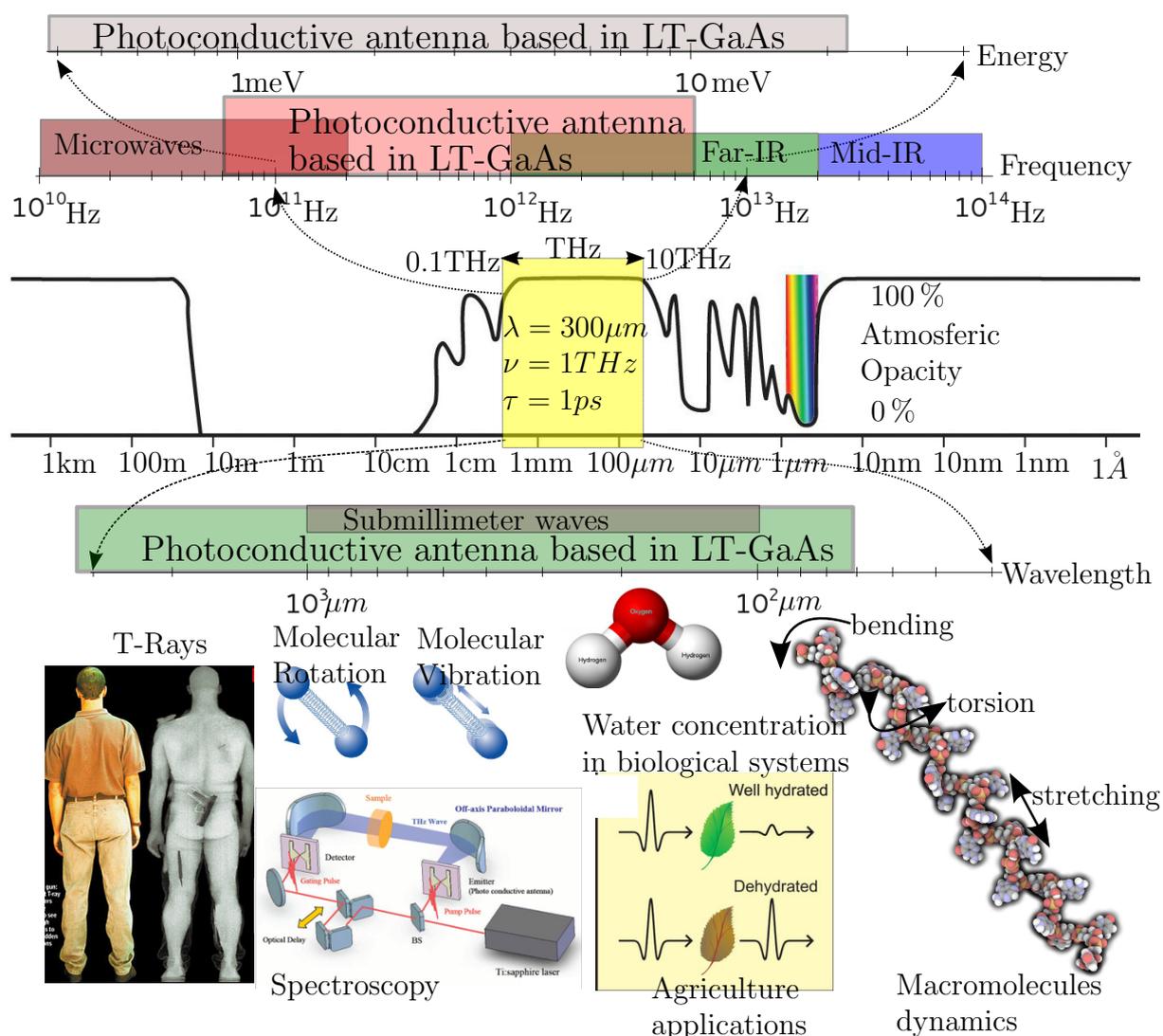


Figura 1.3: Ubicación espectral de operación de las antenas fotoconductoras, opacidad atmosférica en el rango que recorre desde las microondas hasta el infrarrojo medio, y posibles aplicaciones de la tecnología que opera en el submilimétrico.

Por otro lado, las aplicaciones inalámbricas, desde la aparición del WIFI y su llegada a la sociedad, han ido incrementando la velocidad de transferencia de información. Desde el protocolo IEEE 802.11g operativo en 1999, en la región SHF ($\sim 5GHz$), hasta el IEEE 802.11ad¹⁶ operativo en 2012, en la región EHF ($\sim 60GHz$), la velocidad de transferencia de información ha pasado de $\frac{Mbit}{s}$ a $\frac{Gbit}{s}$. En este sentido la tecnología de THz podría incrementar sustancialmente este umbral, si bien es verdad que el alcance del protocolo IEEE 802.11ad es sustancialmente inferior al del IEEE 802.11g y todo apunta a que este será el factor de mayor peso para el desarrollo y aplicación de dispositivos inalámbricos que operen en el submilimétrico. La propiedad III otorga notables cualidades a la tecnología de transmisión de información en THz. Por un lado, imposibilita la transmisión de información con protocolos de alto ancho de banda a grandes distancias, debido a la concentración de vapor de agua contenido en la atmósfera, pero esta desventaja podría convertirse en una ventaja en tiempos de guerra, pues el intercambio inalámbrico de información estaría confinado a áreas locales, evitando escuchas y garantizando la privacidad y alta velocidad de comunicación inalámbrica. Además es extensible a recintos donde el intercambio inalámbrico de información se desea confinar, como centros de investigación, universidades o instalaciones corporativas.

Uno de los bienes más valorados de cualquier comunidad humana es el agua. Según la OCDE¹⁷, el 70 % del agua usada en el mundo es empleada en la agricultura, y las previsiones indican que el 47 % de la población mundial vivirá bajo restricciones extremas de agua en 2050. La propiedad III hace que los tejidos biológicos con contenido en agua se diferencien con un alto contraste de los secos. Una aplicación inmediata es la posible monitorización continua e instantánea de la concentración de agua en hojas de plantas para optimizar el cuidado de cultivos. Actualmente se decide cuando regar atendiendo principalmente a la concentración de agua en el suelo. El estudio de la concentración acuosa óptima directamente en sistemas vegetales (hojas, tallos y raíces) podría ser una realidad mediante el empleo de rayos-T, lo cual incrementaría la eficiencia en la producción reduciendo la cantidad de agua necesaria para desarrollar la actividad. Además, la propiedad III permite a los rayos T generar imágenes tomográficas de quemaduras por capas, lo cual acelera la toma de decisiones en la evaluación de la gravedad de un quemado. Otra aplicación que se desprende de la propiedad III es la detección de cánceres de piel, ya que los tejidos afectados presentan mayores concentraciones de agua que los tejidos sanos⁹. Además, de acuerdo con la propiedad IV, que permite a la tecnología

de THz-TDS generar imágenes de absorción, y teniendo en cuenta que los tejidos sanos presentan perfiles de absorción diferentes de los cancerígenos (independientemente de la concentración de agua en los tejidos), se pueden generar imágenes de la piel para detectar cánceres en su interior en un estado muy temprano. Las aplicaciones que derivan de la propiedad III en combinación con la propiedad IV permiten generar información de las dinámicas de biomoléculas disueltas en agua, el disolvente universal de la vida⁵.

Otra potencial aplicación está en la toma de imágenes del interior de una mama mediante procesos de reflexión con fibras delgadas, que pueden considerarse como simples guías de ondas de señales electromagnéticas en el rango de los THz. Esto permitiría delimitar la zona de seguridad con mayor precisión a la hora de extirpar un tumor. La tecnología de THz-TDS imaging ha permitido detectar tumores del tamaño de 0.02mm^3 en células grasas (como las del tejido mamario), en ratones vivos a temperatura ambiente¹⁸.

Otra aplicación médica, relacionada no sólo con la detección sino también con la terapia, proviene de la combinación de la tecnología de terahercios con la iluminación de láseres infrarrojos (IR). Existen evidencias experimentales que muestran como las Gold-Nano-Rods (GNR) o baritas nanométricas de oro recubiertas de azúcar pueden ser usadas para incrementar el contraste en la detección de tejidos cancerígenos empleando THz, para después ser iluminados con un láser IR. Además de la detección, dada la mayor concentración de GNR en células cancerígenas, debido al azúcar que rodean la GNR y que las células tumorales consumen más azúcar que las sanas, la exposición al láser de IR es mayor que la que sufren las células sanas, pudiéndose mediante incremento de temperatura eliminar estas células tumorales²⁰.

La propiedad IV sugiere aplicaciones de identificación química en un amplio rango de disciplinas. A modo de ejemplo permite la detección de sustancias nocivas para la salud como el bisphenol A o BPA²¹. Otra aplicación tecnológica de THz-TDS basada en la propiedad II, es la caracterización de semiconductores y superconductores de alta temperatura crítica^{5,22}. En definitiva, hay tantas posibilidades en esta región del espectro electromagnético por explotar que el interés actual por la tecnología THz está justificado.

No obstante, hay varias razones por las cuales todavía no hay una amplia comercialización de las esas prometedoras aplicaciones que potencialmente se ocultan en esta región del espectro. La figura 1.3 ilustra esta región a tres niveles: frecuencia, longitud de onda y energía del fotón asociado. En esta misma figura 1.3, y en la figura 1.4 con mayor detalle,

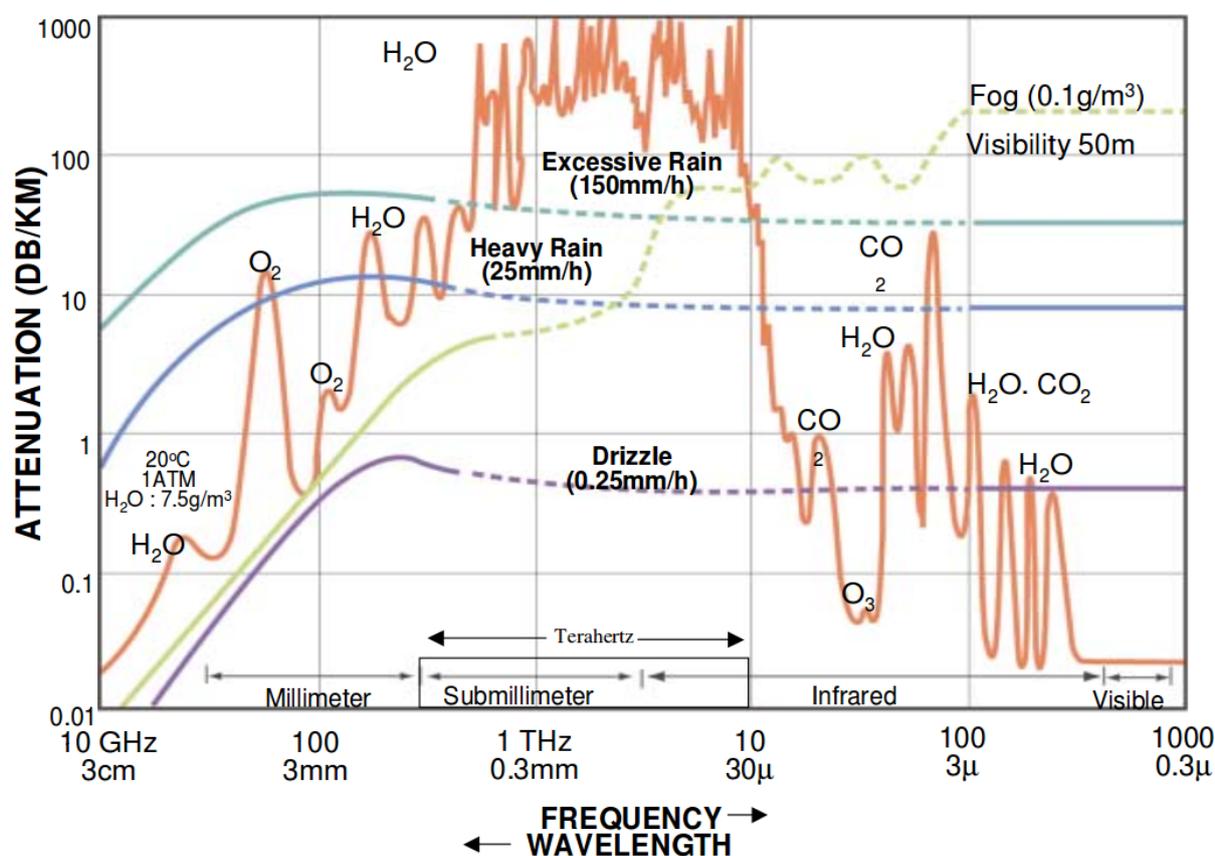


Figura 1.4: Atenuación en decibelios por kilómetro debida a la atmósfera para el rango espectral que va desde las microondas hasta el visible¹⁹.

se ha incluido la curva de opacidad electromagnética dada por la atmósfera terrestre, de la cual se desprende que los rayos-T son completamente absorbidos por la atmósfera. Si existe algún fenómeno natural que radia en este ancho de banda es difícil observarlo a nivel del mar, pues es filtrado y absorbido por completo por la atmósfera y habría que situar el detector muy cerca de la fuente para medir un valor significativo. Por la misma razón, es muy poco probable observar a nivel del mar perturbaciones electromagnéticas en THz provenientes del espacio exterior, aunque hay unas pocas regiones del planeta donde es posible²³. Como hemos dicho el vapor de agua contenido en la atmósfera impide la propagación de los rayos-T a grandes distancias, (más de un kilómetro). Salvo excepciones buscadas, la mayoría de los laboratorios y centros de experimentación se ubican cerca del nivel del mar, donde la concentración de vapor de agua juega un rol

importante volviendo opaca la atmósfera a la propagación de rayos T. Luego las fuentes de radiación en THz para experimentar y generar tecnología son en general artificiales y ese es el verdadero cuello de botella que ha frenado el desarrollo de las aplicaciones en esta región del espectro. Según Carter M. Armstrong en una revisión del estado del arte independiente publicada en 2012, la eficiencia inferior al 1% que presentan las fuentes de terahercios es el punto débil de esta tecnología⁷. Este mismo autor sostiene que las propias fuentes son además, poco potentes y aún pendientes de optimizar. Más allá de estas consideraciones, coincidimos en la apreciación de que uno de los pilares del desarrollo de la tecnología que opera en la región de los THz son las fuentes de emisión. Incrementar la eficiencia es uno de los desafíos que presenta esta tecnología. En esta memoria tratamos de estudiar este parámetro fundamental, buscando, desde el camino de la exploración computacional, hipótesis para conocer y mejorar la eficiencia de antenas típicamente usadas en este rango de frecuencias como son las antenas fotoconductoras, una fuente de emisión de bajo coste que es descrita en el apartado siguiente 1.2.

Las fuentes de THz, ilustradas en la figura 1.5, se pueden clasificar en cuatro grupos: conversión no lineal de altas frecuencias a bajas, conversión no lineal de baja frecuencias a altas, emisión por electrones en vacío y dispositivos fotónicos. No obstante otra clasificación atendiendo a criterios puramente económicos también sería posible. Simplificando mucho, vamos a clasificar todas las fuentes de emisión en dos grupos, fuentes de alto coste y las de un coste aún mayor. Por economía de escala, aquello que se produce masivamente alcanza un valor crítico de coste de producción que lo hace asequible para la mayoría. La probabilidad de que eso suceda es proporcional al coste inicial, ya que una tecnología más barata desde un principio posee mayor probabilidad de imponerse. Como ejemplo tenemos la evolución de los transistores basados en silicio. De este modo los aceleradores de partículas, los láseres de cascada cuántica, los láseres de germanio tipo P y los emisores por haz de electrones periódicamente modulados estarían en el grupo de los emisores de coste prohibitivo. Del lado más asequible están los cristales no lineales, los transistores y los emisores de gas ionizado. Del segundo grupo, los dispositivos pulsantes poseen un mayor interés para muchas aplicaciones de tecnología THz-TDS por poseer un mayor ancho de banda. Las mayores potencias de emisión son producidas por los dispositivos del primer grupo pero su precio frena su uso generalizado. De modo que uno de los desafíos presentes es incrementar las potencias de emisión de los del segundo grupo.

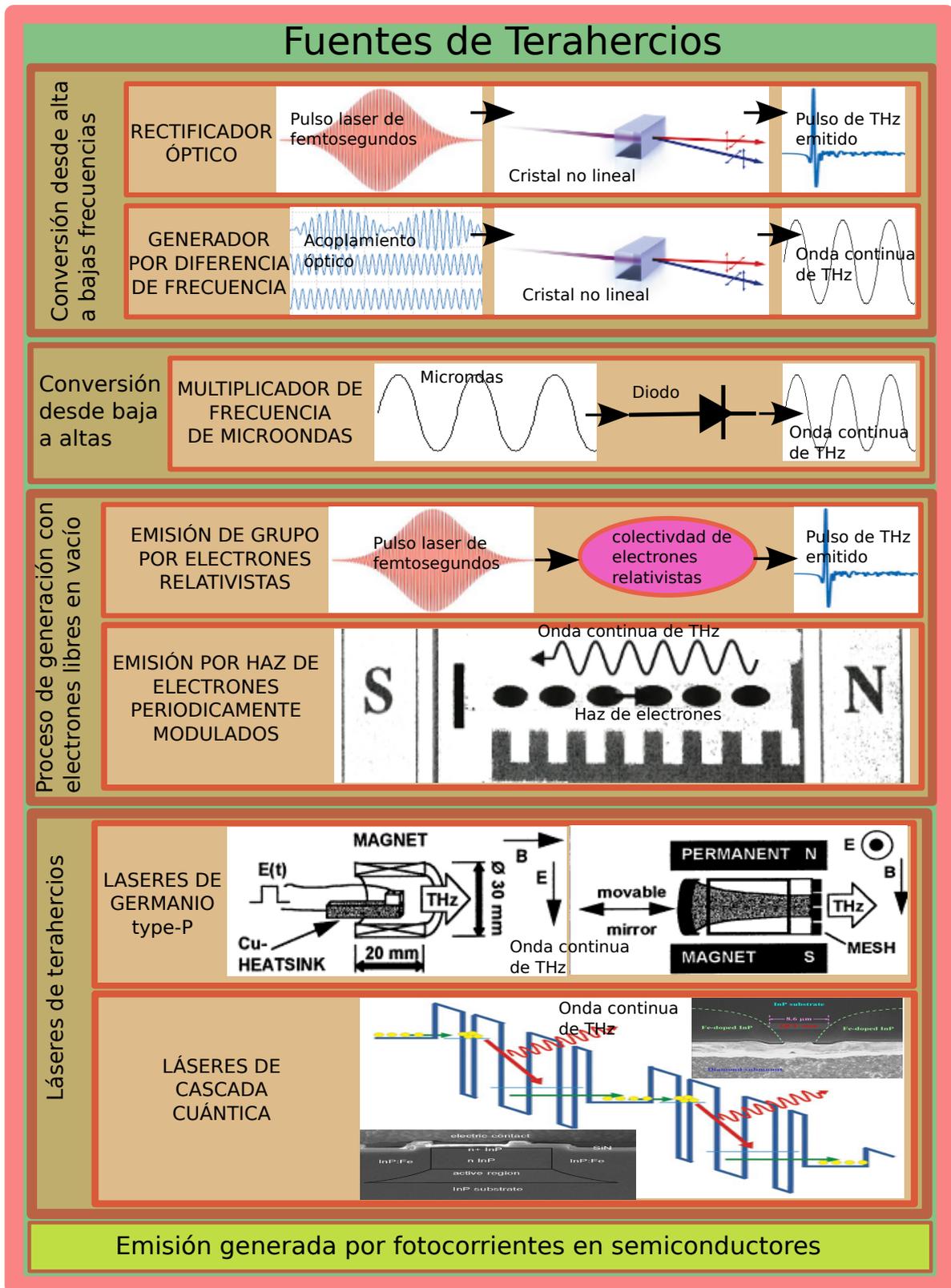


Figura 1.5: Fuentes de terahercios.

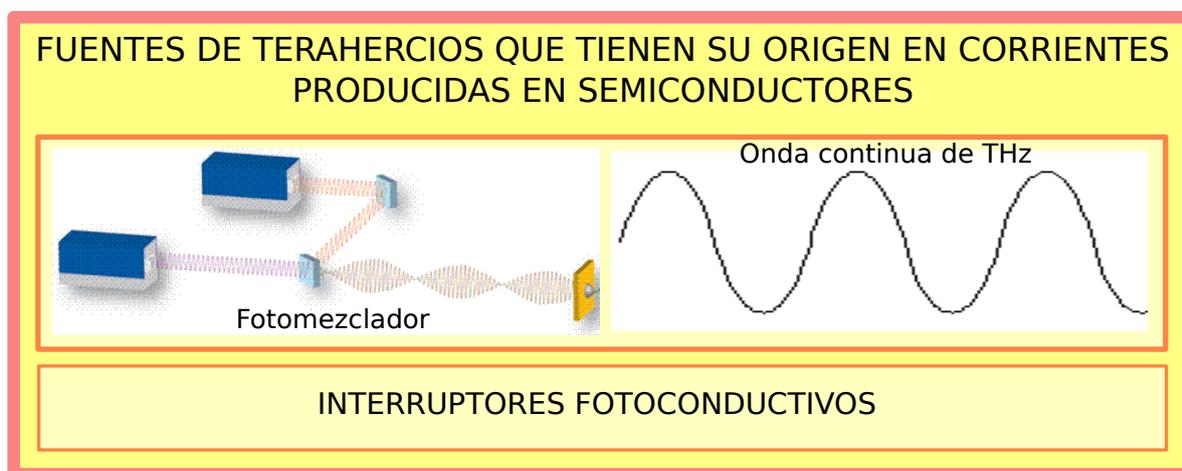


Figura 1.6: Fuentes de terahercios que tienen su origen en corrientes producidas en semiconductores.

De las fuentes pulsantes, la conversión por cristales no lineales de efecto Pockels basada en la respuesta del cristal cuando es expuesto a un campo eléctrico intenso, es una opción interesante, por sensibilidad y coherencia, a pesar de su baja eficiencia en la actualidad. La baja eficiencia de estos dispositivos se basa en la longitud de walk-off⁵. Durante la propagación en el medio a medida que se atraviesa éste, el campo de emisión en THz respecto al incidente se amplifica hasta que se recorre la llamada distancia de walk-off⁵, donde el proceso es inverso. Así el cristal actúa como un rectificador óptico que resta las frecuencias contenidas en el pulso IR láser para obtener una salida en THz. Desde el punto de vista de las ecuaciones constitutivas, que identifican la naturaleza de un material en el seno de un campo electromagnético, se trata de una dependencia cuadrática con el campo del vector densidad de polarización. Al ser cristales no-centrosimétricos el segundo término del desarrollo en serie del vector densidad de polarización domina el comportamiento no lineal, pues la susceptibilidad eléctrica $\chi^{(2)}$ es no nula. Una de las características de esta fuente se basa en la reciprocidad, pues un cristal Pockels también puede ser usado como detector coherente²⁴. Para el caso de emisión continua el proceso es parecido, pues la diferencia de dos frecuencias muy próximas son las que generan la onda continua.

Por otro lado, dentro de éste grupo de conversión de altas a bajas frecuencias, pode-

mos incluir los transistores como dispositivos de emisión generada por fotocorrientes en un semiconductor. En la figura 1.5 son mostrados al final de la misma. En la figura 1.6 se sugieren dos tipos de transistores, el de emisión continua de THz o mezclador fotónico, con un estrecho ancho de banda y los dispositivos pulsantes también conocidos como interruptores-fotoconductorivos, en los que se ha centrado esta tesis. La razones de esta elección han sido principalmente su menor coste y mayor eficiencia comparados con los cristales electro-ópticos. Los multiplicadores de frecuencia basados en diodos Schottky son otro tipo de transistores capaces de convertir las microondas en THz, eso sí, con una bajísima eficiencia. Se basan en la gran velocidad de interrupción de paso de corriente en la unión metal semiconductor gobernada por los portadores mayoritarios del semiconductor. En estos dispositivos hay una entrada de microondas a través de una guía de ondas, una disposición de diodos en array que se comportan como un elemento no lineal, capaz de duplicar o triplicar la frecuencia de entrada, y una guía de ondas para la salida de esta nueva onda electromagnética de mayor frecuencia. La baja eficiencia que presentan se debe a que la potencia de emisión es inversamente proporcional al cubo de la frecuencia. Es decir, a medida que se sube en la frecuencia de emisión, la potencia obtenida es menor.

El marco en el que esta tesis se ha llevado a cabo han sido los proyectos de investigación:

- TERAHERTZ TECHNOLOGY FOR ELECTROMAGNETIC SENSING APPLICATIONS (ver página VIII).
- TERALAB: NUMERICAL LABORATORY FOR DESIGN AND SIMULATION OF THz TECHNOLOGY (ver página IX).

En ambos proyectos, el objetivo primordial era realizar desde el punto de vista del estudio numérico un avance significativo en el conocimiento y comprensión de sistemas de sensores electromagnéticos que operen en el rango de los terahercios. Teralab compartía con Terasense un objetivo común, definir nuevas arquitecturas de dispositivos y sistemas capaces de superar las brechas tecnológicas existentes en las diferentes regiones espectrales de la banda de los terahercios.

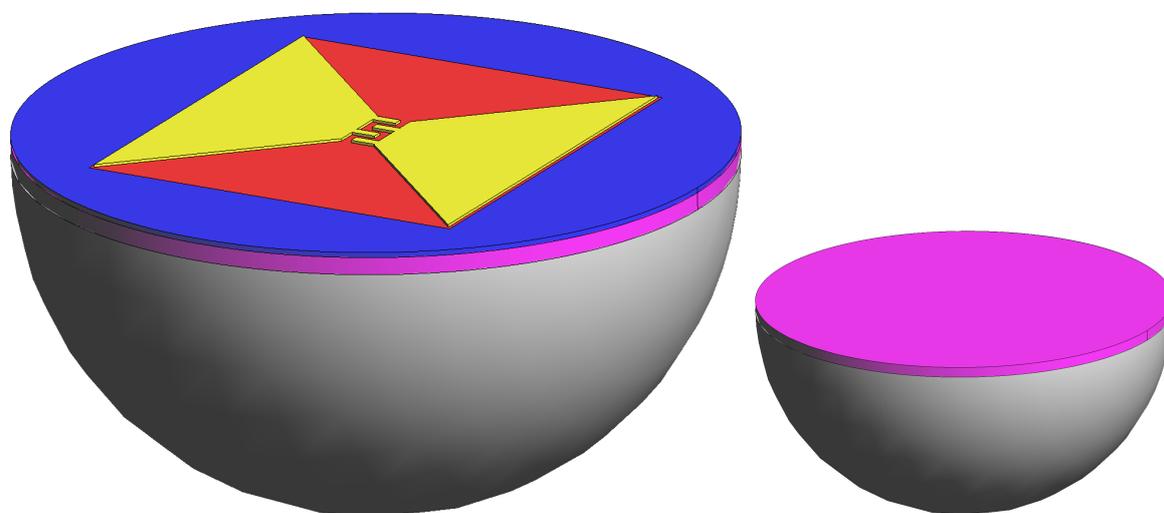
Este trabajo se centra en el estudio de los sensores fotoconductorivos basados en tecnología altamente viable desde el punto de vista económico. La idea es apostar por dispositivos semiconductores robustos, seguros para la salud, relativamente baratos de

producir y sencillos de operar. Además este trabajo pretende proporcionar conocimiento útil para eliminar la brecha entre los actuales sensores de microondas y los ópticos, apostando por un futuro conjunto de sensores multispectrales, tanto pasivos como activos, que cubran la banda de los terahercios. En la medida de lo posible y partiendo de los recursos disponibles, se han abordado partes fundamentales de esos ambiciosos objetivos, simulando arquitecturas de interés. Creemos que se ha conseguido explicar y comprender algunas partes de la emisión de ondas electromagnéticas en el rango de los terahercios para el sensor estudiado en esta tesis, las antenas fotoconductoras.

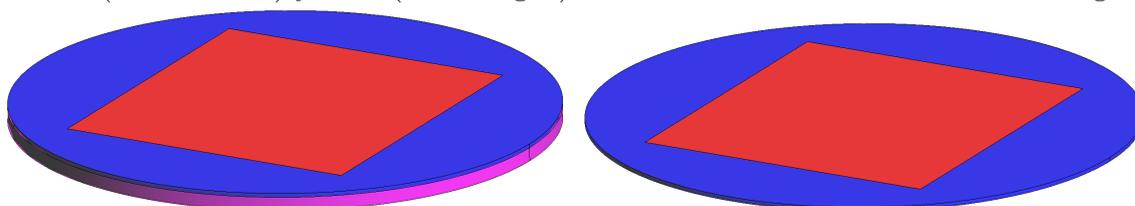
1.2. Las antenas fotoconductoras basadas en materiales semiconductores

Una antena fotoconductora puede entenderse, desde un punto de vista simplificado, como una resistencia variable en el tiempo. Si es una antena emisora, estará conectada a una fuente de tensión y si es receptora a un amperímetro. El principio de trabajo de una antena emisora se basa en por una fuente de tensión que en un momento dado cambia su conductividad, ese cambio producirá una corriente transitoria que inducirá y radiará un campo electromagnético. Recíprocamente, una antena receptora es una resistencia, polarizada por el campo que se desea detectar, cuyo valor cambia en el tiempo durante el periodo de muestreo. La corriente transitoria generada es medida por el amperímetro.

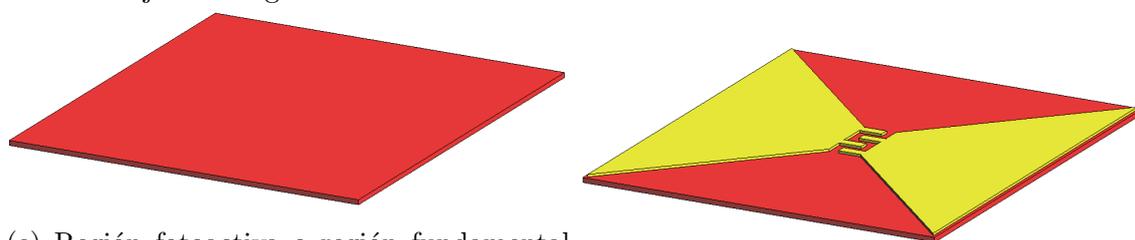
En la fabricación de estas antenas se usa un semiconductor que pasa de ser un mal conductor a incrementar sustantivamente su conductividad, como consecuencia del efecto fotoeléctrico producido por la aplicación de un pulso láser. En general, una antena fotoconductora fabricada con un material semiconductor está estructurada como un conjunto de elementos con diferentes funciones. En la figura 1.7a se tiene un ejemplo de antena completa, compuesta por una lente sobre la que se sitúa un sustrato semi-aislante y sobre este la capa fotoactiva (representada en la figura 1.7c). En esta capa fotoactiva se depositan los contactos metálicos. La región semiconductor es una estructura multicapa que, se puede considerar constituida por una capa de gran grosor, que es el sustrato semi-aislante, y otra más fina, que puede contener impurezas, que es la capa fotoactiva. En la capa fotoactiva llamada zona o región fundamental o fotoactiva al área del semiconductor que se encuentra justo debajo de los contactos metálicos, como se



(a) Esquema de la antena completa constituida por: Contactos metálicos (de color amarillo), capa fotoactiva (de color azul), región fotoactiva (de color rojo), sustrato semi-aislante (de color rosa) y lente (de color gris). (b) Elementos pasivos de la antena, formados por lente, de color gris en la figura, y capa semi-aislante de color rosa en la figura.



(c) Multicapas semiconductoras donde hay dos capas, un sustrato semi-aislante de color rosa y una capa fotoactiva (sobre la que se realiza la implantación de impurezas) de color azul. En esta capa fotoactiva se ha delimitado la región que denominamos fotoactiva, de color rojo en la figura. (d) Capa fotoactiva en la que tiene lugar el efecto fotoeléctrico. Dentro de esta capa la región de color rojo es la denominada zona fotoactiva, región fotoactiva o región fundamental, porque la mayor intensidad de generación de portadores de carga se produce en ella.



(e) Región fotoactiva o región fundamental de la antena. Esta es la parte de la antena en la que se resuelve el estado estacionario (capítulo 2) y el transitorio (capítulos 3 y 6). Así mismo, el estudio de la eficiencia de una antena emisora se realiza sobre esta región (capítulo 4). (f) Elemento equivalente a toda la antena considerado en los capítulos 2, 3, 4 y 6. En el apartado 3.2.4 del capítulo 3 se describe el dominio computacional y se muestra este elemento como el núcleo del mismo.

Figura 1.7: Esquemas de una antena fotoconductoras con sus diferentes partes.

ilustra en la figura 1.7e. La lente dieléctrica se coloca bajo el sustrato semi-aislante para colimar la energía de emisión en una antena emisora o focalizar la energía recibida en una receptora.

Los procesos en los que se centra esta tesis, tienen lugar en la llamada capa fotoactiva y dentro de ésta en la región fotoactiva. En esta región es en la que tiene lugar principalmente cambio de la conductividad debido al efecto fotoeléctrico, y este cambio en la conductividad es el que origina la radiación electromagnética (antena emisora) o permite la detección y muestreo de la misma (antena receptora). La aplicación del campo electrostático que barre las cargas inducidas por el láser tiene lugar sobre esta región. Esto se lleva a cabo mediante el empleo de contactos metálicos, que supondremos de conducción perfecta (PEC), depositados sobre la región fotoactiva. En un trabajo experimental previo²⁵ y en los estudios realizados en esta tesis en el capítulo 4, se ha demostrado que la geometría de estos contactos resulta determinante en la estructura e intensidad del campo radiado, así como en la eficiencia de la antena. Del mismo modo, el material semiconductor con el que se fabrica la antena resulta fundamental. También el grosor de la capa fotoactiva y la del sustrato semi-aislante son parámetros a tener en cuenta, ya que la directividad del campo radiado está relacionado con ellos²⁶. Además de los elementos mencionados, otro factor a tener en consideración es el nivel de impurezas en la capa fotoactiva, ya que este parámetro condiciona la conductividad y la polarización de oposición al barrido de carga que en última instancia modula la intensidad del campo radiado²⁷. Son muchos los parámetros que gobiernan el comportamiento de este tipo de antenas, que si bien poseen una base física sencilla en cuanto a su operatividad, su descripción cuantitativa mediante soluciones analíticas de los modelos diferenciales propuestos es inviable y se requieren soluciones numéricas.

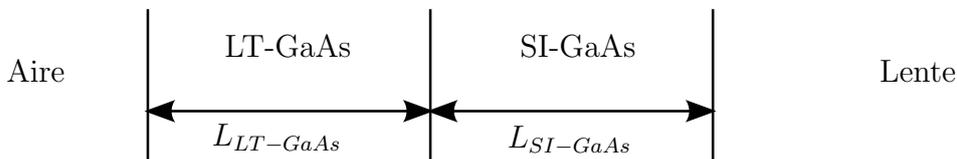


Figura 1.8: División del sustrato de GaAs en capas²⁸: una base SI-GaAs y sobre está la capa fotoactiva de LT-GaAs. En la práctica $L_{SI-GaAs} \gg L_{LT-GaAs}$

De todos los materiales semiconductores útiles para la elaboración de antenas, el GaAs crecido a baja temperatura, LT-GaAs, es el que se ha estudiado y simulado. El LT-GaAs

se hace crecer por deposición molecular de haz²⁹ sobre un sustrato semi-aislante (puro) de GaAs. Como se muestra en la figura 1.8 el grosor de esta capa fotoactiva libre de defectos, cuando la presión equivalente de haz es inferior a 10 y la temperatura superior a 483K, puede superar la micra²⁹. De hecho, el valor medio está alrededor de los $1,5\mu m$ como se desprende de la literatura³⁰⁻³², aunque hay ejemplos experimentales llevados a cabo con láminas de LT-GaAs de mayor grosor³³.

1.3. Estructura de la memoria

En este trabajo se mostrará, que ciertos aspectos de las antenas fotoconductoras que operan en el submilimétrico son analizables mediante el método numérico de FDTD³⁴⁻⁴⁰ como ponen de manifiesto los resultados obtenidos con los algoritmos desarrollados. Al mismo tiempo, se concluirá que simular comportamientos realistas de estos dispositivos es de gran utilidad para explorar caminos que puedan conducir al mejor conocimiento y desarrollo de la tecnología de terahercios. Una prueba de ello es el conocimiento proporcionado por los algoritmos destinados al estudio de la eficiencia de las antenas fotoactivas estudiadas²⁷.

La estructura de esta tesis se ha hecho del siguiente modo:

- En el capítulo 2, después de plantear un procedimiento numérico capaz de conducir a la solución del estado estacionario de un semiconductor polarizado por una fuente de tensión externa, se han implementado y validado los resultados obtenidos con software comercial. Este estado estacionario es de vital interés para conocer el campo electrostático y la carga de una antena fotoconductiva emisora.
- En el capítulo 3 se han introducido una serie de algoritmos que permiten simular el proceso transitorio de una antena fotoconductiva en el dominio del tiempo mediante diferencias finitas (FDTD³⁴⁻⁴⁰). El modelo de difusión y arrastre es un buen descriptor de la física de una antena fotoconductiva, siempre y cuando nos encontremos en las condiciones de aplicabilidad del modelo. De este capítulo se han producido dos publicaciones, una de las cuales centra su atención en la importancia del modelo de movilidad⁴¹. La otra explica el propio algoritmo de simulación del proceso transitorio, su validación e implementación^{42,43}.

- En el capítulo 4 los resultados muestran que la forma de los contactos metálicos resulta realmente relevante en cuanto a lo que la eficiencia se refiere²⁷, y hay evidencias experimentales que ratifican estas conclusiones²⁵. En este capítulo se ha llegado a la conclusión de que los simuladores son útiles, para aunar las características más deseadas que conducen a una eficiencia mayor. Aunando el conocimiento proporcionado por los resultados de las simulaciones llevadas a cabo, ha sido diseñado un modelo de alta eficiencia, en comparación con los diseños anteriores. Su geometría es la que ha mostrado una mayor eficiencia en todas las simulaciones, la forma triangular (TT0), explicada en el capítulo 4, la tensión aplicada ha sido de 60V, el dopado por huecos $C = -10^{14}cm^{-3}$, y la potencia promedio del láser incidente $P_{av} = 5mW$. Con estos datos de partida se ha alcanzado una eficiencia de 0.14% y un ancho de banda relativo a frecuencia de máximo $\frac{\Delta\nu}{\nu_{max}} = 0,4$. No obstante, aumentar la eficiencia reduciendo el nivel de impurezas tiene una penalización, pues se pierde ancho de banda. Aunque esta última conclusión basada en la región fundamental de la antena, concepto descrito en el apartado anterior 1.2, es discutible y se analiza en el capítulo 4.
- En el capítulo 5 los resultados indican que sólo una parte de la señal electromagnética es muestreada, pues existe una ventana temporal dada por la fotoconductividad que es la que limita la anchura temporal de muestreo, como se apunta en la bibliografía⁴⁴. El paso de la onda electromagnética por medios materiales de cierta conductividad (sustrato, lente y regiones fotoactivas), será también analizado.
- Finalmente, en el capítulo 6, se presentan un conjunto de algoritmos destinados a resolver el modelo magnetohidrodinámico. El motivo es que existen evidencias experimentales⁴⁵⁻⁴⁸ y estudios teóricos⁴⁹⁻⁵² que evidencian un aumento en la emisión de una antena fotoconductiva si durante el proceso transitorio esta se encuentra inmersa en el seno de un campo magnetostático. Como el modelo de difusión y arrastre no contempla la ley de Lorentz, se hace necesario acudir al modelo magnetohidrodinámico clásico.

En definitiva, el objetivo último de este trabajo es arrojar luz y crear conocimiento para el desarrollo de los futuros sensores que operarán en la banda submilimétrica.

2

Algoritmos de simulación del estado estacionario de una antena fotoconductiva.

2.1. El modelo físico, sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales a resolver	20
2.1.1. El modelo de difusión y arrastre	23
2.2. La celda de Yee modificada	28
2.3. Aproximación por diferencias finitas del sistema de ecuaciones diferenciales	29
2.4. La movilidad de los portadores de carga	37
2.4.1. Modelos de movilidad	37
2.5. La tasa de recombinación	47
2.5.1. Tiempos de vida de los portadores de carga	50
2.6. Condiciones de contorno	51
2.6.1. Condiciones de contorno de Dirichlet	52
2.6.2. Condiciones de contorno de Neumann	54
2.7. Validación del algoritmo	56

En este capítulo se establecen las bases físicas y el modelo que permite el estudio de las antenas fotoconductivevas ya presentadas en el apartado 1.2 del capítulo 1, desde un punto de vista de simulación numérica. Aquí se estudiará la polarización del semiconductor de la antena fotoconductiveva mediante una fuente de tensión externa que genera un campo electrostático en la región fotoactiva de la antena fotoconductiveva. La fuente de tensión es aplicada a unos contactos metálicos depositados en la región fotoactiva, de forma que se aplica un campo eléctrico sobre una región en la que hay una concentración constante de carga libre, ésta se redistribuye y se produce una corriente estacionaria. Caracterizar este estado estacionario de equilibrio se hace necesario para el posterior estudio del transitorio (donde se cambia la conductividad del semiconductor aplicando una fuente de luz). En definitiva, el estado estacionario es el punto de partida en el que arranca la simulación del proceso transitorio, y su determinación mediante cálculo numérico, es el objeto de este capítulo.

2.1. El modelo físico, sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales a resolver

La descripción de los procesos que tienen lugar en una antena fotoconductiveva mediante la elección y justificación de un modelo físico, es el primer apartado de este capítulo. En la escala espacio-temporal, macroscópicamente, las ecuaciones clásicas de Maxwell⁵³⁻⁵⁵ representan el modelo físico apropiado:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \rho_e(\vec{r}, t) \quad (2.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E}(\vec{r}, t) = -\partial_t \vec{B}(\vec{r}, t) \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{J}(\vec{r}, t) + \partial_t \vec{D}(\vec{r}, t), \quad (2.4)$$

donde $\vec{D}(\vec{r}, t)$ es el desplazamiento eléctrico, $\rho_e(\vec{r}, t)$ la densidad de carga eléctrica, $\vec{B}(\vec{r}, t)$ la inducción magnética, $\vec{E}(\vec{r}, t)$ el campo eléctrico, $\vec{H}(\vec{r}, t)$ el campo magnético y $\vec{J}(\vec{r}, t)$ la densidad de corriente eléctrica.

A partir de la ley de Gauss 2.2 y de la identidad matemática $\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \wedge \vec{a}) = 0$, el vector intensidad de campo magnético $\vec{B}(\vec{r}, t)$ debe provenir de un potencial vector $\vec{A}(\vec{r}, t)$ de

modo que $\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}(\vec{r}, t)$. Sustituyendo este potencial vector $\vec{A}(\vec{r}, t)$ en la ley de inducción de Faraday, se tiene la expresión $\vec{\nabla} \wedge \vec{E}(\vec{r}, t) = -\partial_t (\vec{\nabla} \wedge \vec{A}(\vec{r}, t))$ donde $\vec{\nabla} \wedge (\vec{E}(\vec{r}, t) + \partial_t \vec{A}(\vec{r}, t)) = \vec{0}$. Lo que nos permite escribir⁵³⁻⁵⁵ $\vec{E}(\vec{r}, t) + \partial_t \vec{A}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t)$. Si se multiplica por la permitividad eléctrica del medio se obtiene el vector desplazamiento eléctrico:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = -\varepsilon \left(\partial_t \vec{A}(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) \right) \quad (2.5)$$

Aplicando el operador divergencia a ambos lados de la ecuación anterior 2.5, suponiendo además una permitividad eléctrica isotrópica y homogénea del medio material ε y comparando con la ecuación de Gauss 2.1 se obtiene:

$$\vec{\nabla} \cdot \left(-\varepsilon \left(\partial_t \vec{A}(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) \right) \right) = \vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \rho_e(\vec{r}, t) \quad (2.6)$$

En el estado estacionario, es evidente que $\partial_t \vec{A} = \vec{0}$. Y de esta condición de equilibrio se obtiene la ecuación de Poisson:

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} \psi(\vec{r}) \right) = -\frac{\rho_e(\vec{r})}{\varepsilon} \quad (2.7)$$

En la expresión anterior la densidad espacial de carga eléctrica en un semiconductor es $\rho_e(\vec{r}) = q(p(\vec{r}) - n(\vec{r}) + C(\vec{r}))$ ⁵⁶⁻⁵⁸ donde q es la carga del electrón, $n(\vec{r})$ es la concentración de electrones, $p(\vec{r})$ es la concentración de huecos y $C(\vec{r}) = N_D^+(\vec{r}) - N_A^-(\vec{r})$ es la distribución de impurezas en el semiconductor. Reescribiendo la ecuación de Poisson teniendo en cuenta la densidad espacial de carga eléctrica se llega a la ecuación:

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} \psi(\vec{r}) \right) = -\frac{q}{\varepsilon} (p(\vec{r}) - n(\vec{r}) + C(\vec{r})) \quad (2.8)$$

Resolver esta ecuación conduce a conocer el campo electrostático $\vec{E}_0(\vec{r})$ a través de la relación $\vec{E}_0(\vec{r}) = -\vec{\nabla} \psi(\vec{r})$. Pero para resolverla necesitaremos dos ecuaciones más para las dos incógnitas restantes, la carga debida a electrones e^- y a huecos e^+ . Las ecuaciones presentadas a continuación, de continuidad de la carga eléctrica, tienen un carácter general y serán después particularizadas al caso estacionario.

Aplicando la divergencia a ambos lados de la ley de Ampere-Maxwell⁵³⁻⁵⁵ en la ecuación

22 2. Algoritmos de simulación del estado estacionario de una antena fotoconduactiva.

2.4 se obtiene es $\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \wedge \vec{H}(\vec{r}, t)) = \vec{\nabla} \cdot (\vec{J}(\vec{r}, t) + \partial_t \vec{D}(\vec{r}, t))$. Si se reemplaza en esta expresión $\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{r}, t)$ por $\rho(\vec{r}, t)$ de acuerdo a la ley de Gauss 2.1 y se hace uso de la identidad matemática $\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \wedge \vec{a}) = 0$, llegamos a la ecuación de la continuidad de la carga eléctrica:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) + \partial_t \rho(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.9)$$

Sustituimos ahora en la ecuación obtenida 2.9 la densidad espacial de carga eléctrica $\rho(\vec{r}, t) = q(p(\vec{r}, t) - n(\vec{r}, t) - C(\vec{r}))$ y obtenemos:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p(\vec{r}, t) + \partial_t p(\vec{r}, t) - \partial_t n(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.10)$$

$$-\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n(\vec{r}, t) + \partial_t n(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p(\vec{r}, t) + \partial_t p(\vec{r}, t) \quad (2.11)$$

La ecuación 2.10 da cuenta de la carga que hay en una región del espacio en un instante dado. Si existe una fuente de carga que expresa la tasa de generación de carga en cada punto del espacio y en cada instante del tiempo, a la que llamamos tasa de generación $G(\vec{r}, t)$, y de igual modo hay un sumidero de carga, es decir, una función que expresa la tasa de recombinación de carga en cada punto del espacio y en cada instante del tiempo $R(\vec{r}, t)$, y consideramos que se ha de conservar la neutralidad de la carga, la ecuación 2.11 puede escribirse:

$$-\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n(\vec{r}, t) + \partial_t n(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p(\vec{r}, t) + \partial_t p(\vec{r}, t) = G(\vec{r}, t) - R(\vec{r}, t) \quad (2.12)$$

De esta igualdad se obtienen dos ecuaciones para la carga eléctrica:

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = q^{-1} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n(\vec{r}, t) + G(\vec{r}, t) - R(\vec{r}, t) \quad (2.13)$$

$$\partial_t p(\vec{r}, t) = -q^{-1} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p(\vec{r}, t) + G(\vec{r}, t) - R(\vec{r}, t) \quad (2.14)$$

Estas ecuaciones obtenidas (2.13,2.14), independientemente del modelo para las corrientes (\vec{J}_n, \vec{J}_p) las tasas de generación $G(\vec{r}, t)$ y recombinación $R(\vec{r}, t)$, expresan de modo general la dinámica espacio-temporal clásica de carga y son de aplicación tanto en el estudio estacionario como en el transitorio. En lo que sigue, referiremos el estado estacionario; empleamos la notación:

- $n0(\vec{r})$ y $p0(\vec{r})$ para referirnos a las concentraciones de electrones y huecos respectivamente.

- $R0(\vec{r})$ para referirnos a la tasa de recombinación del estado estacionario.
- \vec{J}_{n0} y \vec{J}_{p0} para referirnos a las corrientes estacionarias debidas a electrones y huecos respectivamente.

Particularizadas las ecuaciones de la continuidad de la carga para el estado estacionario donde no hay tasa de generación $G(\vec{r}, t)$, y se cumple que $\partial_t n(\vec{r}, t) = 0$ y $\partial_t p(\vec{r}, t) = 0$, las ecuaciones 2.13-2.14 se reducen a:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{n0}(\vec{r}) = qR0(\vec{r}) \quad (2.15)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{p0}(\vec{r}) = -qR0(\vec{r}) \quad (2.16)$$

Encontrándose el sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que describen el estado estacionario:

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \psi(\vec{r})) = -\frac{q}{\epsilon} (p0(\vec{r}) - n0(\vec{r}) + C(\vec{r})) \quad (2.17)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{n0}(\vec{r}) = qR0(\vec{r}) \quad (2.18)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{p0}(\vec{r}) = -qR0(\vec{r}) \quad (2.19)$$

Resolver numéricamente este sistema de ecuaciones diferenciales, en la región fotoactiva de una antena fotoconduktiva, es el principal objetivo de este capítulo.

2.1.1. El modelo de difusión y arrastre

La relación entre la ecuación de Poisson 2.17 y las ecuaciones de continuidad de la carga 2.18-2.19 se establece a través de las corrientes de portadores de carga $\vec{J}_n(\vec{r})$ y $\vec{J}_p(\vec{r})$. Es en este apartado en el que se introduce el modelo que se ha usado para estas corrientes, el llamado de difusión y arrastre (modelo de difusión y arrastre). El modelo es un descriptor aceptable bajo ciertas condiciones, y lo más importante, lo suficientemente simple y preciso como para ser computacionalmente implementado en la simulación de dispositivos reales. Una de las características fundamentales que lo hacen adecuado en el contexto de las antenas fotoconduktivas estudiadas, son las dimensiones espaciotemporales de éstas, que aceptan un modelo clásico.

La deducción del modelo de difusión y arrastre para las corrientes fijan su marco de

aplicabilidad⁵⁹. Si bien la deducción del modelo en sí no es fundamental para la comprensión de esta tesis, lo es ese marco de aplicabilidad, es decir, porque especifica cuando se puede emplear el modelo. En particular cuando sobre las antenas fotoconductivevas y en qué condiciones. En este apartado se enumeran las limitaciones del modelo y se justifican algunos puntos discutibles en su aplicación a los dispositivos bajo estudio. Se presentan también los efectos y procesos físicos que el modelo en sí no tiene en cuenta, y porque es posible hacerlo sin pérdida de rigor y precisión de los resultados obtenidos a partir del mismo.

Límites del modelo, marco de aplicabilidad y justificaciones

- **El modelo ignora la interacción entre cargas.** Cuando se obtiene el modelo de difusión y arrastre no se contempla la interacción entre cargas, eso implicaría no linealidades difíciles de tratar^{59,60}. Cuanto menor sea la concentración de impurezas el modelo funcionará mejor.
- **El modelo ignora la ley de Lorentz⁵⁹.** Cuando se obtiene el modelo de difusión y arrastre no se contempla la acción de Lorentz, simplemente se ignora. Por eso el modelo será válido y lo podremos aplicar siempre que no existan campos magnetostáticos de cierta intensidad aplicados durante el transitorio. Además, la fuerza magnética del campo inducido en el transitorio es considerablemente más pequeña que la eléctrica y en las simulaciones realizadas se puede despreciar.
- **El modelo ignora variaciones espacio-temporales de la temperatura⁵⁹.** En todas nuestras simulaciones la temperatura es asumida constante a lo largo de todo el proceso y su valor es el mismo en todo punto del dominio (no hay gradientes térmicos). Parte de la energía del láser se invierte en calentar el punto de impacto de la región fotoactiva durante el transitorio. En el capítulo 4 se calcula la energía suministrada por un láser y la energía suministrada por la fuente de tensión externa durante el régimen transitorio. Si hacemos la aproximación de cuerpo negro y aplicamos la ley de Stefan–Boltzmann⁶¹ suponiendo que toda esta energía (en el caso más extremo de potencia láser simulada, con un dopado por electrones y una relativamente alta tensión aplicada de 150V) se invierte en calentar el semiconductor, el incremento de temperatura es de $\Delta T = \left(\frac{E_{\gamma} + E_{DC}}{\sigma} \right)^{\frac{1}{4}} = 4K$. Eso es relativamente

poco para una antena fotoconductive trabajando a temperatura ambiente. Si la temperatura de trabajo es de $T = 300K$, una variación de $4K$ supone un 1,3% de un $k_B T$. No obstante, una aproximación más realista es posible. De fuentes experimentales⁶² se tiene que la capacidad calorífica de un material semiconductor muy empleado en antenas fotoconductive, GaAs, es $C_{GaAs}(T = 300k) = 5,6 \frac{calg}{AtomK}$ y al mismo tiempo⁶³ en GaAs $1cm^3 = 4,42 \cdot 10^{22} Atom$. Como la densidad⁶³ del GaAs es $\rho_{GaAs} = 5,32 \frac{g}{cm^3}$ suponiendo que toda la energía se invierte en calentar un región fotoactiva de altura $H = 1,5\mu m$ y radio $R = 3\mu m$; el incremento de temperatura sería $\Delta T = \frac{E_\gamma + E_{DC}}{C_{GaAs}(T=300k)\rho_{GaAs}H\pi R^2} \simeq 10^{-23}K$, aproximadamente un yocto (10^{-24}) de un $k_B T$. Con lo que la aproximación de temperatura constante en todo instante y en todo punto puede ser aplicada. No obstante, es posible estudiar gradientes de temperatura añadiendo al modelo las llamadas relaciones de Einstein modificadas^{59,64-68} y que se corresponden con las expresiones 2.22 y 2.23. Esto implicaría resolver una ecuación en derivadas parciales más, la ecuación del calor 2.24.

- **El modelo no contempla semiconductores degenerados⁵⁹**, tanto el valor máximo de la banda de valencia como el mínimo de la banda de conducción se han aproximado por paraboloides. Consideramos degeneración total una posición de $5k_B T$ del nivel de Fermi, o potencial químico por encima del fondo de la banda de conducción o por debajo del techo de la banda de valencia⁶⁹. En ningún caso las antenas fotoconductive estudiadas en este trabajo están en degeneración total. Ni siquiera parcialmente degeneradas.
- **En este modelo todos los procesos de scattering son elásticos⁵⁹**. Aunque en su formulación se obvian procesos de scattering tan importantes como el de fonones ópticos polares, el mecanismo principal de scattering del GaAs, unos de los materiales más usado en antenas fotoconductive, es posible medir como este mecanismo contribuye a la movilidad⁷⁰ de portadores en GaAs y tenerlo en cuenta en modelos de movilidad.
- **En el modelo se desprecia la variación espacial del tiempo de colisión⁵⁹**. Lo cual tiene remedio empleando un modelo de movilidad que de cuenta de una no igualdad espacial del tiempo de colisión, o en otras palabras, una no uniformidad espacial de la movilidad.

- **En la deducción del modelo el semiconductor se asume infinitamente grande**⁵⁹. Es de esperar que falle en las proximidades de las interfaces. En este contexto proximidades significa unos pocos caminos medios libres. Suponiendo que un camino medio libre tiene el tamaño de separación de núcleos atómicos de red o constante de red no mayor a una docena de Å, el modelo funcionará bien a una distancia de 10^3Å de las interfaces (región fotoactiva-vacío, región fotoactiva-contactos metálicos, región fotoactiva-aislantes, región fotoactiva-sustrato semiconductor...). En definitiva, el modelo sólo puede ser aplicado a una distancia mayor o igual a $0,1 \mu\text{m}$ de las interfaces. Problema que se soluciona aplicando condiciones de contorno apropiadas a cada una de las interfaces. En ningún caso el mallado ha sido menor de 100nm y en la periferia de la región fotoactiva se han aplicado condiciones de contorno específicas de cada interfaz.
- **El modelo no contempla el efecto Gunn**^{59,69}. Este efecto, presente en el GaAs, provoca cambios bruscos de conductividad para campos externos intensos. Se basa en el salto entre valles de la banda de conducción para semiconductores que presentan varios mínimos muy próximos en la citada banda. Tener en cuenta este proceso es posible mediante modelos de movilidad que sean dependientes del campo eléctrico.
- **El modelo desprecia variaciones espaciales de las fuerzas externas aplicadas**⁵⁹. El significado, una variación lenta del vector campo eléctrico, algo solamente posible reduciendo el grid del mallado en las regiones de brusco cambio del vector campo eléctrico (zona de contactos).
- **El modelo sólo tiene en cuenta orden cero del desarrollo en serie de potencias del tiempo de colisión de las corrientes**⁵⁹ J_n y J_p . Se desprecian efectos importantes como la velocidad de sobredisparo, mayor que la de saturación, y que produce movilidades considerables y por ende conductividades. En esta tesis todos los gap de zona de campo eléctrico intenso, poseen una distancia mayor o igual a cinco micrómetros. Tomando como ejemplo la constante de red del GaAs a temperatura ambiente $a = 5,65 \text{Å}$, eso supone aproximadamente 10^4 capas de átomos. Con lo que la probabilidad de que exista sobredisparo y transporte balístico es no nula, pero tan pequeña, que se puede despreciar el efecto. Concluimos que

esto es algo sólo presente en dispositivos submicrométrico⁷¹ mucho menores que los dispositivos estudiados.

El proceso de obtención de las ecuaciones de transporte del modelo de difusión y arrastre así como sus peculiaridades, puede ser consultado en la bibliografía^{56,59,69}. Usando la relación de Einstein $D_n = \mu_n V_T$ y $D_p = \mu_p V_T$ donde $V_T = \frac{k_B T}{q}$, las ecuaciones del modelo de difusión y arrastre se pueden escribir:

$$\vec{J}_n(\vec{r}, t) = -q\bar{\mu}_n(\psi, \vec{r}) \odot \left(n(\vec{r}, t) \vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) - V_T \vec{\nabla}n(\vec{r}, t) \right) \quad (2.20)$$

$$\vec{J}_p(\vec{r}, t) = -q\bar{\mu}_p(\psi, \vec{r}) \odot \left(p(\vec{r}, t) \vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) + V_T \vec{\nabla}p(\vec{r}, t) \right) \quad (2.21)$$

Donde \vec{J}_n es la corriente debida a electrones, q es la carga del electrón, la variedad lineal $\bar{\mu}_n(\psi, \vec{r})$ representa la movilidad del electrón, $n(\vec{r}, t)$ es la concentración volúmica de carga, $\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t)$ es el campo eléctrico cambiado de signo y $\vec{\nabla}n(\vec{r}, t)$ es el gradiente de la concentración de carga debida a electrones. Del mismo modo, \vec{J}_p es la corriente debida a huecos, la variedad lineal $\bar{\mu}_p(\psi, \vec{r})$ representa la movilidad del hueco, $p(\vec{r}, t)$ es la concentración volúmica de carga y $\vec{\nabla}p(\vec{r}, t)$ es el gradiente de la concentración de carga debida a electrones. Como se comentó anteriormente, la definición del producto \odot puede ser consultada en los apéndices I.b, y supone un producto componente a componente respetando el carácter vectorial.

Estas ecuaciones son válidas para dispositivos en los que no hay gradientes de temperatura, siempre que nos restrinjamos al marco de aplicabilidad. Sin embargo, dispositivos con gradientes térmicos pueden ser estudiados con el modelo de difusión y arrastre dado por:

$$\vec{J}_n(\vec{r}, t) = -qn(\vec{r}, t) \bar{\mu}_n(\psi, \vec{r}) \odot \left(\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) - V_T(\vec{r}, t) \frac{\vec{\nabla}n(\vec{r}, t)}{n(\vec{r}, t)} - \frac{k_B}{2q} \vec{\nabla}T(\vec{r}, t) \right) \quad (2.22)$$

$$\vec{J}_p(\vec{r}, t) = -qp(\vec{r}, t) \bar{\mu}_p(\psi, \vec{r}) \odot \left(\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) + V_T(\vec{r}, t) \frac{\vec{\nabla}p(\vec{r}, t)}{p(\vec{r}, t)} + \frac{k_B}{2q} \vec{\nabla}T(\vec{r}, t) \right) \quad (2.23)$$

Donde hay que introducir una ecuación más para modelar las variaciones de temperatura:

$$\varrho(\vec{r}) c_V(\vec{r}) \partial_t T(\vec{r}, t) - \Upsilon(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \cdot \left(\varpi(T(\vec{r}, t)) \vec{\nabla}T(\vec{r}, t) \right), \quad (2.24)$$

donde $\rho(\vec{r})$ es la masa específica, $c_V(\vec{r})$ es el calor específico isócoro, $\Upsilon(\vec{r}, t)$ la tasa de generación de calor⁵⁹, $\varpi(T)$ la conductividad térmica y T la temperatura del semiconductor bajo estudio.

2.2. La celda de Yee modificada

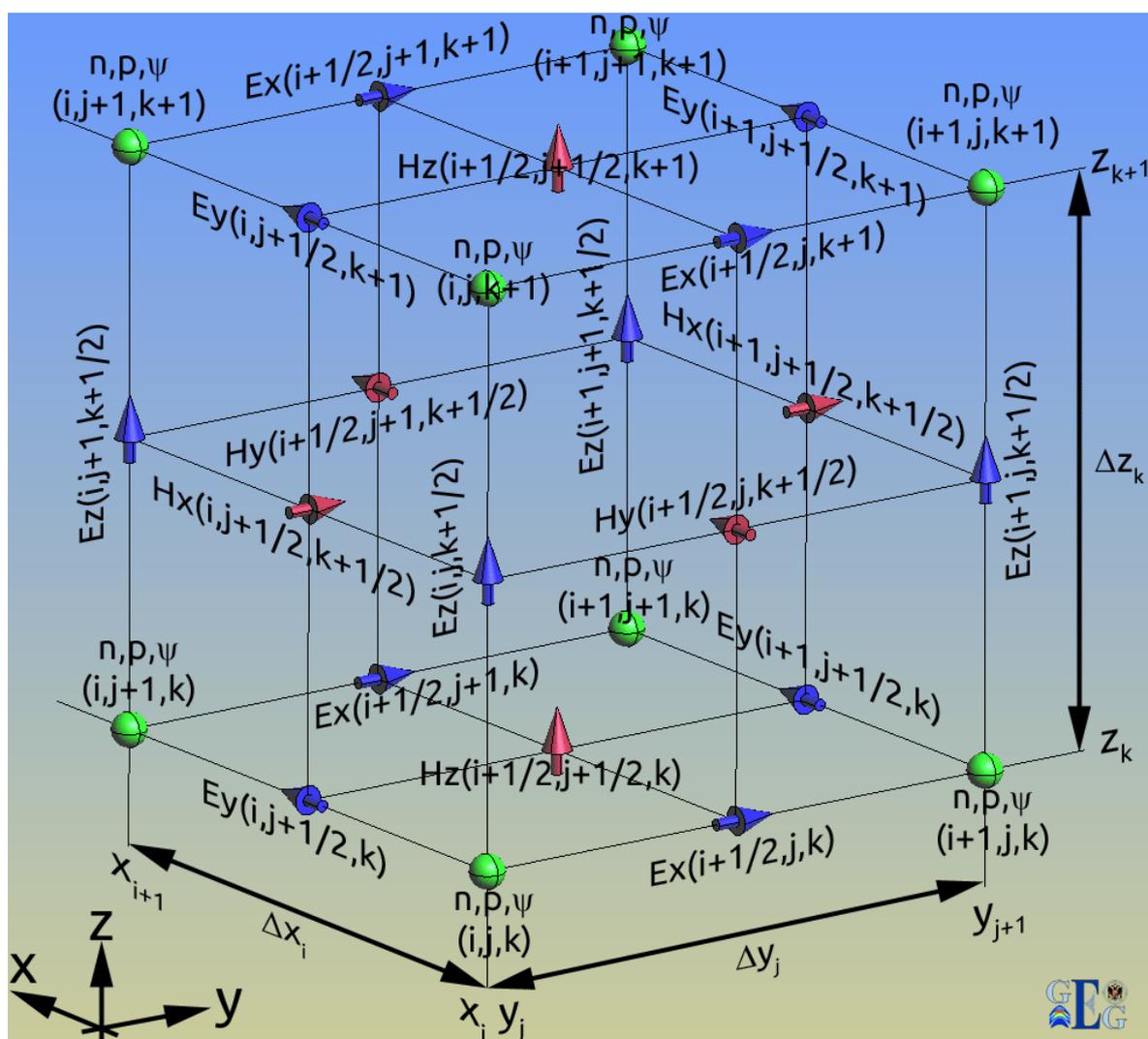


Figura 2.1: Celda de Yee modificada.

Resolver numéricamente un conjunto de ecuaciones diferenciales en derivadas par-

ciales, implica resolver sobre un mallado, que en el caso de FDTD son hexaedros sobre los que se definen las magnitudes estudiadas³⁴⁻⁴⁰. Como se puede ver en la figura 2.1, la resolución numérica por diferencias finitas del estado estacionario queda sobre las esquinas de las celdas de Yee, y es compatible con las elecciones originales de Yee para el transitorio, que explicaremos en el capítulo posterior.

El criterio para asignar magnitudes sobre la celda de la figura no es nuevo y ya ha sido usado en la literatura por diferentes autores⁷²⁻⁷⁵.

En el apartado siguiente se discretizará el sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (2.17, 2.18, 2.19), cuya solución se corresponde con la del estado estacionario. En un dominio computacional mallado con celdas de Yee, la solución sobre este mallado viene dada por las magnitudes del sistema de ecuaciones diferenciales que se localizan en las esquinas de la celda de Yee. Además, en el apartado siguiente se explica la notación de la celda de Yee, que aquí se presenta. No es sólo un elemento fundamental de FDTD tradicional, sino también de los métodos híbridos que en esta tesis se han desarrollado.

2.3. Aproximación por diferencias finitas del sistema de ecuaciones diferenciales

La solución numérica del sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (2.17, 2.18, 2.19) empleando el modelo de difusión y arrastre (2.20,2.21) para las corrientes, se ha resuelto numéricamente por diferencias finitas. Se ha escogido este método por su coherencia geométrica con el empleado en la simulación de los procesos transitorios, FDTD³⁴⁻⁴⁰. Dado que todos los procesos transitorios se han simulado por diferencias finitas en el dominio del tiempo, (FDTD³⁴⁻⁴⁰) la forma más natural de proporcionar un punto de partida, una condición o estado inicial, es mediante una solución del problema electrostático utilizando también diferencias finitas. La figura 2.2 muestra la notación empleada en el método numérico. Este método permite aproximar la derivada de diferentes formas. De todas ellas se ha empleado la derivada central de primer orden que es definida en el apartado I.4 del apéndice I. Apoyándonos en la notación de la figura 2.2, donde es fácil identificar $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$, $\Delta x_{i-1} = x_i - x_{i-1}$, $\Delta y_j = y_{j+1} - y_j$, $\Delta y_{j-1} = y_j - y_{j-1}$, $\Delta z_k = z_{k+1} - z_k$ y $\Delta z_{k-1} = z_k - z_{k-1}$; se puede definir δ_{x_i} , δ_{y_j} y δ_{z_k}

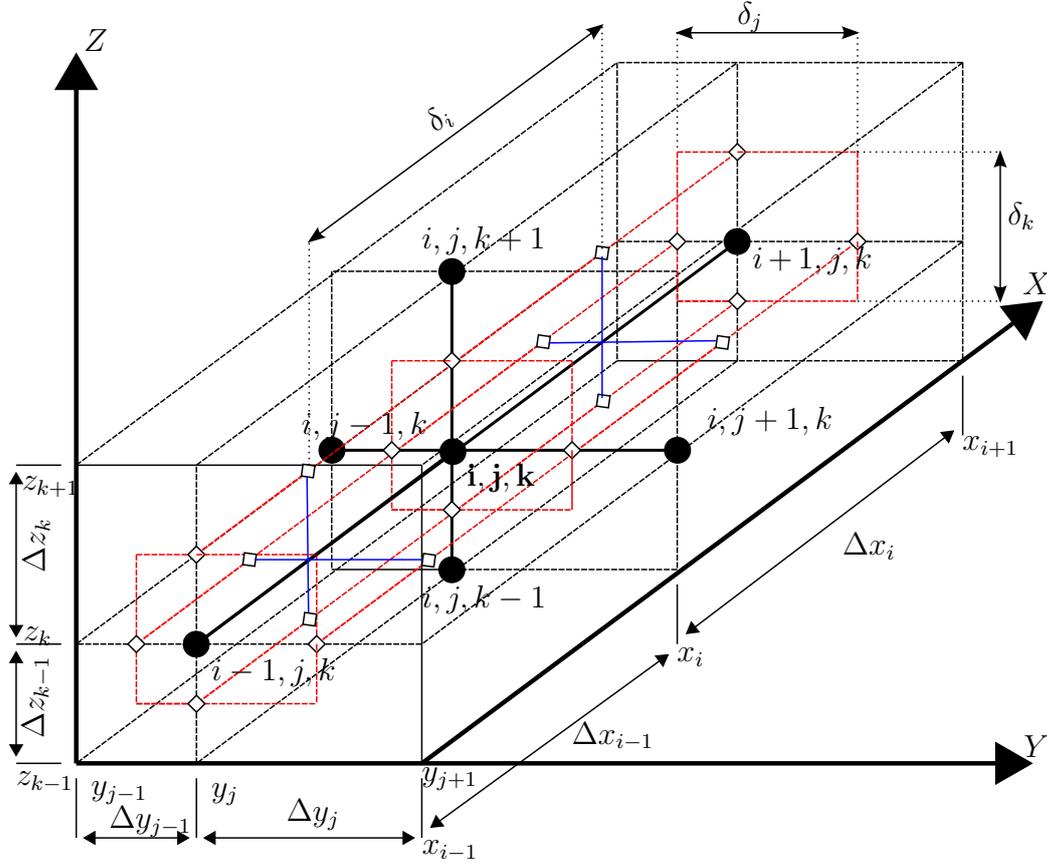


Figura 2.2: Notación adoptada para las diferencias finitas.

como sigue:

$$\delta_{x_i} = \frac{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}{2} \quad (2.25)$$

$$\delta_{y_j} = \frac{\Delta y_j + \Delta y_{j-1}}{2} \quad (2.26)$$

$$\delta_{z_k} = \frac{\Delta z_k + \Delta z_{k-1}}{2}$$

Esta notación aplicada al potencial electrostático ψ , permite expresarlo haciendo uso de subíndices como:

$$\begin{aligned} \psi_{i,j,k} &= \psi(x_i, y_j, z_k) & \psi_{i+\frac{1}{2},j,k} &= \psi\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}, y_j, z_k\right) \\ \psi_{i,j+\frac{1}{2},k} &= \psi\left(x_i, \frac{y_j + y_{j+1}}{2}, z_k\right) & \psi_{i,j,k+\frac{1}{2}} &= \psi\left(x_i, y_j, \frac{z_k + z_{k+1}}{2}\right) \end{aligned}$$

En las definiciones anteriores se introduce el concepto de vecino próximo, cuando dado un nodo del mallado cualquiera de índices (i, j, k) es posible encontrar otro nodo contiguo al situado en los índices (i, j, k) incrementando o disminuyendo en una sola unidad un solo índice. De este modo, los vecinos próximos del nodo (i, j, k) son los ubicado en $(i \pm 1, j, k)$, $(i, j \pm 1, k)$ y $(i, j, k \pm 1)$, seis en total.

Aplicando al sistema de ecuaciones (2.17, 2.18, 2.19) la derivada central de primer orden definida en I.4 y la notación de subíndices también definida, que es extensible a la carga y corriente, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales discretizado en diferencias:

$$\left(\frac{\partial_x \psi_{i+\frac{1}{2},j,k} - \partial_x \psi_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta_{x_i}} + \frac{\partial_y \psi_{i,j+\frac{1}{2},k} - \partial_y \psi_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\delta_{y_j}} + \frac{\partial_z \psi_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \partial_z \psi_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta_{z_k}} \right) + \frac{q}{\varepsilon} (p0_{i,j,k} + C_{i,j,k} - n0_{i,j,k}) = 0 \quad (2.27)$$

$$\frac{J_{n0x}|_{i+\frac{1}{2},j,k} - J_{n0x}|_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta_{x_i}} + \frac{J_{n0y}|_{i,j+\frac{1}{2},k} - J_{n0y}|_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\delta_{y_j}} + \frac{J_{n0z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} - J_{n0z}|_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta_{z_k}} - R0_{i,j,k} = 0 \quad (2.28)$$

$$\frac{J_{p0x}|_{i+\frac{1}{2},j,k} - J_{p0x}|_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta_{x_i}} + \frac{J_{p0y}|_{i,j+\frac{1}{2},k} - J_{p0y}|_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\delta_{y_j}} + \frac{J_{p0z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} - J_{p0z}|_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta_{z_k}} + R0_{i,j,k} = 0 \quad (2.29)$$

El sistema de ecuaciones diferenciales obtenido todavía no contiene en ningún lugar el modelo de difusión y arrastre. Pero antes de introducir el modelo de las corrientes y derivar un sistema de ecuaciones definitivo que sea tratable en un algoritmo computacional, vamos a desarrollar más la ecuación 2.27. Para ello, mostramos a partir de la derivada central de primer orden como aproximar la derivada con la notación definida: $\partial_x f_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{f_{i+1,j,k} - f_{i,j,k}}{\Delta x_i} + O(\Delta x_i^2)$, $\partial_y f_{i,j+\frac{1}{2},k} = \frac{f_{i,j+1,k} - f_{i,j,k}}{\Delta y_j} + O(\Delta y_j^2)$, $\partial_z f_{i,j,k+\frac{1}{2}} = \frac{f_{i,j,k+1} - f_{i,j,k}}{\Delta z_k} + O(\Delta z_k^2)$, y las empleamos para reescribir la ecuación 2.27 de un modo computacionalmente tratable:

$$\left(\frac{\frac{\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{\Delta x_i} - \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k}}{\Delta x_{i-1}}}{\delta_{x_i}} + \frac{\frac{\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}}{\Delta y_j} - \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}}{\Delta y_{j-1}}}{\delta_{y_j}} + \frac{\frac{\psi_{i,j,k+1} - \psi_{i,j,k}}{\Delta z_k} - \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1}}{\Delta z_{k-1}}}{\delta_{z_k}} \right) + \frac{q}{\varepsilon} (p0_{i,j,k} + C_{i,j,k} - n0_{i,j,k}) = 0 \quad (2.30)$$

32 2. Algoritmos de simulación del estado estacionario de una antena fotoconductiva.

Sólo resta introducir los modelos de las corrientes (2.20,2.21) en las ecuaciones 2.28 y 2.29. Para ello y por claridad, trabajaremos en una sola dimensión y luego extrapolaremos los resultados de nuestros cálculos a tres dimensiones. Considerando un camino en la dirección X entre el nodo $x = x_i$ y el nodo $x = x_{i+1}$, y desarrollando la corriente en torno al punto medio del intervalo $[x_i, x_{i+1}]$, es decir, en el punto $x = x_i + \frac{\Delta x_i}{2} = x_{i+\frac{1}{2}}$ en serie de Taylor⁷⁶, tendremos:

$$J_{nx}(x \in [x_i, x_{i+1}]) = J_{nx}|_{i+\frac{1}{2}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial^n J_{nx}|_{x=x_{i+\frac{1}{2}}}}{n!} \left(x - x_{i+\frac{1}{2}}\right)^n \quad (2.31)$$

Prestando atención a la ecuación diferencial discretizada 2.28, sólo se considera el primer término del desarrollo 2.31. Igualando pues la sumatoria con los restantes términos de la aproximación unidimensional de la corriente e igualando con el modelo de la ecuación de difusión y arrastre 2.20 tendremos la siguiente ecuación diferencial:

$$-q\mu_{nx} (n\partial_x\psi - V_T\partial_x n) = J_{nx}|_{i+\frac{1}{2}}, \quad (2.32)$$

que encuentra solución en la expresión:

$$n(x \in [x_i, x_{i+1}]) = Ce^{\frac{\psi(x)}{V_T}} - \Delta x_i \frac{J_{nx}|_{i+\frac{1}{2}}}{q\mu_n|_{i+\frac{1}{2}}} \left(\frac{1 - e^{\frac{\psi(x)}{V_T}}}{\Delta\psi_i} \right) + O(\Delta x_i^3). \quad (2.33)$$

Para comprobarlo basta con sustituir la expresión 2.33 en 2.32 y despreciar todos los términos que vayan con la derivada de la corriente $\partial_x^n J_{nx}|_{x=x_{i+\frac{1}{2}}}$. Esta relación exponencial entre la carga y el potencial sugiere claramente una solución de la densidad efectiva de estados en la banda de conducción⁶⁹, es decir, la integral de Fermi de orden $\frac{1}{2}$, de tipo estadística de Boltzmann y no contempla pues la posibilidad de semiconductor degenerado. Esta solución es compatible con la deducción del modelo de las corrientes que como ya hemos contado no fue deducido para contemplar este supuesto, casos en los que el semiconductor presente degeneración.

Haciendo una aproximación más, la de potencial lineal entre vecinos próximos como ilustra la figura 2.3,

$$\psi(x \in [x_i, x_{i+1}]) = \frac{\Delta\psi_i}{\Delta x_i}(x - x_i) + \psi_i \quad (2.34)$$

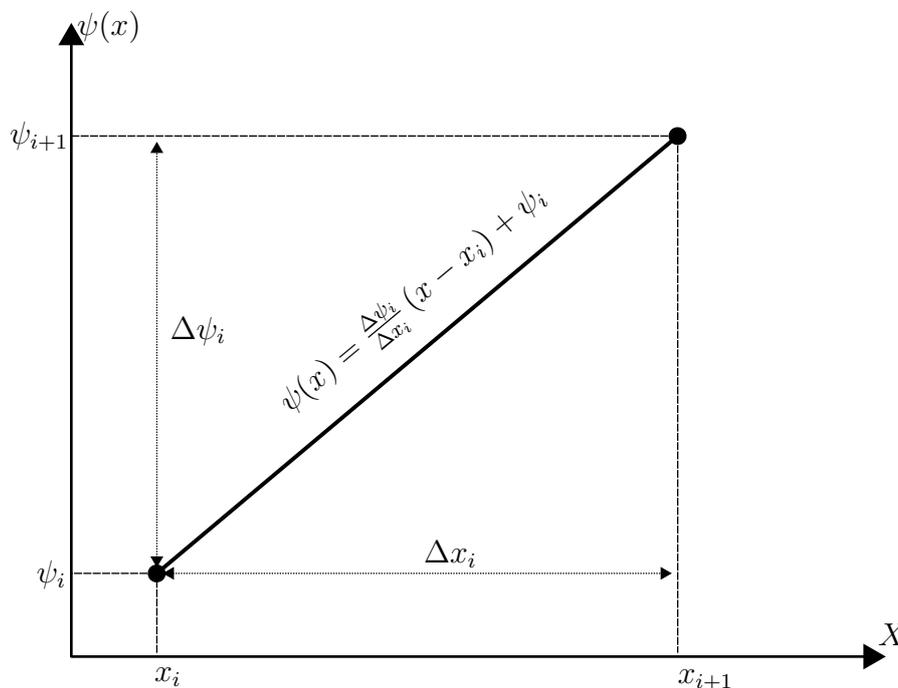


Figura 2.3: Aproximación lineal del potencial entre vecinos próximos o nodos.

donde $\Delta \psi_i = \psi_{i+1} - \psi_i$ y aplicando la condición de contorno sobre 2.33 de $n(x_i) = n_i$ y $n(x_{i+1}) = n_{i+1}$ se llega al par de ecuaciones:

$$n_i = C e^{\frac{\psi_i}{V_T}} - \Delta x_i \frac{J_{nx}|_{i+\frac{1}{2}}}{q\mu_n|_{i+\frac{1}{2}}} \left(\frac{1 - e^{\frac{\psi_i}{V_T}}}{\Delta \psi_i} \right) \quad (2.35)$$

$$n_{i+1} = C e^{\frac{\psi_{i+1}}{V_T}} - \Delta x_i \frac{J_{nx}|_{i+\frac{1}{2}}}{q\mu_n|_{i+\frac{1}{2}}} \left(\frac{1 - e^{\frac{\psi_{i+1}}{V_T}}}{\Delta \psi_i} \right) \quad (2.36)$$

Notando $\Omega = \Delta x_i \frac{J_{nx}|_{i+\frac{1}{2}}}{q\mu_n|_{i+\frac{1}{2}}}$ y despejando C, en ambas ecuaciones (2.35,2.36) e igualando para eliminar C se tiene la ecuación:

$$\left(n_{i+1} + \Omega \left(\frac{1 - e^{\frac{\psi_{i+1}}{V_T}}}{\Delta \psi_i} \right) \right) e^{-\frac{\psi_{i+1}}{V_T}} = \left(n_i + \Omega \left(\frac{1 - e^{\frac{\psi_{i+1}}{V_T}}}{\Delta \psi_i} \right) \right) e^{-\frac{\psi_i}{V_T}}$$

34 2. Algoritmos de simulación del estado estacionario de una antena fotoconduactiva.

Ecuación de la que se despeja despeja Ω . Además se emplea la llamada función de Bernoulli,

$$B(x) = \frac{x}{e^x - 1}, \quad (2.37)$$

para agrupar términos, y esto nos permite expresar $\Omega = V_T \left(B \left(\frac{\Delta\psi_i}{V_T} \right) n_{i+1} - B \left(-\frac{\Delta\psi_i}{V_T} \right) n_i \right)$. De Ω se tiene el valor de la corriente en la mitad del camino entre los nodos vecinos próximos x_i y x_{i+1} . Extrapolando este resultado a tres dimensiones, las corrientes para electrones son,

$$J_{nx}|_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{qV_T\mu_n|_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i} \left(B \left(\frac{\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n_{i+1,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i+1,j,k}}{V_T} \right) n_{i,j,k} \right) \quad (2.38)$$

$$J_{nx}|_{i-\frac{1}{2},j,k} = \frac{qV_T\mu_n|_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k}}{V_T} \right) n_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i-1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n_{i-1,j,k} \right) \quad (2.39)$$

$$J_{ny}|_{i,j+\frac{1}{2},k} = \frac{qV_T\mu_n|_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n_{i,j+1,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j+1,k}}{V_T} \right) n_{i,j,k} \right) \quad (2.40)$$

$$J_{ny}|_{i,j-\frac{1}{2},k} = \frac{qV_T\mu_n|_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}}{V_T} \right) n_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n_{i,j-1,k} \right) \quad (2.41)$$

$$J_{nz}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} = \frac{qV_T\mu_n|_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k+1} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n_{i,j,k+1} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k+1}}{V_T} \right) n_{i,j,k} \right) \quad (2.42)$$

$$J_{nz}|_{i,j,k-\frac{1}{2}} = \frac{qV_T\mu_n|_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1}}{V_T} \right) n_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k-1} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n_{i,j,k-1} \right) \quad (2.43)$$

y para huecos,

$$J_{px}|_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{qV_T\mu_p|_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i} \left(B \left(\frac{\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i+1,j,k}}{V_T} \right) p_{i+1,j,k} \right) \quad (2.44)$$

$$J_{px}|_{i-\frac{1}{2},j,k} = \frac{qV_T\mu_p|_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k}}{V_T} \right) p_{i-1,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i-1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p_{i,j,k} \right) \quad (2.45)$$

$$J_{py}|_{i,j+\frac{1}{2},k} = \frac{qV_T\mu_p|_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j+1,k}}{V_T} \right) p_{i,j+1,k} \right) \quad (2.46)$$

$$J_{py}|_{i,j-\frac{1}{2},k} = \frac{qV_T\mu_p|_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}}{V_T} \right) p_{i,j-1,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p_{i,j,k} \right) \quad (2.47)$$

$$J_{pz}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} = \frac{qV_T\mu_p|_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k+1} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k+1}}{V_T} \right) p_{i,j,k+1} \right) \quad (2.48)$$

$$J_{pz}|_{i,j,k-\frac{1}{2}} = \frac{qV_T\mu_p|_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1}}{V_T} \right) p_{i,j,k-1} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k-1} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p_{i,j,k} \right) \quad (2.49)$$

Existen algunas consideraciones a tener en cuenta en el cálculo de estas corrientes, concretamente en los puntos medios de los caminos entre nodos. Al aproximar el valor de la derivada de las corrientes por la derivada central de primer orden I.4 de las mismas en las ecuaciones 2.28 y 2.29, lo que hemos supuesto es que los valores de las corrientes son constantes en los intervalos, es decir, entre nodos vecinos próximos. Esta misma hipótesis se hizo con la derivada del potencial para pasar de la ecuación 2.27 a la ecuación 2.30, lo que es coherente con el hecho de que el potencial en el cálculo de las corrientes sea lineal entre vecinos próximos. Si la variación del potencial es lineal, su derivada, la pendiente de la ecuación de la recta $\frac{\Delta\psi_i}{\Delta x_i}$ es una constante en cada intervalo x_i, x_{i+1} . Luego entre dos vecinos próximos el campo electrostático es constante, y sufre pequeñas discontinuidades de salto en los nodos del mallado.

Calculadas las corrientes 2.38-2.49, las ecuaciones 2.28 y 2.29 pueden ser reescritas de un modo más conveniente para ser resueltas computacionalmente. Así mismo, mediante este proceso de cálculo que emplea la función de Bernoulli y elimina las corrientes, se obtienen tres ecuaciones diferenciales en derivadas parciales con tres incógnitas, el potencial eléctrico, la densidad volúmica de carga debida a huecos y la debida a electrones.

$$\begin{aligned} & \frac{\mu_n|_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \delta x_i} \left(B \left(\frac{\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n0_{i+1,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i+1,j,k}}{V_T} \right) n0_{i,j,k} \right) \\ & - \frac{\mu_n|_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \delta x_i} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k}}{V_T} \right) n0_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i-1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n0_{i-1,j,k} \right) \\ & + \frac{\mu_n|_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \delta y_j} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n0_{i,j+1,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j+1,k}}{V_T} \right) n0_{i,j,k} \right) \\ & - \frac{\mu_n|_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \delta y_j} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}}{V_T} \right) n0_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n0_{i,j-1,k} \right) \\ & + \frac{\mu_n|_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \delta z_k} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k+1} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n0_{i,j,k+1} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k+1}}{V_T} \right) n0_{i,j,k} \right) \\ & - \frac{\mu_n|_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \delta z_k} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1}}{V_T} \right) n0_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k-1} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) n0_{i,j,k-1} \right) \\ & - \frac{R0_{i,j,k}}{V_T} = 0 \end{aligned} \quad (2.50)$$

No obstante, tanto en la ecuación de la densidad de portadores de electrones como en la ecuación que presentamos a continuación para describir la concentración de carga por huecos, aparece el término de la tasa de recombinación sin desarrollar, ya que hasta ahora no hemos aclarado ni sus dependencias ni su forma. En el apartado siguiente trataremos este término con más detalle. Además, en ambas ecuaciones aparece el término de la movilidad de los portadores de carga, parámetro fundamental que depende de varias magnitudes relevantes entre las que destaca la intensidad del campo eléctrico. Y esto subraya la dependencia lineal del potencial entre vecinos próximos, que proporciona un valor constante del campo eléctrico, y que a su vez justifica una movilidad constante en el intervalo entre nodos vecinos de primer orden. De esta forma si los valores de las corrientes son constantes en el intervalo de vecinos próximos, eso condiciona también a las movilidades μ_n y μ_p que han de ser constantes en el intervalo entre vecinos próximos. Lo que implica que los modelos de movilidad dependientes del campo eléctrico están obligados a proporcionar un valor constante de la movilidad en el camino entre nodos vecinos próximos.

Estas ecuaciones 2.50 y 2.51 junto con la ecuación 2.30 forman un sistema completo de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, discretizado en los nodos de un mallado de hexaedros que será aplicado sobre la región fotoactiva de la antena.

$$\begin{aligned}
& \frac{\mu_p |_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \delta x_i} \left(B \left(\frac{\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p0_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i+1,j,k}}{V_T} \right) p0_{i+1,j,k} \right) \\
& - \frac{\mu_p |_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \delta x_i} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k}}{V_T} \right) p0_{i-1,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i-1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p0_{i,j,k} \right) \\
& + \frac{\mu_p |_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \delta y_j} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p0_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j+1,k}}{V_T} \right) p0_{i,j+1,k} \right) \\
& - \frac{\mu_p |_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \delta y_j} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}}{V_T} \right) p0_{i,j-1,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p0_{i,j,k} \right) \\
& + \frac{\mu_p |_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \delta z_k} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k+1} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p0_{i,j,k} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k+1}}{V_T} \right) p0_{i,j,k+1} \right) \\
& - \frac{\mu_p |_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \delta z_k} \left(B \left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1}}{V_T} \right) p0_{i,j,k-1} - B \left(\frac{\psi_{i,j,k-1} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) p0_{i,j,k} \right) \\
& + \frac{R0_{i,j,k}}{V_T} = 0
\end{aligned} \tag{2.51}$$

Para resolverlo, abordaremos el apartado de las condiciones de contorno aplicadas sobre el obtenido sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales discretizadas (2.30,2.50,2.51).

2.4. La movilidad de los portadores de carga

La movilidad es un parámetro esencial en el modelado de las corrientes 2.20 y 2.21. Permite llevar el modelo de difusión y arrastre más allá del marco de aplicabilidad dado por la deducción del mismo (sujeto en origen a omisiones y aproximaciones). Los modelos de movilidad permiten tener en cuenta procesos de scattering no elásticos, variaciones espaciales del tiempo de colisión, dependencias del campo eléctrico y del dopado, sobre-disparo, dependencias térmicas...

Existen trabajos que relacionan el dopado y la movilidad para problemas de baja intensidad de campo^{77,78}. En este trabajo contemplamos modelos de movilidad de campo intenso a temperatura constante, y aunque existe una probabilidad no nula de transporte balístico, es tan pequeña, que los modelos escogidos no tienen en cuenta este efecto.

2.4.1. Modelos de movilidad

La movilidad depende del módulo del campo eléctrico y en lo que sigue se presenta un conjunto de modelos de movilidad que son dependientes del mismo. El módulo del campo eléctrico más intenso que experimentará una antena fotoconductiva proviene de la fuente de tensión externa que la polariza. Este hecho, unido a la búsqueda de eficiencia numérica y computacional, restringe el cálculo de la movilidad al estado estacionario. Puesto que la aplicación de un modelo de movilidad en el cálculo numérico del transitorio, para ciertos modelos de movilidad (los de mayor interés), provoca inestabilidades del método numérico y exige reducir el número de Courant³⁴⁻⁴⁰. Además, el efecto de emplear un modelo de movilidad en el proceso transitorio resulta del todo irrelevante. Irrelevancia que aunque no ha sido demostrada de un modo riguroso, si ha sido comprobado con varios ejemplos en los que el tamaño de la malla era más de cien veces menor que el tamaño de los dispositivos simulados.

El módulo del campo eléctrico en los lados de la celda de Yee 2.1

Para determinar el valor de la movilidad en los puntos de interés sobre el mallado, los lados de la celda de Yee de la figura 2.1 donde se definen las componentes del campo eléctrico, es necesario conocer el módulo del campo en esas localizaciones. Para ello, lo que se hace es seguir un proceso de aproximación sucesiva a la solución. Consiste en resolver la ecuación 2.30 en condiciones de equilibrio, es decir, resolver el Laplaciano porque en condiciones de equilibrio $(p0_{i,j,k} + C_{i,j,k} - n0_{i,j,k}) = 0$. Cuando se ha resuelto el Laplaciano, usando la relación entre potencial y campo eléctrico $\vec{E}_0(\vec{r}) = -\nabla\psi(\vec{r})$, se calcula el módulo del campo eléctrico en los nodos o esquinas de las celdas de Yee como sigue:

$$|\vec{E}_0|_{i,j,k} = \sqrt{\left(\frac{\psi_{i-1,j,k} - \psi_{i+1,j,k}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}\right)^2 + \left(\frac{\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j+1,k}}{\Delta y_{j-1} + \Delta y_j}\right)^2 + \left(\frac{\psi_{i,j,k-1} - \psi_{i,j,k+1}}{\Delta z_{k-1} + \Delta z_k}\right)^2} \quad (2.52)$$

Una vez que se tiene el valor del módulo del campo en los nodos del mallado o vértices de las celdas de Yee, el siguiente paso es interpolar para extender el módulo del campo a los lados de la celda. Son posibles dos tipos de interpolación, según el modelo de movilidad usado sea paralelo o volúmico. El caso más simple es el paralelo, ya que en este caso sólo estamos interesados en conocer el módulo de campo eléctrico. Para este caso se definen los módulos del campo por componentes $E_{0x//}(\vec{r})$, $E_{0y//}(\vec{r})$ y $E_{0z//}(\vec{r})$ como:

$$E_{0x//}|_{i,j,k} = \frac{1}{2} \left(|\vec{E}_0|_{i,j,k} + |\vec{E}_0|_{i+1,j,k} \right) \quad (2.53)$$

$$E_{0y//}|_{i,j,k} = \frac{1}{2} \left(|\vec{E}_0|_{i,j,k} + |\vec{E}_0|_{i,j+1,k} \right) \quad (2.54)$$

$$E_{0z//}|_{i,j,k} = \frac{1}{2} \left(|\vec{E}_0|_{i,j,k} + |\vec{E}_0|_{i,j,k+1} \right) \quad (2.55)$$

Con estos valores del módulo del campo eléctrico se determina en primera aproximación el valor de la movilidad de tipo paralelo de acuerdo a uno de los modelos que se explican en los siguientes puntos con las ecuaciones 2.59 y 2.63. Después, y usando esta movilidad, se resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (2.30,2.50,2.51). Y definitivamente con la solución del sistema se recalcula la movilidad volviendo a emplear

uno de los modelos expresados por 2.59 o 2.63 según haya sido la elección.

$$E_{x0\perp}|_{i,j,k} = \frac{1}{2} \left[\sqrt{\left(\frac{\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j+1,k}}{\Delta y_{j-1} + \Delta y_j}\right)^2 + \left(\frac{\psi_{i,j,k-1} - \psi_{i,j,k+1}}{\Delta z_{k-1} + \Delta z_k}\right)^2} \right. \\ \left. + \sqrt{\left(\frac{\psi_{i+1,j-1,k} - \psi_{i+1,j+1,k}}{\Delta y_{j-1} + \Delta y_j}\right)^2 + \left(\frac{\psi_{i+1,j,k-1} - \psi_{i+1,j,k+1}}{\Delta z_{k-1} + \Delta z_k}\right)^2} \right] \quad (2.56)$$

Cuando el modelo de movilidad es volúmico, como es el caso de los modelos descritos por las ecuaciones 2.68 y 2.71, además de conocer el módulo del campo en los lados de la celda de Yee, necesitamos conocer el módulo de las componentes perpendiculares del campo eléctrico en esos puntos. Esto se hace mediante el potencial eléctrico como se ilustra en las ecuaciones 2.56-2.58.

$$E_{y0\perp}|_{i,j,k} = \frac{1}{2} \left[\sqrt{\left(\frac{\psi_{i-1,j,k} - \psi_{i+1,j,k}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}\right)^2 + \left(\frac{\psi_{i,j,k-1} - \psi_{i,j,k+1}}{\Delta z_{k-1} + \Delta z_k}\right)^2} \right. \\ \left. + \sqrt{\left(\frac{\psi_{i-1,j+1,k} - \psi_{i+1,j+1,k}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}\right)^2 + \left(\frac{\psi_{i,j+1,k-1} - \psi_{i,j+1,k+1}}{\Delta z_{k-1} + \Delta z_k}\right)^2} \right] \quad (2.57)$$

$$E_{z0\perp}|_{i,j,k} = \frac{1}{2} \left[\sqrt{\left(\frac{\psi_{i-1,j,k} - \psi_{i+1,j,k}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}\right)^2 + \left(\frac{\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j+1,k}}{\Delta y_{j-1} + \Delta y_j}\right)^2} \right. \\ \left. + \sqrt{\left(\frac{\psi_{i-1,j,k+1} - \psi_{i+1,j,k+1}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}\right)^2 + \left(\frac{\psi_{i,j-1,k+1} - \psi_{i,j+1,k+1}}{\Delta y_{j-1} + \Delta y_j}\right)^2} \right] \quad (2.58)$$

Al igual que antes, en los lados del dominio computacional, simplemente se interpola apropiadamente los valores dados por 2.56-2.58.

Modelo de de Caughey^{78,79}

Es un modelo de movilidad de campo paralelo a la dirección de transporte de los portadores de carga. La ecuación del modelo es:

$$f_{Caughey}(\mu_0, E_0(\vec{r}), V_{Sat}, \beta) = \frac{\mu_0}{\left(1 + \left(\frac{\mu_0(E_0(\vec{r}))}{V_{Sat}}\right)^\beta\right)^{\frac{1}{\beta}}}, \quad (2.59)$$

donde μ_0 es la movilidad de los portadores de carga en ausencia de campo eléctrico, $E_0(\vec{r})$ es el módulo del campo electrostático localizado en el punto del espacio donde se calcula la movilidad, V_{Sat} es la velocidad de saturación de los portadores de carga y β es un parámetro que depende exclusivamente del material semiconductor del que está hecha la antena.

La velocidad de saturación se calcula por defecto con un modelo dependiente de la temperatura de la antena con la expresión:

$$fV_{Sat}(\alpha, \theta, T_L, T_{ref}) = \frac{\alpha}{1 + \theta e^{\frac{T_L}{T_{ref}}}} \quad (2.60)$$

La movilidad para los electrones de acuerdo al modelo es:

$$\begin{aligned} V_{nSat} &= fV_{Sat}(\alpha_n, \theta_n, T_L, T_{ref,n}) \\ \bar{\mu}_n(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} f_{Caughey}(\mu_{n0}, E_{0x//}(\vec{r}), V_{nSat}, \beta_n) \\ f_{Caughey}(\mu_{n0}, E_{0y//}(\vec{r}), V_{nSat}, \beta_n) \\ f_{Caughey}(\mu_{n0}, E_{0z//}(\vec{r}), V_{nSat}, \beta_n) \end{pmatrix}^T. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Y para los huecos es:

$$\begin{aligned} V_{pSat} &= fV_{Sat}(\alpha_p, \theta_p, T_L, T_{ref,p}) \\ \bar{\mu}_p(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} f_{Caughey}(\mu_{p0}, E_{0x//}(\vec{r}), V_{pSat}, \beta_p) \\ f_{Caughey}(\mu_{p0}, E_{0y//}(\vec{r}), V_{pSat}, \beta_p) \\ f_{Caughey}(\mu_{p0}, E_{0z//}(\vec{r}), V_{pSat}, \beta_p) \end{pmatrix}^T. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Con este modelo la movilidad cae cuando el campo eléctrico es más intenso. La explicación está en un aumento de las colisiones. Cuando los portadores de carga son acelerados por un campo eléctrico externo, éstos incrementan su velocidad y la probabilidad de interacción con los núcleos atómicos de la red cristalina, así como con otros potenciales locales presentes en el semiconductor, reduciendo su movilidad.

Modelo de Wien⁸⁰

El modelo de movilidad de Wien es también un modelo de movilidad paralelo que está basado en el de Caughey⁷⁹:

$$f_{Wien}(\mu_0, E_0(\vec{r}), V_{Sat}, \beta) = \frac{2\mu_0}{1 + \left(1 + \left(\frac{2\mu_0(E_0(\vec{r}))}{V_{Sat}}\right)^\beta\right)^{\frac{1}{\beta}}} \quad (2.63)$$

La movilidad para electrones es:

$$\begin{aligned} V_{nSat} &= fV_{Sat}(\alpha_n, \theta_n, T_L, T_{ref,n}) \\ \bar{\mu}_n(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} f_{Wien}(\mu_{n0}, E_{0x//}(\vec{r}), V_{nSat}, \beta_n) \\ f_{Wien}(\mu_{n0}, E_{0y//}(\vec{r}), V_{nSat}, \beta_n) \\ f_{Wien}(\mu_{n0}, E_{0z//}(\vec{r}), V_{nSat}, \beta_n) \end{pmatrix}^T. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Y para huecos es:

$$\begin{aligned} V_{pSat} &= fV_{Sat}(\alpha_p, \theta_p, T_L, T_{ref,p}) \\ \bar{\mu}_p(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} f_{Wien}(\mu_{p0}, E_{0x//}(\vec{r}), V_{pSat}, \beta_p) \\ f_{Wien}(\mu_{p0}, E_{0y//}(\vec{r}), V_{pSat}, \beta_p) \\ f_{Wien}(\mu_{p0}, E_{0z//}(\vec{r}), V_{pSat}, \beta_p) \end{pmatrix}^T. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Con este modelo se han reproducido resultados experimentales, cuando se ha usado como velocidad de saturación la sugerida en la literatura⁸¹ para el LT-GaAs.

De los diferentes procesos de scattering 2.4 que tienen lugar en el transporte de portadores de carga, los modelos paralelos tienen la dualidad de funcionar bien entre la transición desde bajo campo a campo intenso, contemplando los ajustes de scattering significativos: I1, I2, III2, III3 mostrados en el esquema de la figura 2.4. La mayoría de las antenas fotoconductoras estudiadas en esta tesis están polarizadas por un campo intenso.

Modelo de Yamaguchi^{78,82}

El modelo de Yamaguchi es de tipo volúmico, pero para sustratos delgados, es decir dispositivos cuasi-bidimensionales. En este modelo se parte de una movilidad de portadores de carga en ausencia de campo dependiente de la concentración de impurezas o

dopado, gobernada por la expresión,

$$\mu_C(\mu_{Yama}, C(\vec{r}), S_{Yama}, N_{ref}) = \mu_{Yama} \left(1 + \frac{C(\vec{r})}{\frac{C(\vec{r})}{S_{Yama}} + N_{ref}} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.66)$$

A partir de esta movilidad en ausencia de campo $\mu_C(\mu_{Yama}, C(\vec{r}), S_{Yama}, N_{ref})$ se determina la movilidad de campo perpendicular con la expresión,

$$\mu_{w\perp}(\mu_C(\vec{r}), a_{SYama}, E_{w0\perp}(\vec{r})) = \mu_C(\vec{r}) (1 + a_{SYama} E_{w0\perp}(\vec{r}))^{-\frac{1}{2}} \quad (2.67)$$

Con $w = x, y, z$ y donde a_{SYama} es un parámetro del modelo que depende del tipo de portador de carga y del material semiconductor del que está hecha la antena.

A partir de esta expresión para $\mu_{w\perp}$ se tiene el modelo de movilidad de Yamaguchi:

$$\mu_{w\perp} \left[1 + \left(\frac{\mu_{w\perp} E_{0w}(\vec{r})}{U_{LYama}} \right)^2 \left(G_{Yama} + \frac{\mu_{w\perp} E_{0w}(\vec{r})}{U_{LYama}} \right)^{-1} + \left(\frac{\mu_{w\perp} E_{0w}(\vec{r})}{V_{Sat,Yama}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} = f_{w,Yamaguchi}(\mu_{w\perp}, E_{0w}(\vec{r}), U_{LYama}, G_{Yama}, V_{Sat,Yama}) \quad (2.68)$$

Donde U_{LYama} , G_{Yama} y $V_{Sat,Yama}$ son parámetros del modelo que dependen del tipo de portador de carga y del material semiconductor con el que está hecha la antena. $V_{Sat,Yama}$ es la velocidad de saturación de los portadores de carga y es obtenida por ajuste de datos experimentales para cada material.

Empleando este modelo de Yamaguchi, la movilidad de los electrones es:

$$\begin{aligned} \mu_{nC}(\vec{r}) &= \mu_C(\mu_{n,Yama}, C(\vec{r}), S_{n,Yama}, N_{n,ref}) \\ \mu_{nx\perp}(\vec{r}) &= \mu_{x\perp}(\mu_{nC}(\vec{r}), a_{Sn,Yama}, E_{x0\perp}(\vec{r})) \\ \mu_{ny\perp}(\vec{r}) &= \mu_{y\perp}(\mu_{nC}(\vec{r}), a_{Sn,Yama}, E_{y0\perp}(\vec{r})) \\ \mu_{nz\perp}(\vec{r}) &= \mu_{z\perp}(\mu_{nC}(\vec{r}), a_{Sn,Yama}, E_{z0\perp}(\vec{r})) \\ \bar{\mu}_n(\vec{r}) &= \left(\begin{array}{l} f_{x,Yamaguchi}(\mu_{nx\perp}(\vec{r}), E_{0x}(\vec{r}), U_{Ln,Yama}, G_{n,Yama}, V_{n,Sat,Yama}) \\ f_{y,Yamaguchi}(\mu_{ny\perp}(\vec{r}), E_{0y}(\vec{r}), U_{Ln,Yama}, G_{n,Yama}, V_{n,Sat,Yama}) \\ f_{z,Yamaguchi}(\mu_{nz\perp}(\vec{r}), E_{0z}(\vec{r}), U_{Ln,Yama}, G_{n,Yama}, V_{n,Sat,Yama}) \end{array} \right)^T \end{aligned} \quad (2.69)$$

Y de los huecos:

$$\begin{aligned}
\mu_{pC}(\vec{r}) &= \mu_C(\mu_{p,Yama}, C(\vec{r}), S_{p,Yama}, N_{p,ref}) \\
\mu_{px\perp}(\vec{r}) &= \mu_{x\perp}(\mu_{pC}(\vec{r}), a_{Sp,Yama}, E_{x0\perp}(\vec{r})) \\
\mu_{py\perp}(\vec{r}) &= \mu_{y\perp}(\mu_{pC}(\vec{r}), a_{Sp,Yama}, E_{y0\perp}(\vec{r})) \\
\mu_{pz\perp}(\vec{r}) &= \mu_{z\perp}(\mu_{pC}(\vec{r}), a_{Sp,Yama}, E_{z0\perp}(\vec{r})) \\
\bar{\mu}_p(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} f_{x,Yamaguchi}(\mu_{px\perp}(\vec{r}), E_{0x}(\vec{r}), Ul_{p,Yama}, G_{p,Yama}, V_{p,Sat,Yama}) \\ f_{y,Yamaguchi}(\mu_{py\perp}(\vec{r}), E_{0y}(\vec{r}), Ul_{p,Yama}, G_{p,Yama}, V_{p,Sat,Yama}) \\ f_{z,Yamaguchi}(\mu_{pz\perp}(\vec{r}), E_{0z}(\vec{r}), Ul_{p,Yama}, G_{p,Yama}, V_{p,Sat,Yama}) \end{pmatrix}^T \quad (2.70)
\end{aligned}$$

Modelo de Lombardi^{78,83}

De todos los modelos de movilidad empleados, el que presenta mayor complejidad es éste. Es un modelo de movilidad volúmico. El modelo en sí, es una combinación de acuerdo a la regla de Matthiessen⁸⁴ de tres movilidades distintas que obedecen a fenómenos físicos distintos. La ecuación que expresa esta movilidad es:

$$f_{Lombardi}(\mu_{AC}, \mu_b, \mu_{sr}) = \frac{1}{\frac{1}{\mu_{AC}} + \frac{1}{\mu_b} + \frac{1}{\mu_{sr}}} \quad (2.71)$$

Donde μ_{AC} es la movilidad limitada por scattering con fonones acústicos, μ_{sr} es la movilidad debida a los factores de rugosidad de la superficie y μ_b es la movilidad por fonones ópticos. Dado el material empleado en las antenas simuladas, el término más importante de este modelo es μ_b de los portadores de carga limitada como se ha dicho por scattering con fonones ópticos. Como se puede ver, este modelo de la movilidad extiende claramente el modelo de las corrientes de difusión y arrastre más allá de su marco de aplicación. Comenzaremos por la expresión de μ_{AC} que es dependiente del módulo de las componentes perpendiculares del campo eléctrico:

$$\mu_{w,AC}(\beta, E_{w0\perp}(\vec{r}), \varsigma, \Xi, C(\vec{r}), \tau, T_L, \Theta) = \frac{\beta}{(E_{w0\perp}(\vec{r}))^\varsigma} + \frac{\Xi(C(\vec{r}))^\tau}{T_L(E_{w0\perp}(\vec{r}))^\Theta} \quad (2.72)$$

Con $w = x, y, z$ y donde $E_{w0\perp}(\vec{r})$ es el módulo de las componentes perpendiculares del campo eléctrico a la dirección elegida, T_L es la temperatura de la antena, y $C(\vec{r})$ es la

concentración de impurezas presente en la zona fotoactiva del semiconductor de la antena. Los demás parámetros β , ς , Ξ , τ , y Θ , son dependientes del material semiconductor. El sub-modelo de la movilidad debida al factor de rugosidad de la superficie es:

$$\mu_{w, sr}(\vartheta, E_{w0\perp}(\vec{r}), \kappa) = \frac{\vartheta}{(E_{w0\perp}(\vec{r}))^\kappa}. \quad (2.73)$$

Donde ϑ , y κ son parámetros que dependen no sólo del material, sino del procedimiento de uniformidad (pulido) de la superficie fotoactiva.

Finalmente, el sub-modelo de movilidad μ_b viene dado por la ecuación:

$$\mu_b(pC, \mu_0, \mu_1, cS, cr, C(\vec{r}), \alpha, \beta, \gamma) = \mu_0 e^{\frac{-pc}{C(\vec{r})}} + \frac{\mu_{max} \left(\frac{T_L}{300}\right)^{-\gamma} - \mu_0}{1 + \left(\frac{C(\vec{r})}{cr}\right)^\alpha} - \frac{\mu_1}{1 + \left(\frac{cS}{C(\vec{r})}\right)^\beta} \quad (2.74)$$

De este modo se determina la movilidad para electrones:

$$\begin{aligned} \mu_{bN}(\vec{r}) &= \mu_b(pC_n, \mu_{0n}, \mu_{1n}, cS_n, cr_n, C(\vec{r}), \alpha_n, \beta_n, \gamma_n) \\ \mu_{x, AC_n}(\vec{r}) &= \mu_{x, AC}(\beta, E_{x0\perp}(\vec{r}), \varsigma_n, \Xi_n, C(\vec{r}), \tau_n, T_L, \Theta_n) \\ \mu_{x, srN}(\vec{r}) &= \mu_{x, sr}(\vartheta, E_{x0\perp}(\vec{r}), \kappa_n) \\ \mu_{y, AC_n}(\vec{r}) &= \mu_{y, AC}(\beta, E_{y0\perp}(\vec{r}), \varsigma_n, \Xi_n, C(\vec{r}), \tau_n, T_L, \Theta_n) \\ \mu_{y, srN}(\vec{r}) &= \mu_{y, sr}(\vartheta, E_{y0\perp}(\vec{r}), \kappa_n) \\ \mu_{z, AC_n}(\vec{r}) &= \mu_{z, AC}(\beta, E_{z0\perp}(\vec{r}), \varsigma_n, \Xi_n, C(\vec{r}), \tau_n, T_L, \Theta_n) \\ \mu_{z, srN}(\vec{r}) &= \mu_{z, sr}(\vartheta, E_{z0\perp}(\vec{r}), \kappa_n) \\ \bar{\mu}_n(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} f_{Lombardi}(\mu_{x, AC_n}(\vec{r}), \mu_{bN}(\vec{r}), \mu_{x, srN}(\vec{r})) \\ f_{Lombardi}(\mu_{y, AC_n}(\vec{r}), \mu_{bN}(\vec{r}), \mu_{y, srN}(\vec{r})) \\ f_{Lombardi}(\mu_{z, AC_n}(\vec{r}), \mu_{bN}(\vec{r}), \mu_{z, srN}(\vec{r})) \end{pmatrix}^T. \end{aligned} \quad (2.75)$$

Y la de huecos:

$$\begin{aligned} \mu_{bP}(\vec{r}) &= \mu_b(pC_n, \mu_{0n}, \mu_{1n}, cS_n, cr_n, C(\vec{r}), \alpha_n, \beta_n, \gamma_n) \\ \mu_{x, AC_p}(\vec{r}) &= \mu_{x, AC}(\beta, E_{x0\perp}(\vec{r}), \varsigma_p, \Xi_p, C(\vec{r}), \tau_p, T_L, \Theta_p) \\ \mu_{x, srP}(\vec{r}) &= \mu_{x, sr}(\vartheta, E_{x0\perp}(\vec{r}), \kappa_p) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mu_{y,AC_p}(\vec{r}) &= \mu_{y,AC}(\beta, E_{y0\perp}(\vec{r}), \varsigma_p, \Xi_p, C(\vec{r}), \tau_p, T_L, \Theta_p) \\
\mu_{y,srP}(\vec{r}) &= \mu_{y,sr}(\vartheta, E_{y0\perp}(\vec{r}), \kappa_p) \\
\mu_{z,AC_p}(\vec{r}) &= \mu_{z,AC}(\beta, E_{z0\perp}(\vec{r}), \varsigma_p, \Xi_p, C(\vec{r}), \tau_p, T_L, \Theta_p) \\
\mu_{z,srP}(\vec{r}) &= \mu_{z,sr}(\vartheta, E_{z0\perp}(\vec{r}), \kappa_p) \\
\bar{\mu}_p(\vec{r}) &= \left(\begin{array}{l} f_{Lombardi}(\mu_{x,AC_p}(\vec{r}), \mu_{bP}(\vec{r}), \mu_{x,srP}(\vec{r})) \\ f_{Lombardi}(\mu_{y,AC_p}(\vec{r}), \mu_{bP}(\vec{r}), \mu_{y,srP}(\vec{r})) \\ f_{Lombardi}(\mu_{z,AC_p}(\vec{r}), \mu_{bP}(\vec{r}), \mu_{z,srP}(\vec{r})) \end{array} \right)^T. \quad (2.76)
\end{aligned}$$

Tanto el modelo de movilidad de Yamaguchi 2.68 como el de Lombardi 2.71 a pesar de ser volúmicos, de mayor complejidad y con mayores posibilidades descriptivas, desde el punto de vista de fenómenos físicos implicados en el transporte de portadores de carga, no proporcionan resultados mejores que los modelos de movilidad paralela. Entendiendo con esto que reproducen datos experimentales con menor acuerdo e incluso localmente hablando difieren más de las referencias experimentales que modelos de movilidad constante, como se verá en el capítulo 3.

La interpretación que de este hecho hacemos, se basa en la aplicabilidad de dichos métodos volúmicos. En el estudio de MISFETs¹, el transporte de portadores de carga tiene lugar por lo general en la interfaz entre un aislante y el material semiconductor^{56,59}. Pero para que exista transporte, ha de aplicarse una tensión de puerta para inducir el canal de transporte. Ésa tensión de puerta se traduce en un campo electrostático que es perpendicular al transporte de los portadores de carga. De modo que los parámetros que se pueden encontrar en la literatura^{78,82,83} para estos modelos, han sido derivados para estos casos específicos de transporte en MISFETs. La obtención de parámetros apropiados para las antenas fotoconductoras, que describan el verdadero movimiento volúmico de las cargas, es algo que se ha quedado por explorar.

Velocidad de saturación frente a intensidad de campo eléctrico para el LT-GaAs⁸¹

El LT-GaAs es un material ampliamente usado en la fabricación de antenas fotoconductoras, y ha sido escogido como material para simular antenas tanto emisoras como receptoras en este estudio. Las razones son tres: buena movilidad de los portadores de car-

¹MISFET: Metal Insulator Semiconductor Field Effect Transistors

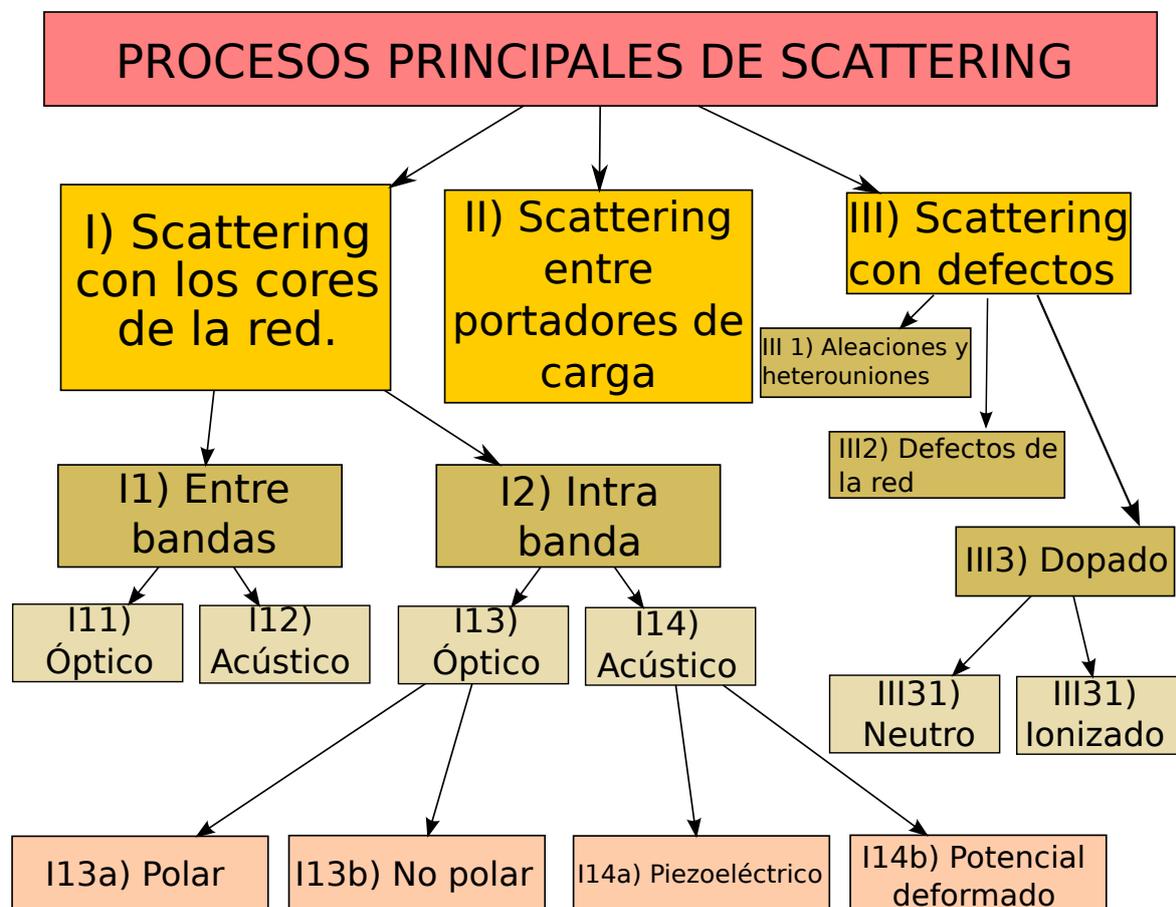


Figura 2.4: Principales procesos microscópicos de scattering⁵⁸. Tenidos en cuenta en modo estadístico (analítico, semiempírico o puramente empírico) explican cualitativamente y modelan cuantitativamente la magnitud macroscópica movilidad de portadores de carga.

ga⁵⁶, tiempo de vida de los portadores de carga de subpicosegundos^{29,30,32,33,85} y una alta resistencia oscura⁸⁶, es decir, muy baja conductividad en ausencia de estímulo lumínico, sobre todo en semiconductores con un nivel bajo de impurezas. Esa es la razón para prestar especial atención a la gráfica 2.5. En ella se relaciona la velocidad de saturación del LT-GaAs con la intensidad del campo eléctrico aplicado y la concentración de impurezas a temperatura ambiente $T = 300K$. Es posible obtener pues, por interpolación, el valor de la velocidad de saturación para un dopado por electrones con $N_d \in [10^{15}, 10^{17}]cm^{-3}$

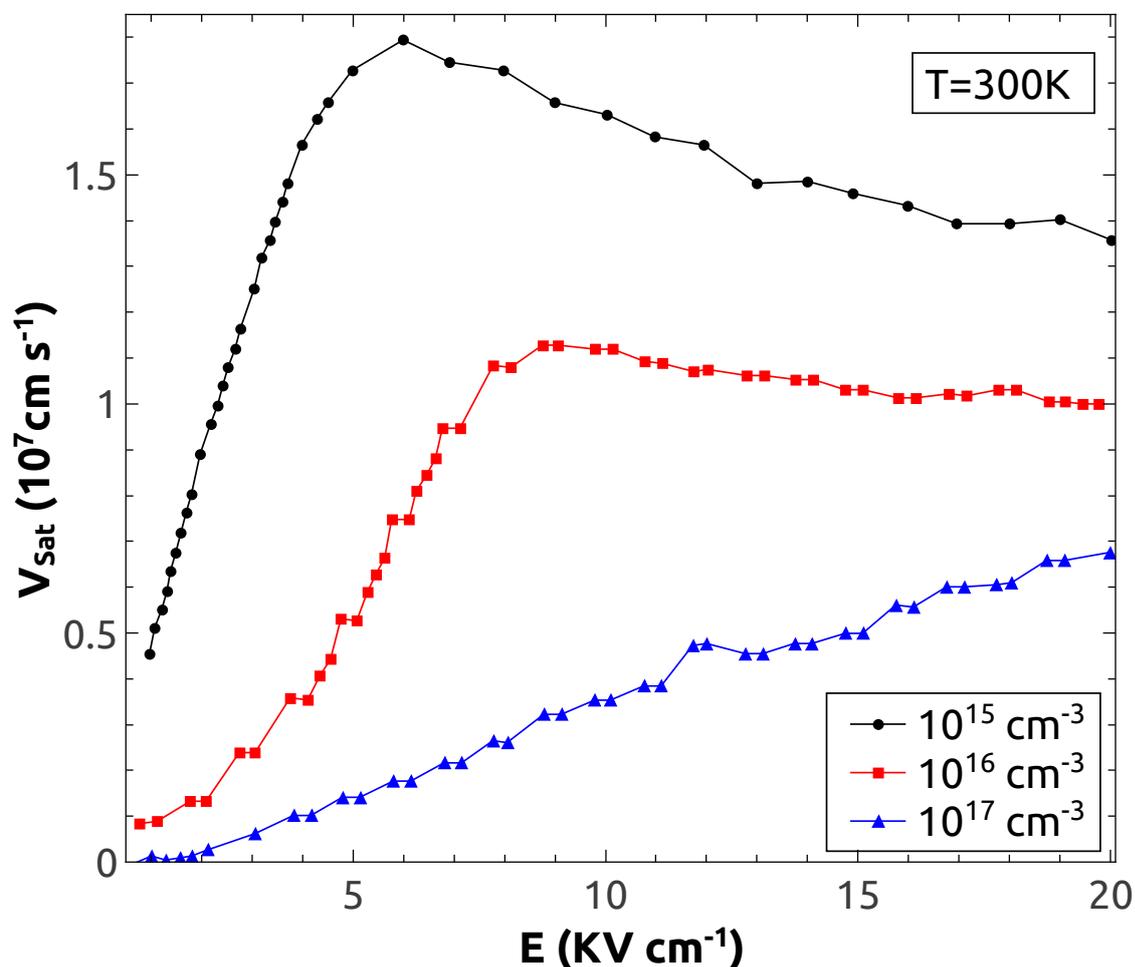


Figura 2.5: Curva de velocidad de saturación para el LT-GaAs sacada de bibliografía⁸¹.

y una magnitud del módulo del campo eléctrico $E \in [0, 20] \frac{\text{kV}}{\text{cm}}$ a partir de la figura 2.5. A excepción de este parámetro, los parámetros empleados en los modelos de movilidad descritos, han sido tomados de las referencias de Atlas⁷⁸ y MiniMos⁸⁰.

2.5. La tasa de recombinación

Se entiende como proceso de recombinación la desaparición de un par electrón-hueco que estaban disponibles para la conducción de la corriente eléctrica. Sucede como consecuencia del salto directo o indirecto del electrón libre desde la banda de conducción a la

banda de valencia. En un sistema en equilibrio termodinámico existe un proceso de generación térmica y recombinación que mantienen constante la concentración de portadores de carga. Por tanto, el proceso de la recombinación es algo que tanto si se presenta un estado de equilibrio termodinámico⁸⁷ como si se produce una fluctuación hacia un estado de no equilibrio, está presente. Y su efecto es tal que preserva el equilibrio y conduce al sistema hacia éste cuando se ha producido una perturbación del mismo. Continuando con esta descripción cualitativa y fenomenológica, los procesos de recombinación se pueden clasificar en tres tipos:

- **El proceso fotónico o de salto directo** es un paso directo desde la banda de conducción de un electrón a la banda de valencia, generando así una eliminación en un solo salto del par electrón hueco y emitiendo un fotón con la energía del ancho del gap.

Existen evidencias experimentales que ponen de manifiesto que este tipo de recombinación es muy frecuente en materiales con un gap estrecho como el PbTe con un ancho de gap de $0,27eV$, y poco probable en materiales con un ancho de gap mayor $1eV$.

En general se trata de pérdidas paulatinas de energía al interactuar con los núcleos atómicos de la red que culminan con este salto directo, en la gráfica 2.4 estaríamos hablando del proceso I.

- **El proceso de recombinación Auger o de colisión** es debido a la colisión de tres portadores de carga libres. Un par electrón-hueco con un tercer portador, que puede ser un electrón o un hueco. En este proceso, el par se recombina, y el tercer portador gana la energía de la colisión, si es un electrón, o cede la energía de la colisión, si es un hueco. Se puede decir que es un proceso de recombinación directo. En la figura 2.4 se corresponde con el proceso II.

Este tipo de proceso de recombinación, es poco frecuente a temperatura ambiente, siendo más frecuente a temperaturas elevadas y en casos de ancho de gap pequeño como el InSb con un gap de $0,18eV$. No obstante, nosotros lo hemos tenido en cuenta en el modelado de la tasa de recombinación usada en las simulaciones. La justificación está en que la mayoría de los semiconductores empleados en las antenas simuladas, el dopado era una característica común. Y el tiempo de vida de los portadores de carga se ve reducido sustancialmente por recombinación Auger

de un modo proporcional a la concentración de mayoritarios⁶⁹, que en definitiva están ligados a la concentración de impurezas.

La tasa de recombinación por colisión viene dada por la expresión:

$$R_{Auger}(\vec{r}, t) = (n(\vec{r}, t)p(\vec{r}, t) - n_i^2(\vec{r})) (C_{An}(\vec{r})n(\vec{r}, t) + C_{Ap}(\vec{r})p(\vec{r}, t)) \quad (2.77)$$

En la expresión anterior, $n_i(\vec{r})$ es la concentración intrínseca de portadores de carga, $n(\vec{r}, t)$ y $p(\vec{r}, t)$ son las concentraciones de electrones y huecos, $C_{An}(\vec{r})$ y $C_{Ap}(\vec{r})$ son los coeficientes de recombinación Auger para electrones y huecos respectivamente. Se comprueba que en estados de equilibrio, $R_{Auger}(\vec{r}, t) = 0$ porque $n(\vec{r}, t)p(\vec{r}, t) = n_i^2(\vec{r})$.

- **Los procesos de recombinación por trampas** son debidos a capturas de un electrón de la banda de conducción por un centro profundo o el llenado de un hueco de la banda de valencia por un electrón alojado en una trampa. Normalmente estos centros profundos son bandas de energía situadas en la proximidad de la mitad del gap. Podríamos decir que todo nivel por debajo de los niveles de demarcación electrónica y por encima de la demarcación hueca son trampas, en cualquier otro caso, estaríamos hablando de centros de adherencia electrónica o centros de adherencia para huecos. El significado es que estas trampas son simplemente imperfecciones de la red, y no se deben a la concentración de impurezas, que al crear bandas superficiales configurarían siempre centros de adherencia. No obstante, un dopado alto introduce muchos errores en la red cristalina simplemente debidos al proceso tecnológico⁶⁹ en sí. La figura 2.4 se corresponde con procesos de tipo III. Éste es el proceso que domina la recombinación en el tipo de material empleado para el estudio de las antenas fotoconductoras simuladas.

El modelo de la tasa de recombinación empleado en esta tesis, basado en el proceso de recombinación por trampas, es el llamado de Shockley-Read-Hall⁵⁹ y su expresión matemática es,

$$R_{SRH}(\vec{r}, t) = \frac{n(\vec{r}, t)p(\vec{r}, t) - n_i^2(\vec{r})}{\tau_n(\vec{r})(p(\vec{r}, t) + p_1(\vec{r})) + \tau_p(\vec{r})(n(\vec{r}, t) + n_1(\vec{r}))} \quad (2.78)$$

Donde $\tau_n(\vec{r})$ y $\tau_p(\vec{r})$ son los tiempos de vida media de recombinación, $n_1(\vec{r})$ y $p_1(\vec{r})$ las concentraciones de portadores de carga de electrones y huecos si el nivel

de Fermi estuviese situado en el nivel de las trampas para electrones y huecos respectivamente. Al igual que la tasa de recombinación Auger, para el caso de equilibrio, su valor es nulo.

La tasa de recombinación empleada en el modelado de antenas fotoconductivas es la suma de la recombinación por trampas más la recombinación por choques, $R(\vec{r}, t) = R_{Auger}(\vec{r}, t) + R_{SRH}(\vec{r}, t)$. Además de los procesos de recombinación estudiados hasta ahora, existen otros que son llamados de superficie, y que serán descritos en el capítulo 3.

Finalmente, se ha discretizado la tasa de recombinación para su implementación computacional y la expresión obtenida para $R0(\vec{r})$ de acuerdo a la notación establecida es:

$$R0_{i,j,k} = \frac{n0_{i,j,k}p0_{i,j,k} - n_i^2|_{i,j,k}}{\tau_n(p0_{i,j,k} + p1|_{i,j,k}) + \tau_p(n0_{i,j,k} + n1|_{i,j,k})} + (n0_{i,j,k}p0_{i,j,k} - n_i^2)(C_{An}n0_{i,j,k} + C_{Ap}p0_{i,j,k}) \quad (2.79)$$

Esta expresión será usada sólo en procesos estacionarios. En procesos transitorios se establece como punto de partida temporal la nulidad de las concentraciones de carga $n(\vec{r}, 0) = 0$ y $p(\vec{r}, 0) = 0$. Así la discretización de la tasa de recombinación para el proceso transitorio toma la forma:

$$R_{i,j,k} = \frac{n_{i,j,k}p_{i,j,k}}{\tau_n(p_{i,j,k} + p1|_{i,j,k}) + \tau_p(n_{i,j,k} + n1|_{i,j,k})} + (n_{i,j,k}p_{i,j,k})(C_{An}n_{i,j,k} + C_{Ap}p_{i,j,k}) \quad (2.80)$$

De las expresiones anteriores 2.79 y 2.80 se puede deducir que, en la práctica, los tiempos de vida medios $\tau_n(\vec{r})$ y $\tau_p(\vec{r})$, y los coeficientes de recombinación Auger $C_{An}(\vec{r})$ y $C_{Ap}(\vec{r})$ se han asumido con igual valor en todo punto del semiconductor. Por eso las ecuaciones discretas 2.79 y 2.80 han perdido la dependencia espacial que poseían en las ecuaciones 2.78 y 2.77.

2.5.1. Tiempos de vida de los portadores de carga

De los parámetros estudiados hasta ahora, el tiempo de vida de los portadores de carga en exceso, resulta de crucial importancia, ya que durante la recombinación permiten transformar una entrada láser de infrarrojo ($\lambda_\gamma \sim 800nm$) en una salida en el rango de los

terahercios ($\lambda_{THz} \sim 300\mu m$). En la evolución temporal del proceso transitorio de emisión de una antena fotoconductive, pasado el proceso de generación, cuando la recombinación gobierna la concentración de carga, cuanto menor es la vida de los portadores de carga, mayor es la frecuencia de emisión en el espectro de terahercios para una misma duración del pulso láser.

El tiempo de vida de recombinación de los portadores de carga en exceso, se define como el promedio de tiempo que este exceso tarda en recombinar. Los procesos de recombinación descritos en el apartado anterior determinan la duración media de estos portadores de carga antes de recombinar. Para los procesos de recombinación más importantes en las antenas fotoconductive estudiadas, los SRH 2.78, cuando hay dopado, es posible encontrar, en la literatura, expresiones semiempíricas que dan cuenta de las dependencias entre la vida de los portadores de carga y el dopado:

$$\tau_n = \frac{\tau_{n0}}{1 + \frac{(N_D + N_A)\gamma_n}{N_n^{\text{ref}}}} \quad (2.81)$$

$$\tau_p = \frac{\tau_{p0}}{1 + \frac{(N_D + N_A)\gamma_p}{N_p^{\text{ref}}}} \quad (2.82)$$

Donde N_n^{ref} , N_p^{ref} , γ_n , y γ_p son los parámetros de ajuste para electrones y huecos respectivamente⁵⁹. Así mismo τ_{n0} y τ_{p0} son los tiempo de vida de los portadores de carga en ausencia de dopado y son independientes de los estados estacionarios del dispositivo.

La dependencia entre el tiempo de vida de los portadores de carga y el dopado puede ser explicado por el proceso de scattering III3 de la figura 2.4, aunque, como ya se ha dicho, no se trate del dopado sino de los defectos que la implantación de impurezas producida en el proceso tecnológico. De hecho, el tiempo de vida de los portadores de carga en desequilibrio depende fuertemente de los procesos de fabricación, con lo que la determinación de este parámetro debe ser medida en cada caso.

2.6. Condiciones de contorno

Toda antena fotoconductive se puede delimitar en el dominio computacional, donde se simula mediante una interfaz que separa dicha antena del resto del dominio. Así mismo, la antena posee partes materiales no fotoconductive que serán abordadas en el capítulo

5. En este capítulo, sólo estamos interesados en la zona fotoconduactiva. El conjunto de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales discretizadas (2.30,2.50,2.51) es aplicable en el interior de la zona fotoconduactiva de la antena. Y son necesarias condiciones de contorno para establecer los valores físicos de las magnitudes puestas en juego en la interfaz de la zona fotoactiva de la antena. Si Ω es, topológicamente hablando, todo punto frontera de la zona fotoactiva de la antena que la segrega del resto del dominio computacional, Ω es el subdominio computacional de puntos, donde aplicaremos las condiciones de contorno. Así mismo dividiremos esas condiciones de contorno en dos tipos:

- **Condiciones de contorno de Dirichlet** que son todos aquellos puntos de Ω en los que conocemos el valor exacto de la magnitud física y podemos imponerlo. Este subdominio de Ω lo llamaremos Ω_D .
- **Condiciones de Neumann** son todos aquellos puntos de Ω en los que a pesar de no conocer el valor exacto de la magnitud física, podemos imponer condiciones vectoriales que fijan de modo unívoco el valor de la magnitud física en cuestión. A este subdominio de Ω lo llamaremos Ω_N

No es condición necesaria para encontrar solución que $\Omega \equiv \Omega_D \cup \Omega_N$, pero sí se garantiza que la solución es única si esta equivalencia se cumple.

2.6.1. Condiciones de contorno de Dirichlet

Ω_D respecto del potencial eléctrico ψ se corresponde con valores reales físicos conocidos del potencial en los puntos donde se localizan los contactos metálicos, coincidiendo con su geometría sobre el semiconductor. Este valor del potencial es dado por la fuente de tensión externa a través de los contactos tipo óhmico con el metal. Si tenemos una fuente de tensión externa que polariza el semiconductor con una tensión V_A , las ecuaciones 2.83 y 2.84 establecen el valor del potencial en la superficie del semiconductor en contacto óhmico entre éste y el metal, que supondremos un conductor eléctrico perfecto (PEC).

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{bi}(\vec{r}) + V_A; \quad \vec{r} \in PEC^+ \equiv \Omega_D \quad (2.83)$$

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{bi}(\vec{r}) - V_A; \quad \vec{r} \in PEC^- \equiv \Omega_D \quad (2.84)$$

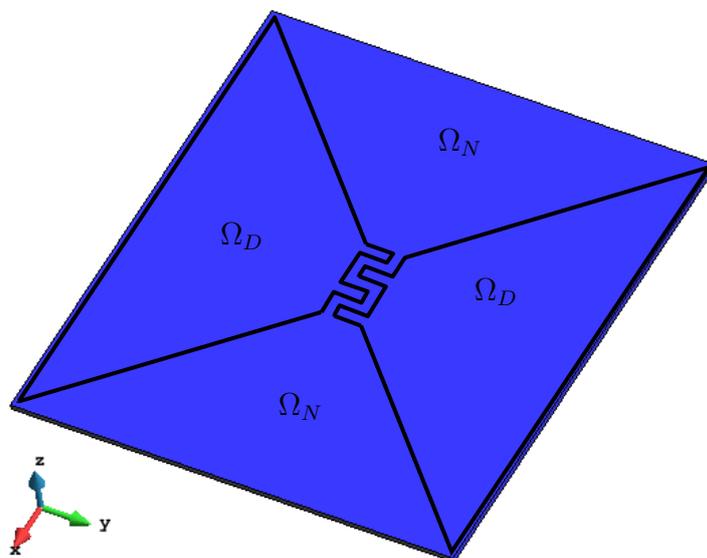


Figura 2.6: Tipos de condiciones de contorno aplicadas sobre el región fotoactiva de una antena ejemplo.

Donde ψ_{bi} es la tensión de construcción de la unión metal semiconductor. Este parámetro depende del nivel de impurezas ionizadas y su expresión es:

$$\psi_{bi}(\vec{r}) = V_T \operatorname{arcsinh} \left(\frac{N_D^+(\vec{r}) - N_A^-(\vec{r})}{2n_i(\vec{r})} \right) = V_T \operatorname{arcsinh} \left(\frac{C(\vec{r})}{2n_i(\vec{r})} \right)$$

A temperatura ambiente, las ecuaciones 2.83 y 2.84 conducen a la condición de Dirichlet aplicable bajo el contacto metálico:

$$\psi_{i,j,k}^- = V_T \operatorname{arcsinh} \left(\frac{C_{i,j,k}}{2n_i|_{i,j,k}} \right) - V_A; \quad (i, j, k) \in \Omega_D \quad (2.85)$$

$$\psi_{i,j,k}^+ = V_T \operatorname{arcsinh} \left(\frac{C_{i,j,k}}{2n_i|_{i,j,k}} \right) + V_A; \quad (i, j, k) \in \Omega_D \quad (2.86)$$

Las concentraciones de portadores de carga $n(\vec{r})$ y $p(\vec{r})$ localizadas en las regiones Ω_D donde está el contacto metálico quedan fijadas, y establecer valores requiere una serie de hipótesis.

Se asume un contacto tipo óhmico y un conductor eléctrico perfecto, sin caídas de tensión en el perímetro de la interfaz del contacto. Si además asumimos ausencia de gradientes

térmicos, no degeneración y despreciamos posibles espacios de carga en el contacto óhmico, se tiene^{59,88}:

$$n0(\vec{r}_{\Omega_D})p0(\vec{r}_{\Omega_D}) - n_i^2(\vec{r}_{\Omega_D}) = 0 \quad (2.87)$$

$$n0(\vec{r}_{\Omega_D}) - p0(\vec{r}_{\Omega_D}) - C(\vec{r}_{\Omega_D}) = 0 \quad (2.88)$$

Que conducen a la condición de Dirichlet sobre la carga:

$$n0(\vec{r}_{\Omega_D}) = \frac{\sqrt{C^2(\vec{r}_{\Omega_D}) + 4n_i^2(\vec{r}_{\Omega_D})} + C(\vec{r}_{\Omega_D})}{2}; \quad (2.89)$$

$$p0(\vec{r}_{\Omega_D}) = \frac{\sqrt{C^2(\vec{r}_{\Omega_D}) + 4n_i^2(\vec{r}_{\Omega_D})} - C(\vec{r}_{\Omega_D})}{2} \quad (2.90)$$

Ecuaciones que discretizadas adquieren la forma:

$$\begin{cases} n0_{i,j,k} = \frac{\sqrt{C_{i,j,k}^2 + 4n_i^2} + C_{i,j,k}}{2} & (i, j, k) \in \Omega_D \\ p0_{i,j,k} = \frac{\sqrt{C_{i,j,k}^2 + 4n_i^2} - C_{i,j,k}}{2} & (i, j, k) \in \Omega_D \end{cases} \quad (2.91)$$

2.6.2. Condiciones de contorno de Neumann

En el sentido matemático más estricto $\Omega \equiv \Omega_D \cup \Omega_N$, es decir, todo punto de Ω que no es un Ω_D , lo es de Ω_N . Todo punto que no queda debajo de los contactos metálicos es un punto de Ω_N y sobre él se aplican las condiciones de contorno de Neumann.

Las condiciones de contorno de Neumann, para el potencial eléctrico, se basan en la condición de continuidad de la componente perpendicular del campo eléctrico a la interfaz de dos medios⁵³⁻⁵⁵:

$$(\varepsilon_0 \vec{E}_{Vacio} - \varepsilon_{Antena} \vec{E}_{Antena}) \hat{n} = Q_{Interface} \quad (2.92)$$

Con esta expresión 2.92 asumimos que la región fundamental esta completamente rodeada de vacío, despreciando el sustrato semiaislante sobre la que se apoya. Por eso, para todo punto que rodea la región fundamental ε_0 es la permitividad eléctrica del vacío, \vec{E}_{Vacio} es el campo eléctrico en el vacío, y ε_{Antena} es la permitividad eléctrica de la región fotoactiva de la antena, \vec{E}_{Antena} , es el campo eléctrico en el interior de la antena, \hat{n} es el

versor normal a la interfaz entre los medios y $Q_{Interface}$, es la carga eléctrica que hay en la interfaz. Si despreciamos esta carga eléctrica de la interfaz, tenemos:

$$E_{\perp, Vacio} = \varepsilon_{r, Antena} E_{\perp, Antena} \quad (2.93)$$

Donde $E_{\perp, Vacio}$ es la componente perpendicular del campo eléctrico a la interfaz en el vacío, y es usualmente despreciada⁵⁹, con lo que se llega a la condición de Neumann para el potencial:

$$E_{\perp, Antena} = \left. \frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}} \right|_{\Omega_N} = 0 \quad (2.94)$$

Esta expresión es válida también en la interfaz entre la región fotoactiva y el sustrato semiconductor, siempre que éste se pueda asumir como un buen aislante. Con respecto

Valores de los parámetros en las simulaciones hechas en 2.7	
Parámetros correspondientes a la función de recombinación^{29,89}	
Electrones	Huecos
$\tau_n = 0.5\text{ps}$ $C_{An} = 7 \cdot 10^{-30} \text{cm}^6 \text{s}^{-1}$ $n_1 = 4.0 \cdot 10^6 \text{cm}^{-3}$	$\tau_p = 0.8\text{ps}$ $C_{Ap} = 7 \cdot 10^{-30} \text{cm}^6 \text{s}^{-1}$ $p_1 = 5.0 \cdot 10^6 \text{cm}^{-3}$
Dopado y concentración intrínseca⁹⁰	
Dopado de la antena ET $N_D^+ = 6 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$ C. intrínseca $n_i = 9 \cdot 10^6 \text{cm}^{-3}$	
Dopado de la antena BT $N_D^+ = 10^{15} \text{cm}^{-3}$ C. intrínseca $n_i = 9 \cdot 10^6 \text{cm}^{-3}$	
Dopado de la antena TT1 $N_D^+ = 6 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$ C. intrínseca $n_i = 9 \cdot 10^6 \text{cm}^{-3}$	
Valores iniciales ($\vec{E} = \vec{0}$) de movilidad con dopado no extremo⁹¹	
El modelo empleado es el 2.4.1	
$\mu_{n0} = 8000 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$	$\mu_{p0} = 400 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$
Permitividad y permeabilidad relativas	
$\varepsilon_r = 13.26$ si $\omega < 6\text{THz}$ ⁹² $\mu_r = 1.0$	
Voltaje aplicado a la antena ET	$V_a = 40\text{V}$
Voltaje aplicado a la antena BT	$V_a = 10\text{V}$
Voltaje aplicado a la antena TT1	$V_a = 50\text{V}$

Tabla 2.1: Tabla correspondiente a los parámetros numéricos usado en la simulación del estado estacionario de validación de las antenas ET, BT y TT1

a la carga, la no variación de la concentración de portadores en la interfaz de la región

fotoactiva y el resto del universo, garantiza que no hay flujo desde la antena hacia el vacío y viceversa. Tenemos pues una condición de Neumann para la concentración de carga:

$$\left. \frac{\partial n_0}{\partial \vec{n}} \right|_{\Omega_N} = 0 \quad (2.95)$$

$$\left. \frac{\partial p_0}{\partial \vec{n}} \right|_{\Omega_N} = 0 \quad (2.96)$$

Las aplicaciones de estas condiciones de contorno discretizadas se desarrollan y explican en el apartado I.c del apéndice I.

2.7. Validación del algoritmo

El procedimiento de solución de los ejemplos de regiones fotoconductivevas polarizadas de antenas, se explica en el apartado I.d del apéndice I.

En esta sección, en concreto, se han comparado tres casos de antena fotoconductiveva cuyos parámetros están indicados en la tabla 2.1. La geometría aparece en las figuras 2.7a, 2.9a y 2.11a. Se ilustran las soluciones 3D y se comparan cortes de las soluciones de esos 3D con cortes de soluciones 3D proporcionadas por software comercial (SC)⁷⁸. En todos los casos se hacen dos cortes perpendiculares, claramente identificables sobre los 3D, que son los que sirven para la validación de los estados estacionarios. El corte de color negro se hace en el eje de la X y el de color amarillo en el eje de las Y. Se compara el potencial y las concentraciones de carga.

Las diferencias entre las validaciones y los resultados obtenidos en las figuras 2.10b, 2.10c, 2.8b, 2.8c, 2.12b y 2.12c provienen de las pequeñas diferencias en los potenciales. Como se puede ver en las figuras de validación de los potenciales 2.8a, 2.10a y 2.12a en los bordes o perímetros de los contactos hay una pequeña diferencia, como la carga se comporta exponencialmente con una variación del potencial, esas pequeñas diferencias son el origen de las diferencias en la carga. El motivo está en el modo de implementar la condición Dirichlet para fijar el potencial en los contactos metálicos y en el método numérico empleado (el software comercial emplea elementos finitos).

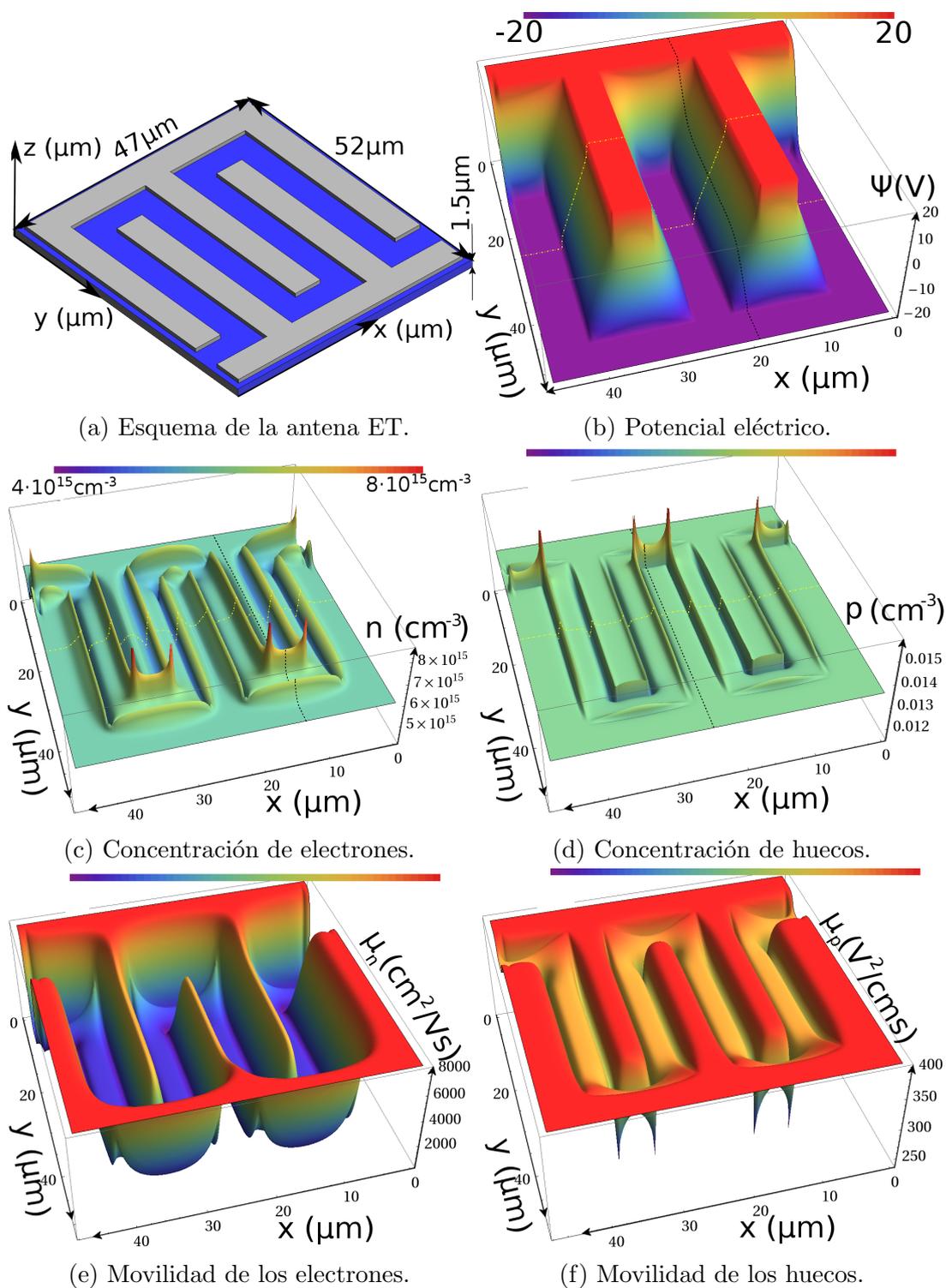
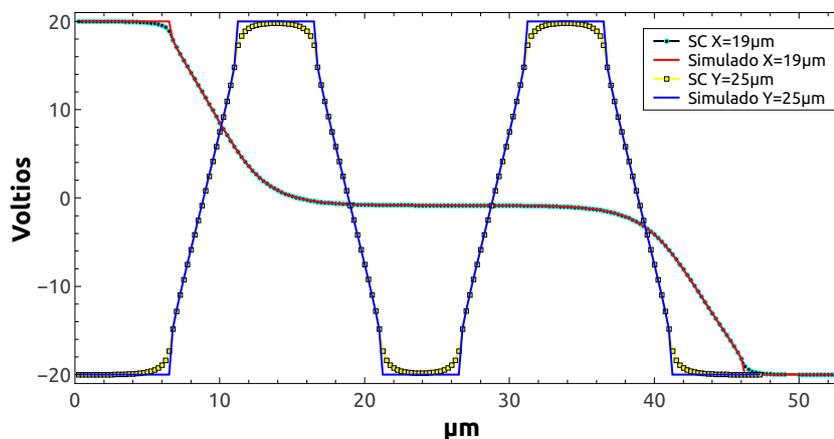
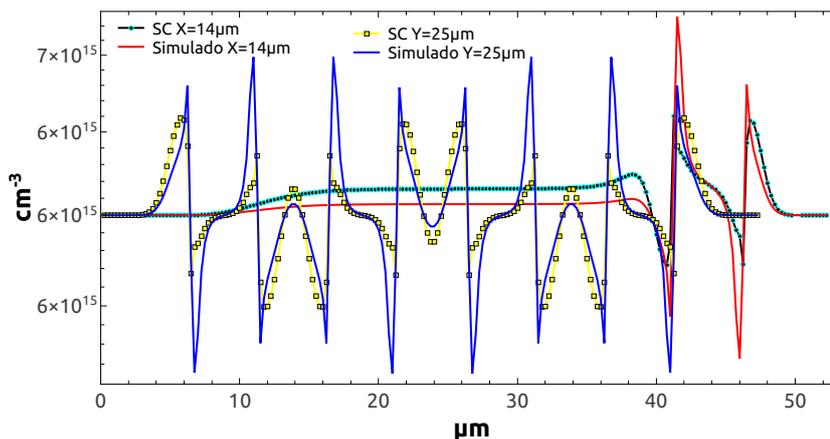


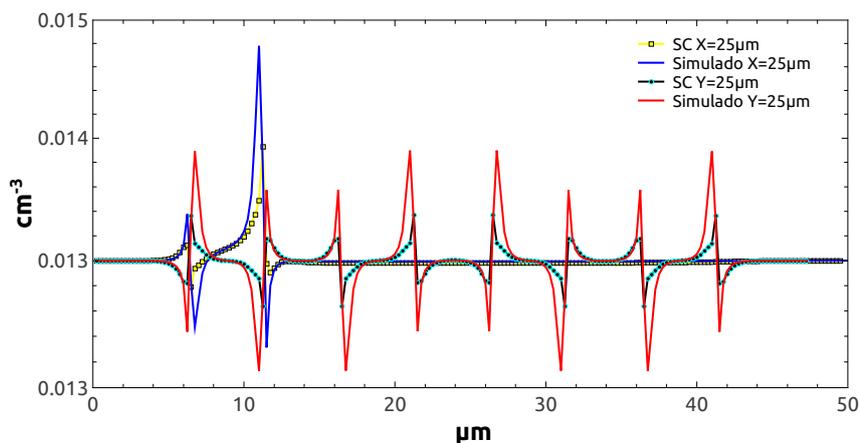
Figura 2.7: 3D y cortes para validación de la antena ET.



(a) Validación del potencial simulado para la antena ET comparado con software comercial.



(b) Validación de la concentración de electrones simulada para la antena ET comparada con software comercial.



(c) Validación de la concentración de huecos simulada para la antena ET comparada con software comercial.

Figura 2.8: Validación de los parámetros electrostáticos de la antena ET.

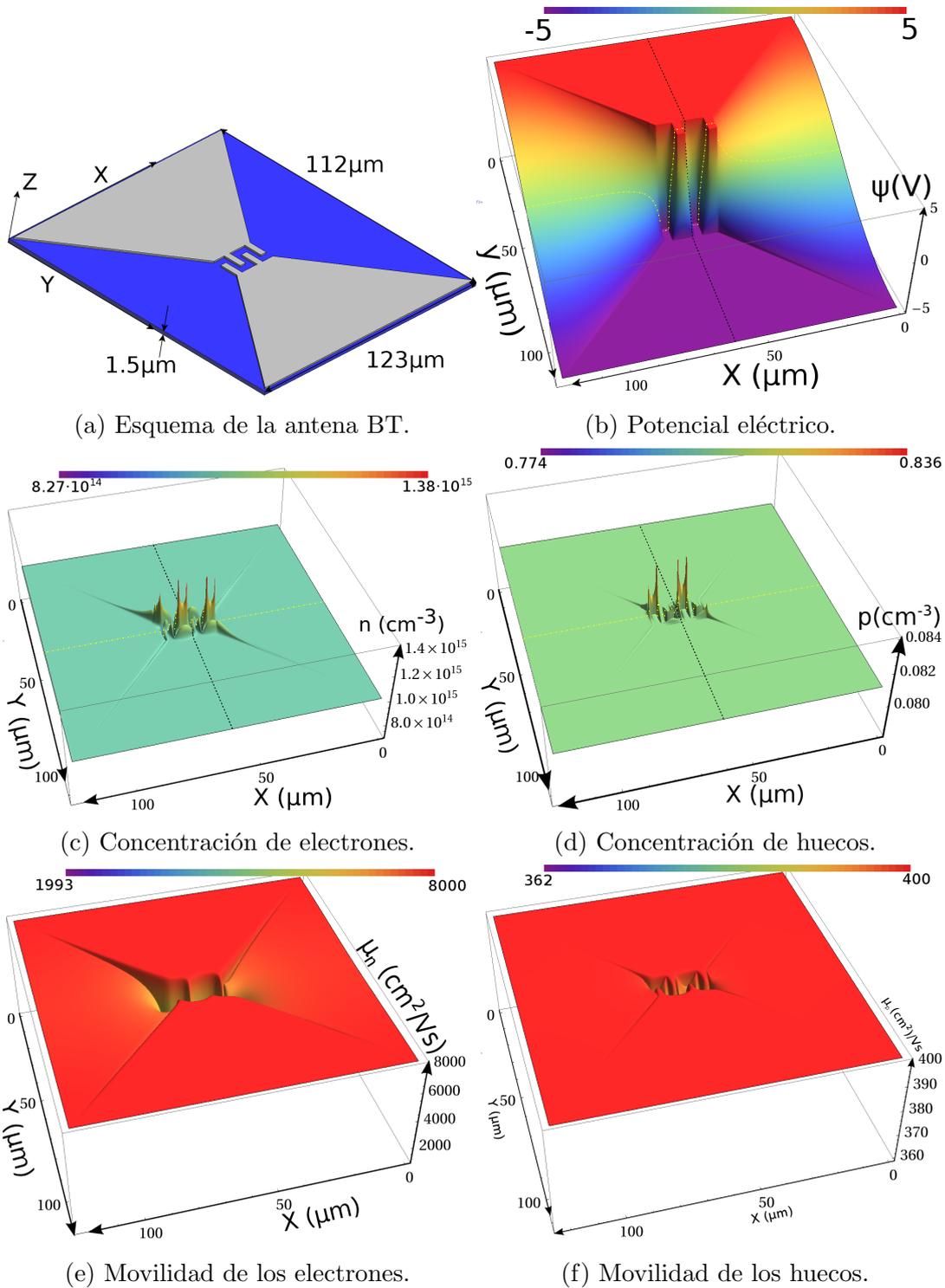
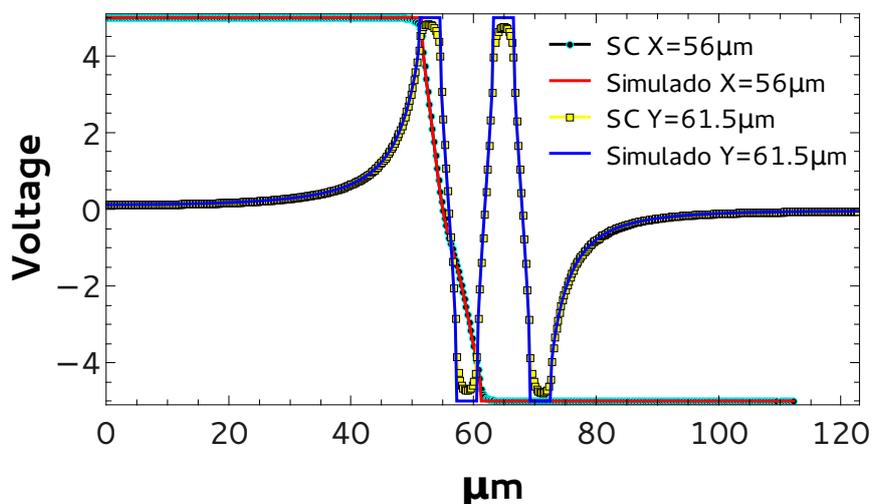
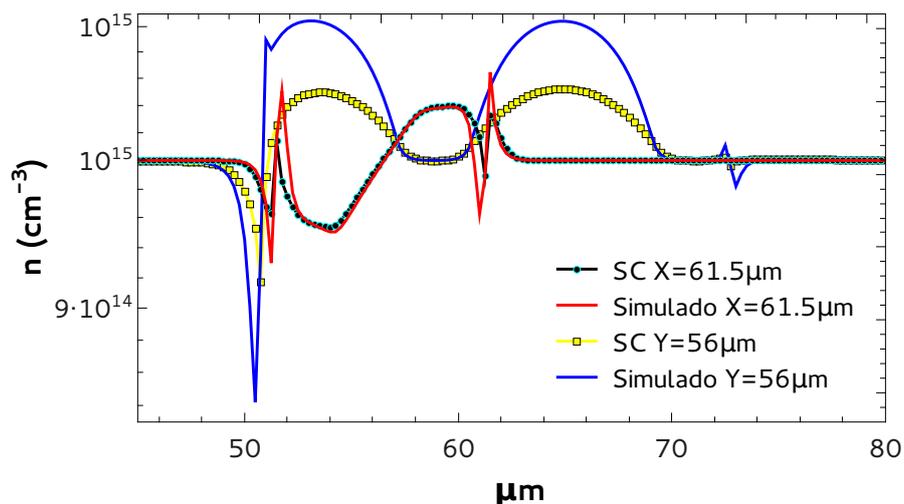


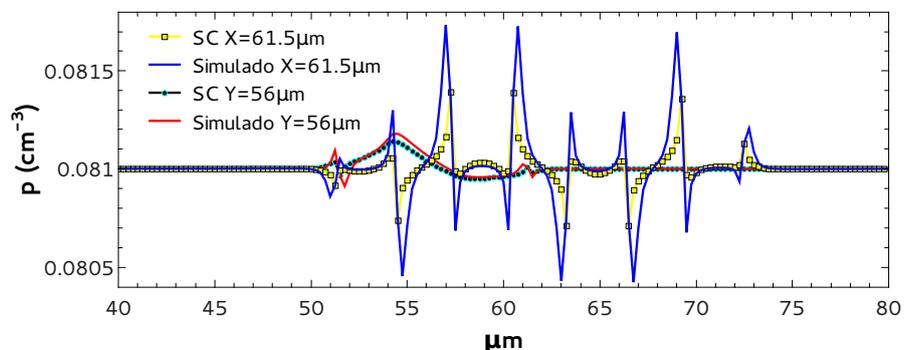
Figura 2.9: 3D y cortes para validación de la antena BT.



(a) Validación del potencial simulado para la antena BT comparado con software comercial.

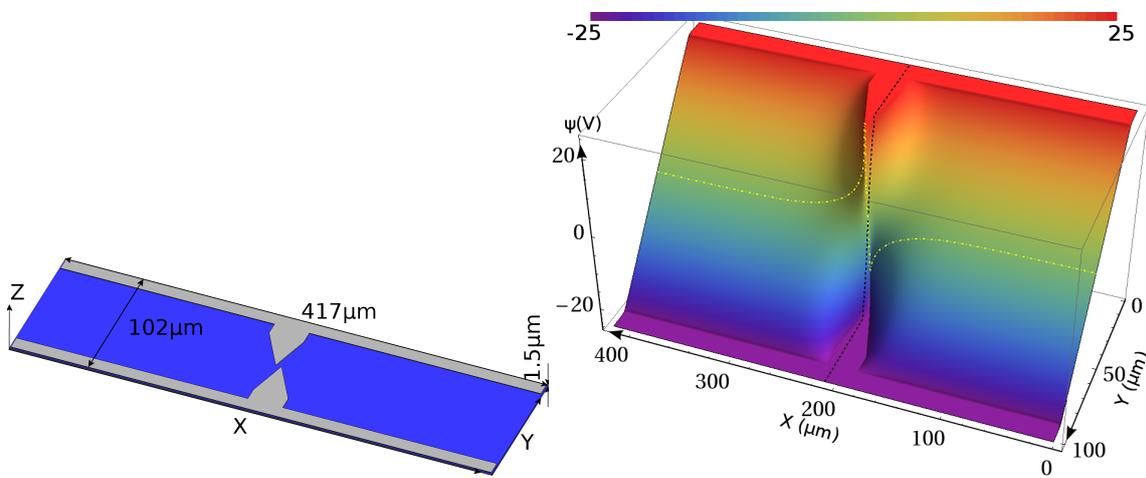


(b) Validación de la concentración de electrones simulada para la antena BT comparada con software comercial.



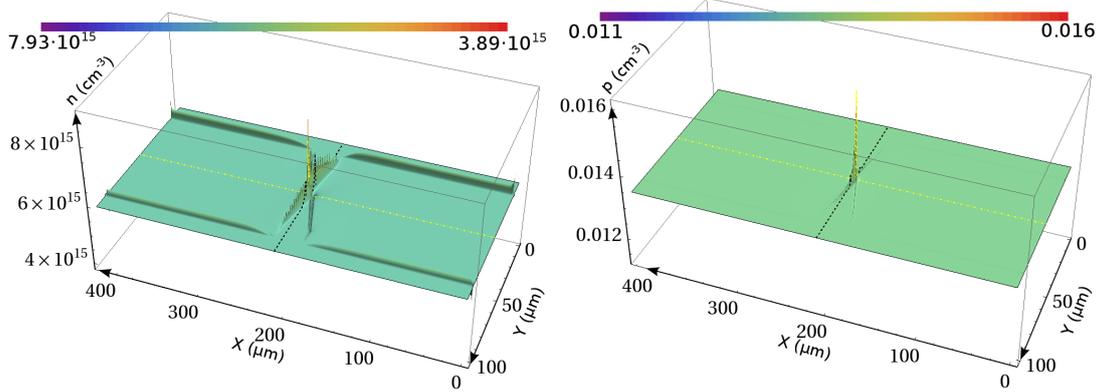
(c) Validación de la concentración de huecos simulada para la antena BT comparada con software comercial.

Figura 2.10: Validación de los parámetros electrostáticos de la antena BT.



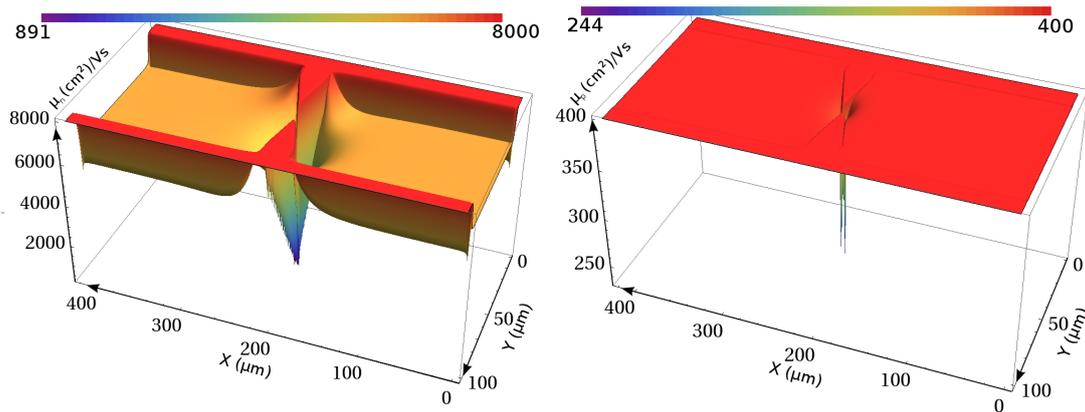
(a) Esquema de la antena TT1.

(b) Potencial eléctrico.



(c) Concentración de electrones.

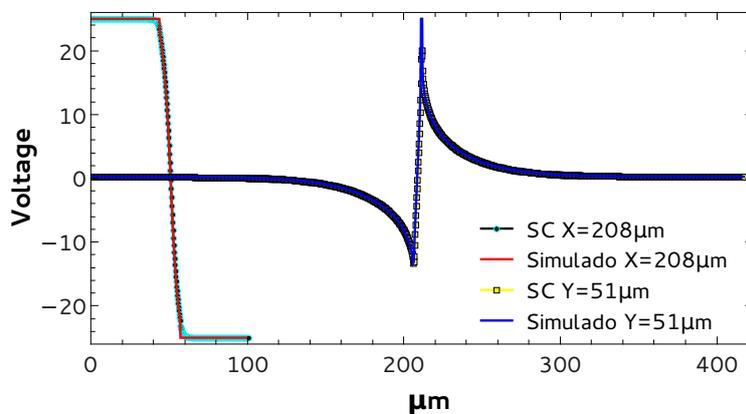
(d) Concentración de huecos.



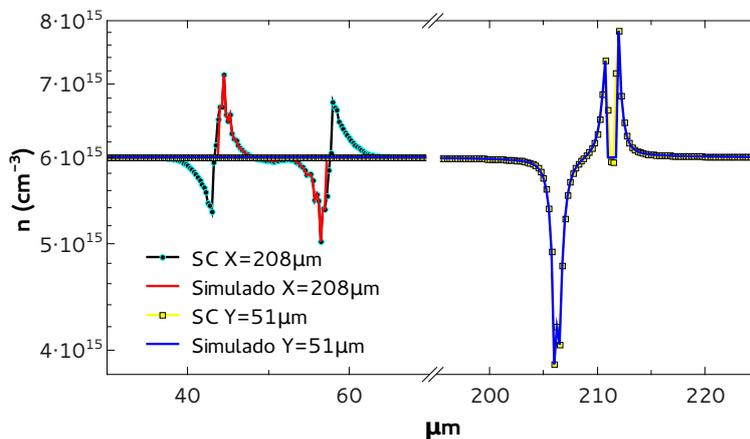
(e) Movilidad de los electrones.

(f) Movilidad de los huecos.

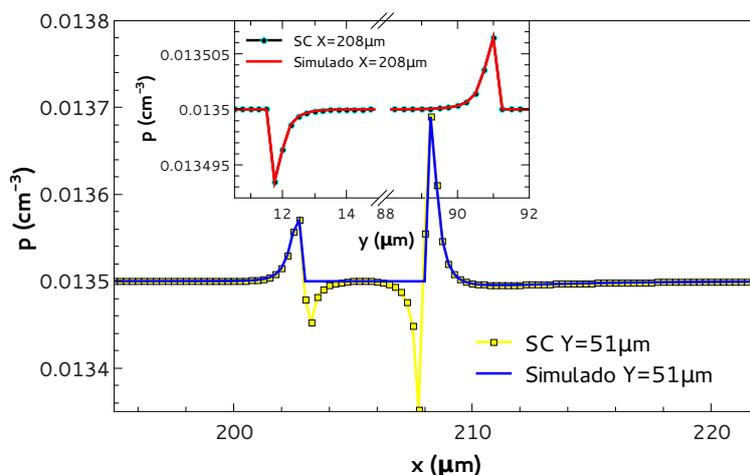
Figura 2.11: 3D y cortes para validación de la antena TT1.



(a) Validación del potencial simulado para la antena TT1 comparado con software comercial.



(b) Validación de la concentración de electrones simulada para la antena TT1 comparada con software comercial.



(c) Validación de la concentración de huecos simulada para la antena TT1 comparada con software comercial.

Figura 2.12: Validación de los parámetros electrostáticos de la antena TT1.

3

Algoritmos para la simulación del régimen transitorio de una antena fotoconductiva modelada por corrientes de difusión y arrastre

3.1. El efecto fotoeléctrico y la tasa de generación	65
3.1.1. Forma temporal del pulso láser	65
3.1.2. Amplitud óptica compleja e intensidad óptica espacial	66
3.1.3. Intensidad óptica espacio-temporal en un medio material	69
3.1.4. Eficiencia cuántica y tasa de recombinación superficial	70
3.1.5. Un modelo para la tasa de generación de portadores de carga	71
3.2. Esquema FDTD para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales híbrido	73
3.2.1. Conexión entre el estado estacionario y el transitorio	74
3.2.2. Los tipos de corrientes	76
3.2.3. El sistema de ecuaciones diferenciales	77
3.2.4. El dominio computacional	83
3.2.5. Las condiciones de contorno	87

3. Algoritmos para la simulación del régimen transitorio de una antena fotoconductiva 64	modelada por corrientes de difusión y arrastre
3.2.6. El campo radiado	87
3.2.7. El efecto de la recepción	89
3.3. La importancia del modelo de movilidad en el análisis del régimen transitorio	91
3.4. Validación del algoritmo	93

3.1. El efecto fotoeléctrico y la tasa de generación

El efecto fotoeléctrico en una antena fotoconductive es el principio físico que permite alimentarla. Si sobre un semiconductor se aplica un haz láser de longitud de onda tal que los fotones asociados poseen al menos energía como para hacer saltar un electrón localizado en el techo de la banda de valencia hasta el fondo de la banda de conducción, es decir, al menos el ancho de la zona prohibida del semiconductor, se generará un par electrón-hueco que incrementarán la carga libre. Durante este proceso, y debido a este efecto, la conductividad del semiconductor se incrementa.

En la simulación de antenas fotoconductive se hace necesario un modelo de la tasa de generación de portadores de carga. Para obtener un modelo 3D que reproduzca con cierto grado de realismo este proceso de generación de carga, hay que tener en cuenta la interacción entre la fuente de luz y el medio material. Y para ello, vamos a definir un conjunto de parámetros involucrados en el proceso, que facilitarán la descripción cualitativa y cuantitativa de la generación, y que permitirán modelarlo.

3.1.1. Forma temporal del pulso láser

Los láseres ultracortos (duración del pulso lumínico de femtosegundos), son ampliamente empleado en la estimulación de antenas fotoconductive, tanto en la emisión como en la recepción^{3,25,93-110}.

Los láseres pulsantes de disparo ultracorto, llamados mode-locked, poseen una distribución temporal de potencia que es descrita con frecuencia en la bibliografía por la secante hiperbólica¹¹¹:

$$P(t) = P_p \operatorname{sech}^2 \left(\frac{t}{\tau_p} \right). \quad (3.1)$$

Donde el ancho temporal completo de la mitad del máximo (FWHM), que llamaremos σ_t , está relacionado con el parámetro τ_p por la expresión $\sigma_t = 1,76\tau_p$. Otra descripción muy extendida en la bibliografía¹¹¹ está dada por la función gaussiana, siendo posible escribir:

$$P(t) = P_p e^{-\left(\frac{t}{\tau_\pi}\right)^2}. \quad (3.2)$$

Donde el ancho temporal completo de la mitad del máximo (FWHM) está relacionado con el parámetro τ_π por la expresión $\sigma_t = \frac{\tau_\pi}{\sqrt{4\ln(2)}} = 0,6\tau_\pi$. No obstante se suele hacer la

aproximación¹¹¹ $\sigma_t \approx \tau_\pi$.

A continuación en el apartado 3.1.2 se verá que existe un cierto confinamiento del haz láser que permite describirlo con simetría radial. Si hacemos la hipótesis de que es posible encontrar un magnitud $I(\rho, z, t) = I_1(\rho, z)I_2(t)$ que llamaremos intensidad óptica, se reescribe la potencia en la forma:

$$P(t) = \int_0^\infty I(\rho, z, t)2\pi\rho d\rho = 2\pi I_2(t) \int_0^\infty I_1(\rho, z)\rho d\rho = P_p(z)I_2(t) \quad (3.3)$$

Podemos decir que:

- $I(\rho, z, t)$ es la intensidad óptica espacio-temporal en el vacío, y es una función simétrica espacialmente en torno al centro del haz láser situado en $\rho = 0$.
- La distribución temporal de $I(\rho, z, t)$ es obtenida comparando términos entre las expresiones 3.1 y 3.3, de lo cual inferimos $I_2(t) = \text{sech}^2\left(1,76\frac{t}{\sigma_t}\right)$. Por tanto la intensidad óptica espacio-temporal en el vacío puede ser descrita temporalmente hablando mediante la secante hiperbólica $I(\rho, z, t) = I_1(\rho, z)\text{sech}^2\left(1,76\frac{t}{\sigma_t}\right)$.
- En caso de que la duración temporal de la potencia es aproximada por una distribución gaussiana y se haga la aproximación $\sigma_t \approx \tau_\pi$, haciendo la misma deducción que en el punto previo resulta $I(\rho, z, t) = I_1(\rho, z)e^{-\left(\frac{t}{\sigma_t}\right)^2}$.

3.1.2. Amplitud óptica compleja e intensidad óptica espacial

Atendiendo a la naturaleza ondulatoria de la luz que proviene del láser, ésta se propaga en el vacío como una onda plana de amplitud compleja $U(\vec{r}, t) = U(\vec{r})e^{j\omega t}$. Si sustituimos esta solución en la ecuación de onda $\nabla^2 U(\vec{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 U(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0$ se llega a una ecuación diferencial para la amplitud compleja $U(\vec{r})$ llamada ecuación de Helmholtz:

$$\nabla^2 U(\vec{r}) + kU(\vec{r}) = 0, \quad (3.4)$$

donde k es el número de onda.

La distribución espacial de la intensidad óptica $I_1(\rho, z)$ es dada por el cuadrado del módulo de la amplitud óptica compleja¹¹² $I_1(\rho, z) = |U(\vec{r})|^2$. Esta igualdad modela mejor la intensidad óptica del láser en vacío cuanto más monocromático sea éste. La solución

de la ecuación diferencial 3.4 conduce a diferentes modelos de distribución espacial de la intensidad óptica del haz láser.

Intensidad óptica espacial de un haz gaussiano

De la aproximación de onda paraxial, obtenemos la aproximación de intensidad de haz gaussiano¹¹²:

$$I_1(\rho, z) = I_0 \left(\frac{W_0}{W(z)} \right)^2 e^{-2\left(\frac{\rho}{W(z)}\right)^2}, \quad (3.5)$$

donde I_0 es la intensidad de pico del haz en $z=0$, $W(z) = W_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_0}\right)^2}$ es el ancho del haz que va, desde el centro del mismo, donde el valor de la intensidad es máxima, hasta el punto de la periferia en el que este máximo ha caído e^{-2} y $W_0 = \sqrt{\frac{\lambda z_0}{\pi}}$ es el ancho justo en $z=0$. La coordenada radial $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$, da cuenta del esparcimiento radial del haz. El parámetro z_0 es el rango de Rayleigh¹¹².

Si particularizamos la expresión 3.5 para $z=0$, tenemos en cuenta que se trata de un haz gaussiano de simetría de revolución $\sigma_r = \sigma_x = \sigma_y$ y que la anchura completa de la intensidad del haz a la mitad del máximo (FWHM) esta relacionada con W_0 por la expresión $W_0 = \frac{\sigma_r}{\sqrt{2\ln(2)}}$, podemos escribir 3.5 como:

$$I_1(x, y) = I_0 e^{-4\ln(2)\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right)} \quad (3.6)$$

No obstante, si hacemos la aproximación $\left(\sqrt{2\ln(2)}\right)^{-1} \approx 1$ que implica que $W_0 \approx \sigma_r$, podemos escribir:

$$I_1(x, y) = I_0 e^{-\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right)}. \quad (3.7)$$

Intensidad óptica espacial de un haz hermite-gaussiano

Mientras que la intensidad óptica de un haz gaussiano posee un solo centro de intensidad, con la intensidad óptica de un haz hermite-gaussiano, son posibles varios. De la solución de 3.4, con otra familia de soluciones, podemos escribir la intensidad óptica de

un haz hermite-gausiano¹¹² como:

$$I_1(x, y, z) = |A_{l,m}|^2 \left(\frac{W_0}{W(z)} \right)^2 \mathbb{G}_l \left(\frac{\sqrt{2}x}{W(z)} \right) \mathbb{G}_m \left(\frac{\sqrt{2}y}{W(z)} \right), \quad (3.8)$$

donde $A_{l,m}$ es una constante que converge a la intensidad de pico del haz cuando $z=0$, $W(z)$ y W_0 tienen el mismo significado que en la expresión 3.5. $\mathbb{G}_l(u)$ es la función Hermite-Gausiana que puede ser consultada del apéndice II.a.1.

De la expresión para la intensidad óptica hermite-gausiana 3.8, si nos restringimos a $z=0$, podemos escribir,

$$I_1(x, y) = I_0 \mathbb{G}_l \left(\frac{\sqrt{2}x}{W_0} \right) \mathbb{G}_m \left(\frac{\sqrt{2}y}{W_0} \right) \quad (3.9)$$

Expresión que si queremos reescribir en términos de FWHM de la distribución espacial del haz, tendremos que aplicar el estándar ISO 11146 explicado en el apéndice II.b.

Intensidad óptica espacial de un haz laguerre-gausiano

Otra familia de soluciones de la ecuación 3.4 conduce a la intensidad óptica de un haz laguerre-gausiano¹¹², cuya expresión es:

$$I_1(\rho, z) = |A_{l,m}|^2 \left(\frac{W_0}{W(z)} \right)^2 \mathbb{Q}_{lm}^2 \left(\frac{\rho}{W(z)} \right), \quad (3.10)$$

donde $A_{l,m}$, $W(z)$ y W_0 tienen el mismo significado que en la expresión 3.8. \mathbb{Q}_{lm} es la función laguerre-gausiana cuya expresión puede ser consultada en los apéndices II.a.2.

Haciendo la hipótesis de que hay una distribución simétrica del haz y haciendo la aproximación $W_0 \approx \sigma_r$, la expresión 3.10 en $z=0$ se puede reescribir como:

$$I_1(x, y) = I_0 \mathbb{Q}_{lm}^2 \left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{\sigma_r} \right), \quad (3.11)$$

con $\sigma_r = \sigma_x = \sigma_y$.

Existen otras distribuciones espaciales de la intensidad óptica del haz láser, como son la *bessel-gausiana*¹¹² y que presenta colas oscilantes para casos de distribuciones no uniformes en el plano del frente de propagación del haz.

3.1.3. Intensidad óptica espacio-temporal en un medio material

Cuando un haz láser interacciona con un medio material, este sufre múltiples efectos. Para empezar, parte del haz se refleja sobre el medio y otra parte se transmite. Del balance energético entre la porción de energía que llega al medio y la que es reflejada, es posible establecer el llamado coeficiente de transmisión T . Teóricamente y desde un enfoque corpuscular, definimos el coeficiente de transmisión como el cociente entre el número de fotones que penetran en el material y el número total de fotones que hay en el haz antes de llegar a la interfaz vacío-material. De esos fotones, una parte es absorbida por el material y otra parte atraviesa el medio en cuestión.

En el medio material, despreciando el scattering interno, la ley de Beer-Buoguer-Lambert¹¹³⁻¹¹⁵ establece que de la energía contenida en un haz lumínico la fracción absorbida es proporcional a la masa de medio atravesada por el haz. Así, para una distancia diferencial dz dentro del material, la fracción de intensidad óptica absorbida dI_1 es dada por:

$$dI_1 = -I\alpha(\lambda_\gamma)dz, \quad (3.12)$$

donde I es la intensidad óptica del haz en (x, y, z) un punto cualquiera del medio material, $\alpha(\lambda_\gamma)$ es el coeficiente de absorción en el intervalo $[z, z + dz]$ para la longitud de onda láser λ_γ , dz es el desplazamiento diferencial del haz desde la posición de referencia z hasta la posición $z + dz$ en el medio. Si suponemos un valor constante del coeficiente de absorción en todo del medio material, la caída de intensidad óptica que sufre el haz a medida que penetra es dada por la ley de potencias de Beer-Buoguer-Lambert¹¹³⁻¹¹⁵,

$$I_{1,medio}(x, y, z) = TI_{1,vacio}(x, y)e^{-\alpha(\lambda_\gamma)(z_0-z)} \quad (3.13)$$

con $z < z_0 \forall z$. En este contexto, $z_0 - z$ es la distancia medida sobre la normal a la interfaz que separa el medio del vacío, y que comienza a contar desde la posición z_0 en el que se produce el impacto del láser sobre el semiconductor¹

Atendiendo ahora a la distribución temporal de la intensidad óptica I_2 , colocaremos el origen de tiempos en $t = t_0$. El máximo de intensidad óptica en la posición de referencia

¹La coordenada z_0 no tiene nada que ver con z_0 el rango de Rayleigh¹¹² y no debe conducir a confusión a pesar de la similitud en la notación.

(x_0, y_0, z_0) donde tiene lugar el impacto del haz láser sobre el semiconductor se alcanza en el instante $t = t_0$. Para conocer la intensidad óptica I_2 cuando el haz ha recorrido una distancia $z_0 - z$ desde la posición del impacto z_0 hacia el interior del material, habrá que introducir un retardo $\frac{z_0 - z}{v_m(\lambda_\gamma)}$. Donde $v_m(\lambda_\gamma)$ es la velocidad de la luz de los fotones con longitud de onda λ_γ que proviene del láser (se entiende que el láser es una fuente muy monocromática). Así mismo y usando el índice de refracción del material semiconductor para esa longitud de onda $n(\lambda_\gamma)$, podemos expresar el retardo como $\frac{(z_0 - z)n(\lambda_\gamma)}{c}$, donde c es la velocidad de la luz en el vacío. Con este retardo, el origen de tiempos será $t_r(z) = t_0 + \frac{z_0 - z}{v_m(\lambda_\gamma)}$, con lo que la distribución temporal de la intensidad óptica, en un medio, vendrá dada por:

$$I_{2,medio}(z, t) = I_{2,vacio} \left(t - t_0 - \frac{(z_0 - z)n(\lambda_\gamma)}{c} \right) \quad (3.14)$$

De las expresiones 3.13 y 3.14, podemos concluir que la intensidad óptica espacio-temporal del haz láser, en un medio material es dada por la expresión:

$$I_{medio}(x, y, z, t) = I_{1,medio}(x, y, z) I_{2,medio}(z, t) \quad (3.15)$$

3.1.4. Eficiencia cuántica y tasa de recombinación superficial

A partir de esta intensidad óptica 3.15, se define el flujo de fotones absorbidos por el medio material como:

$$\phi(x, y, z, t) = \beta_0 I_{medio}(x, y, z, t), \quad (3.16)$$

donde $\beta_0 = \frac{\lambda_\gamma \alpha(\lambda_\gamma)}{hc}$. Y a su vez λ_γ es la longitud de onda asociada a los fotones de la fuente láser, $\alpha(\lambda_\gamma)$ es el coeficiente de absorción del medio para la longitud de onda λ_γ , h es la constante de Plack y c la velocidad de la luz en el vacío.

No todos los fotones que son absorbidos por el semiconductor generan pares electrón hueco. La eficiencia cuántica establece la proporción de fotones absorbidos que generan pares electrón-hueco¹¹² y su expresión es:

$$\eta(z) = \xi \left(1 - e^{-\alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)} \right) \quad (3.17)$$

Donde ξ es la fracción de fotones absorbidos que contribuyen a la fotocorriente. De la expresión de $\eta(z)$ se deduce que justo en la superficie $z = z_0$ la probabilidad de que los fotones absorbidos contribuyan a la fotocorriente es nula. Es decir, debido a la alta concentración de defectos, en la superficie, se tiene una recombinación muy elevada en comparación con la que se produce en el interior del semiconductor, que hace que cualquier par recombinde de inmediato. Algo muy en coherencia el modelo de recombinación superficial propuesto en la literatura⁵⁹. Basándonos en ese modelo para la recombinación superficial⁵⁹ nosotros proponemos el siguiente:

$$R^{SU}(\vec{r}, t) = \frac{n(\vec{r}, t)p(\vec{r}, t) - n_i^2(\vec{r})}{\tau_{ps}(n(\vec{r}, t) + n_1) + \tau_{ns}(p(\vec{r}, t) + n_1)} \left(\delta(z_0 - z) + e^{-\left(\frac{z_0 - z}{\sigma_{tds}}\right)^2} \right), \quad (3.18)$$

donde τ_{ps} y τ_{ns} son los tiempos de recombinación de los portadores de carga en la superficie del medio, en general varios órdenes de magnitud menores que en el interior del bloque de semiconductor. El parámetro σ_{tds} típicamente del orden de $50nm$, es la anchura de la distribución superficial de trampas que hay en exceso en superficie respecto del interior. La delta de Dirac¹¹⁶ garantiza,

$$R^{SU}(\vec{r}, t) = \begin{cases} \infty & \text{si } z \rightarrow z_0 \\ 0 & \text{si } z \ll z_0 \end{cases}, \quad (3.19)$$

es decir, que en la superficie ($z = z_0$) el modelo proporciona una recombinación infinita. Esta tasa sólo existe en la superficie, cuando z se aleja de z_0 simplemente $R^{SU}(\vec{r}, t) \rightarrow 0$. Por otro lado, a medida que el haz láser penetra en el material, la eficiencia cuántica converge exponencialmente a ξ , dejando claro que en el caso de menor densidad volúmica de defectos, la contribución a la recombinación debida a estos desaparecerá, y todos los pares electrón-hueco susceptibles de contribuir a la fotocorriente lo van a hacer.

3.1.5. Un modelo para la tasa de generación de portadores de carga

A partir de la definición de eficiencia cuántica y de la definición de flujo de fotones absorbidos por el medio material, podemos expresar la tasa de generación como:

$$G(x, y, z, t) = \eta(z)\phi(x, y, z, t) \quad (3.20)$$

Si definimos $G_0 = I_0 \beta_0 T \xi = \frac{I_0 \lambda_\gamma \alpha(\lambda_\gamma) T \xi}{hc}$ como la densidad volúmica de pico, generada por unidad de tiempo, podemos modelar la tasa de generación de portadores de carga en la zona fotoactiva de la antena fotoconduactiva con las funciones:

$$G(x, y, z, t) = G_0 \left(1 - e^{-\alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)}\right) e^{-\left(4 \ln(2) \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right) + \alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)\right)} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{t - t_0 - \frac{(z_0 - z)n(\lambda_\gamma)}{c}}{\sigma_t(1,76)^{-1}} \right) \quad (3.21)$$

$$G(x, y, z, t) = G_0 \left(1 - e^{-\alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)}\right) e^{-\left(4 \ln(2) \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \left(\frac{t - t_0 - \frac{(z_0 - z)n(\lambda_\gamma)}{c}}{\sigma_t}\right)^2\right) + \alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)\right)} \quad (3.22)$$

$$G(x, y, z, t) = G_0 \left(1 - e^{-\alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)}\right) e^{-\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \left(\frac{t - t_0 - \frac{(z_0 - z)n(\lambda_\gamma)}{c}}{\sigma_t}\right)^2 + \alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)\right)} \quad (3.23)$$

$$G(x, y, z, t) = G_0 \left(1 - e^{-\alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)}\right) e^{-\alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)} \mathbb{Q}_{lm}^2 \left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{\sigma_r} \right) \operatorname{sech}^2 \left(\frac{t - t_0 - \frac{(z_0 - z)n(\lambda_\gamma)}{c}}{\sigma_t(1,76)^{-1}} \right) \quad (3.24)$$

$$G(x, y, z, t) = G_0 \left(e^{-\alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)} - e^{-2\alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)}\right) \mathbb{G}_l \left(\frac{\sqrt{2}x}{\sigma_x^*} \right) \mathbb{G}_m \left(\frac{\sqrt{2}y}{\sigma_y^*} \right) \operatorname{sech}^2 \left(\frac{t - t_0 - \frac{(z_0 - z)n(\lambda_\gamma)}{c}}{\sigma_t(1,76)^{-1}} \right) \quad (3.25)$$

$$G(x, y, z, t) = G_0 \left(1 - e^{-\alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)}\right) e^{-\alpha(\lambda_\gamma)(z_0 - z)} \mathbb{G}_l \left(\frac{\sqrt{2}x}{\sigma_x^*} \right) \mathbb{G}_m \left(\frac{\sqrt{2}y}{\sigma_y^*} \right) e^{-\left(4 \ln(2) \left(\frac{t - t_0 - \frac{(z_0 - z)n(\lambda_\gamma)}{c}}{\sigma_t}\right)^2\right)} \quad (3.26)$$

Todas estas expresiones de la tasa de generación son modelos a explorar que permitirían reproducir un amplio rango de interacciones (redistribuciones de la generación de los portadores de carga), entre el láser y el semiconductor.

No obstante, de todas ellas, la expresión que se ha usado en las simulaciones llevadas a cabo para el estudio de antenas fotoconductivas, es la 3.23. Siendo la más simple de las deducidas 3.21-3.26, posee mayor grado de realismo y capacidad de descripción física que las encontradas en la bibliografía^{73,117-122} para la simulación de antenas fotoconductivas. Como se puede ver en la figura 3.1, para el modelo de la tasa de generación de porta-

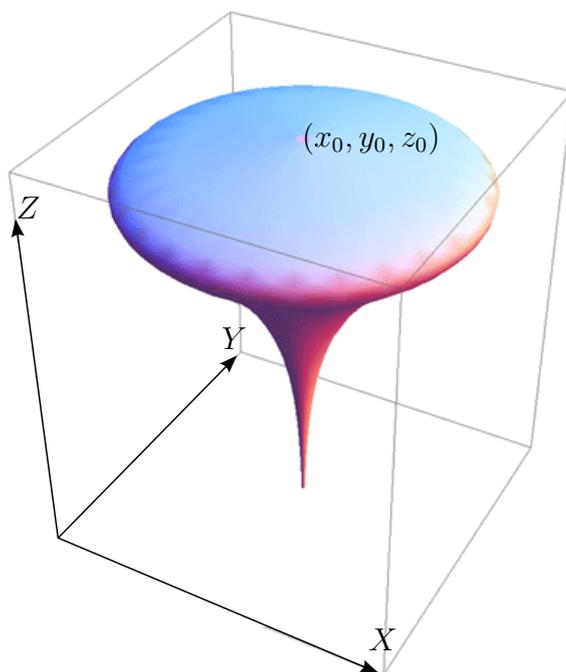


Figura 3.1: Para un instante de tiempo la distribución de la generación de portadores de carga en el interior de un semiconductor de acuerdo al modelo de generación 3.23.

dores de carga 3.23, la estructura de la generación está confinada en una capa de unas pocas micras de profundidad. Esto explica el porqué los modelos de movilidad paralela (2.59,2.63) funcionan adecuadamente.

3.2. Esquema FDTD para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales híbrido

En la aplicación tradicional de FDTD³⁴⁻⁴⁰ sobre las ecuaciones rotacionales de Maxwell,

$$\mu \partial_t \vec{H}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \wedge \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (3.27)$$

$$\varepsilon \partial_t \vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \wedge \vec{H}(\vec{r}, t) - \vec{J}(\vec{r}, t), \quad (3.28)$$

el avance temporal del algoritmo proporciona las magnitudes fundamentales $\vec{E}(\vec{r}, t)$ y $\vec{H}(\vec{r}, t)$ desfasadas $\frac{\Delta t}{2}$, siendo Δt el paso temporal de la discretización en diferencias

finitas. Se llama línea de tiempos al esquema que ilustra como el algoritmo proporciona el valor de los campos a medida que avanza en el tiempo. La figura 3.2 ilustra este esquema para el avance temporal tradicional del método.

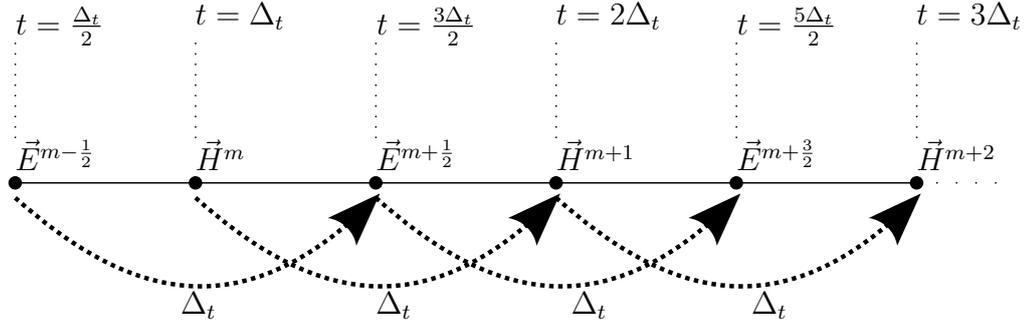


Figura 3.2: Avance temporal del algoritmo tradicional de FDTD³⁴⁻⁴⁰.

En este esquema, cada instante conocido del campo eléctrico viene dado por la expresión $t = (m - \frac{1}{2}) \Delta t$ donde $m = 1, 2, 3, \dots$ y el magnético por la expresión $t = m\Delta t$ donde $m = 1, 2, 3, \dots$. La simulación comienza cuando $m = 1$, es decir, en el instante $t = \frac{\Delta t}{2}$ colocamos el origen de tiempos del régimen transitorio.

3.2.1. Conexión entre el estado estacionario y el transitorio

En este apartado se conecta el resultado estacionario con el formalismo numérico que ha permitido simular el régimen transitorio. Para ello, se presenta el estado estacionario como un punto de partida temporal, que de acuerdo a la fig. 3.2 es $t = \frac{\Delta t}{2}$, y en el que conocemos todas las magnitudes físicas. La caracterización de ese punto de partida viene dado por el conocimiento de las siguientes magnitudes:

- El campo electrostático $\vec{E}_0(\vec{r})$ es conocido en la región fotoconductiva, **y su valor será el mismo para todo instante de tiempo** a lo largo de la simulación del régimen transitorio.
- La concentración espacial de portadores de carga en el instante inicial $t = \frac{\Delta t}{2}$ es conocida, $n_0(\vec{r})$ y $p_0(\vec{r})$, **y será la misma en todo instante de tiempo** a lo largo de la simulación del régimen transitorio. A estas concentraciones las llamaremos **concentraciones del equilibrio**.

3.2. Esquema FDTD para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales híbrido 75

- Los valores de las concentraciones transitorias de los portadores de carga en el instante inicial $t = \frac{\Delta t}{2}$, son conocidos y son nulos $n(\vec{r}, \frac{\Delta t}{2}) = 0$ y $p(\vec{r}, \frac{\Delta t}{2}) = 0$. Estas concentraciones **modificarán su valor a lo largo de la simulación** del régimen transitorio.

- En la discretización de las ecuaciones diferenciales a resolver numéricamente con FDTD³⁴⁻⁴⁰ a lo largo del régimen transitorio, Δt es el paso temporal, y los valores de las concentraciones transitorias de los portadores de carga en el instante $t = \Delta t$, son conocidos. Esos valores son también nulos $n(\vec{r}, \Delta t) = 0$ y $p(\vec{r}, \Delta t) = 0$. Para que esto sea cierto **habrá que elegir el instante de tiempos t_0 de la tasa de generación 3.23** con un valor tal que en el instante $t = \Delta t$ dicha tasa sea nula para todo punto de la región fotoactiva.

- En la simulación del régimen transitorio, dado que las concentraciones transitorias $n(\vec{r}, t)$ y $p(\vec{r}, t)$ parten de un valor nulo, la tasa de recombinación no contendrá la concentración intrínseca al cuadrado de portadores de carga $n_i^2(\vec{r})$, empleándose la expresión 2.80 descrita en el apartado 2.5 del capítulo 2 para modelar la tasa de recombinación.

- El valor del campo eléctrico transitorio en el instante $t = \frac{\Delta t}{2}$ es conocido, y su valor es nulo $\vec{E}(\vec{r}, \frac{\Delta t}{2}) = \vec{0}$. Este campo **modificará su valor a lo largo de la simulación** del régimen transitorio.

- Si como ya se ha dicho Δt es el paso temporal en la aplicación del método de FDTD³⁴⁻⁴⁰, como el campo magnético esta temporalmente desfasado $\frac{\Delta t}{2}$ respecto del eléctrico en el algoritmo de avance temporal, el valor del campo magnético transitorio en el instante $t = \Delta t$ debe ser nulo $\vec{H}(\vec{r}, \Delta t) = \vec{0}$, lo que implica que en el instante inicial $t = \frac{\Delta t}{2}$ lo era $\vec{H}(\vec{r}, \frac{\Delta t}{2}) = \vec{0}$. La condición que garantiza esto es una elección **del instante t_0 de la tasa de generación 3.23 empleada en las simulaciones** tal que en el instante $t = \Delta t$ dicha tasa sea nula para todo punto de la región fotoactiva. Este campo también **modificará su valor a lo largo de la simulación** del régimen transitorio.

3.2.2. Los tipos de corrientes

En una antena fotoconduactiva el inductor del campo electromagnético es, a través de la ley de Ampere-Maxwell, una corriente transitoria. Por las razones argumentadas en el apartado 2.1.1, en el estudio de antenas fotoconductivas, hemos decidido emplear el modelo de difusión y arrastre para describir las corrientes tanto de electrones 2.20 como de huecos 2.21.

En la simulación del régimen transitorio, tendremos un conjunto de magnitudes físicas que llamamos totales, que describirán globalmente el proceso. Estas magnitudes son:

- El campo eléctrico total, que es la suma del campo electrostático más el transitorio,

$$\vec{E}_T(\vec{r}, t) = \vec{E}_0(\vec{r}) + \vec{E}(\vec{r}, t). \quad (3.29)$$

- Las concentraciones de carga total,

$$n_T(\vec{r}, t) = n_0(\vec{r}) + n(\vec{r}, t), \quad (3.30)$$

$$p_T(\vec{r}, t) = p_0(\vec{r}) + p(\vec{r}, t). \quad (3.31)$$

- Las corrientes totales de electrones $J_n(\vec{r}, t)$ y de huecos $J_p(\vec{r}, t)$.

De acuerdo a las definiciones de las corrientes hechas en 2.20 y 2.21, la corrientes totales de electrones $J_n(\vec{r}, t)$ y de huecos $J_p(\vec{r}, t)$ se pueden escribir:

$$\vec{J}_n(\vec{r}, t) = q\bar{\mu}_n(\vec{r}) \odot \left(n_T(\vec{r}, t) \vec{E}_T(\vec{r}, t) + V_T \overrightarrow{\nabla} n_T(\vec{r}, t) \right), \quad (3.32)$$

$$\vec{J}_p(\vec{r}, t) = q\bar{\mu}_p(\vec{r}) \odot \left(p_T(\vec{r}, t) \vec{E}_T(\vec{r}, t) - V_T \overrightarrow{\nabla} p_T(\vec{r}, t) \right). \quad (3.33)$$

Por lo que la corriente total es la suma de ambas $\vec{J}(\vec{r}, t) = \vec{J}_n(\vec{r}, t) + \vec{J}_p(\vec{r}, t)$.

Del mismo modo, las corrientes estacionarias que existen en el semiconductor debidas a la fuente de tensión que polariza la antena, antes de la aplicación de la fuente lumínica, pueden ser escritas como:

$$\vec{J}_{n0}(\vec{r}) = q\bar{\mu}_n(\vec{r}) \odot \left(n_0(\vec{r}) \vec{E}_0(\vec{r}) + V_T \overrightarrow{\nabla} n_0(\vec{r}) \right), \quad (3.34)$$

$$\vec{J}_{p0}(\vec{r}) = q\bar{\mu}_p(\vec{r}) \odot \left(p_0(\vec{r}) \vec{E}_0(\vec{r}) - V_T \overrightarrow{\nabla} p_0(\vec{r}) \right). \quad (3.35)$$

3.2. Esquema FDTD para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales híbrido 77

Con lo que la corriente total estacionaria es la suma de ambas $\vec{J}_0(\vec{r}) = \vec{J}_{n0}(\vec{r}) + \vec{J}_{p0}(\vec{r})$. A partir de las corrientes totales y estacionarias definimos las corrientes transitorias, que son las que radiarán campo electromagnético. Se definen las corrientes transitorias como:

$$\vec{J}_{nT}(\vec{r}, t) = \vec{J}_n(\vec{r}, t) - \vec{J}_{n0}(\vec{r}), \quad (3.36)$$

$$\vec{J}_{pT}(\vec{r}, t) = \vec{J}_p(\vec{r}, t) - \vec{J}_{p0}(\vec{r}). \quad (3.37)$$

Con lo que la corriente total transitoria es la suma de ambas $\vec{J}_T(\vec{r}, t) = \vec{J}_{nT}(\vec{r}, t) + \vec{J}_{pT}(\vec{r}, t) = \vec{J}(\vec{r}, t) - \vec{J}_0(\vec{r})$.

Puede reescribirse de la forma,

$$\vec{J}_T(\vec{r}, t) = \vec{J}_s(\vec{r}, t) + (\bar{\sigma}(\vec{r}, t) + \bar{\sigma}_0(\vec{r})) \odot \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (3.38)$$

donde las conductividades transitoria $\bar{\sigma}(\vec{r}, t)$ y estacionaria $\bar{\sigma}_0(\vec{r})$, así como la corriente de fuentes $\vec{J}_s(\vec{r}, t)$, son dadas por las expresiones:

$$\bar{\sigma}(\vec{r}, t) = q(\bar{\mu}_n(\vec{r})n(\vec{r}, t) + \bar{\mu}_p(\vec{r})p(\vec{r}, t)) \quad (3.39)$$

$$\bar{\sigma}_0(\vec{r}) = q(\bar{\mu}_n(\vec{r})n_0(\vec{r}) + \bar{\mu}_p(\vec{r})p_0(\vec{r})) \quad (3.40)$$

$$\vec{J}_s(\vec{r}, t) = \bar{\sigma}(\vec{r}, t) \odot \vec{E}_0(\vec{r}) + qV_T \left(\bar{\mu}_n(\vec{r}) \odot \vec{\nabla} n(\vec{r}, t) - \bar{\mu}_p(\vec{r}) \odot \vec{\nabla} p(\vec{r}, t) \right). \quad (3.41)$$

Es pues la expresión 3.38 la que ha de ser usada en la ecuación de Ampere-Maxwell, $\varepsilon \partial_t \vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \wedge \vec{H}(\vec{r}, t) - \vec{J}_T(\vec{r}, t)$, para obtener el campo inducido por una antena fotoconducciona a lo largo del régimen transitorio.

3.2.3. El sistema de ecuaciones diferenciales

El sistema de ecuaciones diferenciales híbrido que describe el régimen transitorio está constituido por las siguientes cuatro ecuaciones:

$$\mu \partial_t \vec{H}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \wedge \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (3.42)$$

$$\varepsilon \partial_t \vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \wedge \vec{H}(\vec{r}, t) - \vec{J}_T(\vec{r}, t) \quad (3.43)$$

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = q^{-1} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{nT}(\vec{r}, t) + G(\vec{r}, t) - R(\vec{r}, t) \quad (3.44)$$

$$\partial_t p(\vec{r}, t) = -q^{-1} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{pT}(\vec{r}, t) + G(\vec{r}, t) - R(\vec{r}, t) \quad (3.45)$$

Para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales 3.42-3.45 mediante el algoritmo de FDTD³⁴⁻⁴⁰ se comienza por la división del tiempo en intervalos temporales y la discretización espacial del dominio computacional. En este contexto, para describir el avance temporal del algoritmo que se muestra en la figura 3.3, por legibilidad de la notación, en la variables involucradas se ha omitido la dependencia espacial de las magnitudes fundamentales.

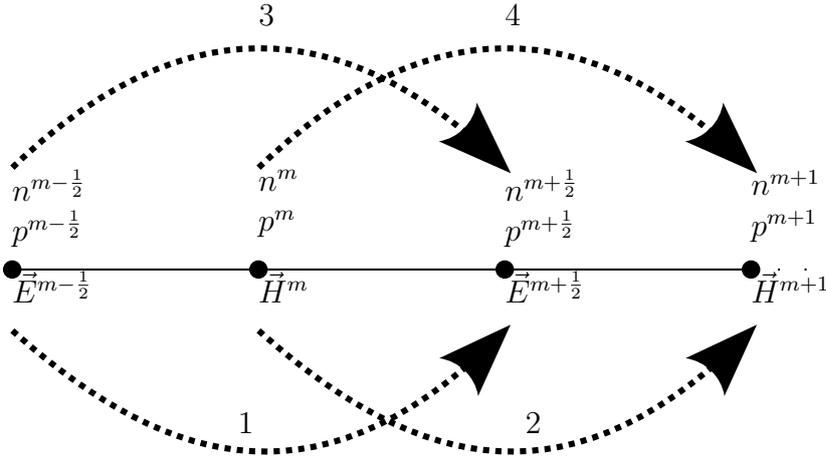


Figura 3.3: Avance temporal del algoritmo de FDTD³⁴⁻⁴⁰ para el sistema de ecuaciones diferenciales híbrido.

La figura 3.3 muestra que las concentraciones de carga se actualizan cada $\frac{\Delta t}{2}$ mientras que las componentes de los campos lo hacen cada Δt . Entre dos componentes temporales de la misma magnitud de campo que el algoritmo nos proporciona siempre se encuentra la concentración de carga eléctrica, también proporcionada por el algoritmo.

En el proceso de discretización de las cuatro ecuaciones diferenciales se ha decidido comenzar por explicar las que hacen alusión a la carga 3.44 y 3.45.

Si discretizamos el paso 3 de la figura 3.3 tendremos:

$$\frac{n^{m+\frac{1}{2}} - n^{m-\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \left[GR^m + q^{-1} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{nT}^m \right] \quad (3.46)$$

$$\frac{p^{m+\frac{1}{2}} - p^{m-\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \left[GR^m - q^{-1} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{pT}^m \right] \quad (3.47)$$

Donde $GR(\vec{r}, t) = G(\vec{r}, t) - R(\vec{r}, t)$ es la diferencia de tasas de recombinación y generación de portadores de carga y por tanto $GR^m = G^m - R^m$.

3.2. Esquema FDTD para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales híbrido **79**

Si discretizamos el paso 4 de la figura 3.3 tendremos:

$$\frac{n^{m+1} - n^m}{\Delta t} = \left[GR^{m+\frac{1}{2}} + q^{-1} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{nT}^{m+\frac{1}{2}} \right] \quad (3.48)$$

$$\frac{p^{m+1} - p^m}{\Delta t} = \left[GR^{m+\frac{1}{2}} - q^{-1} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{pT}^{m+\frac{1}{2}} \right] \quad (3.49)$$

Para discretizar estas ecuaciones tenemos que tener en cuenta la relación entre las corrientes y la función de Bernoulli 2.37. La discretización espacio-temporal del paso 3 mostrado en la figura 3.3 de las ecuaciones 3.44 y 3.45 es:

$$n_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} = n_{i,j,k}^{m-\frac{1}{2}} - \Delta t \left[GR_{i,j,k}^m + V_T^{-1} \sum_{w=1}^3 \left(\bar{\beta}_{nw}^m (\bar{n}_w^m)^T \right) \right] \quad (3.50)$$

$$p_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} = p_{i,j,k}^{m-\frac{1}{2}} - \Delta t \left[GR_{i,j,k}^m + V_T^{-1} \sum_{w=1}^3 \left(\bar{\beta}_{pw}^m (\bar{p}_w^m)^T \right) \right] \quad (3.51)$$

Las magnitudes empleadas en la expresión anterior provienen de reagrupación de parámetros y magnitudes que pueden ser consultados en el apartado II.c del apéndice II. La magnitudes $\bar{\beta}_{nw}^m$, $\bar{\beta}_{pw}^m$, \bar{n}_w^m y \bar{p}_w^m con $w = 1, 2, 3$ se definen en el apéndice II con las expresiones II.22, II.23, II.5 y II.6 respectivamente.

En este paso 3 las magnitudes $\bar{\beta}_{nw}^m$, $\bar{\beta}_{pw}^m$ se definen sobre el conocimiento del instante temporal del campo eléctrico $\vec{E}_{i,j,k}^m = \frac{\vec{E}_{i,j,k}^{m-\frac{1}{2}} + \vec{E}_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}}}{2}$. No obstante $\bar{\beta}_{nw}^m$, $\bar{\beta}_{pw}^m$ albergan en su interior las magnitudes estacionarias aunque no se hayan escrito explícitamente. Empleando las expresiones de los apéndices II.27 y II.28 no sabemos calcular ni $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{nT}$, ni $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{pT}$ y lo que hacemos es calcular $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{nT} = \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n - \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{n0}$ y $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{pT} = \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p - \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{p0}$. Si discretizamos espacio-temporalmente, el paso 4, llegamos a las expresiones:

$$n_{i,j,k}^{m+1} = n_{i,j,k}^m - \Delta t \left[GR_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} + V_T^{-1} \sum_{w=1}^3 \left(\bar{\beta}_{nw}^{m+\frac{1}{2}} (\bar{n}_w^{m+\frac{1}{2}})^T \right) \right] \quad (3.52)$$

$$p_{i,j,k}^{m+1} = p_{i,j,k}^m - \Delta t \left[GR_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} + V_T^{-1} \sum_{w=1}^3 \left(\bar{\beta}_{pw}^{m+\frac{1}{2}} (\bar{p}_w^{m+\frac{1}{2}})^T \right) \right] \quad (3.53)$$

nuevamente las magnitudes $\bar{\beta}_{nw}^{m+\frac{1}{2}}$, $\bar{\beta}_{pw}^{m+\frac{1}{2}}$, $\bar{n}_w^{m+\frac{1}{2}}$ y $\bar{p}_w^{m+\frac{1}{2}}$ con $w = 1, 2, 3$ están definidas en el apéndice II por las expresiones II.24, II.25, II.7 y II.8 respectivamente.

Hasta aquí hemos presentado el procedimiento de discretización de las ecuaciones de la continuidad de la carga. Nos queda, por tanto, aplicar FDTD³⁴⁻⁴⁰ a las tradicionales ecuaciones rotacionales de Maxwell. Aplicar el método sobre la ecuación de Faraday 3.43, correspondiente al paso 2 del esquema de avance temporal mostrado en la figura 3.3, no aporta nada nuevo que no esté ampliamente descrito en la literatura³⁴⁻⁴⁰. Para el paso 1 del esquema temporal mostrado en la figura 3.3 donde se realiza el avance del campo eléctrico y aplicamos el método de FDTD³⁴⁻⁴⁰ para discretizar la ecuación de Ampere-Maxwell 3.42 en la región en la que hay fuentes de corriente, la región fotoactiva, la discretización espacio-temporal de 3.42 en su componente X es:

$$E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} = Ca_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} + Cb_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \left[\frac{H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - H_z|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^m}{\delta_{y_j}} - \frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^m}{\delta_{z_k}} - J_{sx}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \right] \quad (3.54)$$

con una corriente,

$$J_{sx}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = \sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m E_{0x}|_{i+\frac{1}{2},j,k} + qV_T \left(\frac{\mu_n|_{i+\frac{1}{2},j,k} (n_{i+1,j,k}^m - n_{i,j,k}^m) - \mu_p|_{i+\frac{1}{2},j,k} (p_{i+1,j,k}^m - p_{i,j,k}^m)}{\Delta x_i} \right)$$

y una conductividad,

$$\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = q(\mu_n|_{i+\frac{1}{2},j,k} n_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \mu_p|_{i+\frac{1}{2},j,k} p_{i+\frac{1}{2},j,k}^m)$$

Donde los coeficientes $Ca_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m$ y $Cb_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m$ han sido deducidos en el apartado II.d del apéndice II. Y sus valores son:

$$Ca_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = \begin{cases} \frac{2\varepsilon - \Delta t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right)}{2\varepsilon + \Delta t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) \\ e^{-\left(\frac{\Delta t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right)}{\varepsilon} \right)} & \text{si } 2\varepsilon < \Delta t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) \end{cases}$$

3.2. Esquema FDTD para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales híbrido 81

$$Cb_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = \begin{cases} \frac{2\Delta_t}{2\varepsilon+\Delta_t \left(\frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\varepsilon} \right)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta_t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) \\ - \left(\frac{\Delta_t \left(\frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\varepsilon} \right)}{1-e} \right) & \text{si } 2\varepsilon < \Delta_t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) \\ \frac{1-e}{\left(\frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\varepsilon} \right)} & \end{cases}$$

La componente Y es:

$$Ey|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} = Ca_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m Ey|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} + Cb_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \left[\frac{H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m}{\delta_{z_k}} - \frac{H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - H_z|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m}{\delta_{x_i}} - J_{sy}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \right] \quad (3.55)$$

con una corriente,

$$J_{sy}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m = \sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m E_{0y}|_{i,j+\frac{1}{2},k} + qV_T \left(\frac{\mu_n|_{i,j+\frac{1}{2},k} (n_{i,j+1,k}^m - n_{i,j,k}^m) - \mu_p|_{i,j+\frac{1}{2},k} (p_{i,j+1,k}^m - p_{i,j,k}^m)}{\Delta y_j} \right)$$

y una conductividad,

$$\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m = q(\mu_n|_{i,j+\frac{1}{2},k} n_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \mu_p|_{i,j+\frac{1}{2},k} p_{i,j+\frac{1}{2},k}^m)$$

Donde los coeficientes $Ca_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m$ y $Cb_x|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m$ han sido deducidos en el apartado II.d del apéndice II. Y sus valores son:

$$Ca_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m = \begin{cases} \frac{2\varepsilon-\Delta_t \left(\frac{\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \sigma_0|_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\varepsilon} \right)}{2\varepsilon+\Delta_t \left(\frac{\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \sigma_0|_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\varepsilon} \right)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta_t \left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \sigma_0|_{i,j+\frac{1}{2},k} \right) \\ - \left(\frac{\Delta_t \left(\frac{\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \sigma_0|_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\varepsilon} \right)}{e} \right) & \text{si } 2\varepsilon < \Delta_t \left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \sigma_0|_{i,j+\frac{1}{2},k} \right) \\ e & \end{cases}$$

$$Cb_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m = \begin{cases} \frac{2\Delta_t}{2\varepsilon + \Delta_t \left(\frac{\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \sigma_0|_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\varepsilon} \right)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta_t \left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \sigma_0|_{i,j+\frac{1}{2},k} \right) \\ - \left(\frac{\Delta_t \left(\frac{\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \sigma_0|_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\varepsilon} \right)}{\varepsilon} \right) & \\ \frac{1-e}{\left(\frac{\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \sigma_0|_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\varepsilon} \right)} & \text{si } 2\varepsilon < \Delta_t \left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \sigma_0|_{i,j+\frac{1}{2},k} \right) \end{cases}$$

La componente Z es:

$$E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = Ca_y|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} + Cb_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \left[\frac{Hy|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - Hy|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m}{\delta x_i} - \frac{Hx|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - Hx|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m}{\delta y_j} - J_{sz}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \right] \quad (3.56)$$

con una corriente,

$$J_{sz}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m = \sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m E_{0z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} + qV_T \left(\frac{\mu_n|_{i,j,k+\frac{1}{2}} (n_{i,j,k+1}^m - n_{i,j,k}^m) - \mu_p|_{i,j,k+\frac{1}{2}} (p_{i,j,k+1}^m - p_{i,j,k}^m)}{\Delta z_k} \right)$$

y una conductividad,

$$\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m = q(\mu_n|_{i,j,k+\frac{1}{2}} n_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \mu_p|_{i,j,k+\frac{1}{2}} p_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m)$$

Donde los coeficientes $Ca_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m$ y $Cb_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m$ han sido deducidos en apartado II.d del apéndice II. Y sus valores son:

$$Ca_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m = \begin{cases} \frac{2\varepsilon - \Delta_t \left(\frac{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0|_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\varepsilon} \right)}{2\varepsilon + \Delta_t \left(\frac{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0|_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\varepsilon} \right)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta_t \left(\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right) \\ - \left(\frac{\Delta_t \left(\frac{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0|_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\varepsilon} \right)}{\varepsilon} \right) & \\ e & \text{si } 2\varepsilon < \Delta_t \left(\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right) \end{cases}$$

$$Cb_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m = \begin{cases} \frac{2\Delta_t}{2\varepsilon + \Delta_t \left(\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta_t \left(\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right) \\ - \left(\frac{\Delta_t \left(\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right)}{\varepsilon} \right) & \\ \frac{1-e}{\left(\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right)} & \text{si } 2\varepsilon < \Delta_t \left(\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right) \end{cases}$$

Con las expresiones 3.54-3.56 que son la discretización espacio-temporal de 3.42 y las ecuaciones de discretización de la carga 3.50-3.53 se implementa con FDTD³⁴⁻⁴⁰ el algoritmo mostrado en la figura 3.4, que permite simular el régimen transitorio de una antena fotoconduktiva. Algunos puntos de este algoritmo, como el avance del campo magnético correspondiente al punto 2 del diagrama de flujo de la fig.3.4 y al avance de tiempos 2 de la fig. 3.3, así como los medios absorbentes CPMLs que permiten simular un espacio infinito en un dominio computacional finito, pueden ser consultadas en bibliografía^{35,37-40}.

3.2.4. El dominio computacional

Se entiende por dominio computacional al conjunto de elementos físicos reales que mediante algoritmos numéricos, son simulados en un computador. Llamaremos región fundamental de una antena fotoconduktiva a la región fotoactiva de la antena y los contactos metálicos sobre la misma. En este capítulo, por razones de limitación de memoria y tiempo, el dominio computacional se restringe a la región fundamental inmersa en vacío y a unas multicapas llamadas CPMLs o absorbentes^{34,35,37-40}. Las CPMLs son las capas de materia artificial diseñadas para simular problemas abiertos en un espacio computacional finito, es decir producen la extensión simulada del medio material inmerso en ellas hasta el infinito.

Es usual que la frecuencia de corte imponga condiciones sobre el tamaño del grid con el que se malla en FDTD, a modo de ejemplo si la frecuencia de corte estuviese en 6THz necesitaríamos mallar con un grid igual o menor a $25\mu m$. Pero en este caso el grid ha de ser menor a este valor por dos motivos, el primero es dado por la limitación con la que se deduce el modelo de difusión y arrastre que desprecia variaciones espaciales de las fuerzas externas aplicadas. Eso significa que el potencial o campo electrostático ha de cambiar numéricamente poco entre vecinos próximos, y cuando decimos poco nos referimos a un máximo de un 5% o menos del potencial total aplicado, lo que impone una proximidad

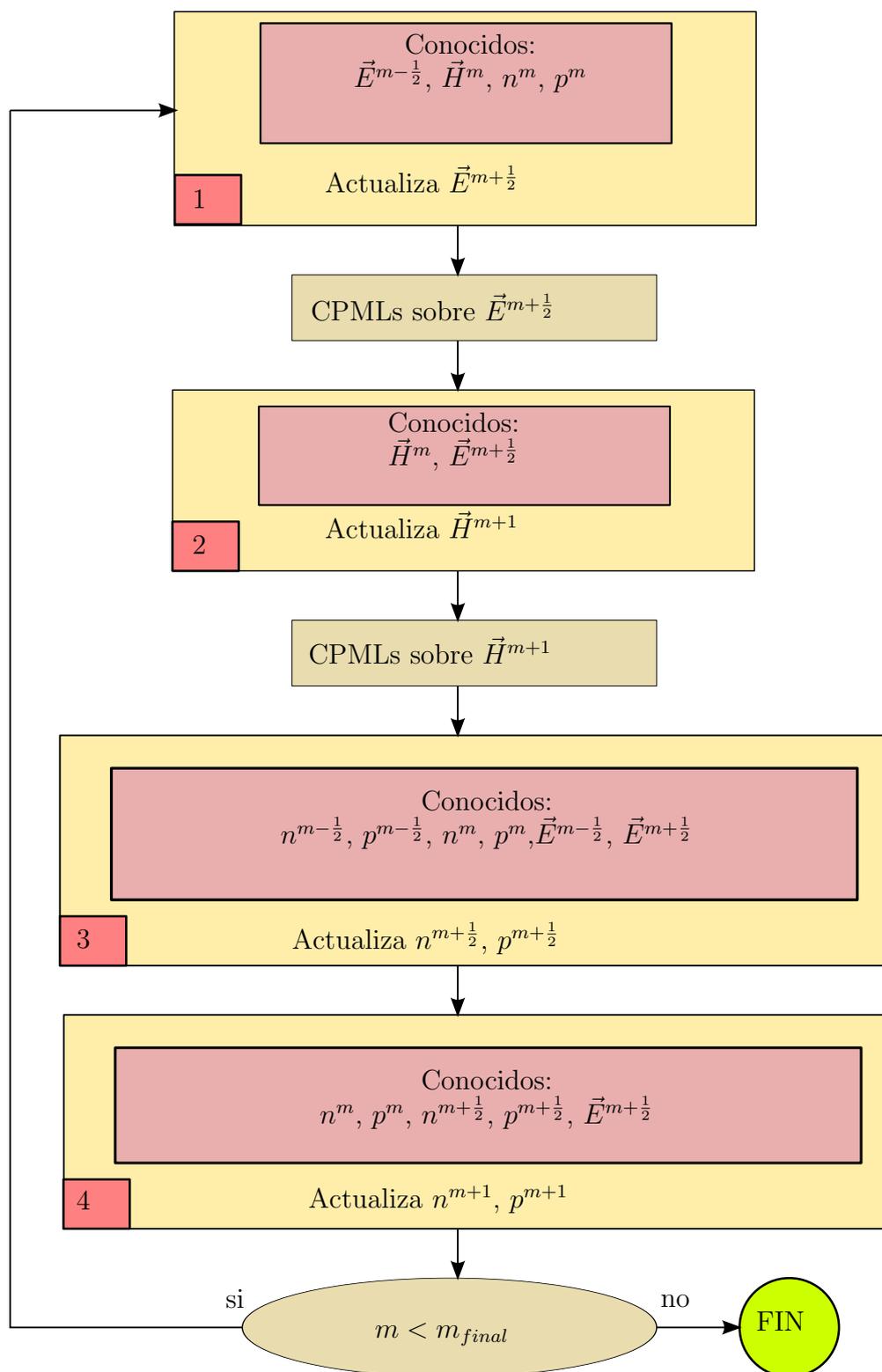


Figura 3.4: Avance temporal del algoritmo híbrido de FDTD³⁴⁻⁴⁰.

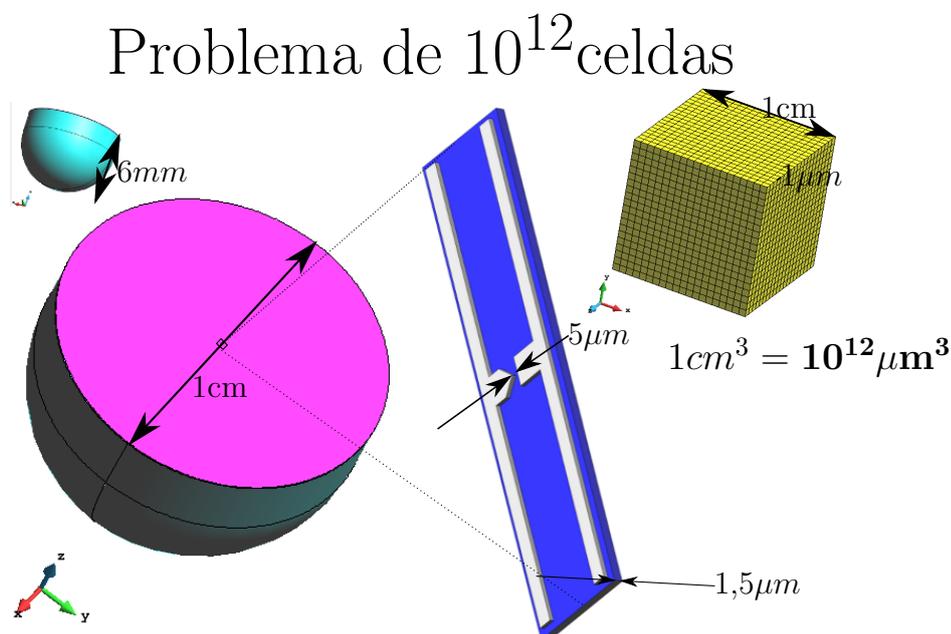
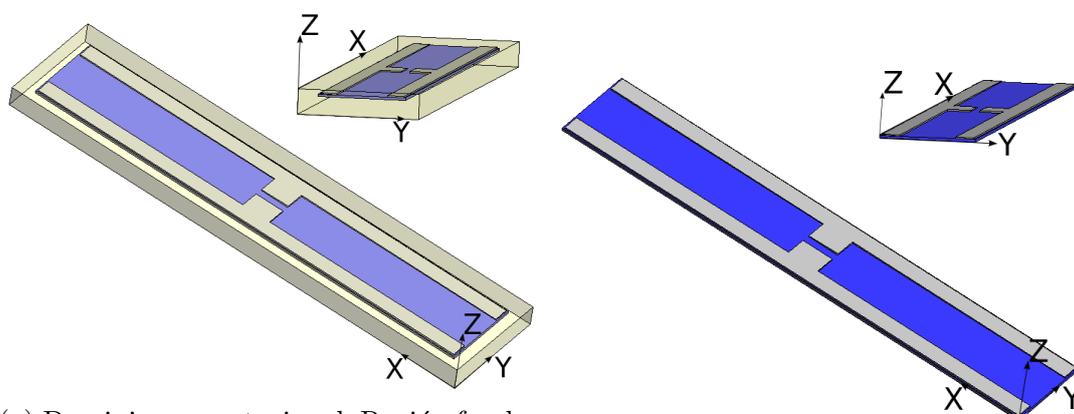
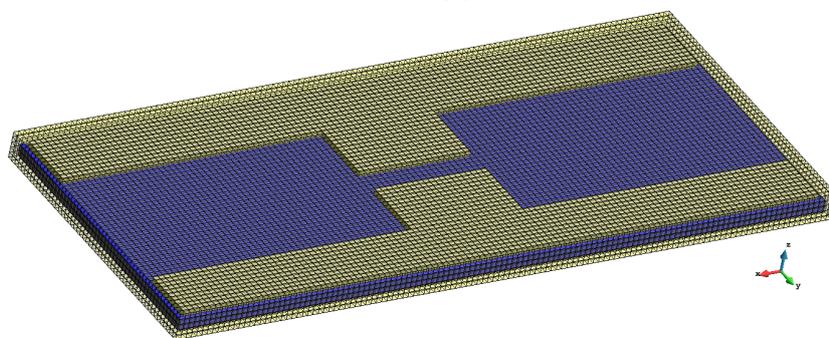


Figura 3.5: Dominio computacional correspondiente a un problema de un cubo con 1 cm de lado que es mallado con hexaedros regulares de $1 \mu\text{m}$. El problema consta de 10^{12} celdas para cada paso del avance temporal.

de los contactos o gap que han de estar separados más de $2 \mu\text{m}$ para no reducir el grid por debajo de 100 nm (ver apartado 2.1.1 del capítulo 2). Esta es una razón por la que no es posible colocar la antena entera. La otra se desprende de las propias dimensiones y peculiaridades geométricas de la antena. En la fig. 3.6a se ilustra la región fundamental de una antena dipolo tipo FF (face-face)²⁵. En esta antena, ampliamente estudiada desde el punto de vista experimental^{25,93–96,98,100,102,123} y teórico^{124,125} la anchura típica del gap es de $5 \mu\text{m}$ (ver fig. 3.5). Para describir pues la región del gap con cierta precisión, debemos reducir el tamaño del mallado a menos de un micrómetro. Al mismo tiempo, en este tipo de antenas es normal colocar una lente de 1 cm de diámetro⁹⁴ o mayor. Si en el dominio computacional introdujésemos la antena completa, con sustrato y lente, rodeada de vacío, tendríamos un dominio computacional enorme. Desde el punto de vista de los recursos computacionales, mallar un centímetro cúbico con celdas de un micrómetro implicaría resolver un problema de una teracelda en cada iteración temporal como ilustra la figura 3.5. Suponiendo una velocidad de $100 \frac{\text{Mcells}}{\text{s}}$ se tardaría tres años en hacer una sola simulación de 10^4 pasos de tiempo. La justificación que permite tomar una



(a) Dominio computacional: Región fundamental de la antena FF inmersa en vacío. (b) Región fundamental de la antena FF.



(c) Mallado del dominio computacional.

Figura 3.6: Dominio computacional correspondiente a la antena FF²⁵ constituido por la región fundamental de la antena situada en vacío.

parte de la antena, la que llamamos fundamental, se apoya en la dirección en la que se estudiará su campo radiado. Ésta será la dirección correspondiente a $\theta = \pi$, cuando θ se mide desde el eje Z como muestra la figura 3.7. En esta dirección el efecto de la geometría de la lente puede ser despreciado al ser la dirección axial y coincidir con el eje óptico de la misma. Por supuesto, que esto no permite tener en cuenta reflexiones internas ni entregas de energía radiadas en la frecuencia de THz a posteriori. Hablamos de la energía que se almacena en el sustrato y la lente de modo reactivo y que se radiaría después de pasar el pulso principal. Tampoco permitiría tener en cuenta los efectos dispersivos que las conductividades de estos medios materiales, lente más sustrato, introducirían en el campo radiado. A pesar de todo, las validaciones de los resultados simulados con datos experimentales, como se verá en el apartado 3.4, muestran que es posible obviar estas partes de la antena en el dominio computacional en determinadas ocasiones y simular sólo

la región fundamental en vacío para obtener un acuerdo razonable entre datos simulados y datos experimentales.

3.2.5. Las condiciones de contorno

En el régimen transitorio, en la región fotoactiva de la antena fotoconductive, al igual que ocurría para la resolución estacionaria de las ecuaciones de continuidad de la carga, es necesario introducir condiciones de contorno. Aplicaremos los dos mismos tipos de condiciones de contorno que se describieron en el apartado 2.6 sobre las concentraciones de carga. Salvo que en este caso, la condición de Dirichlet cambia, ya que el equilibrio referido a concentraciones transitorias de carga implica que estas han de permanecer nulas en los contactos ya que en el instante inicial lo eran. Es decir que $n(\vec{r}_{\Omega_D}, t) = 0$ y $p(\vec{r}_{\Omega_D}, t) = 0$. Por otro lado, las condiciones de Neumann son también aplicadas cada vez que se actualiza un estado temporal de la carga para mantener la autoconsistencia de la solución respecto a la carga y evitar flujos virtuales de carga que físicamente son imposibles.

Respecto a las condiciones de contorno aplicadas sobre los campos electromagnéticos \vec{E} y \vec{H} recordar que los algoritmos de avance temporal del campo \vec{E} no actualizan este en la última capa de la PML, es decir, ponemos condiciones de contorno PEC, pero al existir las PMLs, simplemente, su amplitud en el recorrido de entrada y rebote cae tanto que se pueden considerar absorbidos numéricamente en estas regiones, que, en definitiva, para eso están implementadas.

3.2.6. El campo radiado

Para determinar el campo radiado hemos empleado el teorema de equivalencia^{34,35,37,126-128} mediante el algoritmo (near field to far field NF-FF) de transformación de campo cercano en campo lejano descrito en la bibliografía^{34,35,129-131}. La figura 3.7 muestra una onda plana que se propaga en la dirección del eje Z en sentido decreciente, linealmente polarizada en la dirección Y. Para este caso se ha obtenido la transformación de campo cercano a campo lejano en coordenadas esféricas para la dirección ($\theta = \pi, \varphi = 0$), donde φ es medida desde el eje de las X. Se tiene que $E_\theta \ll E_\varphi$, no obstante la corriente equivalente generada en la antena no es un dipolo con orientación perfecta en el eje Y. Se observa que tiene una gran componente en el eje Z como se

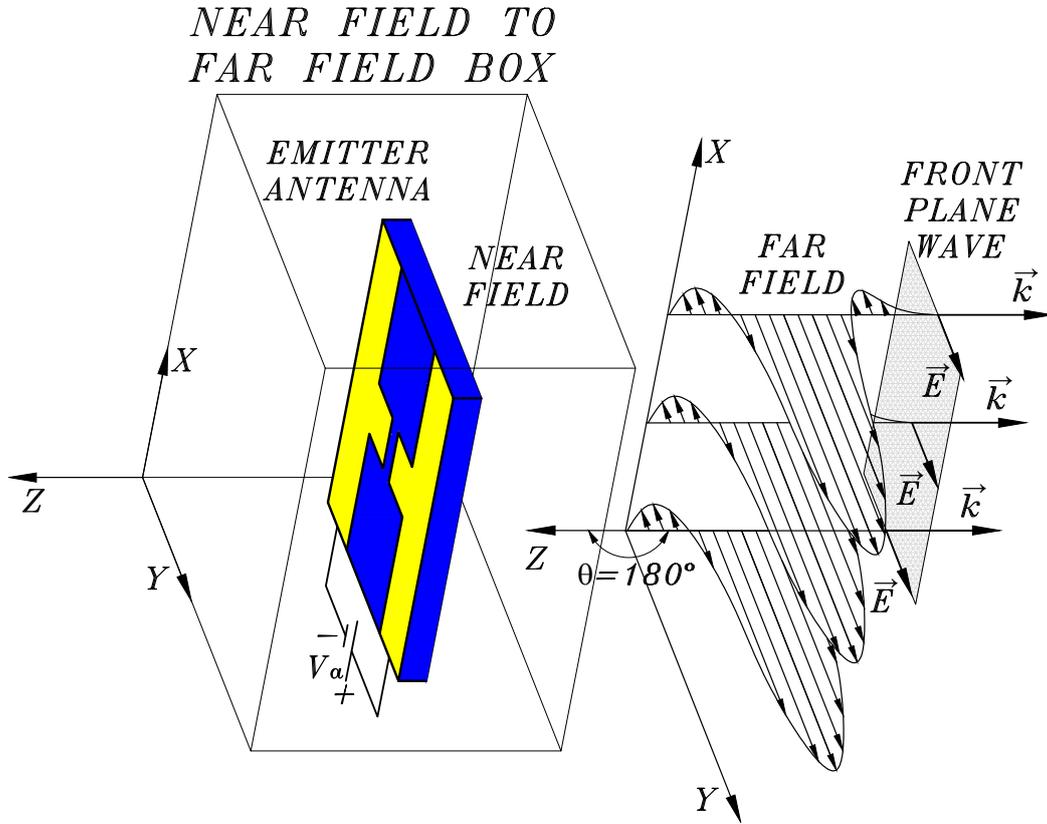


Figura 3.7: Caja de transformación de campo cercano a lejano y onda linealmente polarizada en la dirección del dipolo fotoconductorivo.

apunta también en bibliografía^{46,50,51}. En cualquier caso, la componente más intensa del campo radiado, $E_{THz}(t) \equiv E_y(t) \equiv E_\varphi(t)$ es la que consideramos como emisión de la antena.

La necesidad de emplear este algoritmo de transformación, es fácilmente justificable si se tiene en cuenta que la longitud de onda asociada a 1THz es $\lambda = 300\mu m$ y la distancia de Fraunhofer¹³² es $d_f = \frac{2D^2}{\lambda} \simeq 0,67m$ para una antena de 1cm de diámetro. Distancia que va mucho más allá del dominio computacional. Sería inviable colocar una sonda numérica a esta distancia cuando el grid del mallado es menor de $1\mu m$. Además, según el teorema de muestreo de Nyquist-Shannon^{133,134}, para poder replicar con exactitud la forma de la onda electromagnética es necesario que la frecuencia de muestreo sea superior al doble de la máxima frecuencia a muestrear. Si suponemos que la frecuencia más alta de emi-

sión para una antena fotoconducciona está localizada entorno a $6THz$ habría que mallar con $25\mu m$ para cumplir Nyquist-Shannon^{133,134}, y eso son mas de 10^4 celdas desde la antena hasta la sonda numérica. Por esta razón es imprescindible el uso del teorema de la transformación NF-FF para obtener el campo radiado por la antena.

3.2.7. El efecto de la recepción

Para llevar a cabo una comparación de nuestros resultados simulados con datos experimentales que validen el procedimiento de simulación, tenemos que comparar las mismas magnitudes. Experimentalmente existen diferentes formas de medir el campo emitido por

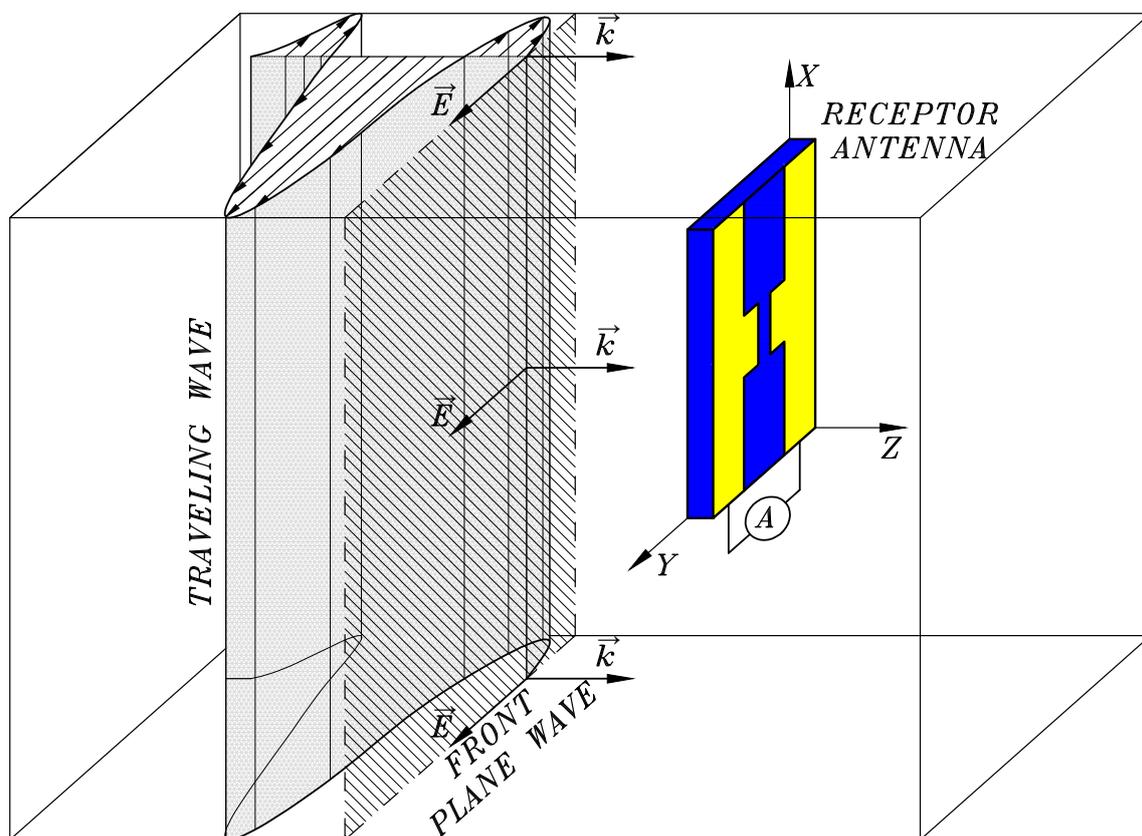


Figura 3.8: Caja de transformación de campo cercano a lejano y onda linealmente polarizada en la dirección del dipolo fotoconducciona.

una antena fotoconducciona. Una de ellas es usar una antena fotoconducciona receptora. El

proceso de recepción es simple, se coloca la antena receptora a una distancia conocida de la emisora y se sincroniza el pulso láser con un retardador, de forma tal que éste induzca una fotoconductividad en la antena receptora en el instante en que la onda electromagnética que proviene de la emisora llegue a ésta. Así, el campo eléctrico de la onda incidente barre la carga inducida, generando una corriente que es amplificada y después medida con un amperímetro. En la literatura se narran procesos experimentales de medición en los que no se emplea lente en la detección⁹⁴. Con lo que podemos representar la región fundamental de una antena receptora tipo FF como la ilustrada en la figura 3.8, recibiendo la onda emitida por una antena fotoconductiva emisora. De todos los efectos que la antena receptora introduce sobre la señal, el más notable es la convolución del campo electromagnético por la fotoconductividad transitoria $\sigma_c(t)$ que se induce en la antena receptora **no polarizada con una fuente de tensión externa**^{4,11,95,102,125}.

$$i_{THz}(t) \propto \int \sigma_c(t - \tau) E_{THz}(\tau) d\tau \quad (3.57)$$

Esta expresión 3.57 es la que se empleará en este capítulo para generar una magnitud que es aproximadamente la corriente en el detector, comparable con lo que un experimental mediría en la detección de la onda electromagnética usando una antena fotoactiva como receptor.

Cuanto más se aproxima la fotoconductividad transitoria $\sigma_c(t)$ en la antena receptora a una delta de Dirac¹¹⁶ más se parecerá la fotocorriente medida i_{THz} al campo que se pretende muestrear $E_{THz}(t)$ ya que $E_{THz}(t) = \int \delta(t - \tau) E_{THz}(\tau) d\tau$. Si aproximamos el sistema receptor por una linealización del mismo, de la expresión 3.57 deducimos que la fotoconductividad sería la respuesta impulsiva de este sistema.

Cálculo de la fotoconductividad $\sigma_c(t)$ de la antena receptora

La fotoconductividad de la antena receptora, se determina simulando una antena sin polarizar e integrando la densidad volúmica de fotoconductividad en el corte transversal que se localiza en la mitad del gap de la antena. En la figura 3.9 se ilustra un esquema de antena receptora en el cual se ha pintado el versor diferencial $d\vec{S}_{xz}$ para indicar la dirección ortogonal al plano de integración. Al mismo tiempo, la coordenada y_{cut} ilustra la posición del corte en el eje y , de modo que si $\sigma(\vec{r}, t) = \sigma(x, y, z, t)$ es la densidad

volúmica de fotoconductividad transitoria en el instante t será:

$$\sigma_c(t) = \int \sigma(x, y_{cut}, z, t) dx dz \quad (3.58)$$

Hemos comprobado que para la antena FF, escogida una celda abajo del punto central del impacto láser, $(x_0, y_0, z_0 - \Delta z_{k \equiv z_0})$ o de la tasa de generación 3.23, punto de la cara superior de la región fotoactiva, la fotoconductividad integrada sobre el corte coincide con la densidad volúmica de fotoconductividad en dicho punto en forma, pero no en módulo. Si se normalizan y comparan ambas funciones coinciden.

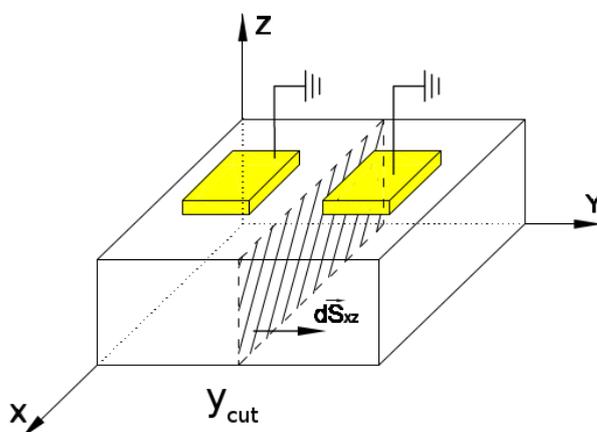


Figura 3.9: Corte en el plano XZ con un valor y_{cut} , tal que el corte se localiza en la mitad del gap de la antena fotoconductor.

3.3. La importancia del modelo de movilidad en el análisis del régimen transitorio

En este apartado tratamos de ilustrar la importancia del modelo de movilidad en el régimen transitorio, para ello, se ha simulado la antena 3.12a con los contactos paralelos al eje X más cortos (el stripline) en los casos de movilidad constante, 2.59, 2.63 y 2.71 comentados en el apartado 2.4.1 del capítulo 2. En la figura 3.11, además de las curvas en frecuencia, se muestran las soluciones estacionarias correspondientes al modelo de movilidad de Wien 2.63. De este modo se da una idea de los tamaños de los contactos

metálicos usados en este caso concreto. La fotoconductividad empleada en la obtención de la fotocorriente ha sido la ya obtenida en el punto anterior. En esencia, se trata del mismo dipolo FF ya simulado en el apartado 3.4 y por ende los datos experimentales de referencia son los tomados de la bibliografía⁹⁶.

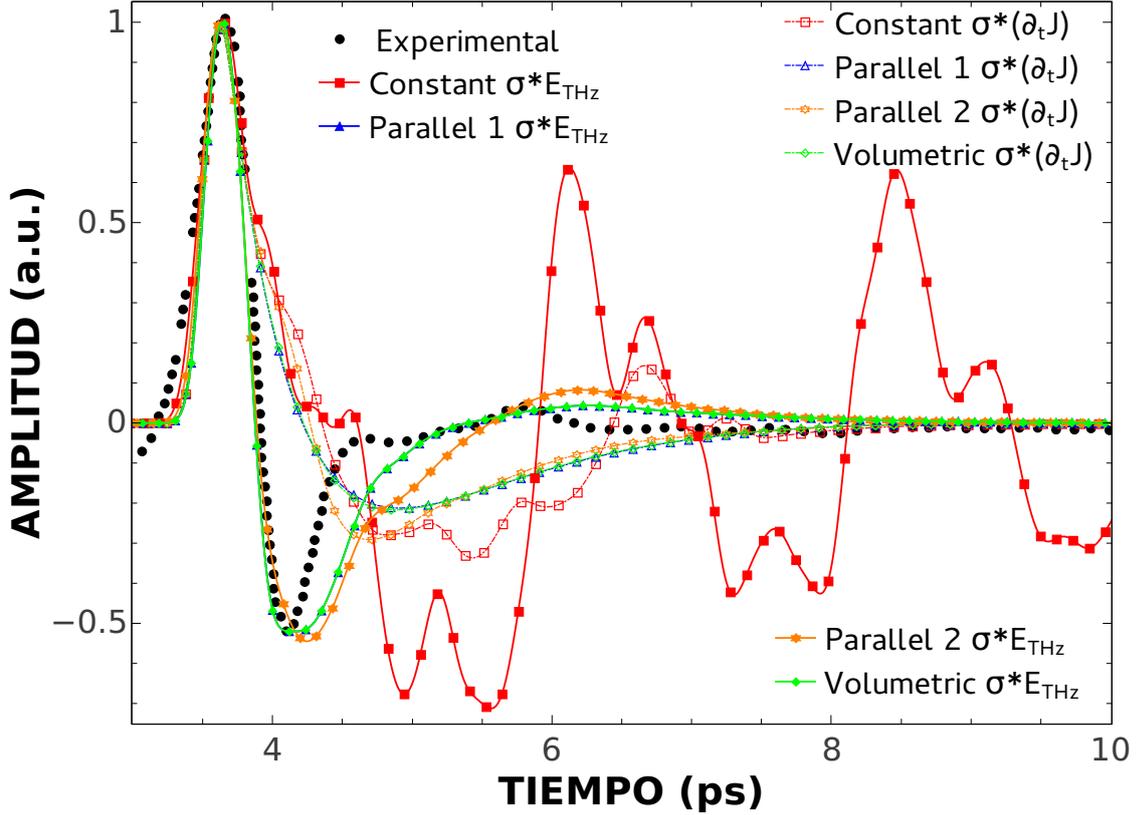


Figura 3.10: Validación en frecuencia entre el dispositivo simulado 3.14a y los datos experimentales obtenidos en bibliografía⁹⁶.

Aunque no sea estrictamente cierto, como se pone de manifiesto en la literatura¹³⁵, en elementos de corrientes pequeños, y hablamos del caso del dipolo FF, el campo se aproxima por la derivada temporal de la corriente^{4,96,124,125,136,137} de modo que:

$$E_{THz}(t) \propto \partial_t J(t) \quad (3.59)$$

Ése es el motivo de haber comparado también la convolución de la derivada de la densidad volúmica de la fotocorriente medida en el punto $(x_0, y_0, z_0 - \Delta z_{k \equiv z_0})$, que como ya se ha comentado, es una celda debajo de donde tiende lugar el impac-

to del láser. Las correspondencias de las leyendas de las figuras 3.10 y 3.11 son:

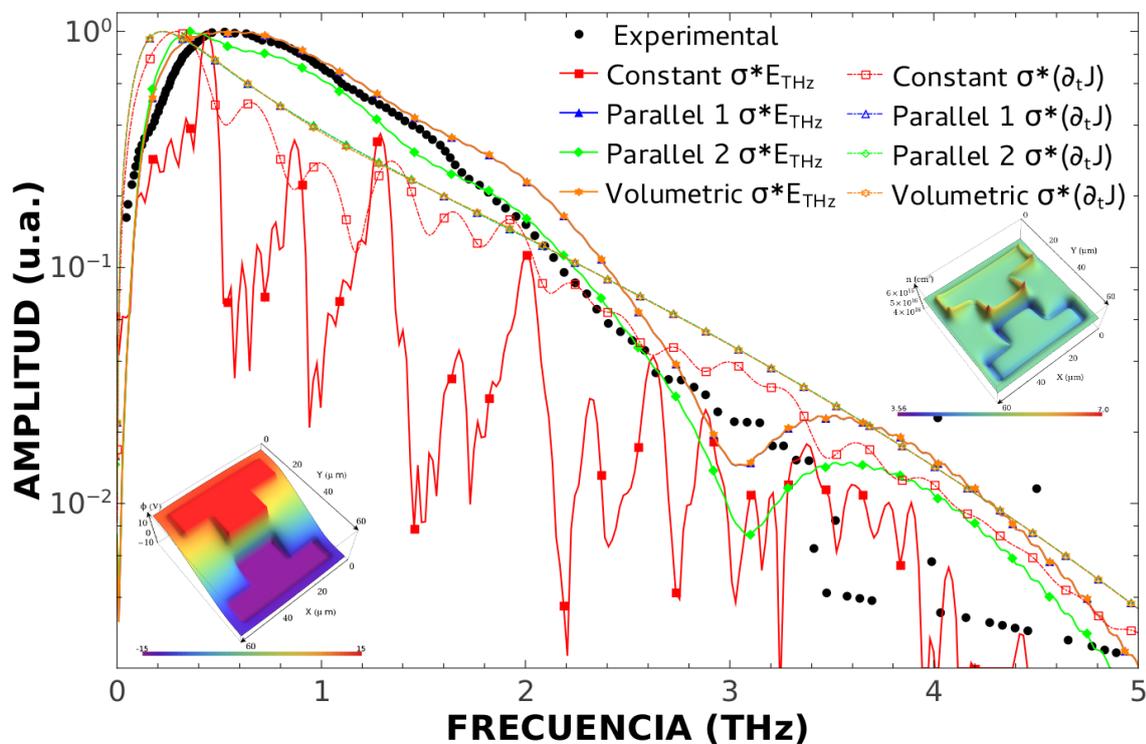


Figura 3.11: Validación en tiempo, que compara el dispositivo simulado 3.14a y los datos experimentales⁹⁶ obtenidos en bibliografía.

Leyenda	Modelo de movilidad
Constant	Las movilidades son constantes $\mu_n(\vec{r}) = cte$ y $\mu_p(\vec{r}) = cte$
Parallel 1	Se ha empleado el modelo de movilidad de Wien 2.63
Parallel 2	Se ha empleado el modelo de movilidad de Caughey 2.59
Volumetric	Se ha empleado el modelo de movilidad de Lombardi 2.71

3.4. Validación del algoritmo

La validación del algoritmo transitorio se ha realizado comparando pulsos de corriente con datos experimentales⁹⁶. Se han comparado dos dispositivos fotoconductorivos con diferente geometría. En primer lugar, un dipolo FF mostrado en la figura 3.12a. Los parámetros empleados en la simulación de este dispositivo pueden ser consultados en 3.1.

3. Algoritmos para la simulación del régimen transitorio de una antena fotoconductive
 94 modelada por corrientes de difusión y arrastre

Parámetros definidos para el régimen transitorio de las simulaciones llevadas a cabo en el apartado 3.4	
Parámetros correspondientes a la función de recombinación ^{29,89}	
Electrones	Huecos
$\tau_n = 0.3ps$ $C_{An} = 7 \cdot 10^{-30}cm^6s^{-1}$ $n_1 = 4.5 \cdot 10^6cm^{-3}$	$\tau_p = 0.4ps$ $C_{Ap} = 7 \cdot 10^{-30}cm^6s^{-1}$ $p_1 = 4.5 \cdot 10^6cm^{-3}$
Dopado y concentración de impurezas ⁹⁰	
Dipolo FF $N_D^+ = 10^{16}cm^{-3}$	$n_i = 9 \cdot 10^6cm^{-3}$
Stipline $N_D^+ = 1.3 \cdot 10^{16}cm^{-3}$	$n_i = 9 \cdot 10^6cm^{-3}$
Modelo de movilidad de 2.4.1 cuando $\vec{E} = \vec{0}$ teniendo en cuenta el dopado ⁹¹	
$\mu_{n0} = 8000 \frac{cm^2}{Vs}$	$\mu_{p0} = 400 \frac{cm^2}{Vs}$
Permeabilidad y permitividad relativas.	
$\epsilon_r = 13.26$ si $\omega < 6THz$ ⁹² $\mu_r = 1.0$	
Parámetros de la función de generación láser	
$\alpha = 1,0\mu m^{-1}$ ¹¹² $\xi = 0,9999$ $I_0 = 5 \frac{W}{\mu m^2}$ $n_{GaAs}(\lambda_\gamma) = 3,3$ tomado de bibliografía ¹³⁸ $v_m = \frac{c_0}{n_{GaAs}}$	(1-R)=0.9999 $\lambda_\gamma = 780nm$ $\sigma_x = 1,8\mu m$ $\sigma_y = 1,8\mu m$ $\sigma_t = 80fs$
Voltaje aplicado al dipolo FF $V_a = 30V$ Voltaje aplicado al stripline $V_a = 200V$	

Tabla 3.1: Tabla correspondiente a los parámetros numéricos usado en la simulación de validación del proceso transitorio del dipolo FF y del stripline tomados de la misma fuente bibliográfica⁹⁵.

El segundo dispositivo que se ha empleado para validar al algoritmo numérico transitorio, es la antena stripline mostrada en la figura 3.14a y sacada de la misma fuente bibliográfica⁹⁶.

Los parámetros empleados en la simulación de este dispositivo también pueden ser consultados en 3.1.

El campo radiado por ambas antenas ha sido convertido en fotocorriente mediante el empleo de la expresión 3.57 y la fotoconductividad ha sido obtenida mediante la ecuación 3.58, simulando la antena mostrada en la figura 3.12a sin polarizar.

En las comparativas temporales de validación 3.13b y 3.15b se ha comparado no sólo los pulsos de corriente, sino que se han representado las fotoconductividades y los campos

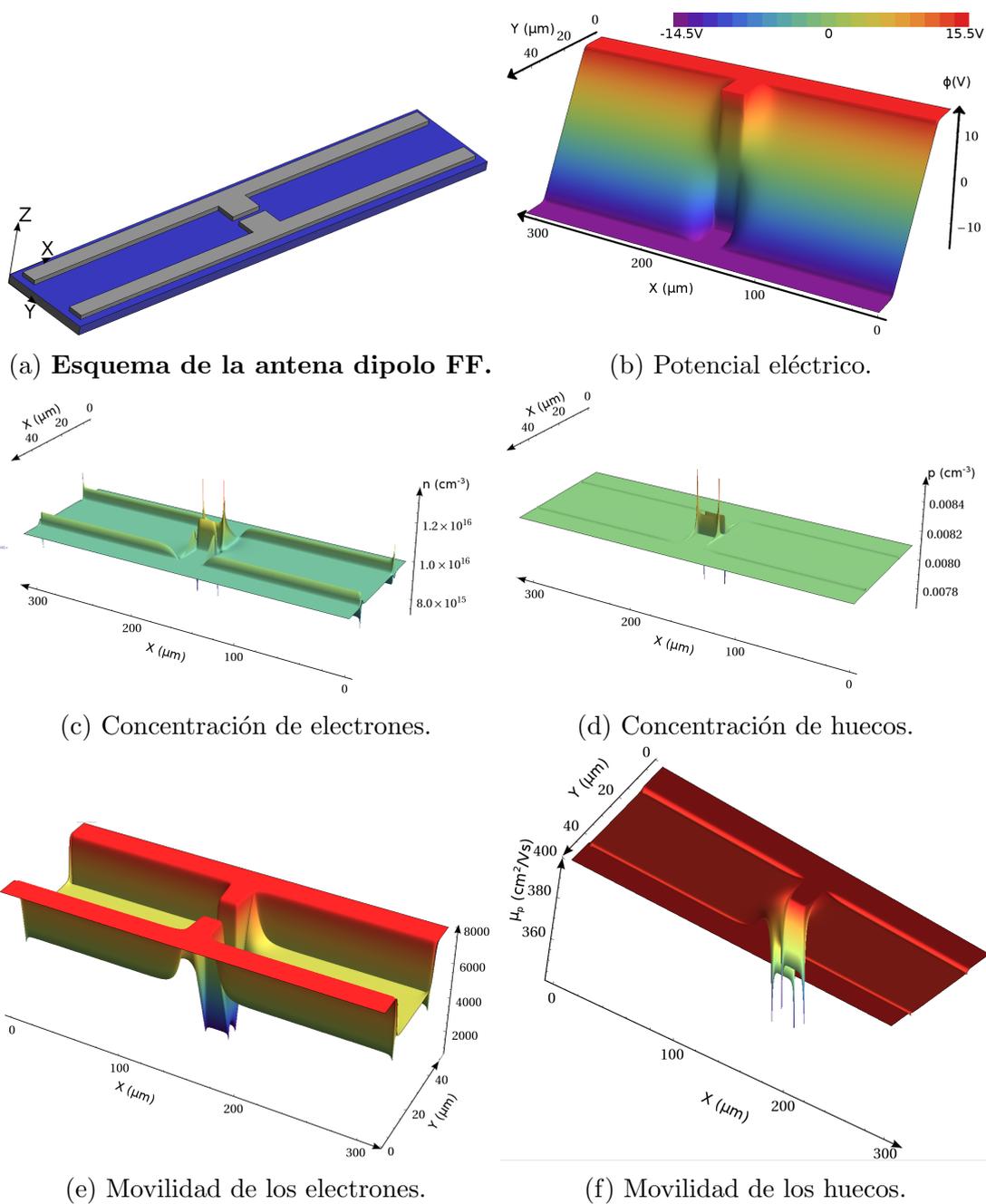
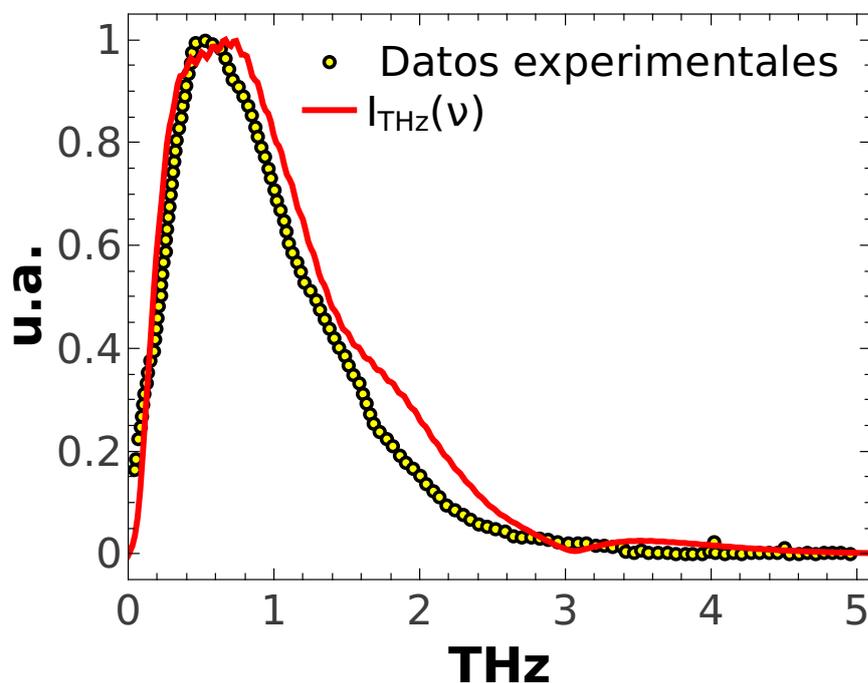
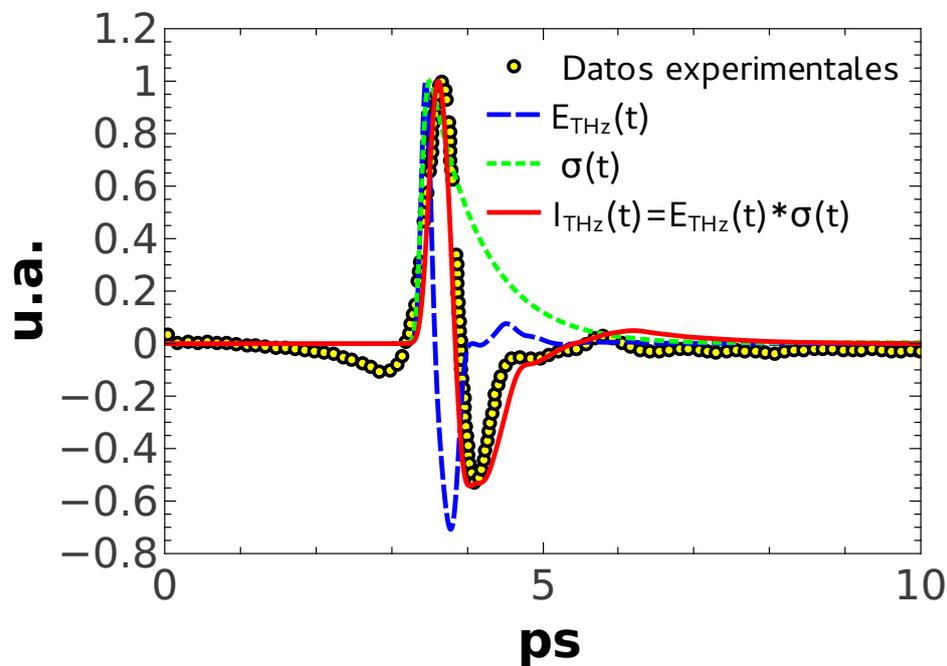


Figura 3.12: 3D de la antena emisora dipolo FF.

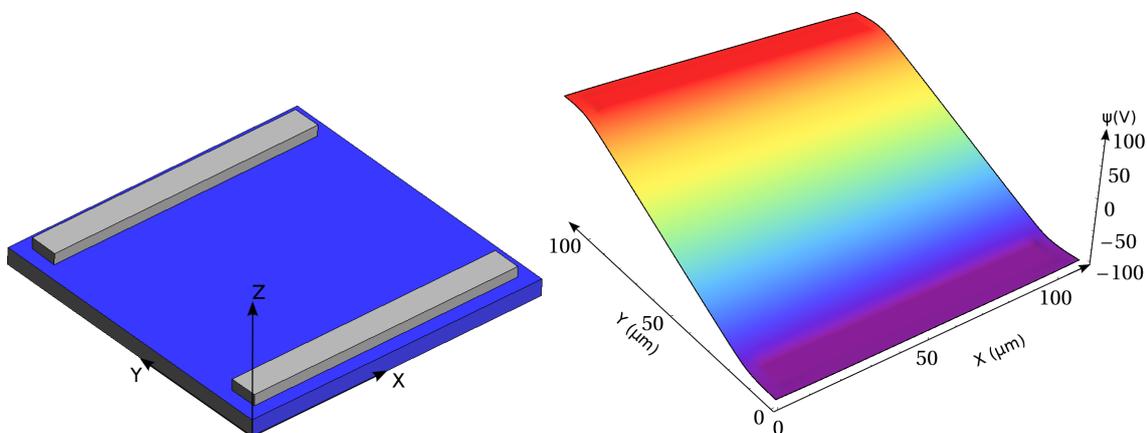


(a) Validación en frecuencia, que compara el dispositivo simulado 3.12a y los datos experimentales obtenidos en bibliografía⁹⁶.



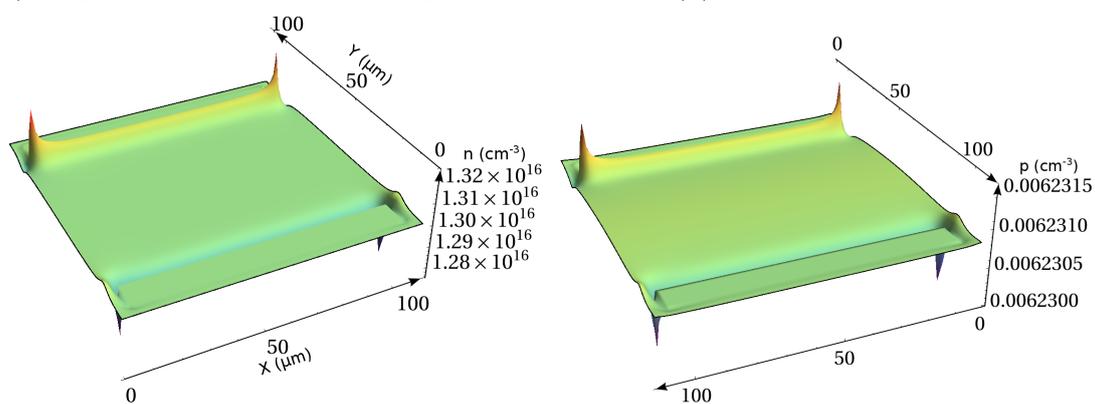
(b) Validación en tiempo, que compara el dispositivo simulado 3.12a y los datos experimentales⁹⁶ obtenidos en bibliografía.

Figura 3.13: Comparativas de validación con datos experimentales⁹⁶ y simulación de una antena dipolo FF .



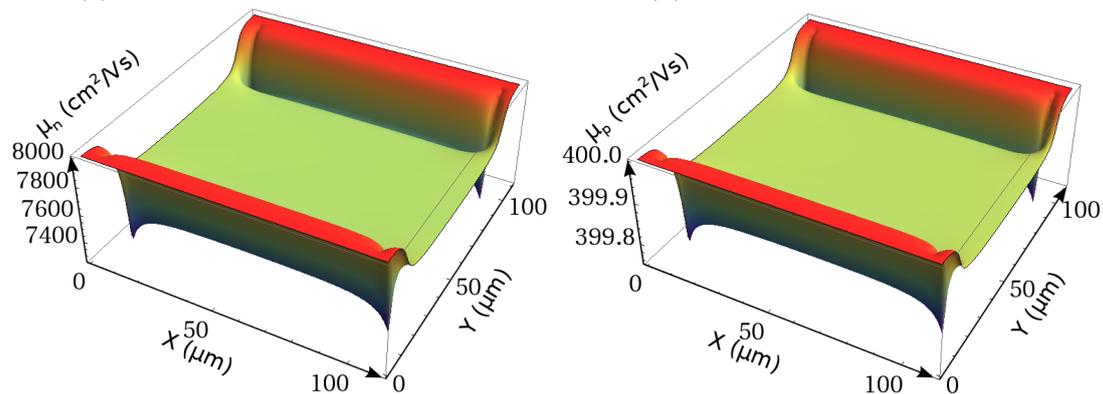
(a) Esquema de la antena Stripline.

(b) Potencial eléctrico.



(c) Concentración de electrones.

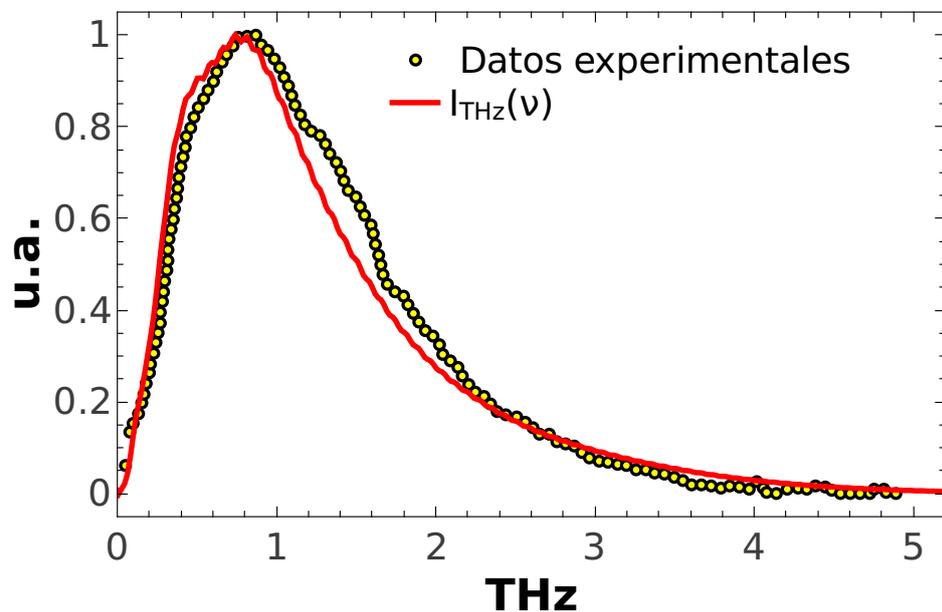
(d) Concentración de huecos.



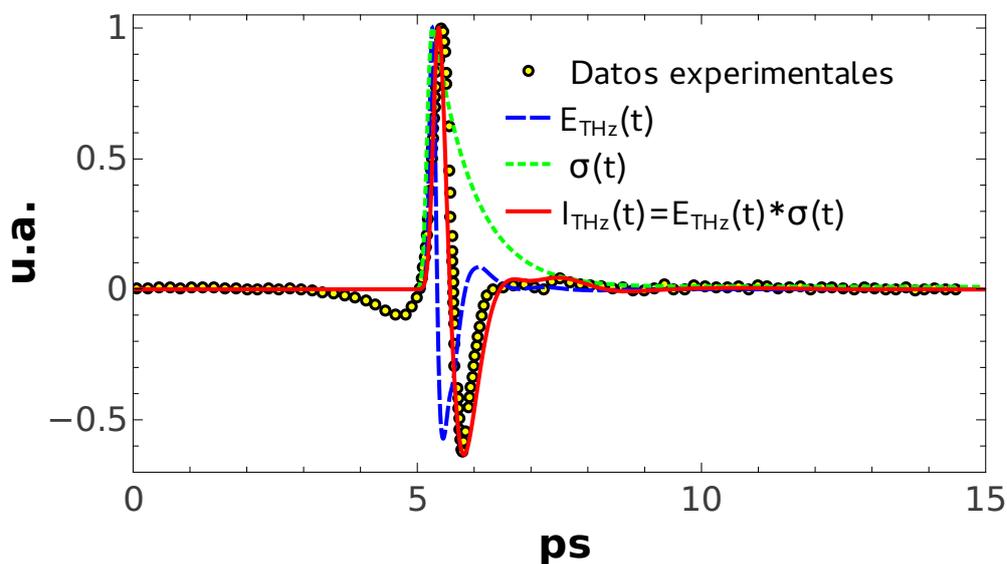
(e) Movilidad de los electrones.

(f) Movilidad de los huecos.

Figura 3.14: 3D de la antena emisora Stripline.



(a) Validación en frecuencia, que compara el dispositivo simulado 3.14a y los datos experimentales obtenidos en bibliografía⁹⁶.



(b) Validación en tiempo, que compara el dispositivo simulado 3.14a y los datos experimentales⁹⁶ obtenidos en bibliografía.

Figura 3.15: Comparativas de validación con datos experimentales⁹⁶ y simulación de una antena Stripline .

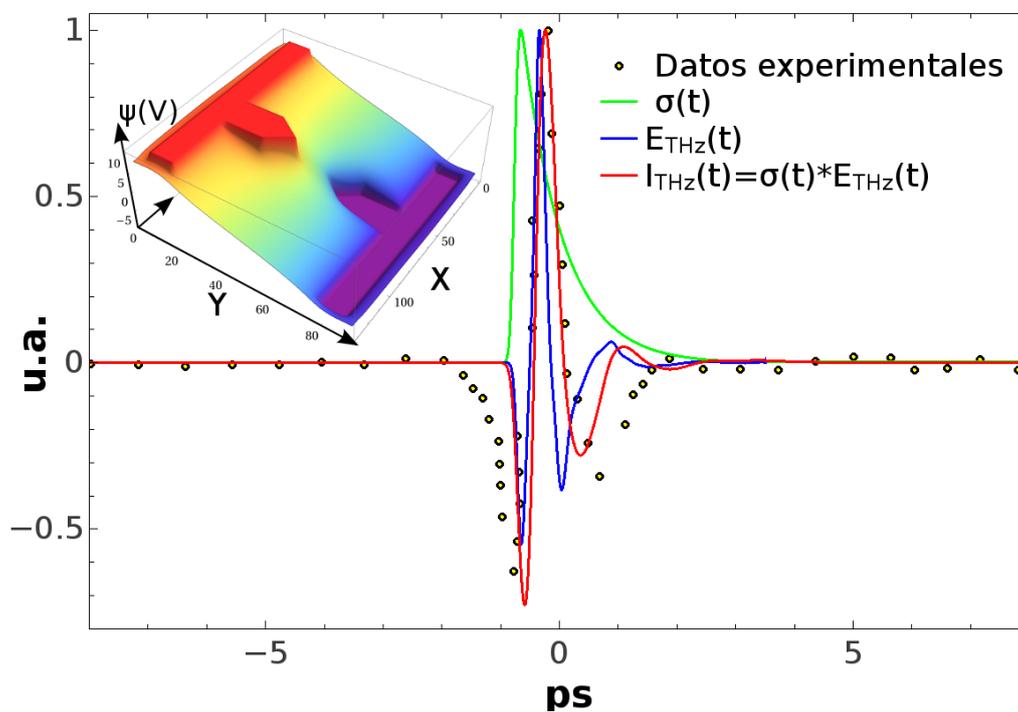


Figura 3.16: Comparativa temporal correspondiente a la antena TT0.

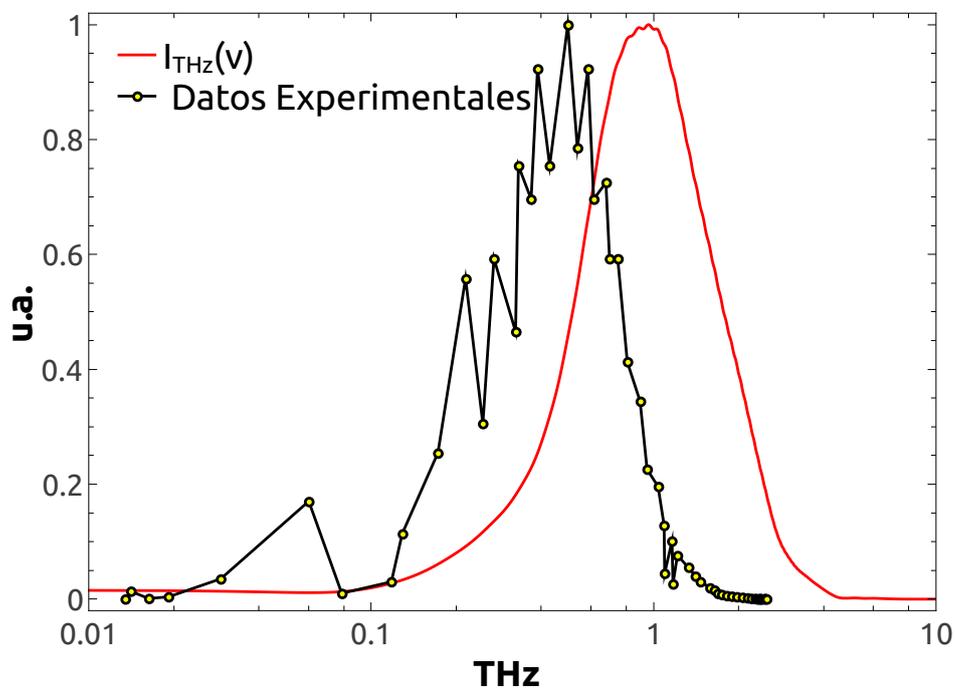


Figura 3.17: Comparativa en frecuencia con la antena TT0.

radiados sin convolucionar.

A pesar de los resultados obtenidos, la aproximación 3.57 no deja de ser nada más que eso, una forma de incluir la recepción de la onda electromagnética para poder comparar con datos experimentales. No obstante, hay demasiadas aproximaciones en la obtención de los resultados y que en ciertos casos, como muestra las comparativas con datos experimentales⁹⁸, para un dipolo TT0 mostrado en la figura 3.17, el acuerdo de la simulación no es del todo satisfactorio.

4

Estudio mediante algoritmos basados en FDTD de la eficiencia de emisión de las antenas fotoconductoras

4.1. Eficiencia de una antenas fotoconductoras	102
4.1.1. Potencia y energía radiada por una antena fotoconductoras emi- sora	103
4.1.2. Potencia y energía suministrada por la fuente de tensión externa	106
4.1.3. Potencia y energía suministrada por el láser	108
4.2. Resultados y análisis	109
4.3. Validación	118

En los capítulos anteriores hemos deducido los algoritmos necesarios para simular el régimen transitorio de una antena fotoconductoras. En este capítulo emplearemos esos algoritmos para hacer un estudio de la eficiencia de emisión de varias antenas fotoconductoras, considerando cuatro parámetros de interés:

- La forma de los contactos metálicos sobre la región semiconductor²⁵.
- El valor de la tensión aplicada a estos contactos.
- La potencia del láser empleado.
- La concentración de impurezas presentes en la región fotoconductoras.

Los dos primeros puntos se centran en el mismo concepto, la polarización del sustrato a través del campo electrostático $\vec{E}_0(\vec{r})$. El tercer punto está directamente relacionado con la cantidad de carga inducida durante el régimen transitorio $n(\vec{r}, t)$ y $p(\vec{r}, t)$. El cuarto punto da cuenta de la concentración de carga electrostática $n_0(\vec{r})$ y $p_0(\vec{r})$.

En definitiva, todos estos puntos están relacionados con elementos que juegan un rol decisivo en la corriente transitoria, que es la inductora del campo electromagnético radiado por la antena.

4.1. Eficiencia de una antenas fotoconductoras

Se llama eficiencia de una máquina al cociente entre la energía “deseada” y la energía “necesaria”⁸⁷. En analogía, se define la eficiencia de una antena como el cociente entre la energía radiada por la antena y la suministrada a la misma.

$$\eta_T = \frac{W_{rad}}{W_{sum}} \quad (4.1)$$

Donde la energía suministrada a la antena es la suma de la suministrada por el láser más la suministrada por la fuente externa de tensión.

En el diseño de antenas es muy útil hablar de la eficiencia de una antena para una frecuencia determinada. No obstante, en antenas que emiten con un determinado ancho

de banda, como es el caso de las antenas fotoconductorivas, se habla de eficiencia en un rango de frecuencias como:

$$\eta_\nu = \frac{W_{rad}^{\nu_c}}{W_{sum}} \quad (4.2)$$

Donde $W_{rad}^{\nu_c}$ es la energía radiada por la antena en un rango de frecuencias, entorno a una frecuencia ν_c , siendo ésta la frecuencia asociada a la máxima potencia de emisión. Los límites que delimitan el rango de frecuencias citado a la izquierda y derecha están fijados por las frecuencias en las que hay una caída de 3dB de la potencia radiada respecto a la máxima frecuencia de paso situada en ν_c . En los siguientes apartados se llevan a cabo las definiciones de las energías involucradas en los cálculos de la eficiencias definidas aquí.

4.1.1. Potencia y energía radiada por una antena fotoconductoriva emisora

El comportamiento espacial de radiación de una antena fotoconductoriva tipo dipolo es muy similar al de un simple dipolo, omnidireccional²⁶ y por tanto, tiene sentido calcular la potencia total radiada, como la suma de las contribuciones de cada una de las potencias radiadas en las direcciones normales a una superficie virtual que encierre a la antena. Existen trabajos que demuestran que es posible incrementar notablemente la directividad de estas antenas reconduciendo la radiación generada; pues parte de la misma se radia en la dirección opuesta al sustrato, hacia el vacío, en dirección opuesta a la de colocación de la lente¹³⁹. Algo que ya se había comprobado en un estudio previo, que demostraba que aunque la mayoría de la radiación producida en un elemento de corriente situado en una interfaz dieléctrico-aire penetra en el dieléctrico, una parte del la misma escapa hacia el aire¹⁴⁰, concepto que se empleó para producir guías de ondas coplanares para transporte de señales en el rango de los terahercios⁴.

En el apartado 3.2.6 se introdujo el algoritmo NF-FF basado en el teorema de equivalencia^{34,35,37}, que permite calcular las componentes del campo lejano $E_\theta(t)$ y $E_\varphi(t)$ en cualquier dirección (θ, φ) que rodean la antena.

Volviendo al concepto de región fundamental de una antena fotoconductoriva inmersa en vacío definida en 3.2.4, desde el punto de vista del principio de conservación de la energía⁸⁷ dado por el teorema Poynting^{53-55,141}, la energía emitida por la antena comple-

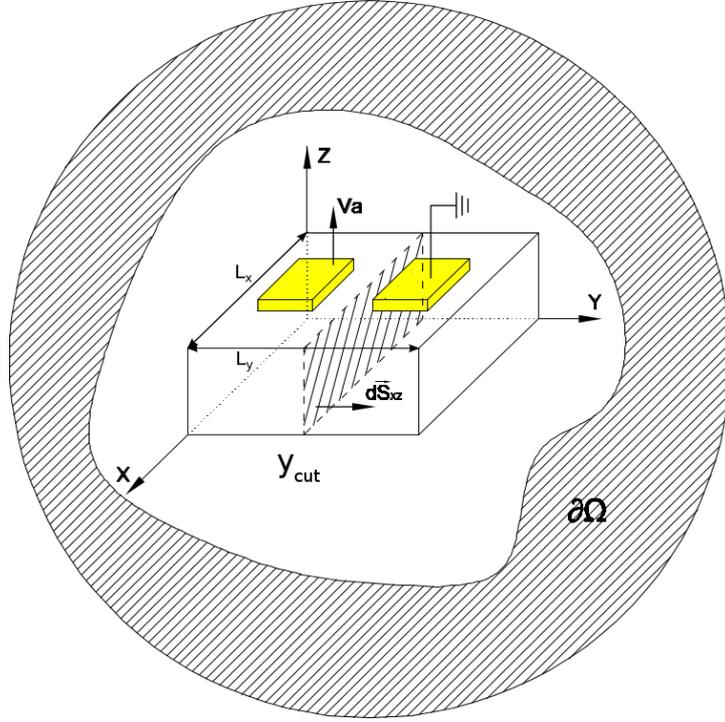


Figura 4.1: Esquema de antena emisora con corte para cálculo de la corriente y caja virtual sobre la que se ha calculado el campo radiado.

ta (contactos metálicos, capa fotoactiva, sustrato semiconductor y lente) es equivalente a la emitida por ésta región sola. En otras palabras, la energía emitida por toda la antena puede ser aproximada como la emitida por la región fotoconductoras. Y aunque en una antena real las conductividades del sustrato y lente puedan variar las frecuencias de emisión de la energía radiada correspondiente a los remanentes reactivos que se almacenan en ellos, la contribución al balance total de energía radiada ha de permanecer invariante.

La figura 4.1 muestra la superficie virtual esférica $\partial\Omega$ que encierra la región fundamental de la antena y sobre la que se han generado parejas de campos lejanos radiados divididos por la distancia $(\frac{E_\theta(t)}{R}, \frac{E_\varphi(t)}{R})$ mediante el empleo del algoritmo NF-FF¹²⁹. La superficie virtual $\partial\Omega$ se ha cubierto con parejas separadas entre sí cinco grados sobre un sistema de coordenadas esféricas. Es decir, se ha obtenido un conjunto discreto de pares de campos lejanos radiados divididos por la distancia $(\frac{E_\theta(t)}{R}, \frac{E_\varphi(t)}{R})$ con un salto angular entre parejas contiguas de $\Delta\theta_k = \frac{\pi}{36}$ y $\Delta\varphi_i = \frac{\pi}{36}$. Con lo que $N_\theta = 36$ y $N_\varphi = 72$. Del vector de Poynting^{53-55,141} $\vec{\mathbb{P}}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}, t) \wedge \vec{H}(\vec{r}, t)$ y la relación de estructura^{53-55,141}

$\eta_0 \vec{H}(\vec{r}, t) = \hat{n} \wedge \vec{E}(\vec{r}, t)$, donde \hat{n} es la dirección de propagación de la onda y η_0 la impedancia del vacío, se obtiene la siguiente expresión para calcular la potencia radiada en el dominio del tiempo:

$$\begin{aligned} P_{rad}(t) &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{1}{\eta_0} \left(\left(\frac{E_\theta(t)}{R} \right)^2 + \left(\frac{E_\varphi(t)}{R} \right)^2 \right) R^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi = \\ &= \frac{1}{\eta_0} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (E_\theta^2(t) + E_\varphi^2(t)) \sin(\theta) d\theta d\varphi \end{aligned} \quad (4.3)$$

Donde $\eta_0 \simeq 120\pi$ corresponde a la impedancia del vacío. A partir de esta expresión 4.3, la potencia radiada por la antena emisora se calcula numéricamente como:

$$P_{rad}(t) = \frac{1}{\eta_0} \sum_{i=0}^{N_\varphi} \left(\sum_{k=0}^{N_\theta} [(E_{\theta_k}^2(t) + E_{\varphi_i}^2(t)) \sin(k\Delta\theta_k) \Delta\theta_k] \Delta\varphi_i \right) \quad (4.4)$$

Para determinar la energía radiada por la antena W_{rad} , basta con integrar la potencia en el tiempo,

$$W_{rad} = \int_0^{\tau_{50dB}} P_{rad}(t) dt \quad (4.5)$$

donde τ_{50dB} es el instante de tiempo en el que la potencia radiada simulada ha caído 50dB respecto del máximo de potencia emitida¹. Para hacer la estimación de τ_{50dB} se estudian tres direcciones, la dirección $(\theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = 0)$, la dirección $(\theta = \frac{3\pi}{4}, \varphi = \frac{\pi}{2})$ y la dirección $(\theta = \pi, \varphi = 0)$. Si la condición se cumple en estas tres direcciones, se detiene la simulación. Numéricamente hablando, se realiza este cálculo considerando $N_t = \frac{\tau_{50dB}}{\Delta t}$, y entonces $W_{rad} = \sum_{m=0}^{N_t} P_{rad}(m\Delta t)$. Volviendo ahora al apartado anterior, consideramos $W_{rad}^{\nu_c}$ a la energía radiada por la antena en un rango de frecuencias entorno a la frecuencia de máxima potencia de emisión ν_c . Se define esta energía como la correspondiente a la integral de la potencia radiada por la antena en el citado intervalo de frecuencias $[\nu_{min}, \nu_{max}]$ tal que $\nu_c \in [\nu_{min}, \nu_{max}]$. Es decir,

$$W_{rad}^{\nu} = \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} P_{rad}(\nu) d\nu \quad (4.6)$$

Donde ν_{min} , es la frecuencia a la izquierda de ν_c , en la que la potencia $P(\nu)$ ha caído

¹Se ha considerado 50dB como un valor suficiente para que la señal emitida haya caído a valor nulo

3dB mientras que ν_{max} es la frecuencia a la derecha de ν_c , en la que la potencia $P(\nu)$ ha caído 3dB.

El camino para obtener la potencia radiada en función de la frecuencia, se realiza la transformada de Fourier¹⁴² a los campos $\frac{E_\theta(t)}{R} \xrightarrow{\mathcal{F}} \frac{E_\theta(\nu)}{R}$ y $\frac{E_\varphi(t)}{R} \xrightarrow{\mathcal{F}} \frac{E_\varphi(\nu)}{R}$, para definir $P_{rad}(\nu)$ como:

$$P_{rad}(\nu) = \frac{1}{\eta_0} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left(\left(\frac{E_\theta(\nu)}{R} \right)^2 + \left(\frac{E_\varphi(\nu)}{R} \right)^2 \right) R^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi$$

4.1.2. Potencia y energía suministrada por la fuente de tensión externa

La potencia suministrada por la fuente de tensión, la dividiremos en dos contribuciones. Por un lado está la potencia suministrada por la fuente cuando todavía no se ha aplicado el láser. Ésa es la potencia que llamaremos P_{DC} y su valor no cambia en el tiempo. Es debida a la conductividad en equilibrio de la antena polarizada. Al mirar la figura 4.2, un esquema circuital simplificado de la antena fotoconductoras en relación con la fuente de tensión, podemos ver que existe una intensidad de corriente llamada I_{DC} que es constante en el tiempo. Como la tensión suministrada por la fuente V_A es constante en el tiempo, la potencia será $P_{DC} = I_{DC}V_A$. Por otro lado en el esquema 4.2 aparece una corriente $I(t)$ fruto de una impedancia variable en el tiempo Z_{photo} y que comienza a ser suministrada en el instante $t = 0$, que se corresponde con el instante en que se aplica el láser. Tenemos así la potencia transitoria $P_T(t) = I(t)V_A$. Es decir, en un instante de tiempo la conductividad de la antena se incrementa como consecuencia de la aplicación del pulso láser, y la intensidad total de corriente que circula por la antena se incrementa también disipando una energía transitoria en el proceso, a la que hay que sumar la que se disipa debido a la corriente estacionaria.

Esta suma es la potencia suministrada por una fuente externa a la antena:

$$P_{sc}(t) = (I(t) + I_{DC})V_A \quad (4.7)$$

Para obtener esta potencia debemos obtener las correspondientes intensidades de corriente. En la figura 4.1, se ilustra un corte en el plano XZ de la región fotoactiva de la antena. Si tomamos la densidad de corriente debida unicamente al arrastre, en el estado

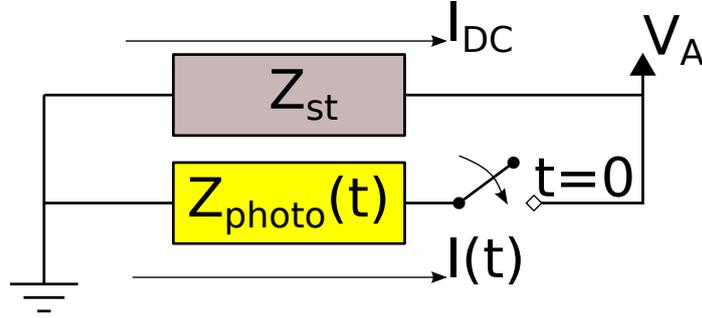


Figura 4.2: Equivalencia circuital simplificada de una antena fotoconduactiva.

estacionario $\vec{J}_{0,Drift}(\vec{r}) = \vec{\sigma}_0(\vec{r}) \odot \vec{E}_0(\vec{r})$ y nos quedamos con la componente Y de la misma, $J_{0y,Drift}(x, y, z) = \sigma_{0,y}(x, y, z)E_{0y}(x, y, z)$, la integral de esta densidad de corriente sobre todo el corte de la región fotoactiva de la antena nos proporcionará la corriente:

$$I_{DC} = \iint J_{0y,Drift}(x, y_{cut}, z) dx dz = \iint \sigma_{0,y}(x, y_{cut}, z) E_{0y}(x, y_{cut}, z) dx dz \quad (4.8)$$

Es posible calcular la intensidad de corriente $I(t)$ correspondiente al transitorio, realizando la integral de la densidad de corriente de arrastre transitoria sobre el corte mostrado en la figura 4.1. De la expresión 3.38, tenemos la corriente de arrastre transitoria $\vec{J}_{T,Drift}(\vec{r}, t) = (\vec{\sigma}_0(\vec{r}) + \vec{\sigma}(\vec{r}, t)) \odot \vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{\sigma}(\vec{r}, t) \odot \vec{E}_0(\vec{r})$. Tomando la componente Y de esta densidad de corriente e integrando sobre el corte obtenemos la intensidad de corriente transitoria:

$$\begin{aligned} I(t) &= \iint J_{y,Drift}(x, y_{cut}, z, t) dx dz = \\ &= \iint [(\sigma_{0,y}(x, y_{cut}, z) + \sigma(x, y_{cut}, z, t)E_y(x, y_{cut}, z, t) \\ &\quad + \sigma_y(x, y_{cut}, z, t)E_{0y}(x, y_{cut}, z))] dx dz \end{aligned} \quad (4.9)$$

Obtenemos así la potencia suministrada por la fuente. El siguiente paso es calcular la energía que suministra la misma. Al igual que hemos hecho con la potencia, calcularemos la energía suministrada por la fuente como la contribución de dos energías: la energía que suministra la fuente durante el régimen transitorio, más la que suministra la polarización de la antena. Para calcular la energía correspondiente al transitorio, basta con realizar

la integral en el tiempo:

$$W_{T,sc} = \int_0^{\tau_{50dB}} P_T(t) dt \quad (4.10)$$

En los láseres pulsantes, se define la tasa de repetición del láser ν_γ como el número medio de disparos o pulsos que el láser emite por segundo¹¹¹. Nosotros consideramos que la duración del evento se mide como el tiempo que transcurre entre dos disparos consecutivos del láser ν_γ^{-1} . A partir de este concepto, definimos la energía correspondiente a la corriente estacionaria I_{DC} durante el evento como:

$$W_{DC} = \nu_\gamma^{-1} P_{DC} \quad (4.11)$$

De esta forma se define la energía suministrada por la fuente de tensión como:

$$W_{V_A} = W_{DC} + W_{T,sc} \quad (4.12)$$

4.1.3. Potencia y energía suministrada por el láser

La potencia óptica de pico del láser¹¹¹ viene dada por la ecuación,

$$P_{opt-peak} = \frac{P_{opt,av}}{\sigma_t \nu_\gamma}, \quad (4.13)$$

donde $P_{opt,av}$ es la potencia promedio del láser, σ_t el ancho temporal completo de la mitad del máximo (FWHM) del pulso láser y la ya definida ν_γ , la tasa de repetición del pulso.

Se define la intensidad óptica de pico como $I_0 = \frac{P_{opt-peak}}{\pi r_{sp}^2}$, donde r_{sp} es el radio del haz láser sobre la zona fotoactiva del semiconductor, y retomando la expresión 3.3, con intensidad óptica en vacío $I(x, y, t) = I_0 e^{-\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \left(\frac{t}{\sigma_t}\right)^2\right)}$, coherente con la tasa de generación de portadores de carga 3.23 usada en las simulaciones es posible determinar la potencia suministrada por el láser. Si L_x y L_y son las dimensiones de la cara superior de la región fotoactiva mostradas en la figura 4.1, podemos calcular la citada potencia suministrada por el láser como:

$$P(t) = \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}} I(x, y, t) dx dy \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} I(x, y, t) dx dy = I_0 \pi \sigma_x \sigma_y e^{-\left(\frac{t}{\sigma_t}\right)^2} \quad (4.14)$$

La aproximación es posible porque $L_x \gg \sigma_x$ y $L_y \gg \sigma_y$.

Para obtener la energía integramos la potencia óptica durante el tiempo que transcurre entre la emisión de dos pulsos consecutivos ν_γ^{-1} :

$$W_\gamma = \int_0^{\nu_\gamma^{-1}} P(t) dt \quad (4.15)$$

En la mayoría de los láseres pulsantes, empleados para disparar antenas fotoconductoras, la tasa de repetición es de unos $80 MHz$, y FWHM temporal ronda el centenar de femtosegundos^{95,96,98,100}. Eso significa que $\nu_\gamma^{-1} > 10^5 \sigma_t$, lo que permite hacer la aproximación:

$$W_\gamma = \int_0^{\nu_\gamma^{-1}} P(t) dt \simeq \int_0^\infty P(t) dt = I_0 (\sqrt{\pi})^3 \sigma_x \sigma_y \sigma_t \quad (4.16)$$

Hasta aquí, se han introducido todos los parámetros necesarios para estudiar la eficiencia de las antenas semiconductoras con los algoritmos desarrollados en este trabajo.

4.2. Resultados y análisis

Uno de los puntos que se ha estudiado en este capítulo, es como influye la forma del contacto metálico en la eficiencia de una antena fotoconductor. Para ello, se han

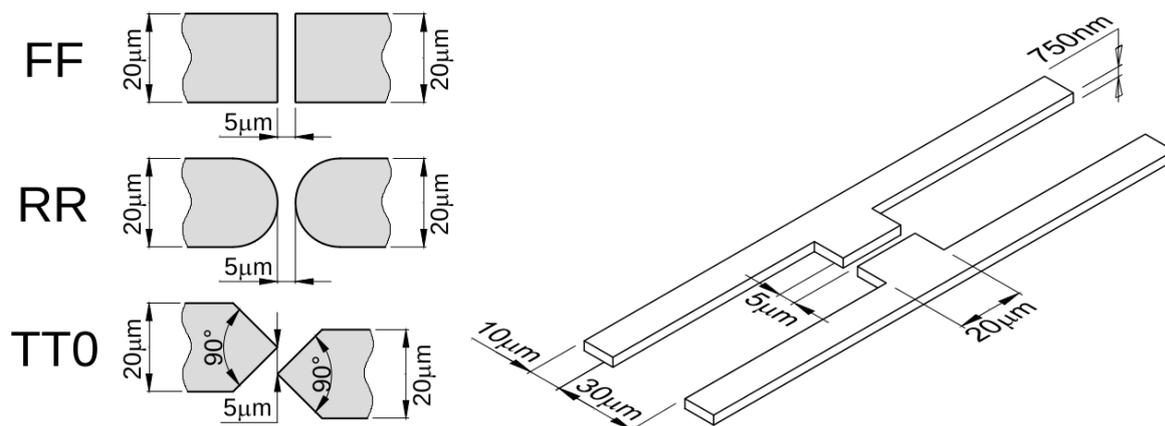


Figura 4.3: Diferentes geometrías de los contactos metálicos implementados como tipo PEC en los estudios llevados a cabo en este capítulo.

estudiado tres geometrías distintas, mostradas en la figura 4.3. Todas ellas con:

- El espesor de los contactos igual a $750nm$.
- La longitud del stripline igual a $120\mu m$.
- La separación entre striplines igual a $30\mu m$.
- El grosor del sustrato fotoactivo igual a $1.5\mu m$.
- Utilizando el modelo de movilidad de Wien introducido en el apartado 2.63 del capítulo 2.
- Empleando como material semiconductor LT-GaAs. Tanto los parámetros del semiconductor como los del láser empleado en las simulaciones pueden ser consultados en la tabla 3.1 del apartado 3.4 del capítulo anterior.

Simulaciones

Las gráficas 4.4, 4.5, 4.6 y 4.7 muestran los resultados correspondientes a las 63 simulaciones llevadas a cabo para realizar este estudio. Cada punto de estas gráficas se corresponde con una simulación distinta. Tienen en común que:

- Todas las simulaciones se han llevado a cabo con un mallado espacial de $250nm$.
- Todas las simulaciones se han realizado cabo con un factor de Courant $Hc = \frac{\sqrt{3}}{2}$.
- Todas las simulaciones se han hecho a cabo con una separación de cinco celdas entre la región fundamental y la caja de transformación NF-FF¹²⁹.
- El código del motor numérico ha sido implementado en Fortran y OpenMP², y compilado con Intel Fortran³.
- Todas las simulaciones han corrido en un procesador Intel Core(TM) i7-3960X CPU @ 3.30 GHz x 12 sobre Debian⁴ 64-bit.

²Para más información visite: www.ugrfdtd.es

³non-comercial Intel Fortran Composer XE 2013 for Linux®

⁴Debian 7.0 Wheezy released

- Todas las geometrías estudiadas han sido creadas, malladas con hexaedros regulares y preprocesadas con GID⁵.

Resultados

La figura 4.4 muestra la relación entre la potencia promedio del láser y la eficiencia de las tres antenas. La figura también muestra cual es la dependencia de la potencia promedio radiada, definida en 4.17 con respecto a la potencia promedio del láser.

La potencia media radiada se ha calculado multiplicando la tasa de repetición del láser ν_γ por la energía radiada en un pulso:

$$P_{rad,av} = \nu_\gamma W_{rad} \quad (4.17)$$

En este conjunto de simulaciones en las que el parámetro variable era la potencia promedio del láser, el dopado fue $C = 5 \cdot 10^{16} cm^{-3}$ y la tensión $V_A = 30V$ parámetros que permanecieron constantes.

La figura 4.5 ilustra la dependencia de la eficiencia con la tensión aplicada a los contactos metálicos para los tres modelos simulados. En esta figura también se ilustra la dependencia de la potencia promedio radiada por la antena 4.17 con respecto al voltaje aplicado a la misma.

En este conjunto de simulaciones donde el parámetro variable era el voltaje V_A aplicado a los contactos metálicos, permanecieron constantes el dopado $C = 5 \cdot 10^{16} cm^{-3}$ y la potencia promedio del láser $P_{opt,av} = 20mW$

La figura 4.6 muestra como el dopado es un parámetro fundamental en cuanto a la eficiencia de las antenas fotoconductoras. Por supuesto la figura, al igual que sus predecesoras, muestra la dependencia de la potencia promedio radiada en función del dopado.

Finalmente, la figura 4.7 pone de manifiesto que existe una relación clara ente el ancho de banda de emisión y el dopado.

En este conjunto de simulaciones el parámetro variable fue el dopado $C(\vec{r})$ de la región fotoactiva, permanecieron constantes la tensión aplicada a los contactos metálicos $V_A = 30V$ y a la potencia promedio del láser $P_{opt,av} = 20mW$

⁵GID 11.0.5 for Linux; www.gidhome.com

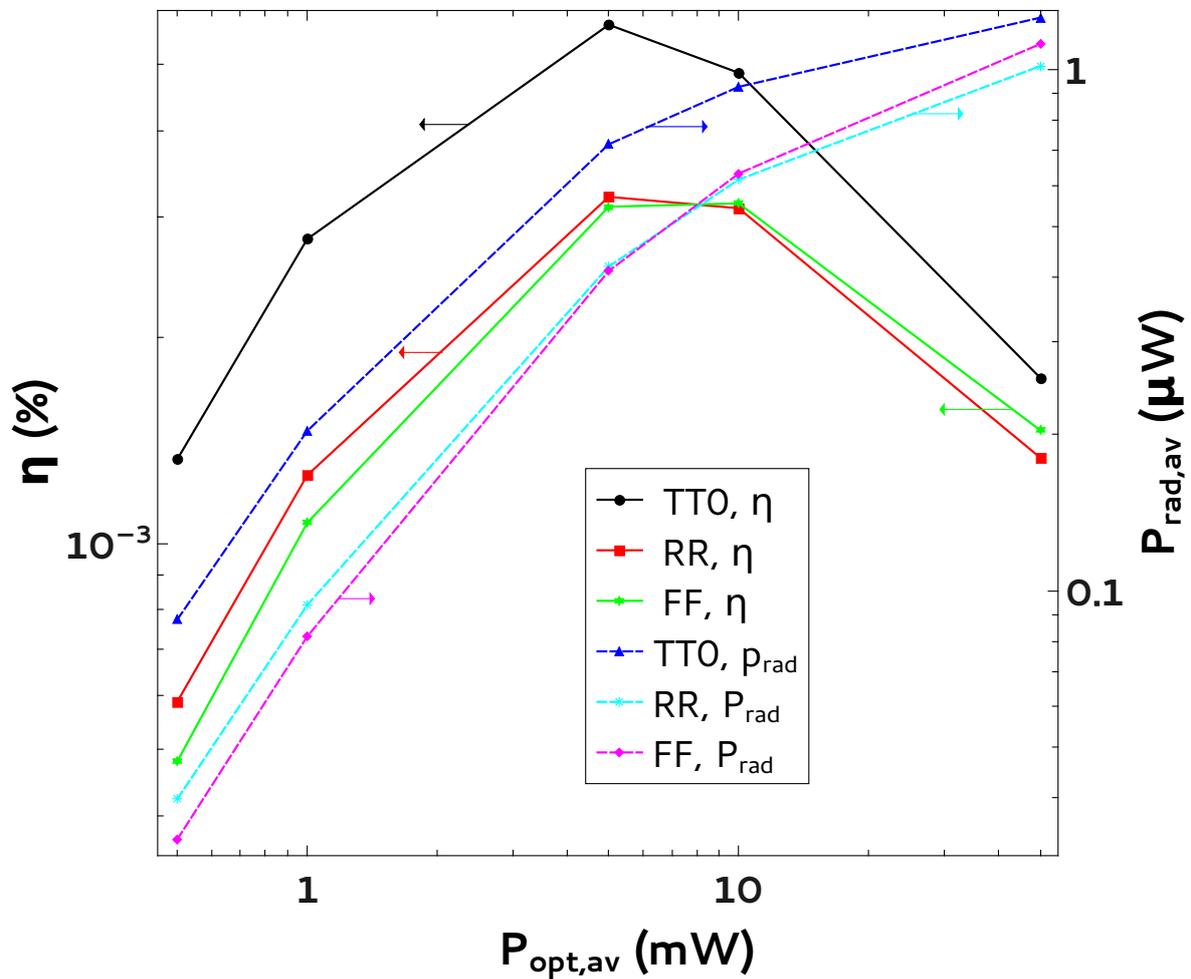


Figura 4.4: Eficiencia y potencia radiada como funciones de la potencia láser suministrada.

Análisis

En la figura 4.8a se presenta un modelo circuital simplificado de la impedancia transitoria de una antena fotoconductorva. El condensador que aparece en la figura es un efecto de apantallamiento del campo $\vec{E}_0(\vec{r})$ debido a la redistribución de las concentraciones de carga alrededor de los contactos metálicos a lo largo del transitorio. A medida que el láser es más potente, éste genera más carga y el apantallamiento es mayor, llegando a un punto crítico en el que la eficiencia del dispositivo cae porque la velocidad de cre-

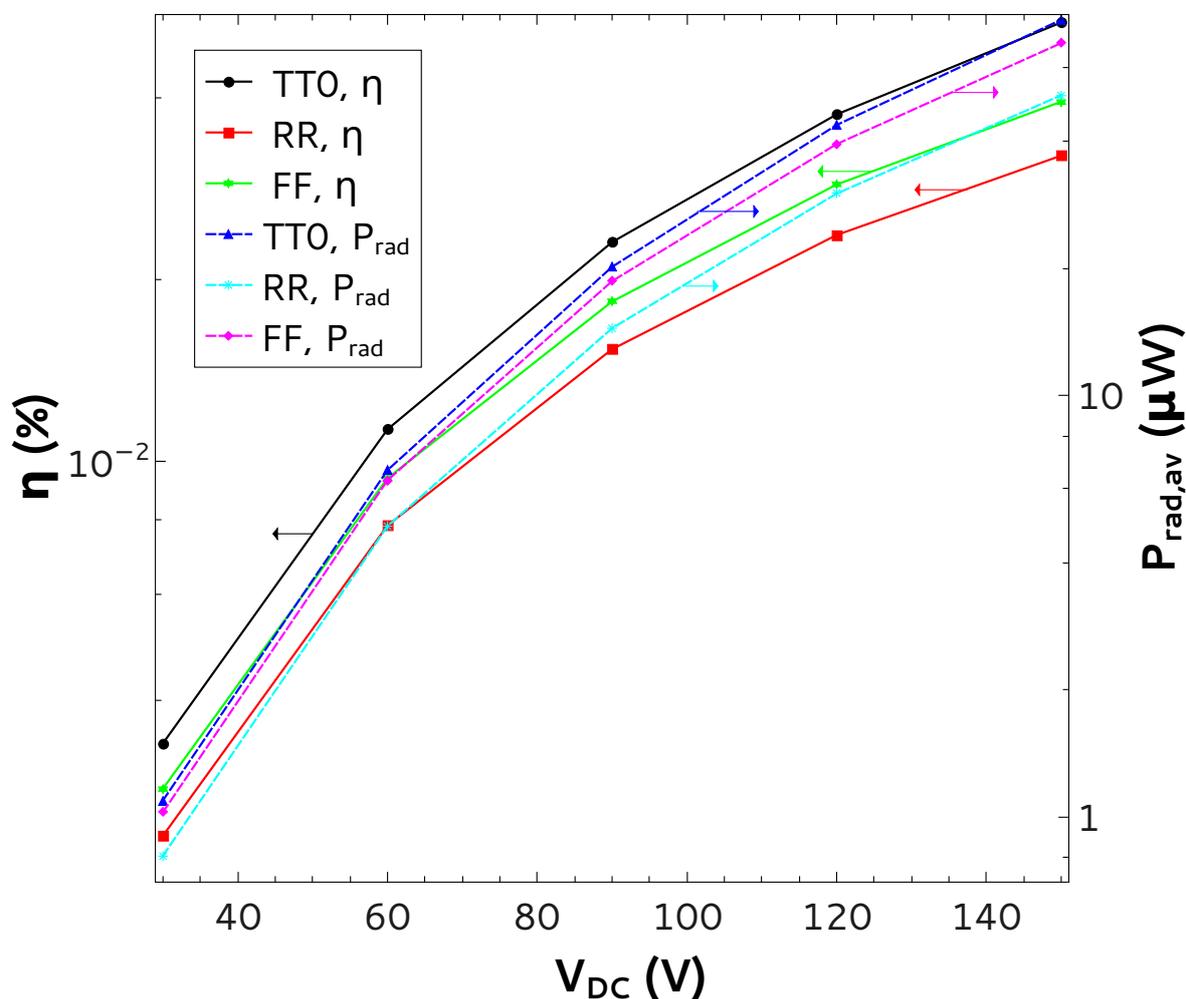


Figura 4.5: Eficiencia y potencia radiada como funciones de la tensión externa V_A aplicada.

El aumento del apantallamiento electromagnético es mayor que el aumento de la corriente debida a la fotogeneración en la antena y por tanto la potencia promedio de radiación va saturando. Esta idea, ya sugerida en la literatura¹²², se consolida con los resultados de las simulaciones realizadas.

Analizar la figura 4.5 es hacer un análisis de la movilidad, pues a medida que se incrementa el voltaje $\vec{E}_0(\vec{r})$ se hace más intenso $\vec{E}_0(\vec{r}) \propto V_A$. Como resultado se incrementa la potencia radiada promedio. No obstante, a medida que se incrementa $\vec{E}_0(\vec{r})$ las movilidades de los portadores de carga son menores de un modo no lineal como se aprecia en los

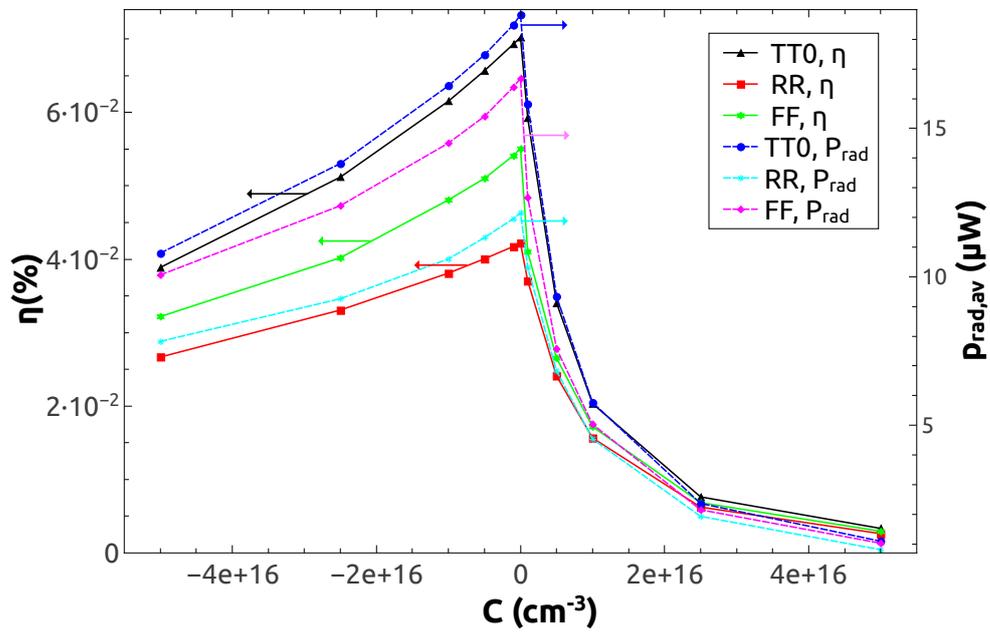


Figura 4.6: Eficiencia y potencia radiada como funciones del dopado.

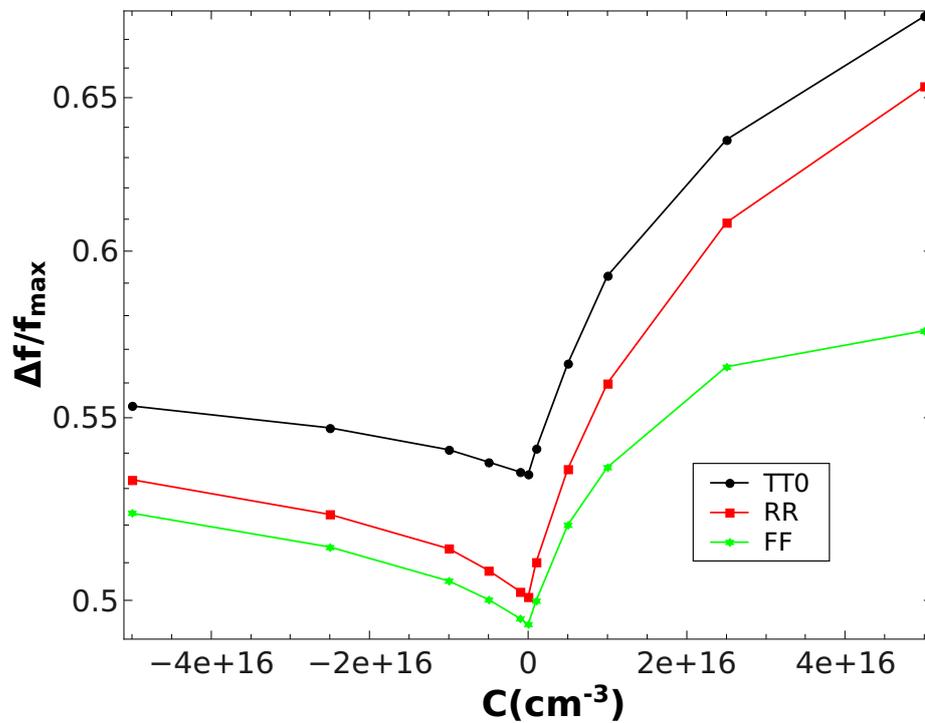


Figura 4.7: Ancho de banda en función del dopado.

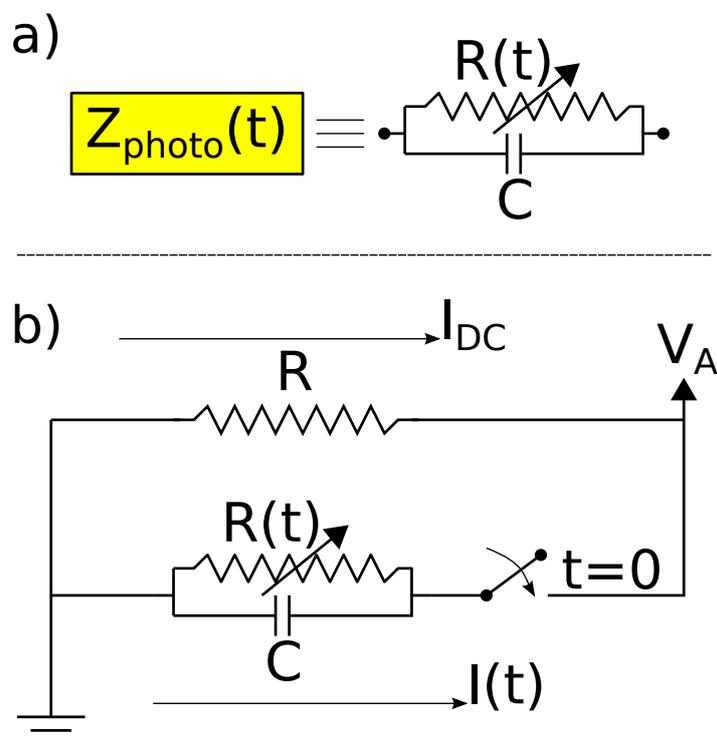
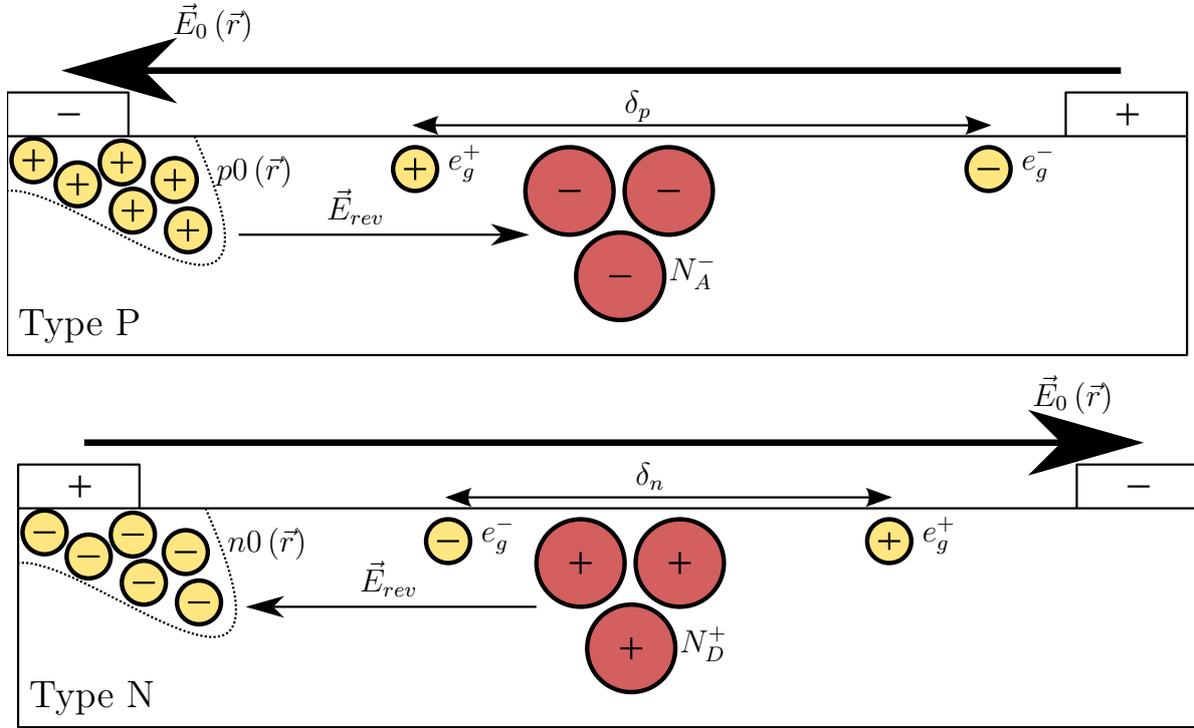


Figura 4.8: a) Esquema circuital simplificado de la impedancia transitoria de una antena fotoconductiva. b) Equivalencia circuital simplificada de una antena fotoconductiva, donde las impedancias genéricas mostradas en 4.2 han sido sustituidas por los elementos circuitales apropiados.

modelos deducidos de datos experimentales y que fueron descritos en el apartado 3.3 del capítulo 3. Éso explica que para un incremento lineal del voltaje no haya una respuesta lineal por parte del sistema, la antena. Es decir, las corrientes transitorias que inducen la radiación crecen más despacio que $\vec{E}_0(\vec{r}) \propto V_A$ porque la conductividad $(\bar{\sigma}_0(\vec{r}) + \bar{\sigma}(\vec{r}, t))$ crece más despacio debido a que las movilidades caen rápidamente. Además, este incremento está limitado por la disrupción eléctrica del material semiconductor.

Para analizar la figura 4.6 haremos uso de un simple esquema ilustrativo mostrado en la figura 4.9. En este esquema se han definido las longitudes del dipolo equivalente δ_n y δ_p . La idea es suponer que la radiación de la antena está inducida por un dipolo de corriente transitoria equivalente. La intensidad del campo radiado por un dipolo es directamente proporcional a su longitud¹³². Ese es el motivo por el que una antena tipo N emite



$$\mu_n \gg \mu_p \Rightarrow \delta_p > \delta_n$$

Figura 4.9: Efecto conjunto de la movilidad y del campo de oposición interno a la polarización electrostática, sobre la longitud del elemento dipolar equivalente en una antena fotoconductoras.

menos que una antena tipo P. Cuando la región fotoactiva de la antena está afectada por impurezas aceptadoras, tras aplicar la tensión de polarización hay una “región de vaciamiento” de mayoritarios que neutralizan el campo de polarización $\vec{E}_0(\vec{r})$ con un campo interno que en la figura hemos llamado $\vec{E}_{rev}(\vec{r})$. En el momento que se inicia la generación de pares (pulso láser), los huecos generados e_g^+ , sufren la acción de este campo. Eso les impide avanzar y la longitud del dipolo equivalente es debida principalmente a los electrones generados e_g^- .

En el caso contrario, una antena dopada con impurezas donadoras, sucede que la longitud del dipolo equivalente es debida a los huecos, pues los electrones se ven afectados por el campo interno $\vec{E}_{rev}(\vec{r})$. Como los electrones poseen mayor movilidad que los huecos, la longitud del dipolo aceptador es mayor que la del donador. De ahí la diferencia observada en los resultados mostrados en la figura 4.6. En el caso intrínseco, es evidente

que el campo interno es más intenso en las proximidades de los contactos por no existir impurezas ionizadas localizadas en la región de generación. Eso hace que éste sea el caso de mayor emisión.

Analizando la fig. 4.7 cuya interpretación se apoya en la idea del dipolo equivalente, cuanto más largo es éste más tiempo se requiere para recombinarlo. De ahí que el ancho temporal asociado a la corriente sea mayor y la transformada de Fourier del campo inducido sea más estrecha que para un semiconductor tipo N. Para el caso intrínseco, la ausencia de trampas justificaría un tiempo de recombinación mayor. Pero lo cierto es que el valor de estos parámetros no se modificaron en las simulaciones llevadas a cabo en ausencia de dopado.

Sumario de los estudios llevados a cabo	
Parámetro que varía	Parámetros fijos
$P_{av} \in [0,5, 50]mW$	$C = 5 \cdot 10^{16}cm^{-3}, V_a = 30V$
$V_a \in [30, 150]V$	$C = 5 \cdot 10^{16}cm^{-3}, P_{av} = 20mW$
$C \in [-5 \cdot 10^{16}, 5 \cdot 10^{16}]cm^{-3}$	$V_a = 30V, P_{av} = 20mW$
$P_{av} \in [0,5, 50]mW$	$C = 10^{15}cm^{-3}, V_a = 10V$ $\nu_\gamma = 82MHz, \text{Modelo: FF}$
Resultados Obtenidos	
Estudios	Relaciones estudiadas
1	P_{av} V.S. $P_{rad,av}, \eta$
2	V_a V.S. $P_{rad,av}, \eta$
3	C V.S. $P_{rad,av}, \eta, \frac{\Delta\nu}{\nu_{max}}$
Validación	P_{av} V.S. $P_{rad,av}$

Tabla 4.1: Tabla resumen de los estudios realizado. En la tabla se presentan los parámetros que han variado mientras otros han permanecido igual en cada estudio realizado, y los estudios realizados mostrando las magnitudes relacionadas en ellos. El estudio 1 se corresponde con la figura 4.4, el estudio 2 se corresponde con la figura 4.5, el estudio 3 se corresponde con las figuras 4.6 y 4.7 y el estudio llamado validación se corresponde con la figura 4.10.

4.3. Validación

Como muestra la tabla 4.1 la validación con resultados experimentales se ha realizado para la geometría FF mostrada en la figura 3.12a⁹⁵ y la geometría de una antena bowtie mostrada en la propia figura de validación 4.10 obtenida de la misma fuente⁹⁵. En este caso la tensión aplicada a los contactos metálicos ha sido de 10V para el dipolo FF y 30V para la antena bowtie. La frecuencia de disparo del láser de 82MHz. Para estas diez simulaciones, una para cada potencia óptica del láser, se ha tomado un dopado donador constante. Dado que los datos experimentales se dan arbitrariamente normalizados, se ha hecho lo mismo, dividiendo los resultados obtenidos por el factor 1.2 de normalización. En la figura 4.10 se muestra la validación de los resultados comparados además con un modelo semiempírico para la antena bowtie¹²².

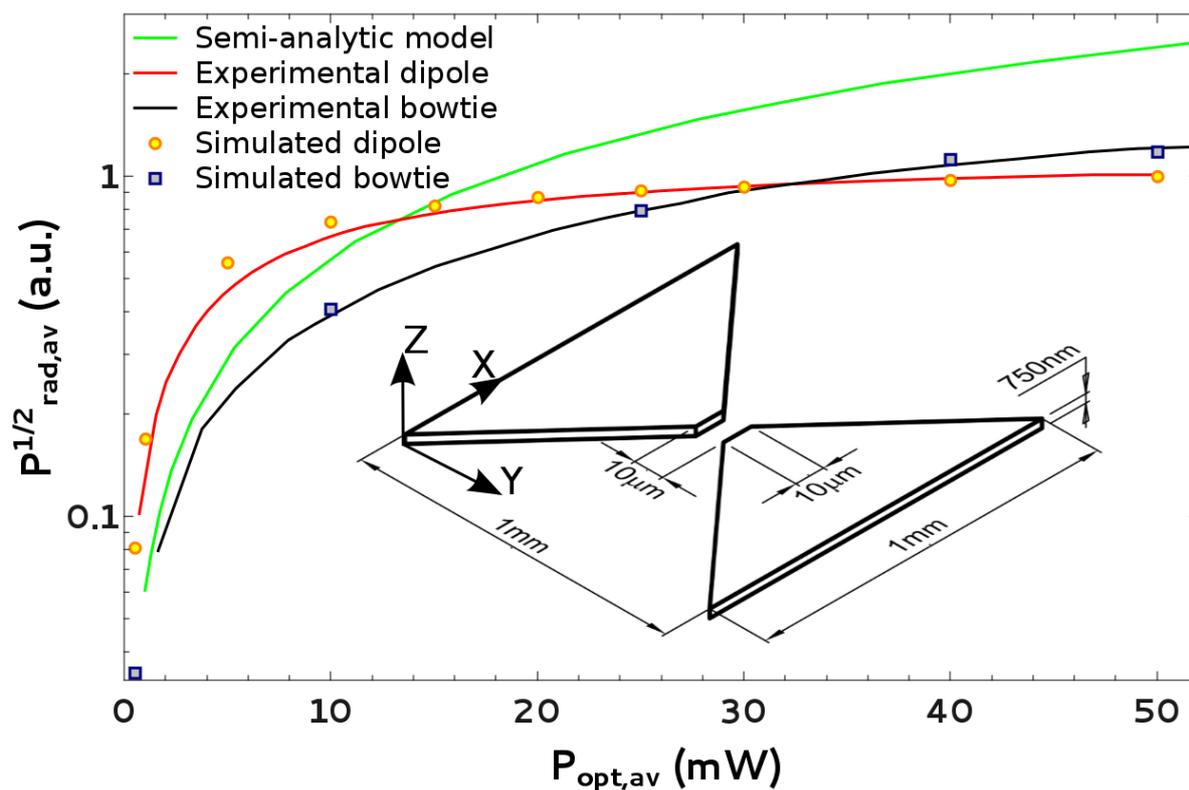


Figura 4.10: Validación de los algoritmos empleados en este capítulo. En el interior de esta gráfica de validación se muestran las dimensiones de la bowtie simulada.

5

Algoritmos de emisión-recepción en campo cercano y lejano de la antena completa mediante subdominios escalantes

5.1. Algoritmos de recepción: la antena receptora	120
5.1.1. Caja de iluminación	121
5.1.2. Aproximación de región fundamental en vacío	122
5.2. El subdominio receptor	128
5.3. El subdominio emisor	131
5.4. Conexión entre subdominios	132
5.4.1. Estructura de onda plana	135
5.5. Resultados	136

En este capítulo nos proponemos hacer un estudio del proceso completo de emisión-recepción, en el esquema simplificado de un sistema de espectroscopía de THz. Para ello se han desarrollado algoritmos y se ha realizado un estudio del proceso completo en región de campo cercano. En este capítulo se presenta:

- Algoritmos de recepción en vacío, en aproximación de región fundamental.
- Extensión de algoritmos de recepción y estudio de la recepción mediante subdominios escalantes en campo cercano.
- Procedimiento de alimentación del sistema total, a partir de fuentes duras generadas en el subdominio emisor.
- Estudio de la propagación en el sistema total, mediante subdominios escalantes, y acoplamiento entre antena emisora y receptora en región de campo cercano.

Comenzaremos estudiando la recepción como parte fundamental del proceso de detección de una onda electromagnética mediante una corriente. El análisis de este proceso ayudará a justificar la expresión 3.57 del capítulo 3.

5.1. Algoritmos de recepción: la antena receptora

En el apartado 3.2.7 se explica la detección de un pulso emitido por una antena fotoconductiva. En ese apartado se esboza el modo de operación de la receptora. Partiremos de la hipótesis de que conocemos el campo electromagnético radiado por una antena emisora y queremos obtener la fotocorriente que sería detectada por una antena fotoconductiva receptora. Haremos también la hipótesis de que ese campo electromagnético es un pulso de onda plana linealmente polarizada en el eje Y que se propaga en la dirección Z creciente.

Con estas hipótesis partimos del conocimiento de la estructura espacial del campo electromagnético. Si, por ejemplo, se establece una coordenada Z en un punto del espacio, conocemos la componente Y del campo eléctrico E_y en todo instante de tiempo (ver figura 5.1), podemos decir que conocemos el campo electromagnético en un entorno del punto. Este entorno donde el campo electromagnético incidente es plenamente conocido, lo denominamos la región de detección.

5.1.1. Caja de iluminación

Consideramos que la separación de la fuente emisora respecto del punto de recepción es tal que el campo recibido por la antena receptora es un campo lejano. En estas circunstancias la hipótesis de onda plana es válida y podemos suponer de polarización lineal en el eje Y (conforme a los sistemas de referencia usados en la tesis). Si en efecto

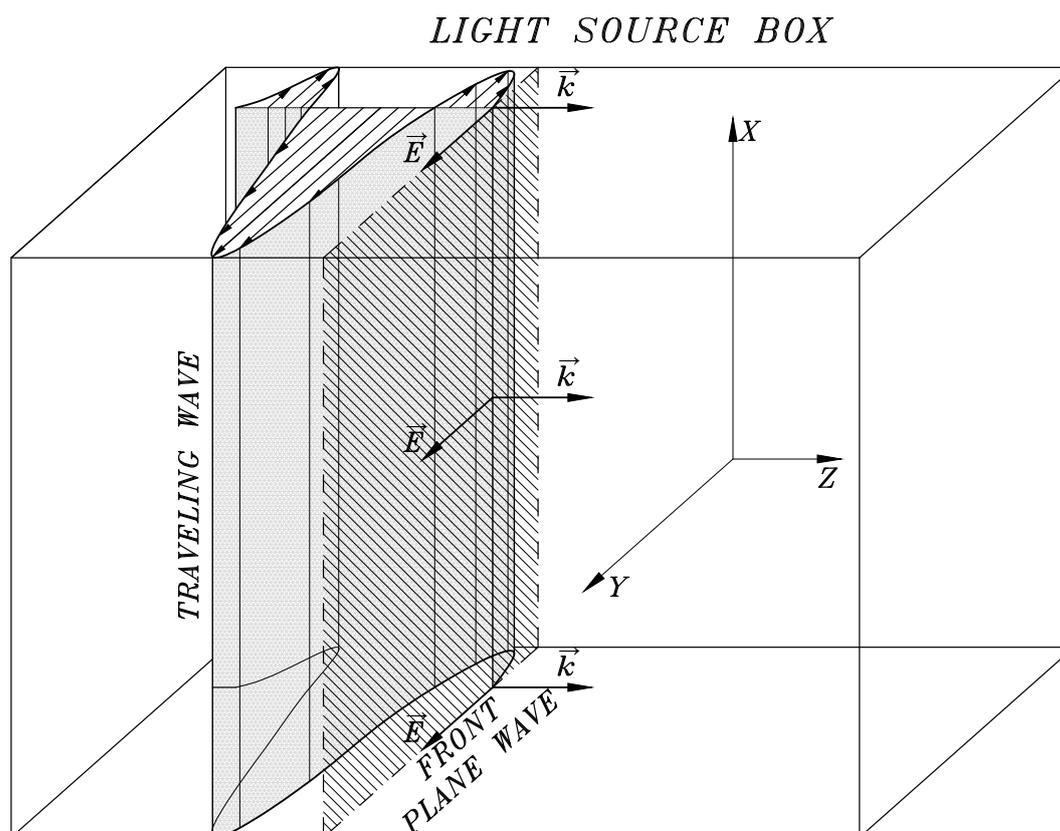


Figura 5.1: Pulso de onda plana polarizada en el eje Y propagándose en la dirección Z dentro de una caja de iluminación creada con el teorema de equivalencia.

tomamos una antena Stripline como la de la figura 3.14a, un dipolo FF, RR o TT0 como el mostrado en la ilustración 4.3 o una antena BT como la mostrada en 2.11 y deducimos la polarización fijada por la fuente de tensión externa, apreciamos que el campo electrostático tiene principalmente componente Y en todas las figuras de acuerdo al sistema de referencia adjunto a cada una de ellas. De esta forma, los elementos de corriente que inducen el campo tienen principalmente componente Y, generando campo

lejano mayoritariamente polarizado en la dirección Y, y que puede ser sustituido en procesos de recepción por una onda plana como la ilustrada en la figura 5.1.

Al conocer la componente E_y del campo en todo instante de tiempo en un punto, conocemos lo necesario para implementar la propagación unidimensional del campo electromagnético en la dirección Z, haciendo uso de la componente del campo magnético H_x . El conocimiento funcional del campo permite implementar condiciones absorbentes en 1D analíticamente³⁵. Consideramos como punto de partida una propagación en vacío en la que todas las componentes de la señal viajan a velocidad c . Para un segmento computacional cualquiera, si en un lado introducimos el campo eléctrico y lo propagamos con las ecuaciones de Maxwell, bastará restar el campo que introducimos con el retardo apropiado por la distancia que recorre entre el punto donde lo introducimos y el punto de la frontera absorbente para tener valor cero de campo más allá del extremo del segmento computacional. Este principio de conocimiento de campo unido al teorema de equivalencia^{34,35,37,39,126–128} es el que nos permitirá usar lo que se denomina usualmente como caja de iluminación de onda plana^{34,35,39}. Esta caja de iluminación divide el dominio computacional en dos zonas. Dentro de la caja de iluminación tenemos la llamada zona de campo total (ZCT) y fuera de ésta tenemos la llamada zona de campo dispersado (ZCD). En ausencia de antena, el campo en ZCD es nulo porque el campo incidente no sufre scattering o dispersión con ningún objeto dentro de la caja, de modo que en ZCT sólo tendremos el campo incidente correspondiente a la onda plana.

5.1.2. Aproximación de región fundamental en vacío

Al igual que en una antena emisora, en una receptora definimos la región fundamental como aquella región fotoconductiva del sustrato semiconductor que se emplaza debajo de los contactos metálicos más los propios contactos metálicos, todo ello inmerso en vacío. La figura 5.3 muestra la región fundamental de una antena receptora rodeada de vacío y situada en el interior de la caja de iluminación de onda plana. Sincronizando la llegada del frente de onda sobre la región fotoactiva de la antena con el pulso láser y basándonos en la expresión 5.1 tomada de 4.9, o en la ley de Ampere aplicada tal y como se indica en la figura 5.2, determinaremos la fotocorriente en la receptora.

$$I(t) = \iint_{S_\Omega} (\sigma_0 + \sigma(x, y_{cut}, z, t)) E_y(x, y_{cut}, z, t) dx dz \quad (5.1)$$

Cuando decimos que la caja de iluminación se encuentra inmersa en vacío, entende-

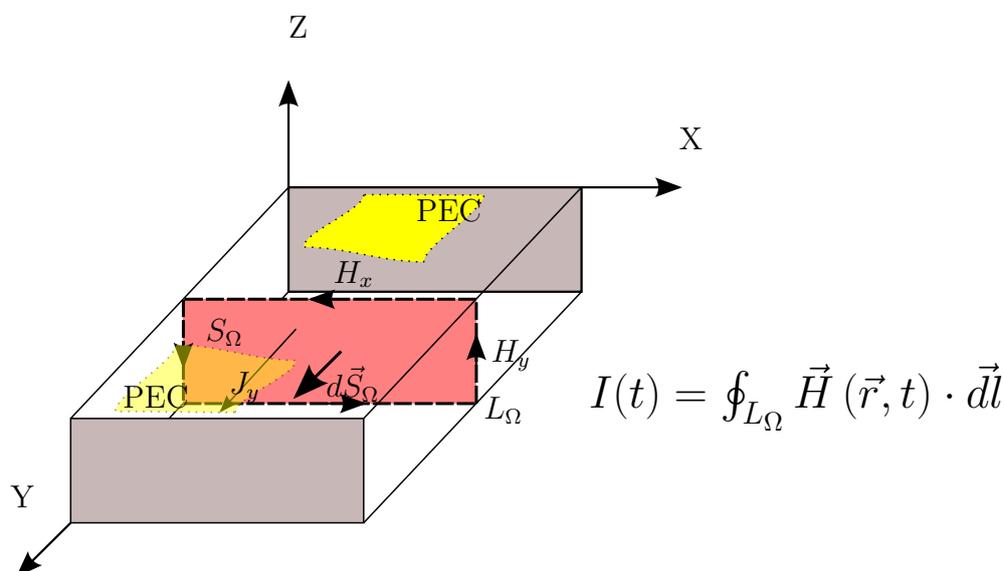


Figura 5.2: Procedimiento de cálculo de la intensidad de corriente haciendo uso de la ley de Ampere.

mos que son necesarios medios absorbentes (CPMLs) para evitar reflexiones del campo dispersado más el autoinducido (por el láser) en la antena receptora, que provenientes de los límites del dominio computacional, contaminarían la medida de la fotocorriente calculada en la receptora. En la figura 5.4 se ilustra la caja de iluminación bordeada de medio absorbente CPML.

El tratamiento interno desde el punto de vista del algoritmo computacional del régimen transitorio de una antena receptora, es diferente de una antena emisora. Como una antena receptora no está polarizada electrostáticamente, la corriente transitoria 3.38 se transforma en:

$$\vec{J}'_T(\vec{r}, t) = \vec{J}'_s(\vec{r}, t) + (\sigma(\vec{r}, t) + \sigma_0)\vec{E}(\vec{r}, t) \quad (5.2)$$

donde las conductividades transitoria $\bar{\sigma}(\vec{r}, t)$ y estacionaria $\bar{\sigma}_0(\vec{r})$ así como la corriente

fuente $\vec{J}'_s(\vec{r}, t)$ son dadas por las expresiones:

$$\sigma(\vec{r}, t) = q(\mu_{n0}n(\vec{r}, t) + \mu_{p0}p(\vec{r}, t)) \quad (5.3)$$

$$\sigma_0 = q(\mu_{n0}n_0 + \mu_{p0}p_0) \quad (5.4)$$

$$\vec{J}'_s(\vec{r}, t) = qV_T \left(\mu_{n0} \vec{\nabla} n(\vec{r}, t) - \mu_{p0} \vec{\nabla} p(\vec{r}, t) \right). \quad (5.5)$$

donde μ_{n0} y μ_{p0} son las movibilidades de electrones y huecos respectivamente, en ausencia de campo; n_0 y p_0 son las concentraciones de carga en equilibrio, con lo cual tienen los mismos valores en todo punto de la zona fotoactiva.

A partir de la ecuación 5.2 para la corriente, los algoritmos de avance temporal para el campo eléctrico en la receptora se pueden obtener basándonos en el caso más general de la emisora 3.54-3.56 como sigue. Para la componente X del campo eléctrico:

$$E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} = C a_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} + C b_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \left[\frac{H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - H_z|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^m}{\delta_{y_j}} - \frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^m}{\delta_{z_k}} - J'_{sx}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \right] \quad (5.6)$$

donde la componente X de la corriente es:

$$J'_{sx}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = qV_T \left(\frac{\mu_{n0} (n_{i+1,j,k}^m - n_{i,j,k}^m) - \mu_{p0} (p_{i+1,j,k}^m - p_{i,j,k}^m)}{\Delta x_i} \right)$$

y con una conductividad: $\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = q(\mu_{n0}n_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \mu_{p0}p_{i+\frac{1}{2},j,k}^m)$. Los coeficientes $C a_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m$ y $C b_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m$ de 5.6 son:

$$C a_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = \begin{cases} \frac{2\varepsilon - \Delta_t (\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0)}{2\varepsilon + \Delta_t (\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta_t (\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0) \\ e^{-\frac{\Delta_t (\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0)}{\varepsilon}} & \text{si } 2\varepsilon < \Delta_t (\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0) \end{cases}$$

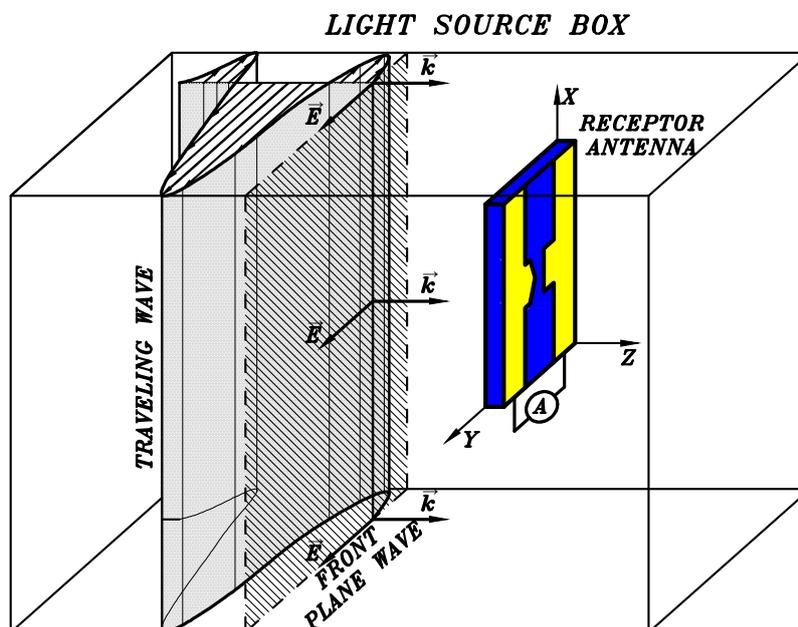


Figura 5.3: Caja de iluminación para incidir con onda plana sobre la antena receptora aproximada por región fundamental colocada en vacío.

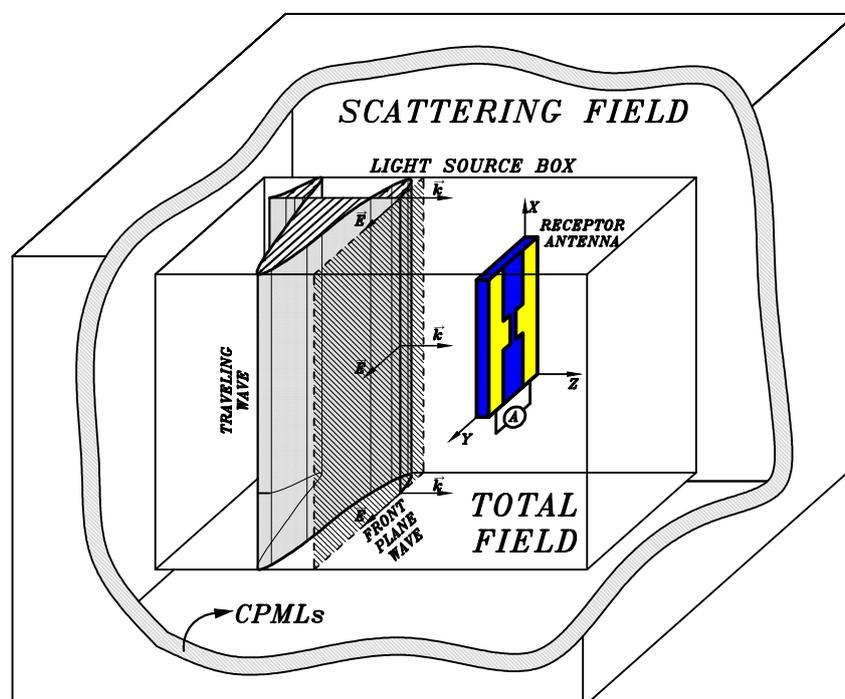


Figura 5.4: Dominio computacional de recepción formado por una caja de iluminación en vacío para incidir con onda plana sobre la antena receptora aproximada por región fundamental colocada en vacío.

$$Cb_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = \begin{cases} \frac{2\Delta_t}{2\varepsilon+\Delta_t\left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m+\sigma_0\right)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta_t\left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m+\sigma_0\right) \\ \frac{\Delta_t\left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m+\sigma_0\right)}{1-e^{-\frac{\Delta_t\left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m+\sigma_0\right)}{\varepsilon}}} & \text{si } 2\varepsilon < \Delta_t\left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m+\sigma_0\right) \end{cases}$$

De forma similar la componente Y del campo eléctrico es:

$$E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} = Ca_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} + Cb_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \left[\frac{H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m}{\delta_{z_k}} - \frac{H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - H_z|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m}{\delta_{x_i}} - J'_{sy}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \right] \quad (5.7)$$

con una componente Y de la corriente:

$$J'_{sy}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m = qV_T \left(\frac{\mu_{n0} (n_{i,j+1,k}^m - n_{i,j,k}^m) - \mu_{p0} (p_{i,j+1,k}^m - p_{i,j,k}^m)}{\Delta y_j} \right),$$

conductividad: $\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m = q(\mu_{n0}n_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + \mu_{p0}p_{i,j+\frac{1}{2},k}^m)$, y coeficientes $Ca_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m$ y $Cb_x|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m$ en la forma:

$$Ca_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m = \begin{cases} \frac{2\varepsilon-\Delta_t\left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m+\sigma_0\right)}{2\varepsilon+\Delta_t\left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m+\sigma_0\right)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta_t\left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m+\sigma_0\right) \\ e^{-\frac{\Delta_t\left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m+\sigma_0\right)}{\varepsilon}} & \text{si } 2\varepsilon < \Delta_t\left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m+\sigma_0\right) \end{cases}$$

$$Cb_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m = \begin{cases} \frac{2\Delta_t}{2\varepsilon+\Delta_t\left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m+\sigma_0\right)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta_t\left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m+\sigma_0\right) \\ \frac{\Delta_t\left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m+\sigma_0\right)}{1-e^{-\frac{\Delta_t\left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m+\sigma_0\right)}{\varepsilon}}} & \text{si } 2\varepsilon < \Delta_t\left(\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k}^m+\sigma_0\right) \end{cases}$$

Por último, la componente Z del campo eléctrico es:

$$E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = Ca_y|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} + Cb_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \left[\frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - H_y|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m}{\delta_{x_i}} - \frac{H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - H_x|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m}{\delta_{y_j}} - J'_{sz}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \right] \quad (5.8)$$

donde la misma componente de la corriente corresponde a:

$$J'_{sz}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m = qV_T \left(\frac{\mu_{n0} (n_{i,j,k+1}^m - n_{i,j,k}^m) - \mu_{p0} (p_{i,j,k+1}^m - p_{i,j,k}^m)}{\Delta z_k} \right), \quad (5.9)$$

y conductividad $\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m = q(\mu_{n0}n_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \mu_{p0}p_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m)$. Los coeficientes $Ca_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m$ y $Cb_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m$ son:

$$Ca_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m = \begin{cases} \frac{2\varepsilon - \Delta_t (\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0)}{2\varepsilon + \Delta_t (\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta_t (\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0) \\ e^{-\frac{\Delta_t (\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0)}{\varepsilon}} & \text{si } 2\varepsilon < \Delta_t (\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0) \end{cases}$$

$$Cb_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m = \begin{cases} \frac{2\Delta_t}{2\varepsilon + \Delta_t (\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0)} & \text{si } 2\varepsilon \geq \Delta_t (\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0) \\ \frac{1 - e^{-\frac{\Delta_t (\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0)}{\varepsilon}}}{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0} & \text{si } 2\varepsilon < \Delta_t (\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + \sigma_0) \end{cases}$$

En este algoritmo de recepción la única fuente de radiación interna es \vec{J}'_s , aunque al ser una corriente difusiva “simétrica” contribuye muy poco a la fotocorriente y por eso se aproxima como nula en la expresión de detección 5.1.

Por otro lado, resulta interesante resaltar que si el haz láser no es focalizado o proviene de un cable de fibra óptica no muy próximo a la región fotoactiva, en la capa superior del semiconductor se origina una capa de pares electrón hueco de cierta sección. Al difundir en el medio, como los electrones tienen una mayor movilidad que los huecos, tiene lugar una separación de carga, quedando en la superficie la positiva y penetrando hacia el interior la negativa. Como consecuencia aparece un campo interno reductor que es denominado fuerza electromotriz Dember, y al proceso en sí efecto foto-Dember⁶⁹. Esta fuerza electromotriz Dember es perpendicular a la dirección de campo radiado que golpea la antena en forma de onda plana y es causante de una reorientación de la corriente. En pocas palabras, reduce el barrido tangencial del campo incidente sobre la antena, creando uno oblicuo hacia el interior del semiconductor. Esto reduce la corriente efectiva porque parte de la carga se recombina en el interior del bloque semiconductor antes de alcanzar

los contactos. Evitar este efecto es imposible, pero es aconsejable reducir, en la medida de lo posible, el tamaño de la zona iluminada por el láser sobre el semiconductor, para focalizar la fuerza electromotriz Dember y evitar que esté presente en toda la trayectoria de la corriente efectiva.

5.2. El subdominio receptor

Hasta ahora hemos abordado el problema simplificando toda la antena por la que hemos definido como la región fundamental de la misma, por eso no ha sido posible tener en cuenta el efecto de la lente ni del sustrato, no sólo en la emisión sino también en la recepción. El concepto de subdominio proviene de una división del problema completo, del dominio computacional donde se pretende resolver el problema completo, en trozos o subdominios computacionales con una escala espacio-temporal propia. Las razones por las que la escala espacial ha de ser relativamente pequeña $\Delta < 1\mu m$ respecto de la longitud de onda $\lambda \sim 300\mu m$ asociada a la radiación electromagnética fueron expuestas en el apartado 3.2.4 del capítulo 3.

La solución del problema completo culmina en la recepción de la onda electromagnética en el llamado subdominio receptor. Si suponemos que de algún modo conocemos el campo que llega a la región fotoactiva de la antena receptora, entendiendo por ésta la que se sitúa debajo de los contactos metálicos, podemos recrear este campo dentro de una caja de iluminación aplicando el mismo algoritmo descrito en 5.1.2, siempre que éste posea estructura de onda plana. Si a la hipótesis previa le añadimos que el campo electromagnético realmente posee de un modo muy apropiado estructura de onda plana en la región fotoactiva, es evidente que el hecho de contemplar una medida de la fotocorriente teniendo en cuenta una propagación de la onda electromagnética en el material es más coherente con la realidad que la aproximación de región fundamental en vacío.

En la caja de iluminación del subdominio receptor mostrada en la figura 5.5, en ausencia de pulso láser sincronizado, sólo hay campo incidente y fuera de la caja de iluminación no hay campo. El campo que aparece cuando aplicamos el pulso láser es el único que se propaga más allá de la caja de iluminación. La ilustración 5.6 muestra que el subdominio receptor contiene no sólo al sustrato intrínseco sino también a la región superior de la lente. La función de las PML es extender el medio material lente y sustrato más allá de subdominio receptor hasta el infinito. En la la figura 5.6 se ilustra el efecto de

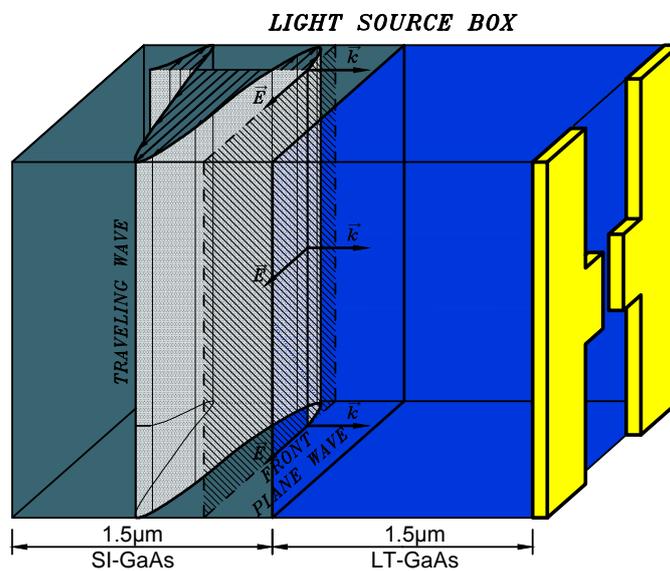


Figura 5.5: Caja de iluminación del subdominio receptor de una antena fotoconduccion receptora.

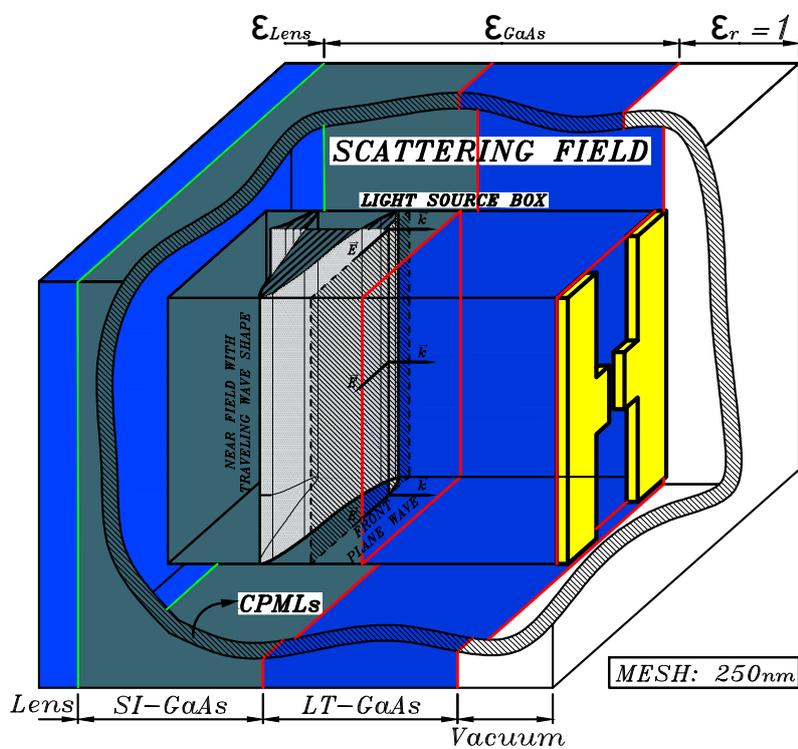


Figura 5.6: Dominio computacional del subdominio receptor de una antena fotoconduccion receptora.

la colocación de una zona PML para truncar el espacio problema y de este modo extiende hasta el infinito la capa sustrato intrínseco y la interfaz lente-sustrato. La simulación de la recepción para obtener la fotocorriente con la expresión 5.1 en el subdominio receptor dura un tiempo tal que el frente de sucesos de la onda electromagnética emitida más allá de la caja de iluminación aún no ha regresado al subdominio receptor, tras reflejarse en alguna interfaz externa al subdominio, y por tanto esta información queda fuera del subdominio y no ha de ser tenida en cuenta. Esta separación temporal de la información es la que permite realizar la medida de la fotocorriente sin aproximaciones y de un modo realista. Pero al mismo tiempo limita la aplicación de este método, ya que cuando hay retroalimentación porque el frente de sucesos tiene suficiente tiempo, durante el proceso de la recepción, de volver al subdominio receptor, el desconocimiento total de este campo reflejado desde más allá del subdominio receptor es imposible de tener en cuenta y ha de ser despreciado, produciendo una medida incompleta y aproximada.

La descripción geométrica de la caja de iluminación del subdominio receptor mostrada en la figura 5.5 posee una estratificación por capas que divide la caja de iluminación en dos zonas de interés. De un lado está el sustrato intrínseco y del otro la capa fotoactiva sobre éste. La división es conceptual, porque ambas regiones poseen la misma permitividad eléctrica y lo único que cambia es la conductividad de la región fotoactiva durante el transitorio en el que se recibe la onda electromagnética incidente.

Queda aclarar la razón de que sólo podremos llevar a cabo la detección de la fotocorriente en el caso de que la estructura del campo cercano, en el interior de la caja de iluminación, sea de onda plana. Es una razón de escala. Al igual que existe un subdominio receptor, existe uno emisor, ambos con el mismo mallado $\Delta < 1\mu m$. La conexión entre ambos, es dada por una simulación completa que contiene a ambas antenas y simula el campo que transmite durante todo el proceso de emisión-recepción. El proceso de emisión en el subdominio emisor y el proceso de simulación de conexión entre subdominios serán explicados en apartados posteriores. Pero la escala espacio-temporal de la simulación que conecta los subdominios es mayor que en cada uno de éstos, para poder simular el problema completo con las dos antenas emisora y receptora. Como en la simulación realizada en el subdominio receptor se requiere más información espacio temporal de la que el dominio de conexión contiene hay que interpolar los datos obtenidos del dominio de conexión. El teorema de equivalencia permite reproducir la estructura espacio-temporal de cualquier campo. Pero el desconocimiento del mismo en ciertos puntos del espacio y en

ciertos instantes de tiempo obliga a interpolar espacio-temporalmente para determinar los valores que no se consideran en el dominio de conexión y que son necesarios en el subdominio receptor. Por evidentes razones de simplicidad y en acuerdo con la realidad del proceso físico, interpolar sólo temporalmente es totalmente correcto cuando la estructura del campo es aproximadamente la de una onda plana. Esta razón fundamental condiciona también la aplicabilidad del método, ya que en la posición donde se sitúa la caja de iluminación dentro del dominio de conexión, dentro de la caja la estructura del campo de iluminación ha de ser de onda plana. Los apartados siguientes proporcionan una descripción más detallada de este proceso.

5.3. El subdominio emisor

En la figura 5.7a se ilustra la emisión en campo lejano de lo que hemos definido como la región fundamental de la antena. Se trata de una aproximación que permite obtener, mediante una expresión semiempírica, la fotocorriente medida. Pero no deja de ser más que una aproximación susceptible de ser mejorada. El subdominio emisor es una región de la antena emisora que comprende:

- La capa de vacío localizada sobre los contactos metálicos.
- Los contactos metálicos sobre la región fundamental.
- La región fundamental.
- El sustrato semiaislante emplazado bajo la región fundamental.
- Una región de lente dieléctrica situada bajo el sustrato semiaislante.

Almacenando los campos eléctrico y magnético en esta región se encapsula toda la física de la antena emisora en una región de la misma.

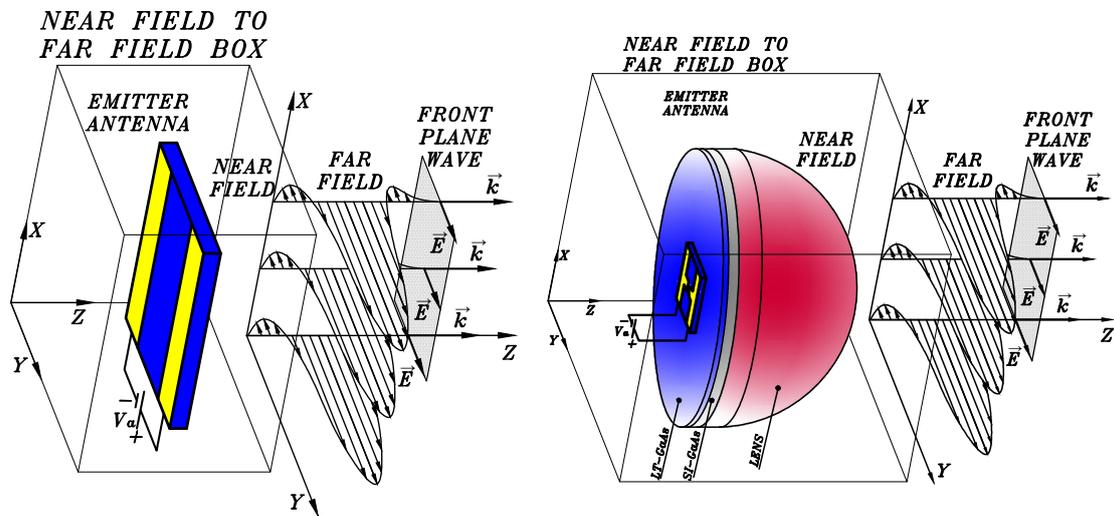
La figura 5.7c ilustra esta región de la antena emisora más una zona de vacío. Esta región es denominada caja de fuentes duras o de almacenamiento de campo. Los nombramos así debido a que, durante el proceso de emisión, el valor de los campos es almacenado no sobre el grid de la simulación, sino sobre uno cien veces mayor y cada cien pasos temporales, es decir, se realiza un submuestreo del campo para adaptarlo a la región de conexión entre los subdominios emisor y receptor. Este proceso se realiza sobre la caja de

almacenamiento de campos. Como se puede ver en la figura 5.7c, podemos considerar la antena emisora como estratificada en capas. Cuando el pulso láser es aplicado a la región fotoactiva polarizada, aparece el equivalente a un dipolo de corriente, y este es el que induce la radiación electromagnética. Durante el tiempo que ocurre la aplicación del láser y hasta que la recombinación de la carga en exceso inducida por efecto fotoeléctrico cae numéricamente a cero (50dB), la perturbación de la radiación electromagnética alcanza una distancia respecto de su origen. A la máxima distancia alcanzada se la denomina frente de sucesos. Si este frente de sucesos tras reflejarse en las interfaces que hay más allá de la caja de almacenamiento de campo no tiene tiempo de regresar a la misma, podemos decir que desde el punto de vista de un observador situado en la caja de almacenamiento de campos los medios materiales durante el tiempo de simulación, son infinitos y todo campo generado viaja sobre ellos y el vacío sin regresar. Con estas consideraciones y haciendo uso de las CPMLs que permiten truncar problemas abiertos, es posible almacenar durante el intervalo de tiempo de interés los campos electromagnéticos. La caja de almacenamiento de campo puede ser trasladada a otro dominio con otra escala espacio-temporal mayor, sin perder la información física del proceso de emisión, siempre que esa escala contemple la frecuencia máxima de corte. Esta caja se comportará como un conjunto de fuentes duras durante el intervalo de tiempo que contenga almacenado.

5.4. Conexión entre subdominios

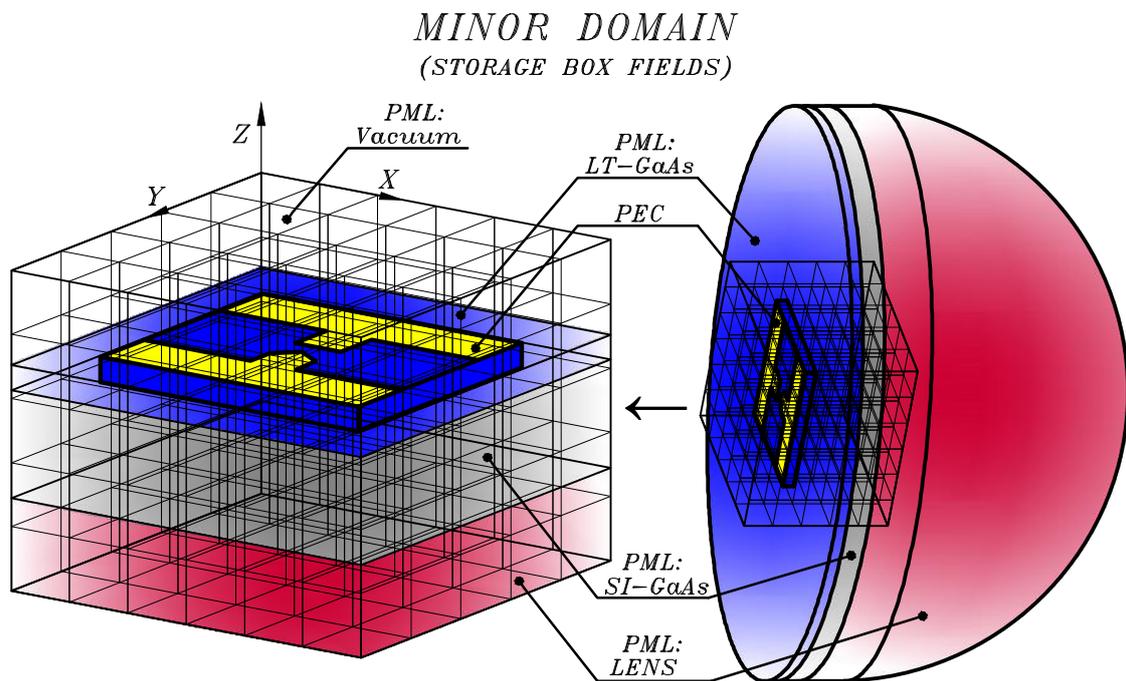
Para poder simular la propagación del campo desde la antena emisora, por motivos computacionales, necesitamos un mallado considerablemente mayor al empleado para describir el gap de la emisora. Esto significa, por ejemplo, que si hemos mallado la región fundamental de la antena con un grid de 250nm, tendremos que mallar la antena total con un mallado cien veces mayor de $25\mu m$. No obstante, con este procedimiento no hemos perdido información sustancial cuantitativa para describir el fenómeno electrodinámico, pues la longitud de onda máxima significativa asociada es de unos $100\mu m$ (cuando la frecuencia de corte son 6THz), y con una resolución espacial de $\Delta = 25\mu m$ esta longitud de onda es muestreada aceptablemente^{133,134}.

En la figura 5.7b se traslada la caja de fuentes duras a la antena emisora, que en este caso es un elemento pasivo y se rodea dicha antena por una caja de transformación de campo cercano a campo lejano^{34,35}. Durante todos los instantes temporales almacenados



(a) Obtención del campo lejano de la re-emisora completa empleando el algoritmo de transformación fundamental de una antena emisoratransformación NF-FF¹²⁹, pero alimentada por empleando el algoritmo de transformación la caja de fuentes duras obtenida en el subdominio emisor.

(b) Obtención del campo lejano de la antena



(c) Subdominio emisor de una antena fotoconducciona emisora.

Figura 5.7: Esquemas de modelos de procesos de emisión de una antena fotoconducciona, en campo cercano y lejano.

en la caja de fuentes duras, el valor del campo en la región de la antena emisora, donde la caja esta emplazada, están fijados. Pasado ese instante el valor del campo en la región donde se coloca la caja de fuentes duras deja de ser impuesto, y se deja al campo en esa región evolucionar sin imposiciones de acuerdo a las ecuaciones de Maxwell. El campo lejano producido por la antena en la dirección axial puede ser usado para alimentar el subdominio receptor.

No bastante el caso de mayor interés está en la recepción en zona de campo cercano. Para ello se ha creado un dominio computacional total donde antena emisora y receptora están separadas una distancia pequeña, por ejemplo, tan sólo un centímetro. Esta disposición ilustrada por la figura 5.8 es llamada dominio computacional de conexión entre subdominios y en ella están presentes todos los elementos del proceso de emisión recepción. Como ya se ha dicho se emplea la caja de fuentes duras para alimentar la antena emisora y después se deja al sistema avanzar en el tiempo. El resultado será analizado en un apartado 5.5.

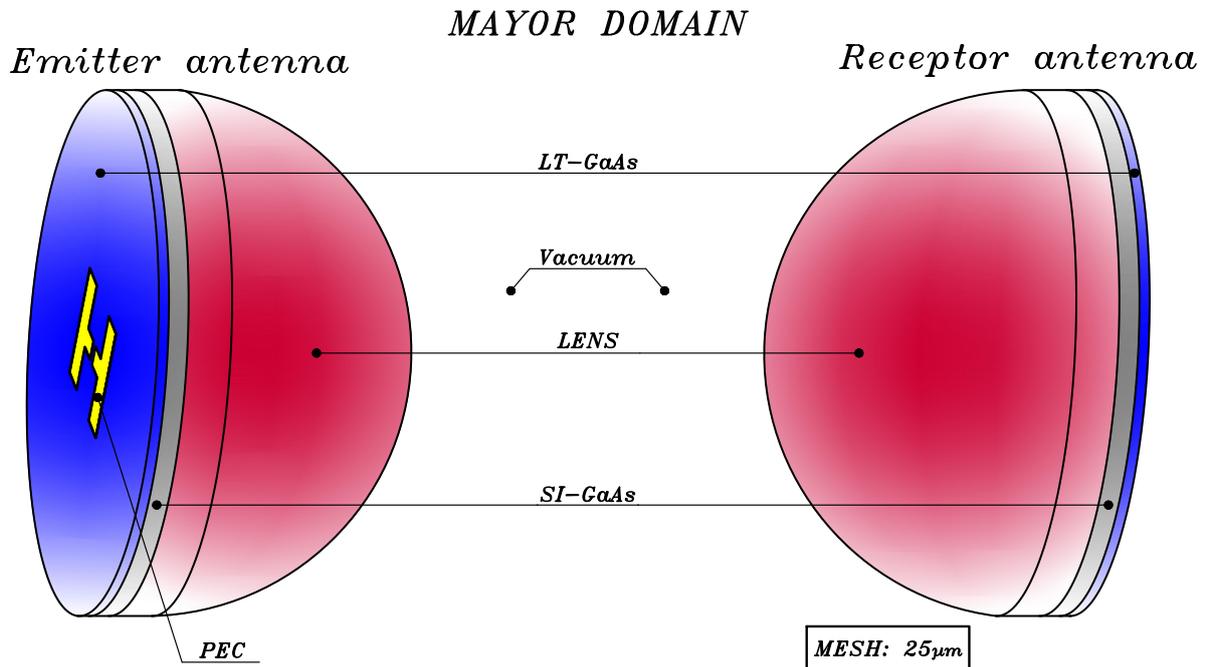


Figura 5.8: Conexión entre subdominios y dominio correspondiente al sistema total de emisión-recepción.

5.4.1. Estructura de onda plana

Como hemos dicho, por razones de simplicidad en la interpolación que permite conectar el subdominio receptor con el dominio de conexión, la premisa de que en la región fotoactiva de la antena receptora el campo posea estructura de onda plana es clave. La forma más simple de comprobar que en la región fotoactiva de la antena receptora el campo posee estructura de onda plana es colocar sondas formando un plano en la región el la que se desea comprobar esta propiedad, en este caso la interfaz semiconductor-metal, y comparar que la forma temporal del campo coincide. La figura 5.9 muestra el conjunto de cinco sondas que se han colocado en dicha interfaz. Se ha intentado disponer éstas de modo que proporcionen información sobre puntos con disparidad de valor de campo electrostático si estuviésemos en una antena emisora. Aunque sabemos que este campo electrostático es nulo en la receptora, hemos creído útil por principio de reciprocidad de operación que estos puntos proporcionan información suficiente. En la figura 5.10 se

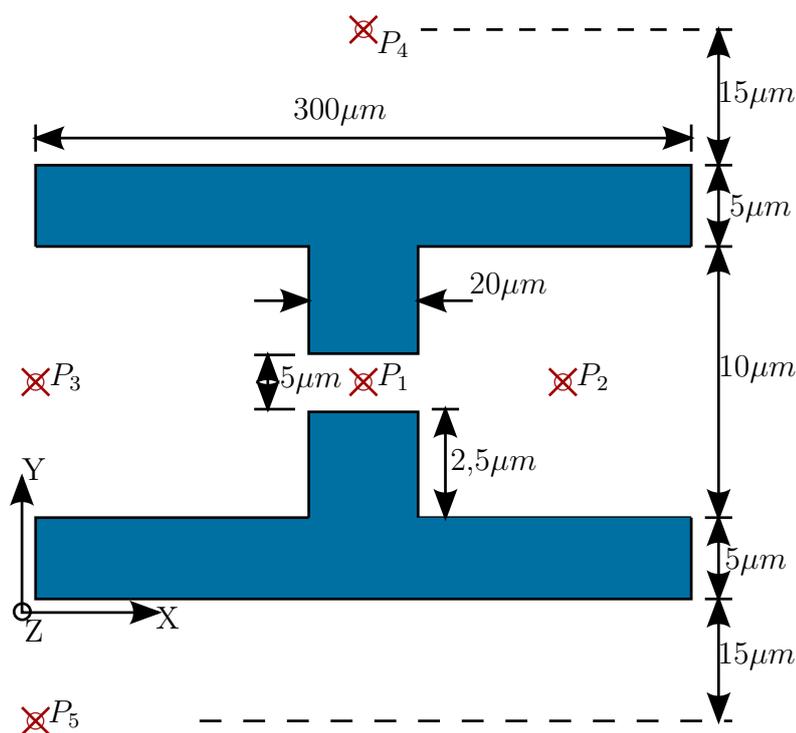


Figura 5.9: Sondas colocadas en el plano de la interfaz semiconductor-metal. Contactos metálicos tomados de la bibliografía para reproducir datos experimentales⁹⁵.

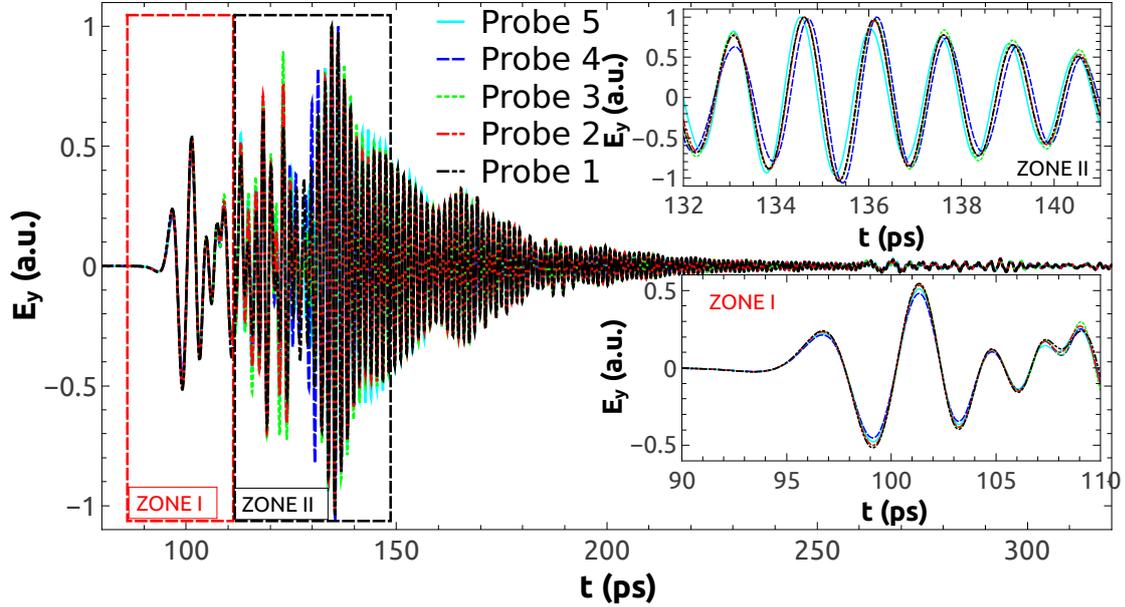


Figura 5.10: Perfiles de campo eléctrico comparado en el plano de la interfaz semiconductor metal de la antena receptora. Las sondas se corresponden con los puntos mostrados en la figura 5.9

muestran las comparativas de los campos correspondientes a las sondas localizadas en las posiciones mostradas en la figura 5.9. Este resultado confirma la validez de la hipótesis y permite realizar una interpolación sólo temporal del campo para el subdominio receptor.

5.5. Resultados

Para obtener la fotocorriente en la antena receptora, se ha tomado el campo correspondiente a la sonda 1 de la figura 5.9 y se ha interpolado temporalmente. Con este perfil unidimensional, se ha generado la onda plana en el subdominio receptor. Esta representa al campo que llega a la zona fotoactiva de la antena receptora.

En ausencia de pulso láser ($\sigma(t) = \sigma_0$), se ha obtenido la fotocorriente que es mostrada en la figura 5.11. Como se puede ver a medida que la frecuencia del campo es mayor, en instantes temporales avanzados que se corresponden con la zona II de la figura 5.10, los portadores de carga no tiene tiempo para reaccionar al cambio de campo y la amplitud se atenúa hasta casi cero. En instantes posteriores correspondientes a la zona II, donde la amplitud del campo es mayor, el máximo de la fotocorriente no alcanza la decena de

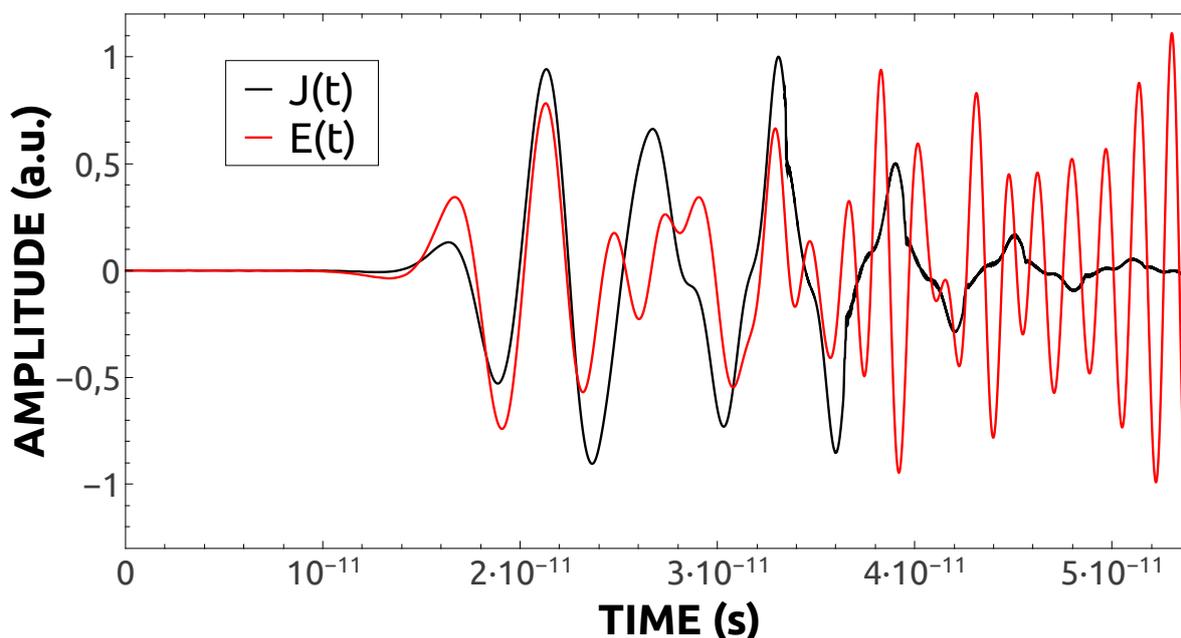


Figura 5.11: Perfil de campo eléctrico y corriente detectada en el subdominio receptor en ausencia de pulso láser. El orden de magnitud de la corriente medida es de 5fA.

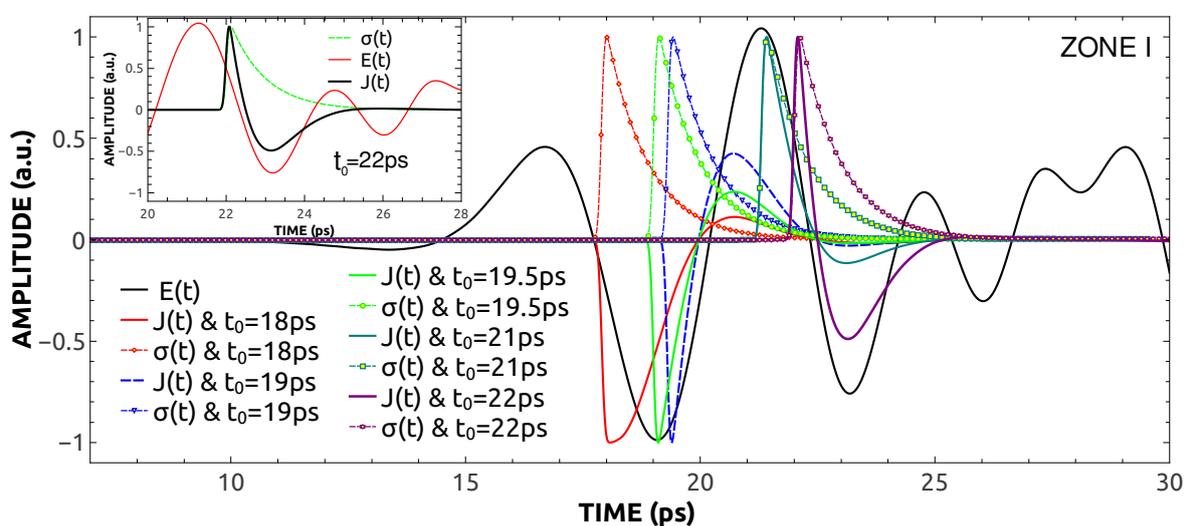


Figura 5.12: Perfiles de campo eléctrico, fotoconductividades aplicadas con diferentes retardos t_0 en zona I de la figura 5.9 y las corrientes detectadas en la ventana temporal gobernada por la fotoconductividad⁴⁴. El orden de magnitud del máximo de la corriente es de 80nA.

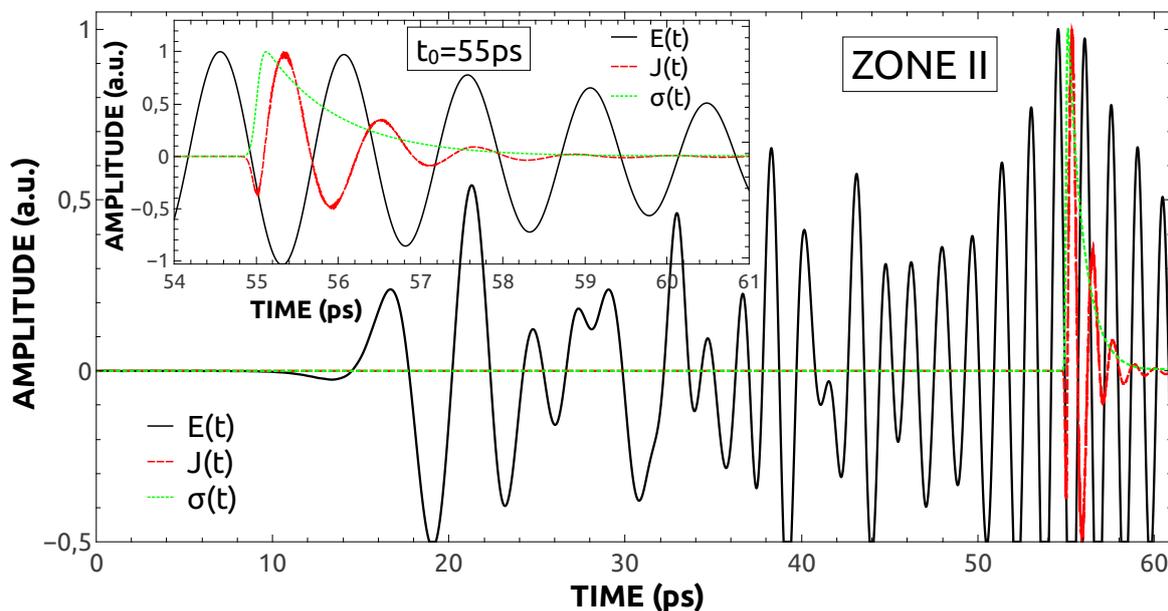


Figura 5.13: Perfil de campo eléctrico, fotoconductividad aplicada con retardo $t_0 = 55ps$ en zona II de la figura 5.10 y la corriente detectada. El orden de magnitud del máximo de la corriente es de $4nA$, más de diez veces menor que en Zona I.

nano-amperios.

El segundo estudio se ha centrado en los instantes iniciales (zona I) donde se han disparado pulsos láser con diferentes retardos. En la figura 5.12 se muestran los cambios en las fotoconductividades y las correspondientes fotocorrientes detectadas en el subdominio receptor durante la ventana de muestreo impuesta por la duración de la fotoconductividad⁴⁴. En todos los casos las fotocorrientes han superado los $50nA$. En estos casos, la estructura de la fotocorriente es aproximadamente la convolución del campo por la fotoconductividad, comprobando que la expresión semiempírica 3.57 puede ser atribuida en gran medida al proceso de la recepción.

Por último hemos considerado instantes temporales avanzados, identificados como correspondientes a la zona II de la figura 5.10. Los resultados mostrados en la figura 5.13 indican que a pesar de que el campo es más intenso, la rápida oscilación temporal del mismo hace que el máximo de la amplitud de la fotocorriente calculada en el subdominio receptor, sea diez veces menor.

6

Algoritmos para la simulación del régimen transitorio de dispositivos modelados por las ecuaciones magnetohidrodinámicas

6.1. Introducción	140
6.2. El modelo magnetohidrodinámico	141
6.3. Conexión entre el estado estacionario y el régimen transitorio	146
6.4. El algoritmo DH-FDTD	152
6.4.1. Discretización temporal	155
6.4.2. La discretización espacio-temporal	157
6.4.3. Condiciones de contorno	178
6.5. Estabilidad	180
6.6. Conjetura teórica Dember-Lorentz-Hall	182

6.1. Introducción

Hasta ahora hemos abordado el estudio de las antenas fotoconductoras mediante el modelo de difusión y arrastre. En los capítulos precedentes se ha empleado este modelo bajo un conjunto de restricciones listadas en el apartado 2.1.1 del capítulo 2. Pero existen dispositivos de interés, que por sus peculiaridades, no pueden ser descritos correctamente por dicho modelo. La razón fundamental es porque no contempla la ley de interacción de Lorentz⁵⁹.

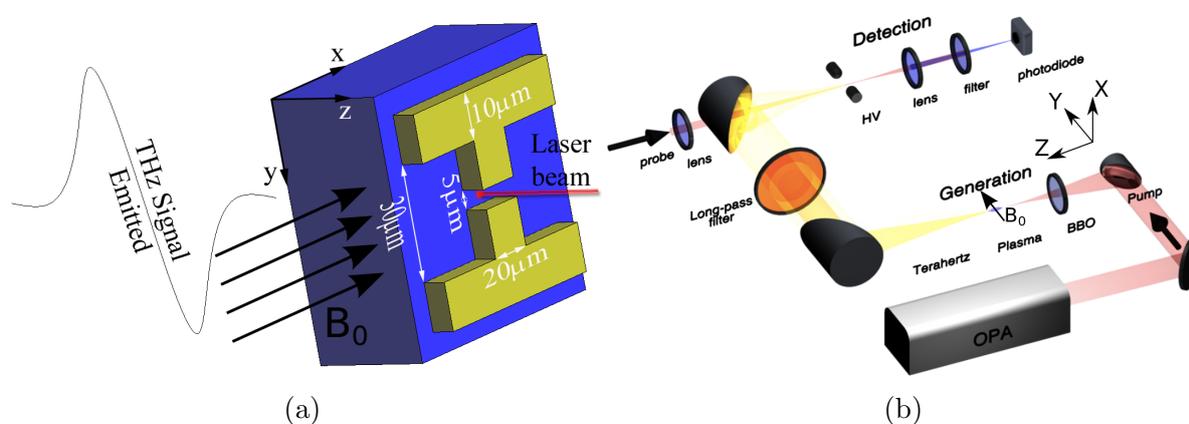


Figura 6.1: a) Antena fotoconductoras polarizada por una fuente de tensión externa e inmersa en un campo magnetostático. b) Corriente debida a un plasma inducido en un gas al ser este ionizado por un láser. El filamento de corriente se encuentra en presencia de un campo magnetostático. Esta figura es una modificación de la referencia¹⁴³.

Existen evidencias experimentales^{45–48} y estudios teóricos^{49–52} que demuestran y justifican respectivamente que una antena fotoconductoras emite más, si durante el proceso transitorio se encuentra inmersa en el seno de un campo magnetostático con una determinada orientación. En la figura 6.1a, por ejemplo, se ilustra una antena fotoconductoras polarizada en la dirección Y que está situada en el seno de un campo magnetostático orientado en la dirección X. Esta configuración no puede ser descrita satisfactoriamente por el modelo de difusión y arrastre. Otro ejemplo de fuente de emisión lo encontramos en un gas ionizado^{143–145}, en el cual un filamento de corriente inducida es el que radia. Un gas ionizado es un plasma, que tampoco puede ser descrito por el modelo de difusión y arrastre, más aún posiblemente cuando ese elemento de corriente se produce en el seno de un campo magnetostático.

La figura 6.1b ilustra un sistema típico en el que un elemento de corriente radia en la banda de los THz y después la radiación es detectada por una antena fotoconductiva. En este capítulo se han desarrollado algoritmos basados en las ecuaciones magnetohidrodinámica con el objetivo de presentar procedimientos numéricos que permitan abordar estos problemas.

6.2. El modelo magnetohidrodinámico

El concepto de partícula fluida hace referencia a la masa que un fluido (conjunto de partículas con más grados de libertad que ligaduras) posee en un instante de tiempo en un punto del espacio. En el enfoque que el modelo magnetohidrodinámico hace de la dinámica de carga este concepto adquiere un doble significado. De un lado sigue siendo coherente con la definición de partícula fluida dada. Del otro se añade a la definición una especificación sobre la carga, ya que entenderemos como partícula fluida no sólo la masa sino también la carga eléctrica de una colectividad de partículas en un instante dado en un punto del espacio. La aproximación macroscópica sería válida, puesto que si el mallado es de $1\mu m$ un nodo representaría una esfera de $0.5\mu m$ que contendría $\sim 8 \cdot 10^9$ átomos.

En el caso de partículas fluidas cargadas y “ligadas” por el potencial de los núcleos atómicos en el interior de una red cristalina, la interacción de los portadores de carga (entendidos como colectividades dentro del concepto de partícula fluida) con los núcleos atómicos de la red cristalina condiciona la masa efectiva de los portadores. De esta forma, la masa efectiva es un concepto que permite tratar a una partícula ligada por un potencial como si de una partícula libre se tratase. Con la particularidad de poseer diferente masa dependiendo de la dirección de su desplazamiento con respecto a la orientación de la red cristalina^{58,69}. Una definición de masa efectiva, la que se ha usado en este trabajo, es explicada con más detalle en el apartado III.a del apéndice III.

Definiremos hueco fluido (HF) como la concentración de huecos y la masa que estos poseen en un instante en un punto dado expresados como $p_T(\vec{r}, t)$ y \bar{m}_p . Del mismo modo definiremos electrón fluido (EF) como la concentración de electrones y la masa de estos ($n_T(\vec{r}, t)$ y \bar{m}_n) que en un instante de tiempo hay en un punto del espacio. La figura 6.2 muestra un HF y un EF sobre los que actúan un conjunto de densidades volúmicas de fuerza o fuerzas por unidad de volumen, que también llamaremos densidades de acción,

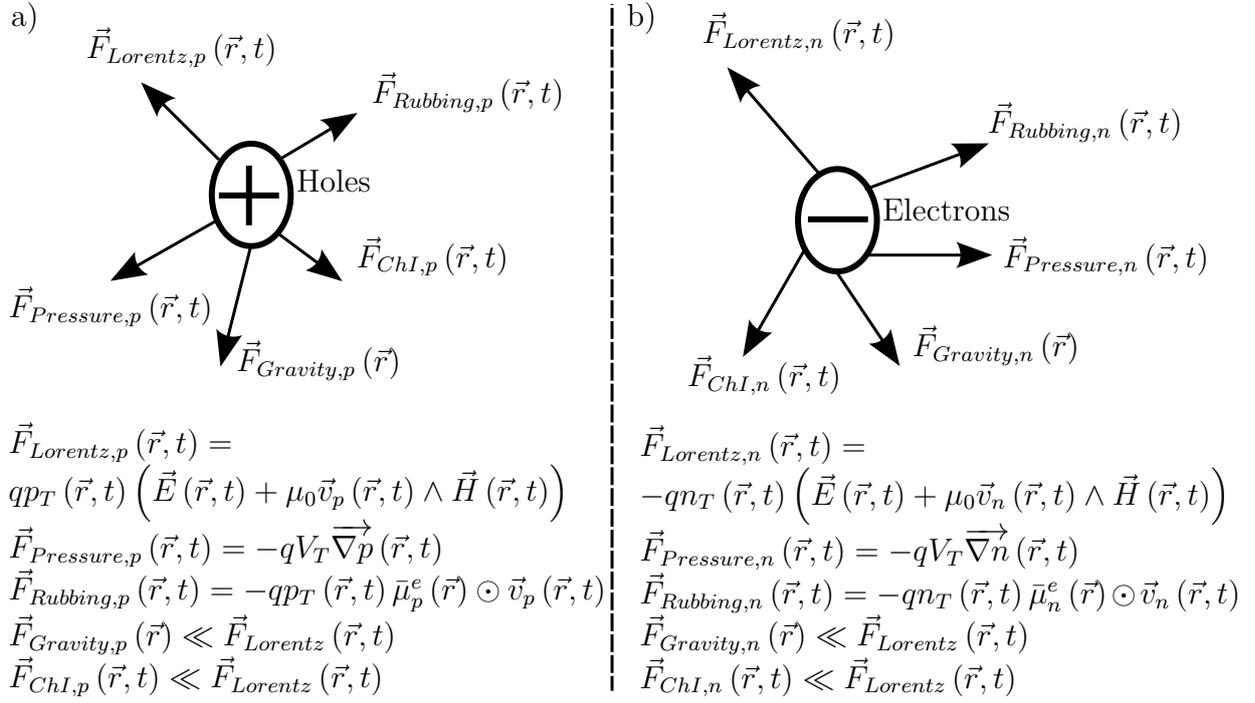


Figura 6.2: Densidades de acción sobre un a) hueco fluido y b) sobre una electrón fluido.

y que corresponden a:

- Densidad de acción de Lorentz^{53,55,146} sobre un HF:
 $\vec{F}_{Lorentz,p} = qp_T(\vec{r},t) \left(\vec{E}(\vec{r},t) + \mu_0 \vec{v}_p(\vec{r},t) \wedge \vec{H}(\vec{r},t) \right).$
- Densidad de acción de Lorentz^{53,55,146} sobre un EF:
 $\vec{F}_{Lorentz,p} = -qn_T(\vec{r},t) \left(\vec{E}(\vec{r},t) + \mu_0 \vec{v}_n(\vec{r},t) \wedge \vec{H}(\vec{r},t) \right).$
- Densidad de acción de la presión¹⁴⁷ ejercida sobre un HF:
 $\vec{F}_{Pressure,p}(\vec{r},t) = -qV_T \vec{\nabla} \vec{p}(\vec{r},t).$
- Densidad de acción de la presión¹⁴⁷ ejercida sobre un EF:
 $\vec{F}_{Pressure,n}(\vec{r},t) = -qV_T \vec{\nabla} \vec{n}(\vec{r},t).$
- Densidad de acción de los potenciales de la red cristalina^{58,59,69,147} (en situación de campo aplicado no nulo) más la interacción entre partículas fluidas ejercida sobre un HF:
 $\vec{F}_{Rubbing,p}(\vec{r},t) = -qp_T(\vec{r},t) \vec{\mu}_p^e(\vec{r}) \odot \vec{v}_p(\vec{r},t).$

- Densidad de acción de los potenciales de la red cristalina^{58,59,69,147} (en situación de campo aplicado no nulo) más la interacción entre partículas fluidas ejercida sobre un EF:

$$\vec{F}_{Rubbing,n}(\vec{r}, t) = -qn_T(\vec{r}, t) \bar{\mu}_n^e(\vec{r}) \odot \vec{v}_n(\vec{r}, t).$$

- Densidad de acción de la gravedad ejercida sobre un HF $\vec{F}_{Gravity,p}(\vec{r})$ y un EF $\vec{F}_{Gravity,n}(\vec{r})$ respectivamente.
- Densidad de acción de la interacción entre cargas en la propia colectividad y ejercida sobre un HF $\vec{F}_{GhI,p}(\vec{r}, t)$ y un EF $\vec{F}_{GhI,n}(\vec{r}, t)$ respectivamente.

En los dos términos de la densidad de acción de los potenciales de la red cristalina, $\bar{\mu}_n^e(\vec{r})$ y $\bar{\mu}_p^e(\vec{r})$ se corresponden con las movilidades efectivas de electrones y huecos definidos en el apartado III.b del apéndice III, μ_0 es la permeabilidad magnética del vacío y eso significa que este modelo sólo se contemplan medios materiales “no magnéticos”, y $\vec{v}_p(\vec{r}, t)$ y $\vec{v}_n(\vec{r}, t)$ son la velocidad de un HF y de un EF respectivamente. Por otro lado, tanto la fuerza de interacción entre cargas $\vec{F}_{GhI}(\vec{r}, t)$ en el interior de una colectividad (partícula fluida) como la gravitatoria $\vec{F}_{Gravity}(\vec{r})$ pueden ser despreciadas frente a las otras fuerzas. $\vec{F}_{GhI}(\vec{r}, t)$ es muy pequeña y su variación es despreciable en el intervalo de tiempo Δ_t de avance del algoritmo numérico pues no se modifica la forma y estructura de la partícula fluida. La segunda es alrededor de mil veces más pequeña que la interacción de Lorentz¹⁴¹ en la dimensiones que nos ocupan (micrómetros).

De la segunda ley de Newton¹⁴⁸, $m\vec{a} = \sum_{i=1}^N \vec{F}_i$, se obtiene considerando los términos anteriores:

$$p_T(\vec{r}, t) \bar{m}_p \odot \frac{d\vec{v}_p(\vec{r}, t)}{dt} = qp_T(\vec{r}, t) \left(\vec{E}_T(\vec{r}, t) + \mu_0 \vec{v}_p(\vec{r}, t) \wedge \vec{H}(\vec{r}, t) \right) - qV_T \vec{\nabla} \vec{p}(\vec{r}, t) - qp_T(\vec{r}, t) \bar{\mu}_p^e(\vec{r}) \odot \vec{v}_p(\vec{r}, t) + \vec{s}_{p0}(\vec{r}) \quad (6.1)$$

$$n_T(\vec{r}, t) \bar{m}_n \odot \frac{d\vec{v}_n(\vec{r}, t)}{dt} = -qn_T(\vec{r}, t) \left(\vec{E}_T(\vec{r}, t) + \mu_0 \vec{v}_n(\vec{r}, t) \wedge \vec{H}(\vec{r}, t) \right) - qV_T \vec{\nabla} \vec{n}(\vec{r}, t) - qn_T(\vec{r}, t) \bar{\mu}_n^e(\vec{r}) \odot \vec{v}_n(\vec{r}, t) + \vec{s}_{n0}(\vec{r}) \quad (6.2)$$

Donde $p_T(\vec{r}, t) \bar{m}_p$ y $n_T(\vec{r}, t) \bar{m}_n$ expresan la densidad volúmica de masa de un HF y un EF respectivamente. Las aceleraciones sufridas por los HF y los EF viene dados por $\frac{d\vec{v}_p(\vec{r}, t)}{dt}$ y $\frac{d\vec{v}_n(\vec{r}, t)}{dt}$, donde la velocidad del HF es $\vec{v}_p(\vec{r}, t)$ y la del EF $\vec{v}_n(\vec{r}, t)$. Los términos

$\vec{s}_{p0}(\vec{r}) = -qp0(\vec{r})\vec{E}_0(\vec{r})$ y $\vec{s}_{n0}(\vec{r}) = qn0(\vec{r})\vec{E}_0(\vec{r})$ son puramente numéricos y evitan que en el instante inicial $t = 0$ exista una fuerza aplicada no electrostática que inicie el proceso transitorio antes de aplicar el láser.

El sistema de ecuaciones 6.1-6.2 son referidas como el modelo magnetohidrodinámico. Operando este sistema las ecuaciones 6.1-6.2 se pueden reescribir como:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{v}_p(\vec{r}, t)}{dt} &= q\bar{m}_p^* \odot \left(\vec{E}_T(\vec{r}, t) + \vec{L}_p(\vec{r}, t) \right) - qV_T \frac{\bar{m}_p^* \odot \vec{\nabla} p(\vec{r}, t)}{p_T(\vec{r}, t)} \\ &\quad - \bar{\gamma}_p(\vec{r}) \odot \vec{v}_p(\vec{r}, t) + \vec{e}_p(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (6.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{v}_n(\vec{r}, t)}{dt} &= -q\bar{m}_n^* \odot \left(\vec{E}_T(\vec{r}, t) + \vec{L}_n(\vec{r}, t) \right) - qV_T \frac{\bar{m}_n^* \odot \vec{\nabla} n(\vec{r}, t)}{n_T(\vec{r}, t)} \\ &\quad - \bar{\gamma}_n(\vec{r}) \odot \vec{v}_n(\vec{r}, t) + \vec{e}_n(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (6.4)$$

Donde se ha compactado el término $\vec{L}_p(\vec{r}, t) = \mu_0\vec{v}_p(\vec{r}, t) \wedge \vec{H}(\vec{r}, t)$ y $\vec{L}_n(\vec{r}, t) = \mu_0\vec{v}_n(\vec{r}, t) \wedge \vec{H}(\vec{r}, t)$. Los valores de \bar{m}_n^* y \bar{m}_p^* corresponden a la masa efectiva inversa de los electrones y los huecos respectivamente, además ambos parámetros son definidos en el apartado III.a del apéndice III. Los parámetros $\bar{\gamma}_p(\vec{r})$ y $\bar{\gamma}_n(\vec{r})$ son los llamados tiempos efectivos de colisión para un HF y un EF respectivamente. Sus definiciones se pueden consultar también en el apartado III.c del apéndice III. Por último para los huecos se tiene $\vec{e}_{p0}(\vec{r}) = \frac{\bar{m}_p^* \odot \vec{s}_{p0}(\vec{r})}{p_T(\vec{r}, t)} = -q\frac{p0(\vec{r})}{p_T(\vec{r}, t)} \left(\bar{m}_p^* \odot \vec{E}_0(\vec{r}) \right)$, y para los electrones $\vec{e}_{n0}(\vec{r}) = \frac{\bar{m}_n^* \odot \vec{s}_{n0}(\vec{r})}{n_T(\vec{r}, t)} = q\frac{n0(\vec{r})}{n_T(\vec{r}, t)} \left(\bar{m}_n^* \odot \vec{E}_0(\vec{r}) \right)$. Las corrientes transitorias, las que a través

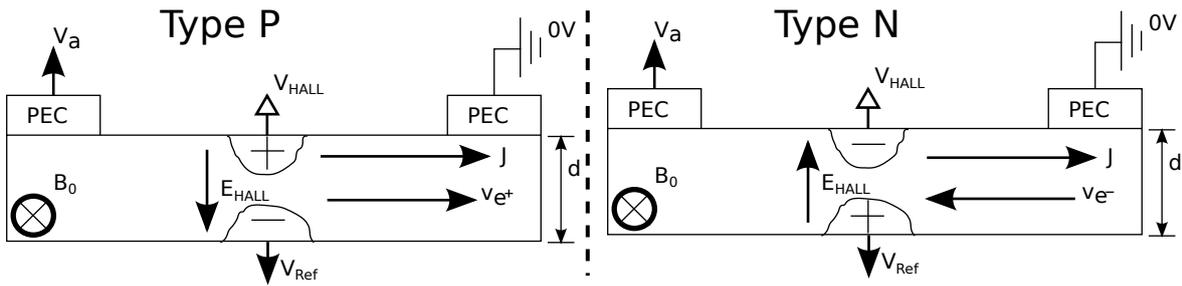


Figura 6.3: Tensión Hall inducida en el estado estacionario de una antena fotoconductor al aplicar el campo magnetostático.

de la ley de Ampere-Maxwell inducirán el campo radiado por una antena emisora son en este capítulo nombradas por $\vec{J}_n(\vec{r}, t)$ y $\vec{J}_p(\vec{r}, t)$. El conocimiento de las velocidades de un

HF y un EF permiten calcular esas corrientes transitorias debidas a electrones $\vec{J}_n(\vec{r}, t)$ y a huecos $\vec{J}_p(\vec{r}, t)$:

$$\vec{J}_n(\vec{r}, t) = -qn_T(\vec{r}, t) \vec{v}_n(\vec{r}, t) \quad (6.5)$$

$$\vec{J}_p(\vec{r}, t) = qp_T(\vec{r}, t) \vec{v}_p(\vec{r}, t) \quad (6.6)$$

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \vec{J}_n(\vec{r}, t) + \vec{J}_p(\vec{r}, t) = q(p_T(\vec{r}, t) \vec{v}_p(\vec{r}, t) - n_T(\vec{r}, t) \vec{v}_n(\vec{r}, t)) \quad (6.7)$$

En el modelo magnetohidrodinámico aparecen dos términos que son puramente estacionarios, $\vec{E}_0(\vec{r})$ y las cargas $n_0(\vec{r})$ y $p_0(\vec{r})$, que serán obtenidos tal y como se describió en el capítulo 2 de este trabajo con el modelo de difusión y arrastre. Esto se debe a que una vez alcanzado el equilibrio en el estado estacionario la velocidad de transporte de la carga no es nula, pues existe una corriente estacionaria que circula por la antena. Al aplicar el campo magnetostático en estas circunstancias, se inducirá una tensión Hall^{56,69} (ver figura 6.3) que provocará una redistribución la carga y la corriente estacionaria. Como conocemos el valor del campo magnetostático aplicado y su dirección, y los valores de las cargas $n_0(\vec{r})$ y $p_0(\vec{r})$ y de $\vec{E}_0(\vec{r})$, deducir el valor del potencial Hall es factible, en determinadas condiciones de simetría, y de ahí una corrección a la distribución espacial de carga $n_0(\vec{r})$, $p_0(\vec{r})$ y al potencial $\vec{E}_0(\vec{r})$. El procedimiento de como hacer esto se presenta en el apartado siguiente 6.3.

El sistema de ecuaciones diferenciales que describirá el transitorio de emisión de una antena fotoconduktiva inmersa en un campo magnetostático es:

$$\mu \partial_t \vec{H}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \wedge \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (6.8)$$

$$\varepsilon \partial_t \vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \wedge \vec{H}(\vec{r}, t) + q(n_T(\vec{r}, t) \vec{v}_n(\vec{r}, t) - p_T(\vec{r}, t) \vec{v}_p(\vec{r}, t)) \quad (6.9)$$

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = GR(\vec{r}, t) - n(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_n(\vec{r}, t) - \vec{v}_n(\vec{r}, t) \cdot \vec{\nabla} n(\vec{r}, t) \quad (6.10)$$

$$\partial_t p(\vec{r}, t) = GR(\vec{r}, t) - p(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_p(\vec{r}, t) - \vec{v}_p(\vec{r}, t) \cdot \vec{\nabla} p(\vec{r}, t) \quad (6.11)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \vec{v}_p(\vec{r}, t) &= q\bar{m}_p^* \odot \left(\vec{E}_T(\vec{r}, t) + \vec{L}_p(\vec{r}, t) \right) - qV_T \frac{\bar{m}_p^* \odot \vec{\nabla} p(\vec{r}, t)}{p_T(\vec{r}, t)} \\ &- \bar{\gamma}_p(\vec{r}) \odot \vec{v}_p(\vec{r}, t) - q \frac{p_0(\vec{r})}{p_T(\vec{r}, t)} \left(\bar{m}_p^* \odot \vec{E}_0(\vec{r}) \right) \end{aligned} \quad (6.12)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \vec{v}_n(\vec{r}, t) &= -q\bar{m}_n^* \odot \left(\vec{E}_T(\vec{r}, t) + \vec{L}_n(\vec{r}, t) \right) - qV_T \frac{\bar{m}_n^* \odot \vec{\nabla}_n(\vec{r}, t)}{n_T(\vec{r}, t)} \\ &- \bar{\gamma}_n(\vec{r}) \odot \vec{v}_n(\vec{r}, t) + q \frac{n0(\vec{r})}{n_T(\vec{r}, t)} \left(\bar{m}_n^* \odot \vec{E}_0(\vec{r}) \right) \end{aligned} \quad (6.13)$$

donde las dos primeras ecuaciones (6.8-6.9) se corresponden con las leyes de Faraday y Ampere-Maxwell, las dos segundas ecuaciones (6.10-6.11) son las de continuidad de la carga las densidades de corriente son las definidas en 6.5 y 6.6. La expresión $GR(\vec{r}, t)$ fue definida en el apartado 3.2.3 y 3 del capítulo 3. El resto de términos del sistema de ecuaciones diferenciales 6.8-6.13 han sido introducidos en la deducción del modelo magnetohidrodinámico. En el siguiente apartado se propone un conjunto de algoritmos para resolver este sistema de ecuaciones diferenciales empleando el método numérico de diferencias finitas presentado en el apéndice I.

6.3. Conexión entre el estado estacionario y el régimen transitorio

El primer paso antes de establecer las conexiones entre el régimen transitorio y el estado estacionario es corregir la carga $n0(\vec{r})$, $p0(\vec{r})$ y el campo electrostático $\vec{E}_0(\vec{r})$ obtenidos de las ecuaciones (2.17, 2.18, 2.19) del capítulo 2. Cuando aplicamos el campo magnetostático el sistema vuelve otra vez a desplazarse desde su estado de equilibrio a otro estado de equilibrio en el que la ley de Lorentz produce un potencial Hall (ver figura 6.3) entre la base de la región fotoactiva (justo en la interfaz entre el sustrato semi-aislante y la capa fotoactiva (ver figura 1.7 del capítulo 1)) y la cara superior de la capa fotoactiva donde se depositan los contactos metálicos (ver figura 1.7 del capítulo 1).

Para determinar este potencial Hall vamos a suponer que tenemos una región fotoactiva como la mostrada en la figura 6.1a. En esta región la corriente estacionaria que circula entre los contactos metálicos es expresada por las ecuaciones 3.34-3.35 del capítulo 3, y su valor es (tomando sólo los términos de arrastre):

$$\vec{J}_0(\vec{r}) = q(\bar{\mu}_n(\vec{r}) \odot n0(\vec{r}) + \bar{\mu}_p(\vec{r}) \odot p0(\vec{r})) \vec{E}_0(\vec{r})$$

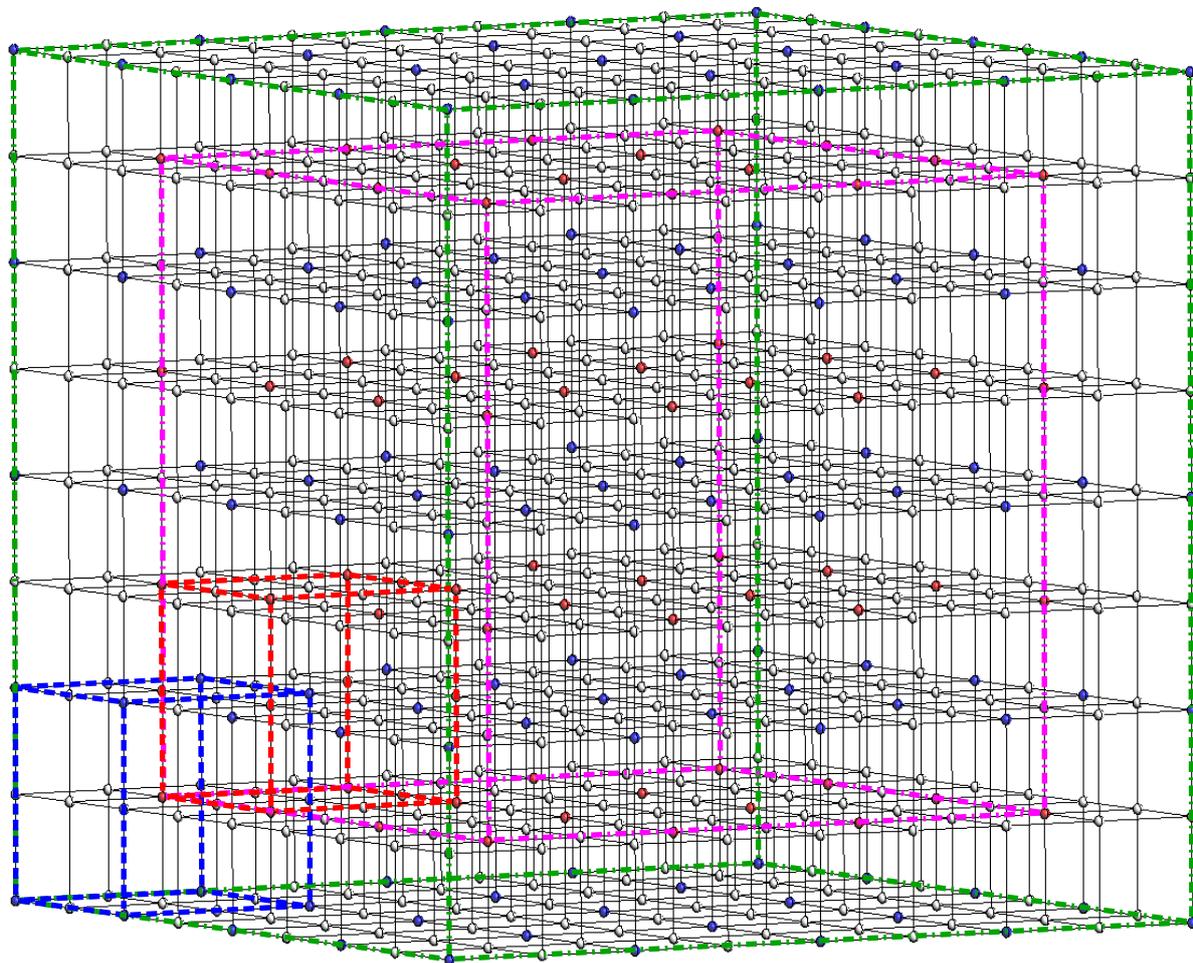


Figura 6.4: Dominio donde se calcula el estado estacionario. División del dominio en dos, uno interior (Dominio II de color rojo) y otro exterior (Dominio I de color azul) donde el mallado de cada dominio está espacialmente desplazado $\frac{\Delta}{2}$ como se puede ver en la celda de Yee de líneas discontinuas.

Si suponemos que el campo magnetostático tiene sólo componente X, $\vec{B} = (B_0, 0, 0)$, el campo electrostático Hall $\vec{E}_{Hall}(\vec{r})$ (ver figura 6.3) entre las dos caras de la capa fotoactiva (ver figura 1.7 del capítulo 1):

$$\vec{E}_{Hall}(\vec{r}) = \Delta_y \iint_{S_\Omega} \frac{\vec{J}_0(\vec{r}) \wedge \vec{B}}{q} dS = B_0 \Delta_y \iint_{S_\Omega} \bar{\alpha}(\vec{r}) \odot (0, 0, E_{0z}(\vec{r}) - E_{0y}(\vec{r})) dS \quad (6.14)$$

donde $\bar{\alpha}(\vec{r}) = \bar{\mu}_n(\vec{r}) \odot n0(\vec{r}) + \bar{\mu}_p(\vec{r}) \odot p0(\vec{r})$, S_Ω es la superficie virtual transversal de la antena, en la que tiene lugar el flujo de la corriente eléctrica, Δ_y un elemento cualquiera de mallado en la dirección Y (la dirección fundamental de la corriente) y dS un elemento diferencial de superficie sobre S_Ω . Como $\frac{\vec{J}_0(\vec{r}) \wedge \vec{B}}{q}$ es una densidad volúmica de campo eléctrico, en un cálculo numérico de $\vec{E}_{Hall}(\vec{r})$ multiplicamos por Δ_y para determinar el valor de este parámetro en una lamina de espesor elemental Δ_y y de sección S_Ω . Como es evidente este método de cálculo del campo Hall, $\vec{E}_{Hall}(\vec{r})$, exige que el producto vectorial $\frac{\vec{J}_0(\vec{r}) \wedge \vec{B}}{q}$ sea simétrico en la dirección X. En otras palabras, que $\vec{E}_0(\vec{r})$ sea simétrico en la dirección X. Por esta razón decíamos en el apartado 6.2 que la determinación del nuevo estado de equilibrio compatible con el campo magnetostático aplicado que se calcula a partir de $n0(\vec{r})$, $p0(\vec{r})$ y $\vec{E}_0(\vec{r})$ en ausencia de campo magnetostático sólo es factible en determinadas condiciones de simetría. A partir de $\vec{E}_{Hall}(\vec{r})$, si la capa fotoactiva tiene un grosor d , el valor del potencial Hall es:

$$V_{Hall}(\vec{r}) = d|\vec{E}_{Hall}(\vec{r})| \quad (6.15)$$

Este potencial Hall $V_{Hall}(\vec{r})$ es una condición de contorno Dirichlet, que será aplicada a toda la cara superior de la región fotoactiva. El apartado 2.6.1 del capítulo 2 especificaba explícitamente la introducción numérica de las condiciones de contorno Dirichlet. En la región de la capa superior de la zona fotoactiva, donde se posicionan los contactos metálicos antes de aplicar el campo magnetostático, el potencial es $\psi_{antesB}(\vec{r})$, para todo punto situado en la interfaz vacío capa fotoconductiva superior. A partir de este valor creamos una condición de contorno tipo Dirichlet en toda la capa superior de la región fotoactiva:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{antesB}(\vec{r}) + V_{Hall}(\vec{r}) \quad (6.16)$$

Pero hay una condición de contorno Dirichlet más. Antes de aplicar el campo magnetostático ha de tenerse en cuenta que en la interfaz semi-aislante capa fotoconductiva, el potencial de referencia se conserva. Eso significa, que el potencial de referencia V_{Ref} mostrado en la figura 6.3 se corresponde con el potencial de esa misma región de puntos sin campo magnetostático ($V_{Ref}(\vec{r}) = \psi_{antesB}(\vec{r}), \forall \vec{r} \in [\text{interfaz semi-aislante capa fotoconductiva}]$, antes de aplicar el campo magnetostático). Por tanto para todos los puntos

de la cara inferior (opuesta a los contactos metálicos) de la región fotoactiva habría una condición de Dirichlet mas:

$$\psi(\vec{r}) = V_{Ref}(\vec{r}) \quad (6.17)$$

Una vez alcanzado el equilibrio, con estas condiciones de Dirichlet nuevas se volvería a resolver el sistema de ecuaciones 2.17-2.19 obteniendo así un estado estacionario coherente con el campo magnetostático aplicado \vec{B} . En definitiva volveríamos a tener la distribución espacial de carga corregida $n0(\vec{r})$, $p0(\vec{r})$ y un campo electrostático corregido $\vec{E}_0(\vec{r})$. Para conectar el estado estacionario y el transitorio, vamos a suponer que la figura 6.4 se corresponde con la región fotoactiva de una antena. El cuboide mayor de color verde que delimita toda la figura segrega la región fotoactiva del resto del universo. El mallado de hexaedros que aparece en la figura es el mallado de celdas de Yee (como las introducidas en el apartado 2.2 del capítulo 2) sobre el que se resuelve el sistema de ecuaciones 2.17-2.19. Como se puede ver en la figura, el mallado es regular, y esta particularización se ha hecho simplemente por simplicidad en la explicación que sigue. Si el mallado es regular, todos los hexaedros son cubos de lado Δ . En la figura 6.4, en una esquina, aparecen dos cubos de lado 2Δ de color rojo y azul. Si mallamos la región fotoactiva sólo con cubos azules (o rojos, pero en este caso dada la disposición se extenderían mas allá de la región fotoactiva), obtendremos un mallado de lado 2Δ . Supongamos que hemos resultado el estado estacionario sobre el mallado original de menor lado Δ en el recinto verde y queremos trasladar la solución al mallado mayor de cubos azules de lado 2Δ . Esto es posible porque sabemos todos los valores de los campos y cargas en el mallado de hexaedros regulares de menor tamaño y pasarlos al mallado de cubos azules y rojos es inmediato. Si mallamos toda la región fotoconductiva con cubos azules y a ese mallado lo llamamos subdominio I, notaremos los valores de carga y campo sobre ese mallado como $n0_I(\vec{r})$, $p0_I(\vec{r})$ y $\vec{E}_{I,0}(\vec{r})$. De igual modo podemos proceder con el recinto interior de color rosa. Sobre él podemos mallar con hexaedros regulares de color rojo con lado 2Δ como el ilustrado en la figura 6.4. Si llamamos subdominio II a la región de color rosa interior a la región fotoactiva, los valores del campo electrostático y la carga sobre los hexaedros de color rojo vienen dados por $n0_{II}(\vec{r})$, $p0_{II}(\vec{r})$ y $\vec{E}_{II,0}(\vec{r})$. Sólo en la región fotoactiva los subdominios I y II son mallados con celdas de Yee como la introducida en apartado 2.2 del capítulo 2. Por necesidades prácticas (extender en el tiempo las simulaciones con

un dominio computacional finito) ambos subdominios computacionales se extienden más allá de la región fotoactiva e incorporan, cada uno de ellos, un multicapa absorbente de tipo CPML. En esta zona externa a la región fotoactiva sólo habría variables de campo eléctrico y magnético, como en la tradicional celda de Yee³⁴⁻⁴⁰. El conocimiento transitorio es, en este caso, el conocimiento de las variables fundamentales (campo y carga) a lo largo del tiempo de dos subdominios **que intercambian información**. Con la figura 6.4 hemos introducido cada uno de ellos en el estado estacionario. La caracterización del transitorio y su conexión con el estacionario es establecida en los siguientes puntos:

- Los campos electrostáticos del sistema I $\vec{E}_{I,0}(\vec{r})$ y II $\vec{E}_{II,0}$ son conocidos en la región fotoconductiva, **y su valores serán los mismos para todo instante de tiempo** a lo largo de la simulación del régimen transitorio.
- En el esquema de avance temporal que se muestra en la figura 6.6 (que será explicado más adelante) se puede ver que la actualización de los campos y corrientes (velocidades magnetohidrodinámicas) del subdominio II, están desplazados $\frac{\Delta t}{2}$ respecto de la actualización de esas mismas variables en el subdominio I, siendo Δt el paso temporal de avance.
- Las concentraciones espaciales de portadores de carga en el instante inicial $t = \frac{\Delta t}{2}$ son conocidas en ambos subdominios I y II, con valores $n_{0I}(\vec{r})$, $p_{0I}(\vec{r})$, $n_{0II}(\vec{r})$ y $p_{0II}(\vec{r})$. **Sus valores serán constantes en todo instante de tiempo** a lo largo de la simulación del régimen transitorio. A estas concentraciones las llamaremos **concentraciones del equilibrio**.
- Los valores de las concentraciones transitorias de los portadores de carga en el instante inicial $t = \frac{\Delta t}{2}$, son conocidas en ambos subdominios y su valores son nulos $n_I(\vec{r}, \frac{\Delta t}{2}) = 0$, $n_{II}(\vec{r}, \frac{\Delta t}{2}) = 0$, $p_I(\vec{r}, \frac{\Delta t}{2}) = 0$ y $p_{II}(\vec{r}, \frac{\Delta t}{2}) = 0$. Estas concentraciones **modificarán su valor a lo largo de la simulación** del régimen transitorio.
- En ambos subdominios, las concentraciones de carga iniciales $t = \Delta t$ son conocidas en ambos subdominios, conociendo así dos instantes de tiempo de las concentraciones de carga. Sus valores son también nulos $n_I(\vec{r}, \Delta t) = 0$, $n_{II}(\vec{r}, \Delta t) = 0$, $p_I(\vec{r}, \Delta t) = 0$ y $p_{II}(\vec{r}, \Delta t) = 0$. Para que esto sea cierto **habrá que elegir el instante de tiempos t_0** de alguna de las tasas de generación definidas en el apartado

3.1 del capítulo 3 tal que en el instante $t = \Delta_t$ dicha tasa sea nula para todo punto de la región fotoactiva.

- En la simulación del régimen transitorio, dado que las concentraciones transitorias $n(\vec{r}, t)$ y $p(\vec{r}, t)$ parten de un valor nulo, la tasa de recombinación no contendrá la concentración intrínseca al cuadrado de portadores de carga $n_i^2(\vec{r})$, empleándose la expresión 2.80 descrita en el apartado 2.5 del capítulo 2 para modelar la tasa de recombinación.
- El valor del campo eléctrico transitorio del subdominio I en el instante $t = \frac{\Delta_t}{2}$ es conocido, y su valor es nulo $\vec{E}_I(\vec{r}, \frac{\Delta_t}{2}) = \vec{0}$. Este campo **modificará su valor a lo largo de la simulación** del régimen transitorio.
- El valor del campo magnético transitorio del subdominio II en el instante $t = \frac{\Delta_t}{2}$ es conocido, y su valor es nulo $\vec{H}_{II}(\vec{r}, \frac{\Delta_t}{2}) = \vec{0}$. Este campo **modificará su valor a lo largo de la simulación** del régimen transitorio.
- Los valores de las velocidades de electrones y de huecos del subdominio II en el instante $t = \frac{\Delta_t}{2}$ son conocidas, y sus valores son nulos $\vec{v}_{II,n}(\vec{r}, \frac{\Delta_t}{2}) = \vec{0}$ y $\vec{v}_{II,p}(\vec{r}, \frac{\Delta_t}{2}) = \vec{0}$. Estas velocidades **modificarán sus valores a lo largo de la simulación** del régimen transitorio.
- Los valores de las velocidades de electrones y de huecos del subdominio I en el instante $t = \Delta_t$ son conocidas, y sus valores son nulos $\vec{v}_{I,n}(\vec{r}, \Delta_t) = \vec{0}$ y $\vec{v}_{I,p}(\vec{r}, \Delta_t) = \vec{0}$. Estas velocidades **modificarán sus valores a lo largo de la simulación** del régimen transitorio.
- Si, como ya se ha dicho, Δ_t es el paso temporal en la aplicación del método de FDTD³⁴⁻⁴⁰, como el campo magnético esta temporalmente desfasado $\frac{\Delta_t}{2}$ respecto del eléctrico en el algoritmo de avance temporal, el valor del campo magnético transitorio del subdominio I en el instante $t = \Delta_t$ debe ser nulo $\vec{H}_I(\vec{r}, \Delta_t) = \vec{0}$, lo que significa que en el instante inicial $t = \frac{\Delta_t}{2}$ lo era $\vec{H}_I(\vec{r}, \frac{\Delta_t}{2}) = \vec{0}$. La condición que garantiza esto es una elección **del instante t_0 de la tasa de generación** tal que en el instante $t = \Delta_t$ dicha tasa sea nula para todo punto de la región fotoactiva. Este campo también **modificará su valor a lo largo de la simulación** del régimen transitorio.

- El campo eléctrico también está temporalmente desfasado $\frac{\Delta t}{2}$ respecto del magnético en el algoritmo de avance temporal, el valor del campo eléctrico transitorio del subdominio II en el instante $t = \Delta t$ debe ser nulo $\vec{E}_{II}(\vec{r}, \Delta t) = \vec{0}$, lo que implica que en el instante inicial $t = \frac{\Delta t}{2}$ lo era $\vec{E}_{II}(\vec{r}, \frac{\Delta t}{2}) = \vec{0}$. Como se ha dicho la condición que garantiza esto es una elección **del instante t_0 de la tasa de generación** tal que en el instante $t = \Delta t$ dicha tasa sea nula para todo punto de la región fotoactiva. Este campo del subdominio II **modificará su valor a lo largo de la simulación** del régimen transitorio.

En el siguiente apartado se desarrolla el método numérico con detalle.

6.4. El algoritmo DH-FDTD

El método DH-FDTD es un procedimiento numérico explícito basado en el método de diferencias finitas descrito en el apéndice I que permite resolver el sistema de ecuaciones 6.8-6.13 porque permite el producto vectorial con un coste computacional mínimo. Supongamos que mallamos un mismo espacio físico con dos mallas uniformes e iguales de lado Δ , pero cada una desplazada respecto de la otra, en las tres direcciones del espacio, un valor $\frac{\Delta}{2}$. En cada uno de esos mallados resolvemos las tradicionales ecuaciones rotacionales de Maxwell mediante el método numérico de FDTD clásico. Ambos mallados están emplazados sobre el mismo sistema físico, por eso, con diferencias muy pequeñas describirán lo mismo. Dado un punto del espacio en que se localice una variable sobre uno de los mallados, el otro mallado poseerá su variable dual, con un valor muy parecido y a una distancia $\frac{\Delta}{2}$ con respecto al punto dado. Eso significa que la densidad de información que los dos mallados proporcionan es mayor que la que aportaría cada uno por separado. Esto es equivalente a tener un sólo mallado de FDTD con un tamaño de celda $\frac{\Delta}{2}$.

En la introducción de la conexión entre el régimen transitorio y estado estacionario, se hizo la hipótesis de mallado uniforme por simplicidad narrativa. En lo que sigue se sobreentiende que esos mallados no tienen que ser uniformes. La figura 6.5 muestra una celda dual de Yee. Este tipo de celda malla el dominio computacional dividiendo este en dos subdominios. Los subdominios I y II que están espacialmente relacionados por el mallado. Si en el subdominio I el tamaño del lado que une los nodos vecinos

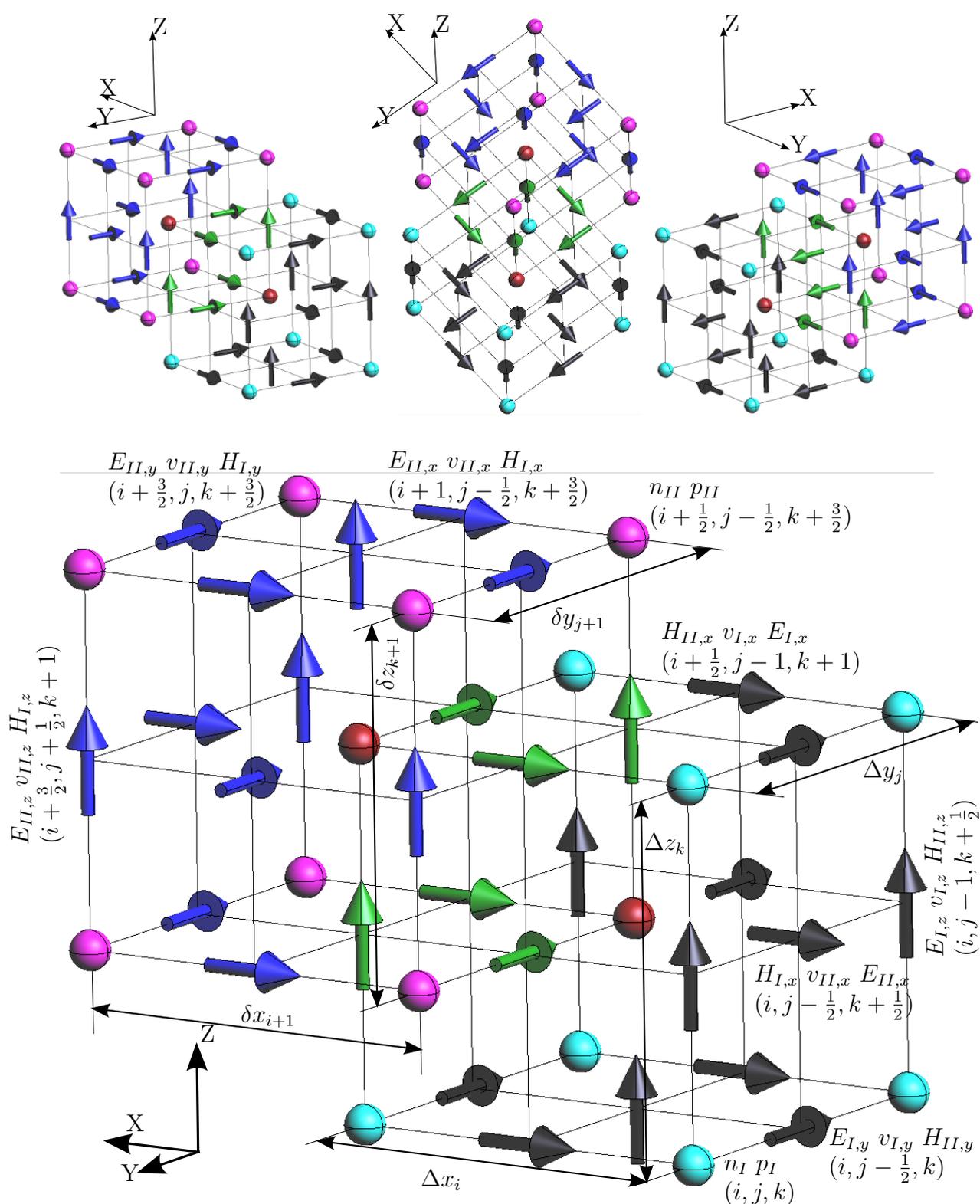


Figura 6.5: Celda dual de Yee empleada para realizar mallados en los cuales los productos vectoriales sean posibles. Las flechas de color negro pertenecen al subdominio computacional I mientras que las de color azul son del subdominio II. Las flechas de color verde indican las componentes de los campos que son comunes a ambos subdominios en esta figura.

próximos (i, j, k) y $(i + 1, j, k)$ es Δx_i , en el subdominio II la distancia entre los nodos vecinos próximos $(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})$ y $(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})$ es δ_{x_i} . La relación que existe es $\delta_{x_i} = \frac{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{2}$, la separación entre variable de campo eléctrico en el subdominio I coincide con las separación de campo magnético en el subdominio II y viceversa. Las distancias entre nodos próximos en el subdominio II coinciden con las distancias entre variables de campo eléctrico próximas en el subdominio I y viceversa.

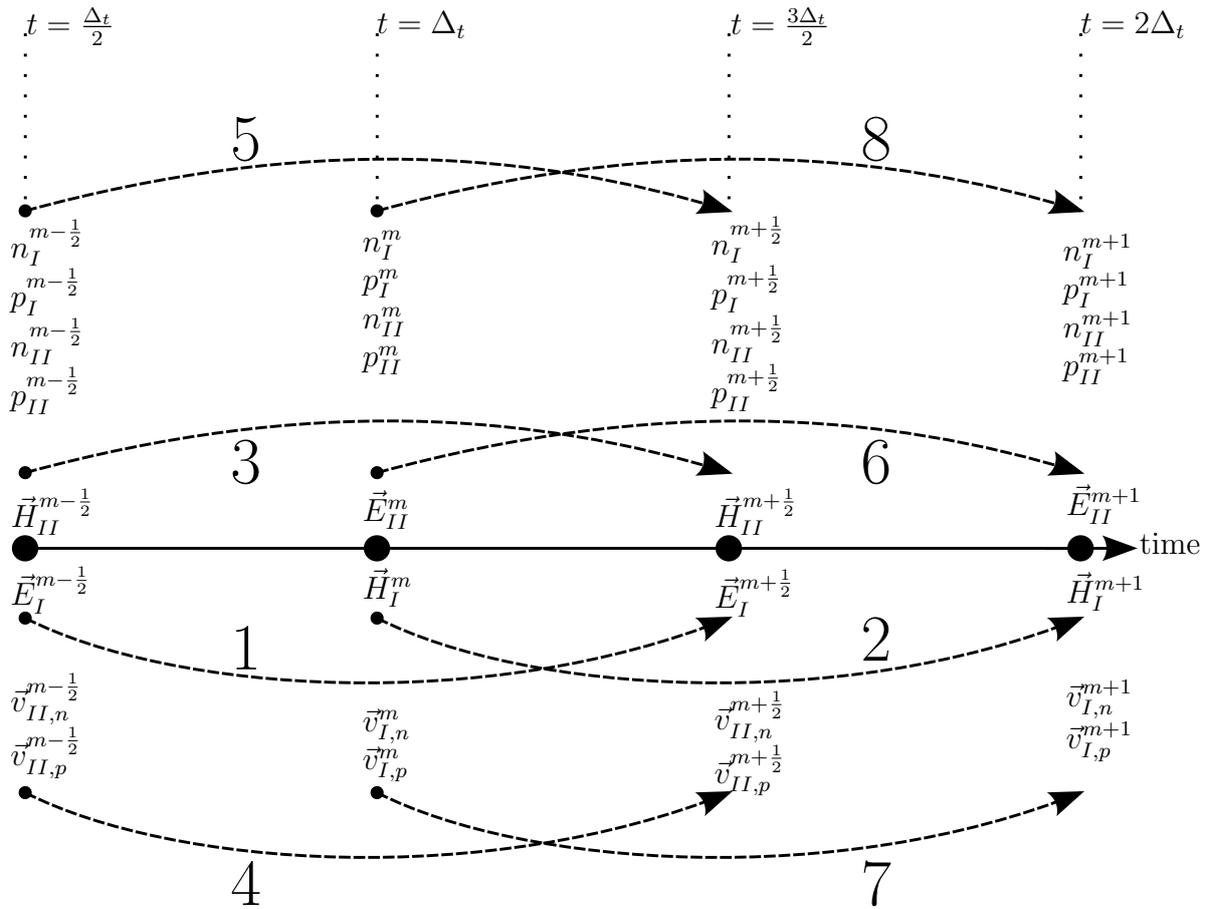


Figura 6.6: Avance temporal de la discretización realizada con celdas duales de Yee (ver figura 6.5). La secuencia del avance minimiza el número de interpolaciones necesarias. Como se puede ver los campos se actualizan una vez cada Δ_t mientras que la carga lo hace cada $\frac{\Delta_t}{2}$. En este esquema, los tres primeros instantes de tiempo han de ser conocidos para comenzar el avance.

Especificadas las relaciones espaciales entre mallados, también las hay temporales. Todas las variables de campos eléctricos y magnéticos así como las velocidades de ambos subdominios están desfasadas $\frac{\Delta_t}{2}$ desde un subdominio al otro. Eso significa que las va-

riables de campo que el mallado dual almacena guardan información sobre campos cada $\frac{\Delta t}{2}$. Como la carga se actualiza en ambos subdominios cada $\frac{\Delta t}{2}$, todas las variables son accesibles cada $\frac{\Delta t}{2}$. La gran ventaja numérica que posee el mallado dual es que se puede intercambiar la información de un modo útil para realizar operaciones de producto vectorial.

6.4.1. Discretización temporal

La figura 6.6 muestra el esquema de avance temporal del algoritmo DH-FDTD. Explicamos a continuación los pasos señalados para clarificar la posterior discretización espacio-temporal. Al mismo tiempo, y por facilitar la implementación en cuanto al cálculo de las variables requeridas del algoritmo, se indicará la información que cada paso requiere. La figura 6.7 complementa el algoritmo gráficamente mediante un diagrama de flujo, haciéndolo más visual. Para la tarea de discretizar temporalmente partimos de un conjunto de datos conocidos, enumerados en la conexión entre el régimen transitorio y el estado estacionario, que facilitarán la tarea. De modo que usando esta información, la discretización temporal viene dada por:

- **PASO 1 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7.**

Se actualiza $\vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}}$ conocidos $\vec{E}_I^{m-\frac{1}{2}}$, \vec{H}_I^m , $\vec{v}_{I,n}^m$, $\vec{v}_{I,p}^m$, $n_{T,I}^m$ y $p_{T,I}^m$; mediante la expresión:

$$\vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}} = \vec{E}_I^{m-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{H}_I^m + q(n_{T,I}^m \vec{v}_{I,n}^m - p_{T,I}^m \vec{v}_{I,p}^m) \right)$$

- Se aplican CPMLs sobre el recién calculado campo $\vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}}$.

- **PASO 2 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7.**

Se actualiza \vec{H}_I^{m+1} conocidos \vec{H}_I^m y $\vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}}$; mediante la expresión:

$$\vec{H}_I^{m+1} = \vec{H}_I^m - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}} \right)$$

- Se aplican CPMLs sobre el recién calculado campo \vec{H}_I^{m+1} .

- **PASO 3 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7.**

Se actualiza $\vec{H}_{II}^{m+\frac{1}{2}}$ conocidos $\vec{H}_{II}^{m-\frac{1}{2}}$ y \vec{E}_{II}^m ; mediante la expresión:

$$\vec{H}_{II}^{m+\frac{1}{2}} = \vec{H}_{II}^{m-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{E}_{II}^m \right)$$

- Se aplican CPMLs sobre el recién calculado campo $\vec{H}_{II}^{m+\frac{1}{2}}$.

■ **PASO 4 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7.**

Se actualiza $\vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}}$ y $\vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}}$ conocidos $\vec{v}_{II,p}^{m-\frac{1}{2}}$, \vec{E}_{II}^m , $\vec{L}_{II,p}^m$, n_{II}^m , $\vec{v}_{II,n}^{m-\frac{1}{2}}$, $\vec{L}_{II,n}^m$ y n_{II}^m ; mediante las expresiones:

$$\vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} = \bar{\Lambda}_{A,p} \odot \vec{v}_{II,p}^{m-\frac{1}{2}} + \bar{\Lambda}_{B,p} \odot \left(\vec{E}_{II,T}^m + \vec{L}_{II,p}^m - \vec{E}_{II,0} \frac{p_{0II}^m}{p_{T,II}^m} \right) + \bar{\Lambda}_{C,p} \odot \frac{\vec{\nabla} p_{II}^m}{p_{T,II}^m}$$

$$\vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} = \bar{\Lambda}_{A,n} \odot \vec{v}_{II,n}^{m-\frac{1}{2}} + \bar{\Lambda}_{B,n} \odot \left(\vec{E}_{II,T}^m + \vec{L}_{II,n}^m - \vec{E}_{I,0} \frac{n_{0II}^m}{n_{T,II}^m} \right) + \bar{\Lambda}_{C,n} \odot \frac{\vec{\nabla} p_{II}^m}{p_{T,II}^m}$$

Los términos $\vec{L}_{II,p}^m = \mu_0 \vec{v}_{I,p}^m \wedge \vec{H}_{II}^m$ y $\vec{L}_{II,n}^m = \mu_0 \vec{v}_{I,n}^m \wedge \vec{H}_{II}^m$, establecen **a través de las velocidades (en este caso $\vec{v}_{I,p}^m$ y $\vec{v}_{I,n}^m$) el intercambio de información entre los subdominios I y II**. Adicionalmente \vec{H}_{II}^m no está definido en el avance temporal, pero como se conocen los valores de sus dos instantes temporales lo que se hace es interpolar $\vec{H}_{II}^m = \frac{\vec{H}_{II}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{H}_{II}^{m-\frac{1}{2}}}{2}$. Además y por compactar notación $\vec{E}_{II,T}^m = \vec{E}_{II}^m + \vec{E}_{II,0}$. Los valores de los coeficientes $\bar{\Lambda}_{A,p}$, $\bar{\Lambda}_{B,p}$, $\bar{\Lambda}_{C,p}$, $\bar{\Lambda}_{D,p}$, $\bar{\Lambda}_{A,n}$, $\bar{\Lambda}_{B,n}$, $\bar{\Lambda}_{C,n}$ y $\bar{\Lambda}_{D,n}$ se definen en el apartado III.d del apéndice III.

■ **PASO 5 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7.**

Se actualiza $n_I^{m+\frac{1}{2}}$, $p_I^{m+\frac{1}{2}}$, $n_{II}^{m+\frac{1}{2}}$ y $p_{II}^{m+\frac{1}{2}}$ conocidos $n_I^{m-\frac{1}{2}}$, $p_I^{m-\frac{1}{2}}$, n_I^m , p_I^m , $\vec{v}_{I,n}^m$, $\vec{v}_{I,p}^m$, $n_{II}^{m-\frac{1}{2}}$, $p_{II}^{m-\frac{1}{2}}$, n_{II}^m , p_{II}^m , $\vec{v}_{II,n}^m$ y $\vec{v}_{II,p}^m$; mediante las expresiones:

$$n_I^{m+\frac{1}{2}} = n_I^{m-\frac{1}{2}} + \Delta_t \left(GR^m - n_I^m \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{I,n}^m - \vec{v}_{I,n}^m \cdot \vec{\nabla} n_I^m \right)$$

$$p_I^{m+\frac{1}{2}} = p_I^{m-\frac{1}{2}} + \Delta_t \left(GR^m - p_I^m \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{I,p}^m - \vec{v}_{I,p}^m \cdot \vec{\nabla} p_I^m \right)$$

$$n_{II}^{m+\frac{1}{2}} = n_{II}^{m-\frac{1}{2}} + \Delta_t \left(GR^m - n_{II}^m \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{II,n}^m - \vec{v}_{II,n}^m \cdot \vec{\nabla} n_{II}^m \right)$$

$$p_{II}^{m+\frac{1}{2}} = p_{II}^{m-\frac{1}{2}} + \Delta_t \left(GR^m - p_{II}^m \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{II,p}^m - \vec{v}_{II,p}^m \cdot \vec{\nabla} p_{II}^m \right)$$

Los valores de $\vec{v}_{II,n}^m$ y $\vec{v}_{II,p}^m$ calculados en el paso 4 permiten calcular interpolando

$$\vec{v}_{II,p}^m = \frac{\vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{v}_{II,p}^{m-\frac{1}{2}}}{2} \text{ y } \vec{v}_{II,n}^m = \frac{\vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{v}_{II,n}^{m-\frac{1}{2}}}{2}.$$

■ **PASO 6 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7.**

Se actualiza \vec{E}_{II}^{m+1} conocidos \vec{E}_{II}^m , $\vec{H}_{II}^{m+\frac{1}{2}}$, $n_{T,II}^{m+\frac{1}{2}}$, $\vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}}$, $p_{T,II}^{m+\frac{1}{2}}$ y $\vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}}$; mediante la expresión:

$$\vec{E}_{II}^{m+1} = \vec{E}_{II}^m + \frac{\Delta_t}{\varepsilon} \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{H}_{II}^{m+\frac{1}{2}} + q \left(n_{T,II}^{m+\frac{1}{2}} \vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} - p_{T,II}^{m+\frac{1}{2}} \vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} \right) \right)$$

■ **PASO 7 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7.**

Se actualiza $\vec{v}_{I,p}^{m+1}$ y $\vec{v}_{I,n}^{m+1}$ conocidos $\vec{v}_{I,p}^m$, $\vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}}$, $\vec{L}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}}$, $n_I^{m+\frac{1}{2}}$, $\vec{v}_{I,n}^m$, $\vec{L}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}}$ y $n_I^{m+\frac{1}{2}}$; mediante las expresiones:

$$\vec{v}_{I,p}^{m+1} = \bar{\Lambda}_{A,p} \odot \vec{v}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} + \bar{\Lambda}_{B,p} \odot \left(\vec{E}_{I,T}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{L}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{E}_{I,0} \frac{p0_I}{p_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} \right) + \bar{\Lambda}_{C,p} \odot \frac{\vec{\nabla} p_I^{m+\frac{1}{2}}}{p_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}}$$

$$\vec{v}_{I,n}^{m+1} = \bar{\Lambda}_{A,n} \odot \vec{v}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} + \bar{\Lambda}_{B,n} \odot \left(\vec{E}_{I,T}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{L}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{E}_{I,0} \frac{n0_I}{n_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} \right) + \bar{\Lambda}_{C,n} \odot \frac{\vec{\nabla} n_I^{m+\frac{1}{2}}}{n_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}}$$

Los términos $\vec{L}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} = \mu_0 \vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} \wedge \vec{H}_I^{m+\frac{1}{2}}$ y $\vec{L}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} = \mu_0 \vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} \wedge \vec{H}_I^{m+\frac{1}{2}}$, establecen a través de las velocidades (en este caso $\vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}}$ y $\vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}}$) el intercambio de información entre los subdominios I y II. $\vec{H}_I^{m+\frac{1}{2}}$ no esta definido en el avance temporal, pero como se conocen los valores de sus dos instantes temporales es interpolado $\vec{H}_I^{m+\frac{1}{2}} = \frac{\vec{H}_I^{m+1} + \vec{H}_I^m}{2}$. Además y por compactar notación $\vec{E}_{I,T}^{m+\frac{1}{2}} = \vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}} + \vec{E}_{I,0}$. Los valores de los coeficientes $\bar{\Lambda}_{A,p}$, $\bar{\Lambda}_{B,p}$, $\bar{\Lambda}_{C,p}$, $\bar{\Lambda}_{D,p}$, $\bar{\Lambda}_{A,n}$, $\bar{\Lambda}_{B,n}$, $\bar{\Lambda}_{C,n}$ y $\bar{\Lambda}_{D,n}$ coinciden con los del paso 4.

■ **PASO 8 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7.**

Se actualiza n_I^{m+1} , p_I^{m+1} , n_{II}^{m+1} y p_{II}^{m+1} conocidos n_I^m , p_I^m , $n_I^{m+\frac{1}{2}}$, $p_I^{m+\frac{1}{2}}$, $\vec{v}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}}$, $\vec{v}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}}$, n_{II}^m , p_{II}^m , $n_{II}^{m+\frac{1}{2}}$, $p_{II}^{m+\frac{1}{2}}$, $\vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}}$ y $\vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}}$; mediante las expresiones:

$$n_I^{m+1} = n_I^m + \Delta_t \left(GR^{m+\frac{1}{2}} - n_I^{m+\frac{1}{2}} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{v}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} \cdot \vec{\nabla} n_I^{m+\frac{1}{2}} \right)$$

$$p_I^{m+1} = p_I^m + \Delta_t \left(GR^{m+\frac{1}{2}} - p_I^{m+\frac{1}{2}} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{v}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} \cdot \vec{\nabla} p_I^{m+\frac{1}{2}} \right)$$

$$n_{II}^{m+1} = n_{II}^m + \Delta_t \left(GR^{m+\frac{1}{2}} - n_{II}^{m+\frac{1}{2}} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} \cdot \vec{\nabla} n_{II}^{m+\frac{1}{2}} \right)$$

$$p_{II}^{m+1} = p_{II}^m + \Delta_t \left(GR^{m+\frac{1}{2}} - p_{II}^{m+\frac{1}{2}} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} \cdot \vec{\nabla} p_{II}^{m+\frac{1}{2}} \right)$$

Los valores de $\vec{v}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}}$ y $\vec{v}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}}$ calculados en el paso 4 permiten calcular interpolando $\vec{v}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{\vec{v}_{I,p}^{m+1} + \vec{v}_{I,p}^m}{2}$ y $\vec{v}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{\vec{v}_{I,n}^{m+1} + \vec{v}_{I,n}^m}{2}$.

6.4.2. La discretización espacio-temporal

La discretización espacio-temporal se presenta conforme a los sucesivos pasos que hemos seguido para narrar la discretización temporal. **Discretización espacio-temporal del paso 1 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7**, cuya expresión de avance temporal viene dada por:

$$\vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}} = \vec{E}_I^{m-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{H}_I^m + q(n_{T,I}^m \vec{v}_{I,n}^m - p_{T,I}^m \vec{v}_{I,p}^m) \right)$$

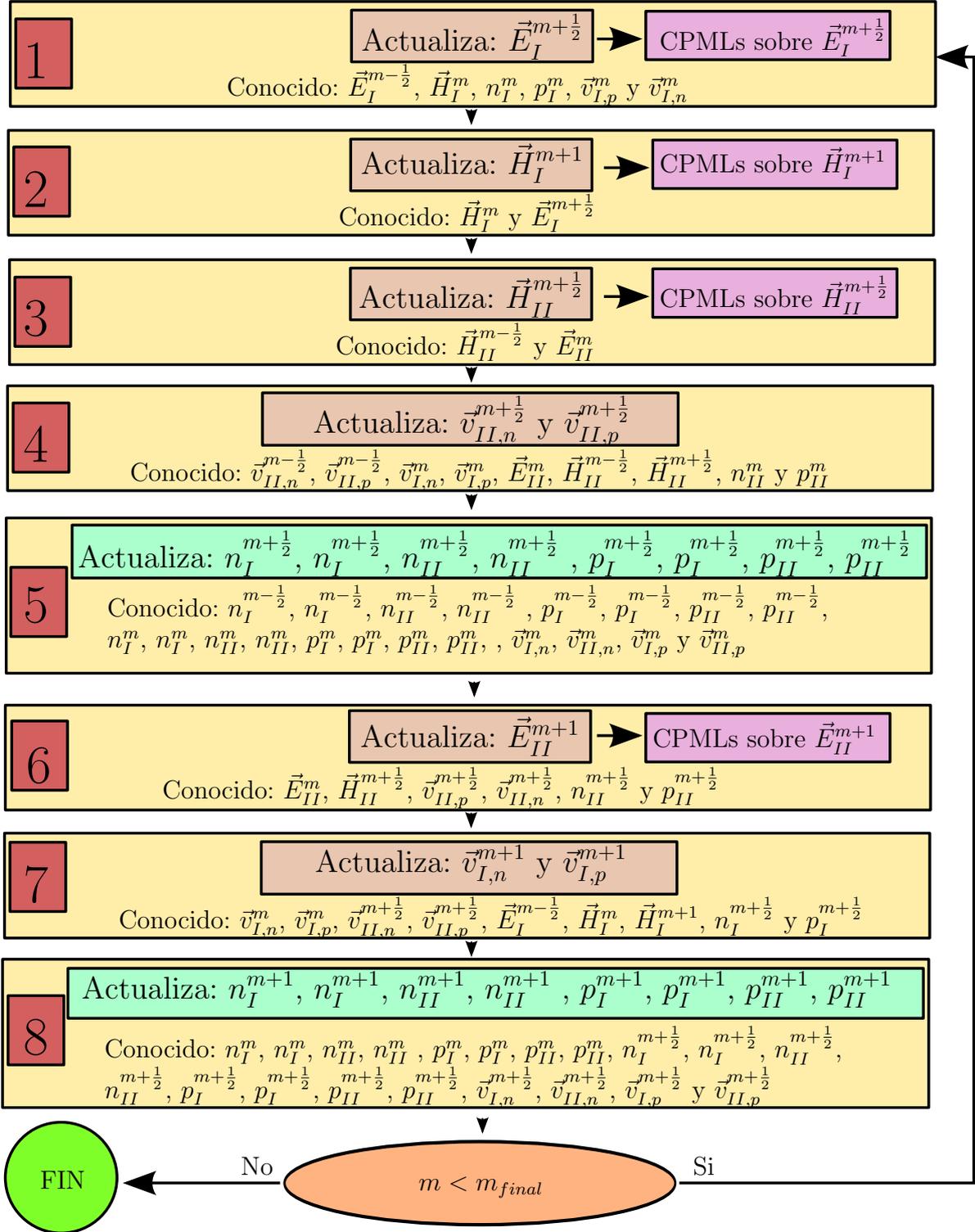


Figura 6.7: Diagrama de flujo del algoritmo DH-FDTD que permite resolver el sistema de ecuaciones 6.8-6.13.

Componente X de la discretización espacio-temporal de $\vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
E_{I,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} &= E_{I,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} \\
+ \frac{\Delta_t}{\varepsilon} &\left(\frac{H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^m}{\delta_{y_j}} - \frac{H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^m}{\delta_{z_k}} \right. \\
&\left. + q \left(n_{T,I}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m - p_{T,I}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \right) \right) \quad (6.18)
\end{aligned}$$

donde

$$n_{T,I}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = \frac{n_{0I}|_{i+1,j,k} + n_{0I}|_{i,j,k} + n_I|_{i+1,j,k}^m + n_I|_{i,j,k}^m}{2} \quad (6.19)$$

$$p_{T,I}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = \frac{p_{0I}|_{i+1,j,k} + p_{0I}|_{i,j,k} + p_I|_{i+1,j,k}^m + p_I|_{i,j,k}^m}{2} \quad (6.20)$$

Componente Y de la discretización espacio-temporal de $\vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
E_{I,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} &= E_{I,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} \\
+ \frac{\Delta_t}{\varepsilon} &\left(\frac{H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m}{\delta_{z_k}} - \frac{H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - H_{I,z}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m}{\delta_{x_i}} \right. \\
&\left. + q \left(n_{T,I}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m - p_{T,I}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \right) \right) \quad (6.21)
\end{aligned}$$

Donde

$$n_{T,I}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m = \frac{n_{0I}|_{i,j+1,k} + n_{0I}|_{i,j,k} + n_I|_{i,j+1,k}^m + n_I|_{i,j,k}^m}{2} \quad (6.22)$$

$$p_{T,I}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m = \frac{p_{0I}|_{i,j+1,k} + p_{0I}|_{i,j,k} + p_I|_{i,j+1,k}^m + p_I|_{i,j,k}^m}{2} \quad (6.23)$$

Componente Z de la discretización espacio-temporal de $\vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
E_{I,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= E_{I,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \\
+ \frac{\Delta_t}{\varepsilon} &\left(\frac{H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - H_{I,y}|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m}{\delta_{x_i}} - \frac{H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - H_{I,x}|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m}{\delta_{y_j}} \right. \\
&\left. + q \left(n_{T,I}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m - p_{T,I}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \right) \right) \quad (6.24)
\end{aligned}$$

donde

$$n_{T,I}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m = \frac{n0_I|_{i,j,k+1} + n0_I|_{i,j,k} + n_I|_{i,j,k+1}^m + n_I|_{i,j,k}^m}{2} \quad (6.25)$$

$$p_{T,I}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m = \frac{p0_I|_{i,j,k+1} + p0_I|_{i,j,k} + p_I|_{i,j,k+1}^m + p_I|_{i,j,k}^m}{2} \quad (6.26)$$

Discretización espacio-temporal del paso 2 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7, cuya expresión de avance temporal viene dada por:

$$\vec{H}_I^{m+1} = \vec{H}_I^m - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}} \right)$$

Componente X de la discretización espacio-temporal de \vec{H}_I^{m+1} :

$$H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} = H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\frac{E_{I,z}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - E_{I,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta y_j} - \frac{E_{I,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{m+\frac{1}{2}} - E_{I,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} \right) \quad (6.27)$$

Componente Y de la discretización espacio-temporal de \vec{H}_I^{m+1} :

$$H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} = H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\frac{E_{I,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} - E_{I,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} - \frac{E_{I,z}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - E_{I,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i} \right) \quad (6.28)$$

Componente Z de la discretización espacio-temporal de \vec{H}_I^{m+1} :

$$H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} = H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\frac{E_{I,y}|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - E_{I,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i} - \frac{E_{I,x}|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} - E_{I,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta y_j} \right) \quad (6.29)$$

Discretización espacio-temporal del paso 3 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7, cuya expresión de avance temporal viene dada por:

$$\vec{H}_{II}^{m+\frac{1}{2}} = \vec{H}_{II}^{m-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{E}_{II}^m \right)$$

Componente X de la discretización espacio-temporal de $\vec{H}_{II}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} = H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\frac{E_{II,z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - E_{II,z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^m}{\delta_{y_j}} - \frac{E_{II,y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - E_{II,y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^m}{\delta_{z_k}} \right) \quad (6.30)$$

Componente Y de la discretización espacio-temporal de $\vec{H}_{II}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$H_{II,y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} = H_{II,y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\frac{E_{II,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - E_{II,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m}{\delta_{z_k}} - \frac{E_{II,z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - E_{II,z} \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m}{\delta_{x_i}} \right) \quad (6.31)$$

Componente Z de la discretización espacio-temporal de $\vec{H}_{II}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$H_{II,z} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = H_{II,z} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left(\frac{E_{II,y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - E_{II,y} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m}{\delta_{x_i}} - \frac{E_{II,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - E_{II,x} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m}{\delta_{y_j}} \right) \quad (6.32)$$

Discretización espacio-temporal del paso 4 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7,

cuyas expresiones de avance temporal vienen dadas por:

$$\begin{aligned} \vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} &= \bar{\Lambda}_{A,p} \odot \vec{v}_{II,p}^{m-\frac{1}{2}} + \bar{\Lambda}_{B,p} \odot \left(\vec{E}_{II,T}^m + \vec{L}_{II,p}^m - \vec{E}_{II,0} \frac{p0_{II}}{pT_{II}} \right) + \bar{\Lambda}_{C,p} \odot \frac{\vec{\nabla} p_{II}^m}{pT_{II}} \\ \vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} &= \bar{\Lambda}_{A,n} \odot \vec{v}_{II,n}^{m-\frac{1}{2}} + \bar{\Lambda}_{B,n} \odot \left(\vec{E}_{II,T}^m + \vec{L}_{II,n}^m - \vec{E}_{I,0} \frac{n0_{II}}{nT_{II}} \right) + \bar{\Lambda}_{C,n} \odot \frac{\vec{\nabla} n_{II}^m}{nT_{II}} \end{aligned}$$

Componente X de la discretización espacio-temporal de $\vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned} v_{II,x,p} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= \Lambda_{A,p} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} v_{II,x,p} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \\ &+ \Lambda_{B,p} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \left(E_{II,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + E_{II,0,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + L_{II,p,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right. \\ &\quad \left. \frac{E_{II,0,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \left(p0_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p0_{II} \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \right)}{p0_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p0_{II} \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + pI \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + pI \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m} \right) \end{aligned}$$

$$+ \frac{2\Lambda_{C,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \left(pI|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - pI|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right)}{\left(p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p0_{II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + pI|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + pI|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right)} \delta_{x_i} \quad (6.33)$$

Donde $L_{II,p,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m$ totalmente desarrollado conduce a la expresión:

$$\begin{aligned} L_{II,p,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m &= \frac{\mu_0}{4} \left(H_{II,z}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^m + H_{II,z}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^m \right. \\ &+ H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^m + H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^m + H_{II,z}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \\ &+ H_{II,z}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \\ &- H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^m \\ &- H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \\ &\left. - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \right) \end{aligned}$$

Componente X de la discretización espacio-temporal de $\vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned} v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= \Lambda_{A,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \\ &+ \Lambda_{B,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \left(E_{II,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + E_{II,0,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + L_{II,n,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right. \\ &\left. - \frac{E_{II,0,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \left(n0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n0_{II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \right)}{n0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n0_{II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + n_{II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m} \right) \\ &+ \frac{2\Lambda_{C,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \left(n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - n_{II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right)}{\left(n0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n0_{II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + n_{II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right)} \delta_{x_i} \quad (6.34) \end{aligned}$$

Donde $L_{II,n,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m$ totalmente desarrollado conduce a la expresión:

$$\begin{aligned} L_{II,n,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m &= \frac{\mu_0}{4} \left(H_{II,z}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^m + H_{II,z}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^m \right. \\ &+ H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^m + H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^m + H_{II,z}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \\ &\left. + H_{II,z}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^m \\
& -H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \\
& \quad \left(-H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \right)
\end{aligned}$$

Componente Y de la discretización espacio-temporal de $\vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= \Lambda_{A,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \\
&+ \Lambda_{B,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} \left(E_{II,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m + E_{II,0,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} + L_{II,p,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m \right. \\
&\quad \left. \frac{E_{II,0,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} \left(p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \right)}{p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + pI|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + pI|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m} \right) \\
&+ \frac{2\Lambda_{C,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} \left(pI|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - pI|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right)}{\left(p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + pI|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + pI|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right)} \delta_{yj}
\end{aligned} \tag{6.35}$$

Donde $L_{II,p,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m$ totalmente desarrollado conduce a la expresión:

$$\begin{aligned}
L_{II,p,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m &= \frac{\mu_0}{4} \left(H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^m + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^m \right. \\
&+ H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^m + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^m + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \\
&\quad + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \\
&- H_{II,z}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^m - H_{II,z}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^m - H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^m \\
&\quad - H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^m - H_{II,z}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m - H_{II,z}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \\
&\quad \left. - H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m - H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \right)
\end{aligned}$$

Componente Y de la discretización espacio-temporal de $\vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= \Lambda_{A,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \\
&+ \Lambda_{B,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} \left(E_{II,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m + E_{II,0,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} + L_{II,n,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{E_{II,0,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} \left(n0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \right)}{n0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m} \\
 & + \frac{2\Lambda_{C,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} \left(n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right)}{\left(n0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right)} \delta_{y_j}
 \end{aligned} \quad (6.36)$$

Donde $L_{II,n,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m$ totalmente desarrollado conduce a la expresión:

$$\begin{aligned}
 L_{II,n,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m &= \frac{\mu_0}{4} \left(H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^m + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^m \right. \\
 & + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^m + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^m + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \\
 & + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \\
 & - H_{II,z}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,z}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m \\
 & - H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - H_{II,z}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m - H_{II,z}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \\
 & \left. - H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m - H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \right)
 \end{aligned}$$

Componente Z de la discretización espacio-temporal de $\bar{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
 v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} &= \Lambda_{A,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} \\
 & + \Lambda_{B,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} \left(E_{II,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m + E_{II,0,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} + L_{II,p,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m \right. \\
 & \left. \frac{E_{II,0,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} \left(p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} \right)}{p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} + pI|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + pI|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m} \right) \\
 & + \frac{2\Lambda_{C,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} \left(pI|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - pI|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m \right)}{\left(p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p0_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} + pI|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + pI|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m \right)} \delta_{z_k}
 \end{aligned} \quad (6.37)$$

Donde $L_{II,p,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m$ totalmente desarrollado viene dado por la expresión:

$$\begin{aligned}
 L_{II,p,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m &= \frac{\mu_0}{4} \left(H_{II,y}|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^m + H_{II,y}|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^m \right. \\
 & + H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^m + H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^m + H_{II,y}|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \\
 & \left. + H_{II,y}|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + H_{II,y} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,p} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + H_{II,y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,p} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + H_{II,y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,p} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \\
& - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,p} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^m - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,p} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^m - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,p} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^m \\
& - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,p} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^m - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,p} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,p} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \\
& \quad - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,p} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,p} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \Big)
\end{aligned}$$

Componente Z de la discretización espacio-temporal de $\bar{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
& v_{II,z,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} = \Lambda_{A,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} v_{II,z,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} \\
& + \Lambda_{B,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} \left(E_{II,y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m + E_{II,0,y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m + L_{II,n,z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m \right. \\
& \quad \left. E_{II,0,z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} \left(n0_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n0_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} \right) \right) \\
& \quad \left. \frac{E_{II,0,z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} \left(n0_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n0_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} \right)}{n0_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n0_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} + n_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + n_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m} \right) \\
& + \frac{2\Lambda_{C,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} \left(n_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - n_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m \right)}{\left(n0_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n0_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} + n_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + n_{II} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m \right)} \delta_{z_k} \quad (6.38)
\end{aligned}$$

Donde $L_{II,n,z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m$ totalmente desarrollado viene dado por la expresión:

$$\begin{aligned}
& L_{II,n,z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m = \frac{\mu_0}{4} \left(H_{II,y} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^m + H_{II,y} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^m \right. \\
& + H_{II,y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^m + H_{II,y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^m + H_{II,y} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \\
& \quad + H_{II,y} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + H_{II,y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,x,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + H_{II,y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,x,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \\
& - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,n} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^m - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,n} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^m - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,n} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^m \\
& \quad - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,n} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^m - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,n} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,n} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \\
& \quad \left. - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} v_{I,y,n} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m - H_{II,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} v_{I,y,n} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \right)
\end{aligned}$$

La figura 6.8 ayuda a visualizar el cálculo del elemento $L_{II,n,x} \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}$ del subdominio II a partir de la velocidades del subdominio I.

Discretización espacio-temporal del paso 5 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7, cuyas expresiones de avance temporal vienen dadas por:

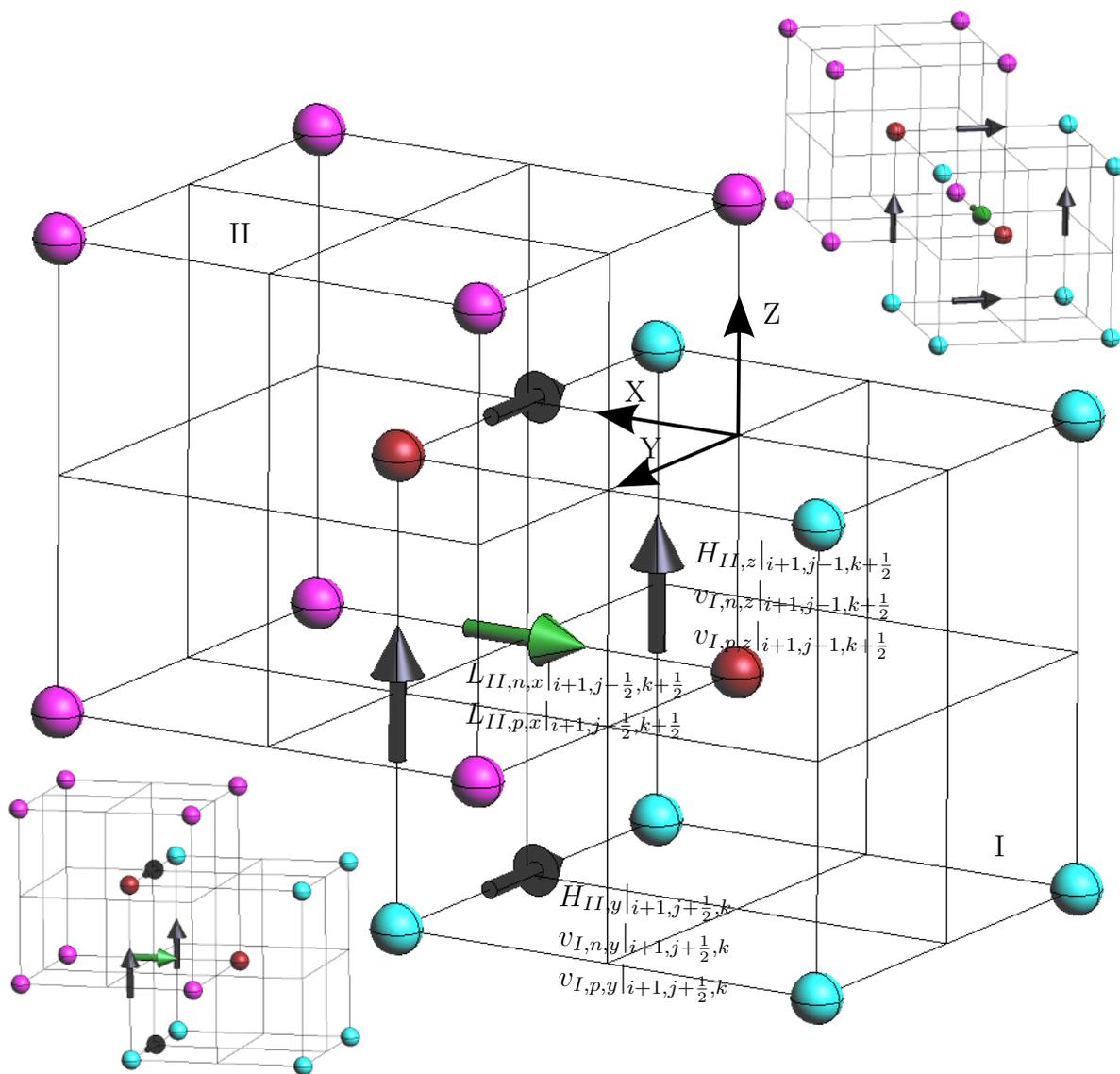


Figura 6.8: Producto vectorial de las velocidades del subdominio I con los campos magnéticos del subdominio II, para obtener el término magnético de la acción de Lorentz sobre el subdominio II.

$$\begin{aligned}
n_I^{m+\frac{1}{2}} &= n_I^{m-\frac{1}{2}} + \Delta_t \left(GR^m - n_I^m \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{I,n}^m - \vec{v}_{I,n}^m \cdot \vec{\nabla} n_I^m \right) \\
p_I^{m+\frac{1}{2}} &= p_I^{m-\frac{1}{2}} + \Delta_t \left(GR^m - p_I^m \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{I,p}^m - \vec{v}_{I,p}^m \cdot \vec{\nabla} p_I^m \right) \\
n_{II}^{m+\frac{1}{2}} &= n_{II}^{m-\frac{1}{2}} + \Delta_t \left(GR^m - n_{II}^m \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{II,n}^m - \vec{v}_{II,n}^m \cdot \vec{\nabla} n_{II}^m \right) \\
p_{II}^{m+\frac{1}{2}} &= p_{II}^{m-\frac{1}{2}} + \Delta_t \left(GR^m - p_{II}^m \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{II,p}^m - \vec{v}_{II,p}^m \cdot \vec{\nabla} p_{II}^m \right)
\end{aligned}$$

Discretización espacio-temporal de $p_I^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
p_I^{m+\frac{1}{2}}|_{i,j,k} &= p_I^{m-\frac{1}{2}}|_{i,j,k} + \Delta_t \left(GR|_{i,j,k}^m + p_I|_{i,j,k}^m \left(\frac{v_{I,x,p}|_{i-\frac{1}{2},j,k}^m - v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m}{\delta x_i} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{v_{I,y,p}|_{i,j-\frac{1}{2},k}^m - v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m}{\delta y_j} + \frac{v_{I,z,p}|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^m - v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m}{\delta z_k} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{(v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + v_{I,x,p}|_{i-\frac{1}{2},j,k}^m)(p_I|_{i-1,j,k}^m - p_I|_{i+1,j,k}^m)}{2(\Delta x_i + \Delta x_{i-1})} \right. \\
&\quad \left. + \frac{(v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + v_{I,y,p}|_{i,j-\frac{1}{2},k}^m)(p_I|_{i,j-1,k}^m - p_I|_{i,j+1,k}^m)}{2(\Delta y_j + \Delta y_{j-1})} \right. \\
&\quad \left. + \frac{(v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + v_{I,z,p}|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^m)(p_I|_{i,j,k-1}^m - p_I|_{i,j,k+1}^m)}{2(\Delta z_k + \Delta z_{k-1})} \right) \tag{6.39}
\end{aligned}$$

Discretización espacio-temporal de $n_I^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
n_I^{m+\frac{1}{2}}|_{i,j,k} &= n_I^{m-\frac{1}{2}}|_{i,j,k} + \Delta_t \left(GR|_{i,j,k}^m + n_I|_{i,j,k}^m \left(\frac{v_{I,x,n}|_{i-\frac{1}{2},j,k}^m - v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m}{\delta x_i} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{v_{I,y,n}|_{i,j-\frac{1}{2},k}^m - v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m}{\delta y_j} + \frac{v_{I,z,n}|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^m - v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m}{\delta z_k} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{(v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + v_{I,x,n}|_{i-\frac{1}{2},j,k}^m)(n_I|_{i-1,j,k}^m - n_I|_{i+1,j,k}^m)}{2(\Delta x_i + \Delta x_{i-1})} \right. \\
&\quad \left. + \frac{(v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m + v_{I,y,n}|_{i,j-\frac{1}{2},k}^m)(n_I|_{i,j-1,k}^m - n_I|_{i,j+1,k}^m)}{2(\Delta y_j + \Delta y_{j-1})} \right. \\
&\quad \left. + \frac{(v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m + v_{I,z,n}|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^m)(n_I|_{i,j,k-1}^m - n_I|_{i,j,k+1}^m)}{2(\Delta z_k + \Delta z_{k-1})} \right) \tag{6.40}
\end{aligned}$$

Discretización espacio-temporal de $p_{II}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
 p_{II}^{m+\frac{1}{2}}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} &= p_{II}^{m-\frac{1}{2}}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + \Delta t \left(GR\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right. \\
 &+ p_{II}^m\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \left(\frac{v_{II,x,p}\Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - v_{II,x,p}\Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m}{\Delta x_i} \right. \\
 &+ \frac{v_{II,y,p}\Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - v_{II,y,p}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^m}{\Delta y_j} + \frac{v_{II,z,p}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - v_{II,z,p}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^m}{\Delta z_k} \Big) \\
 &+ \frac{(v_{II,x,p}\Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + v_{II,x,p}\Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m)(p_{II}^m\Big|_{i-\frac{3}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} - p_{II}^m\Big|_{i+\frac{3}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}})}{2(\delta_{x_i} + \delta_{x_{i-1}})} \\
 &+ \frac{(v_{II,y,p}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^m + v_{II,y,p}\Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m)(p_{II}^m\Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}} - p_{II}^m\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}})}{2(\delta_{y_j} + \delta_{y_{j-1}})} \\
 &+ \frac{(v_{II,z,p}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^m + v_{II,z,p}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m)(p_{II}^m\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{3}{2}} - p_{II}^m\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{3}{2}})}{2(\delta_{z_k} + \delta_{z_{k-1}})} \Big) \quad (6.41)
 \end{aligned}$$

Discretización espacio-temporal de $n_{II}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
 n_{II}^{m+\frac{1}{2}}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} &= n_{II}^{m-\frac{1}{2}}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + \Delta t \left(GR\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \right. \\
 &+ n_{II}^m\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \left(\frac{v_{II,x,n}\Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m - v_{II,x,n}\Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m}{\Delta x_i} \right. \\
 &+ \frac{v_{II,y,n}\Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - v_{II,y,n}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^m}{\Delta y_j} + \frac{v_{II,z,n}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - v_{II,z,n}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^m}{\Delta z_k} \Big) \\
 &+ \frac{(v_{II,x,n}\Big|_{i+1,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + v_{II,x,n}\Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m)(n_{II}^m\Big|_{i-\frac{3}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} - n_{II}^m\Big|_{i+\frac{3}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}})}{2(\delta_{x_i} + \delta_{x_{i-1}})} \\
 &+ \frac{(v_{II,y,n}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^m + v_{II,y,n}\Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m)(n_{II}^m\Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}} - n_{II}^m\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}})}{2(\delta_{y_j} + \delta_{y_{j-1}})} \\
 &+ \frac{(v_{II,z,n}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^m + v_{II,z,n}\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m)(n_{II}^m\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{3}{2}} - n_{II}^m\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{3}{2}})}{2(\delta_{z_k} + \delta_{z_{k-1}})} \Big) \quad (6.42)
 \end{aligned}$$

Discretización espacio-temporal del paso 6 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7, cuya expresión de avance temporal viene dada por:

$$\vec{E}_{II}^{m+1} = \vec{E}_{II}^m + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{H}_{II}^{m+\frac{1}{2}} + q(n_{T,II}^{m+\frac{1}{2}} \vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} - p_{T,II}^{m+\frac{1}{2}} \vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}}) \right)$$

Componente X de la discretización espacio-temporal de \vec{E}_{II}^{m+1} :

$$\begin{aligned} E_{II,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} &= E_{II,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m \\ + \frac{\Delta t}{\varepsilon} &\left(\frac{H_{II,z}|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta y_j} - \frac{H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{m+\frac{1}{2}} - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} \right. \\ &\left. + q \left(n_{T,II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - p_{T,II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right) \right) \end{aligned} \quad (6.43)$$

Donde

$$\begin{aligned} n_{T,II}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} \left(n_{0II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n_{0II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + n_{II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (6.44)$$

$$\begin{aligned} p_{T,II}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} \left(p_{0II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p_{0II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. + p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + p_{II}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (6.45)$$

Componente Y de la discretización espacio-temporal de $\vec{E}_{II}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned} E_{II,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} &= E_{II,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m \\ + \frac{\Delta t}{\varepsilon} &\left(\frac{H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} - H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} - \frac{H_{II,z}|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{II,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i} \right. \\ &\left. + q \left(n_{T,II}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - p_{T,II}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right) \right) \end{aligned} \quad (6.46)$$

Donde

$$\begin{aligned} n_{T,II}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} \left(n_{0II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n_{0II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (6.47)$$

$$p_{T,II}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(p_{0II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p_{0II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \right. \\ \left. + p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right) \quad (6.48)$$

Componente Z de la discretización espacio-temporal de $\vec{E}_{II}^{m+\frac{1}{2}}$:

$$E_{II,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} = E_{II,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m \\ + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left(\frac{H_{II,y}|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{II,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i} - \frac{H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{II,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta y_j} \right. \\ \left. + q \left(n_{T,II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - p_{T,II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \right) \right) \quad (6.49)$$

Donde

$$n_{T,II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(n_{0II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + n_{0II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} \right. \\ \left. + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \right) \quad (6.50)$$

$$p_{T,II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(p_{0II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} + p_{0II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} \right. \\ \left. + p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right) \quad (6.51)$$

Discretización espacio-temporal del paso 7 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7, cuyas expresiones de avance temporal vienen dadas por:

$$\vec{v}_{I,p}^{m+1} = \bar{\Lambda}_{A,p} \odot \vec{v}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} + \bar{\Lambda}_{B,p} \odot \left(\vec{E}_{I,T}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{L}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{E}_{I,0} \frac{p_{0I}}{p_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} \right) + \bar{\Lambda}_{C,p} \odot \frac{\vec{\nabla} p_I^{m+\frac{1}{2}}}{p_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} \\ \vec{v}_{I,n}^{m+1} = \bar{\Lambda}_{A,n} \odot \vec{v}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} + \bar{\Lambda}_{B,n} \odot \left(\vec{E}_{I,T}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{L}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{E}_{I,0} \frac{n_{0I}}{n_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} \right) + \bar{\Lambda}_{C,n} \odot \frac{\vec{\nabla} n_I^{m+\frac{1}{2}}}{n_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}}$$

Componente X de la discretización espacio-temporal de $\vec{v}_{I,p}^{m+1}$:

$$v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+1} = \Lambda_{A,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k} v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \\ + \Lambda_{B,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k} \left(E_{I,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} + E_{I,0,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k} + L_{I,p,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\ \left. - \frac{E_{I,0,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k} (p_{0I}|_{i+1,j,k} + p_{0I}|_{i,j,k})}{p_{0I}|_{i+1,j,k} + p_{0I}|_{i,j,k} + p_{I}|_{i+1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} + p_{I}|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}}} \right)$$

$$+ \frac{2\Lambda_{C,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k} \left(p_I|_{i+1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} - p_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right)}{\left(p_{0I}|_{i+1,j,k} + p_{0I}|_{i,j,k} + p_I|_{i+1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} + p_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right)} \Delta x_i \quad (6.52)$$

Donde $L_{I,p,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}}$ totalmente desarrollado viene dado por la expresión:

$$\begin{aligned} L_{I,p,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} = & \frac{\mu_0}{4} \left(H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\ & + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^m v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\ & + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^m v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\ & - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \\ & - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^m v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \\ & \left. - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^m v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned}$$

Componente X de la discretización espacio-temporal de $\vec{v}_{I,n}^{m+1}$:

$$\begin{aligned} v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+1} = & \Lambda_{A,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k} v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \\ & + \Lambda_{B,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k} \left(E_{I,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} + E_{I,0,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k} + L_{I,n,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\ & \left. - \frac{E_{I,0,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k} (n_{0I}|_{i+1,j,k} + n_{0I}|_{i,j,k})}{n_{0I}|_{i+1,j,k} + n_{0I}|_{i,j,k} + n_I|_{i+1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} + n_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}}} \right) \\ & + \frac{2\Lambda_{C,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k} \left(n_I|_{i+1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} - n_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right)}{\left(n_{0I}|_{i+1,j,k} + n_{0I}|_{i,j,k} + n_I|_{i+1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} + n_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right)} \Delta x_i \quad (6.53) \end{aligned}$$

Donde $L_{I,n,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}}$ totalmente desarrollado viene dado por la expresión:

$$\begin{aligned} L_{I,n,x}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} = & \frac{\mu_0}{4} \left(H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\ & + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^m v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\ & + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^m v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

6. Algoritmos para la simulación del régimen transitorio de dispositivos modelados
172 por las ecuaciones magnetohidrodinámicas

$$\begin{aligned}
& -H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \\
& -H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^m v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \\
& \quad -H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^m v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

Componente Y de la discretización espacio-temporal de $\bar{v}_{I,p}^{m+1}$:

$$\begin{aligned}
v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+1} &= \Lambda_{A,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k} v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \\
& + \Lambda_{B,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k} \left(E_{I,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + E_{I,0,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k} + L_{I,p,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\
& \quad \left. - \frac{E_{I,0,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k} (p0_I|_{i,j+1,k} + p0_I|_{i,j,k})}{p0_I|_{i,j+1,k} + p0_I|_{i,j,k} + p_I|_{i,j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} + p_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}}} \right) \\
& \quad \frac{2\Lambda_{C,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k} \left(p_I|_{i,j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} - p_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right)}{\left(p0_I|_{i,j+1,k} + p0_I|_{i,j,k} + p_I|_{i,j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} + p_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right) \Delta y_j}
\end{aligned} \tag{6.54}$$

Donde $L_{I,p,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}}$ totalmente desarrollado viene dado por la expresión:

$$\begin{aligned}
L_{I,p,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{\mu_0}{4} \left(H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\
& + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,p}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \\
& + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,z,p}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,p}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m v_{II,z,p}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \\
& - H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,z}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
& - H_{I,z}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
& \quad \left. - H_{I,z}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,z}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right)
\end{aligned}$$

Componente Y de la discretización espacio-temporal de $\bar{v}_{I,n}^{m+1}$:

$$\begin{aligned}
v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+1} &= \Lambda_{A,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k} v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m \\
& + \Lambda_{B,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k} \left(E_{I,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + E_{I,0,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k} + L_{I,n,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{E_{I,0,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k} (n0_I|_{i,j+1,k} + n0_I|_{i,j,k})}{n0_I|_{i,j+1,k} + n0_I|_{i,j,k} + n_I|_{i,j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} + n_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}}} \right) \\
& \frac{2\Lambda_{C,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k} \left(n_I|_{i,j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} - n_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right)}{\left(n0_I|_{i,j+1,k} + n0_I|_{i,j,k} + n_I|_{i,j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} + n_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right) \Delta y_j}
\end{aligned} \tag{6.55}$$

Donde $L_{I,n,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}}$ totalmente desarrollado viene dado por la expresión:

$$\begin{aligned}
L_{I,n,y}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} = & \frac{\mu_0}{4} \left(H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\
& + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,n}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \\
& + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,z,n}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,z,n}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,x}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^m v_{II,z,n}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} \\
& - H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,z}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
& - H_{I,z}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,z}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
& \left. - H_{I,z}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+1} v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,z}|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right)
\end{aligned}$$

Componente Z de la discretización espacio-temporal de $\bar{v}_{I,p}^{m+1}$:

$$\begin{aligned}
& v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} = \Lambda_{A,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \\
& + \Lambda_{B,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \left(E_{I,y}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + E_{I,0,y}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} + L_{I,p,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\
& \left. - \frac{E_{I,0,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} (p0_I|_{i,j,k+1} + p0_I|_{i,j,k})}{p0_I|_{i,j,k+1} + p0_I|_{i,j,k} + p_I|_{i,j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} + p_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}}} \right) \\
& + \frac{2\Lambda_{C,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \left(p_I|_{i,j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} - p_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right)}{\left(p0_I|_{i,j,k+1} + p0_I|_{i,j,k} + p_I|_{i,j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} + p_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \right) \Delta z_k}
\end{aligned} \tag{6.56}$$

Donde $L_{I,p,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}$ totalmente desarrollado viene dado por la expresión:

$$L_{I,p,z}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{\mu_0}{4} \left(H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,y}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right)$$

$$\begin{aligned}
 &+ H_{I,y} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,x,p} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,y} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,x,p} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,x,p} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
 &+ H_{I,y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,x,p} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,y} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,x,p} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,y} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,x,p} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
 &- H_{I,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,y,p} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,y,p} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,x} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,y,p} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
 &- H_{I,x} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,y,p} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,y,p} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,y,p} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
 &\quad - H_{I,x} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,y,p} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,x} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,y,p} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \Big)
 \end{aligned}$$

Componente Z de la discretización espacio-temporal de $\bar{v}_{I,n}^{m+1}$:

$$\begin{aligned}
 v_{I,z,n} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} &= \Lambda_{A,n} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}} v_{I,z,n} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \\
 &+ \Lambda_{B,n} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \left(E_{I,y} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + E_{I,0,y} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}} + L_{I,p,z} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{E_{I,0,z} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}} (n0_I \Big|_{i,j,k+1} + n0_I \Big|_{i,j,k})}{n0_I \Big|_{i,j,k+1} + n0_I \Big|_{i,j,k} + n_I \Big|_{i,j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} + n_I \Big|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}}} \right) \\
 &\quad + \frac{2\Lambda_{C,n} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}} (n_I \Big|_{i,j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} - n_I \Big|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}})}{(n0_I \Big|_{i,j,k+1} + n0_I \Big|_{i,j,k} + n_I \Big|_{i,j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} + n_I \Big|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}})} \Delta z_k
 \end{aligned} \tag{6.57}$$

Donde $L_{I,p,z} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}$ totalmente desarrollado viene dado por la expresión:

$$\begin{aligned}
 L_{I,p,z} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{\mu_0}{4} \left(H_{I,y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,x,n} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,x,n} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\
 &+ H_{I,y} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,x,n} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,y} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,x,n} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,x,n} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
 &+ H_{I,y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,x,n} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,y} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,x,n} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + H_{I,y} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m v_{II,x,n} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
 &- H_{I,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,y,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,y,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,x} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,y,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
 &- H_{I,x} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,y,n} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,y,n} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,y,n} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\
 &\quad \left. - H_{I,x} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} v_{II,y,n} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - H_{I,x} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m v_{II,y,n} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right)
 \end{aligned}$$

La figura 6.9 ayuda a visualizar el cálculo del elemento $L_{I,n,x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}$ del subdominio

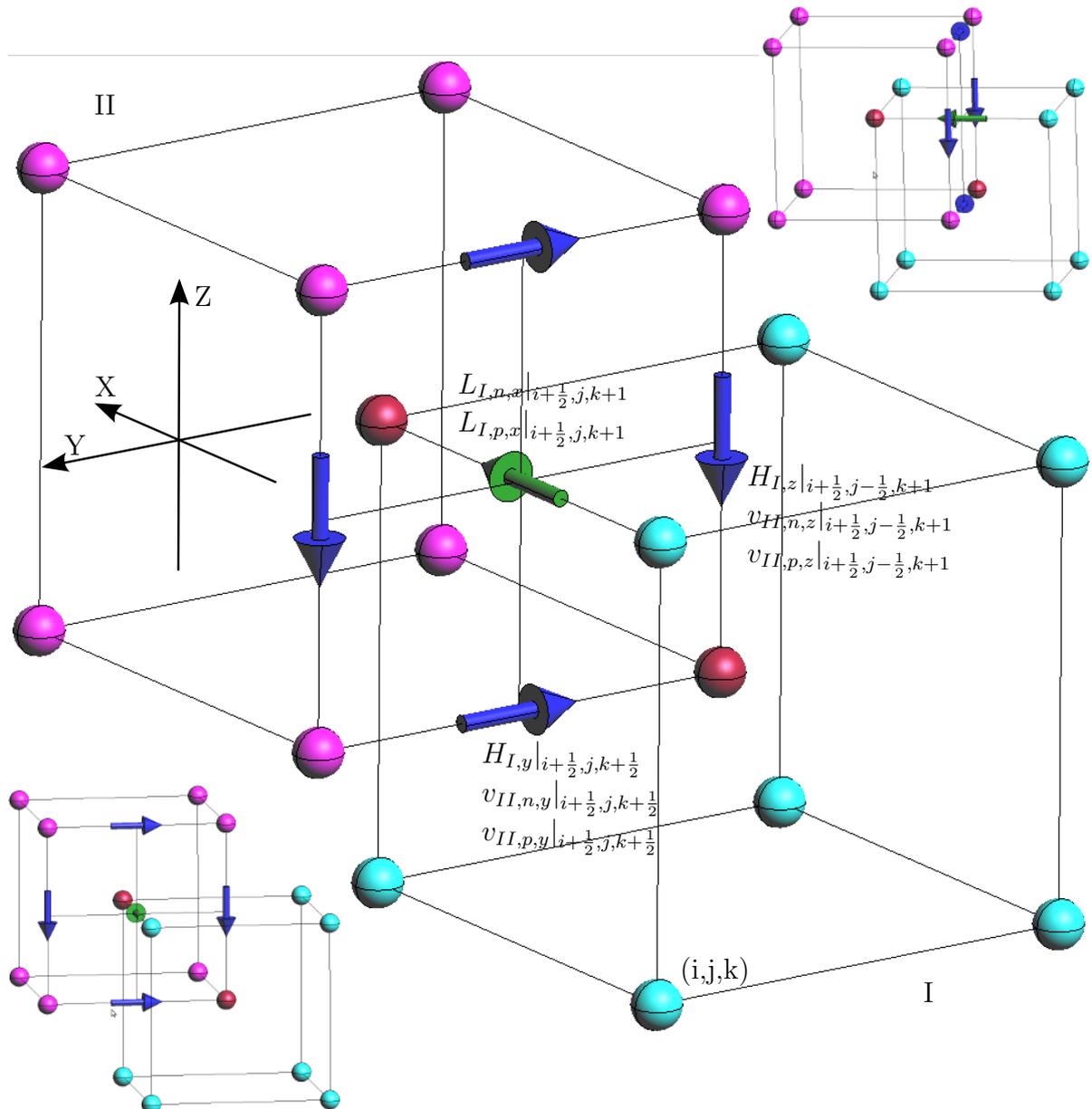


Figura 6.9: Producto vectorial de las velocidades del subdominio II con los campos magnéticos del del subdominio I, para obtener el término magnético de la acción de Lorentz sobre el subdominio I.

I a partir de la velocidades del subdominio II. Esta figura es la complementaria de la figura 6.8 usada para aclarar en mismo tipo de elemento dual del subdominio II.

Discretización espacio-temporal del paso 8 mostrado en las figuras 6.6 y 6.7,

cuyas expresiones de avance temporal vienen dadas por:

$$n_I^{m+1} = n_I^m + \Delta_t \left(GR^{m+\frac{1}{2}} - n_I^{m+\frac{1}{2}} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{v}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} \cdot \vec{\nabla} n_I^{m+\frac{1}{2}} \right)$$

$$p_I^{m+1} = p_I^m + \Delta_t \left(GR^{m+\frac{1}{2}} - p_I^{m+\frac{1}{2}} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{v}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} \cdot \vec{\nabla} p_I^{m+\frac{1}{2}} \right)$$

$$n_{II}^{m+1} = n_{II}^m + \Delta_t \left(GR^{m+\frac{1}{2}} - n_{II}^{m+\frac{1}{2}} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} \cdot \vec{\nabla} n_{II}^{m+\frac{1}{2}} \right)$$

$$p_{II}^{m+1} = p_{II}^m + \Delta_t \left(GR^{m+\frac{1}{2}} - p_{II}^{m+\frac{1}{2}} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} \cdot \vec{\nabla} p_{II}^{m+\frac{1}{2}} \right)$$

Discretización espacio-temporal de p_I^{m+1} :

$$\begin{aligned} p_I|_{i,j,k}^{m+1} = & p_I|_{i,j,k}^m + \Delta_t \left(GR|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} + p_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \left(\frac{v_{I,x,p}|_{i-\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} - v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}}}{\delta_{x_i}} \right. \right. \\ & + \frac{v_{I,y,p}|_{i,j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}}}{\delta_{y_j}} + \frac{v_{I,z,p}|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}}{\delta_{z_k}} \left. \right) \\ & + \frac{(v_{I,x,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} + v_{I,x,p}|_{i-\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}})(p_I|_{i-1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} - p_I|_{i+1,j,k}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\Delta x_i + \Delta x_{i-1})} \\ & + \frac{(v_{I,y,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + v_{I,y,p}|_{i,j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}})(p_I|_{i,j-1,k}^{m+\frac{1}{2}} - p_I|_{i,j+1,k}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\Delta y_j + \Delta y_{j-1})} \\ & + \frac{(v_{I,z,p}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + v_{I,z,p}|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})(p_I|_{i,j,k-1}^{m+\frac{1}{2}} - p_I|_{i,j,k+1}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\Delta z_k + \Delta z_{k-1})} \end{aligned} \quad (6.58)$$

Discretización espacio-temporal de n_I^{m+1} :

$$\begin{aligned} n_I|_{i,j,k}^{m+1} = & n_I|_{i,j,k}^m + \Delta_t \left(GR|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} + n_I|_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \left(\frac{v_{I,x,n}|_{i-\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} - v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}}}{\delta_{x_i}} \right. \right. \\ & + \frac{v_{I,y,n}|_{i,j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}}}{\delta_{y_j}} + \frac{v_{I,z,n}|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}}{\delta_{z_k}} \left. \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{(v_{I,x,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} + v_{I,x,n}|_{i-\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}})(n_I|_{i-1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} - n_I|_{i+1,j,k}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\Delta x_i + \Delta x_{i-1})} \\
& + \frac{(v_{I,y,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} + v_{I,y,n}|_{i,j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}})(n_I|_{i,j-1,k}^{m+\frac{1}{2}} - n_I|_{i,j+1,k}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\Delta y_j + \Delta y_{j-1})} \\
& + \frac{(v_{I,z,n}|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + v_{I,z,n}|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})(n_I|_{i,j,k-1}^{m+\frac{1}{2}} - n_I|_{i,j,k+1}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\Delta z_k + \Delta z_{k-1})} \Big) \tag{6.59}
\end{aligned}$$

Discretización espacio-temporal de p_{II}^{m+1} :

$$\begin{aligned}
p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} & = p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + \Delta t \left(GR|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\
& + p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \left(\frac{v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - v_{II,x,p}|_{i+1,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i} \right. \\
& + \frac{v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta y_j} + \frac{v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} \Big) \\
& + \frac{(v_{II,x,p}|_{i+1,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + v_{II,x,p}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})(p_{II}|_{i-\frac{3}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - p_{II}|_{i+\frac{3}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\delta_{x_i} + \delta_{x_{i-1}})} \\
& + \frac{(v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + v_{II,y,p}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})(p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\delta_{y_j} + \delta_{y_{j-1}})} \\
& + \frac{(v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^{m+\frac{1}{2}} + v_{II,z,p}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}})(p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{3}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{3}{2}}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\delta_{z_k} + \delta_{z_{k-1}})} \Big) \tag{6.60}
\end{aligned}$$

Discretización espacio-temporal de n_{II}^{m+1} :

$$\begin{aligned}
n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+1} & = n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^m + \Delta t \left(GR|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \right. \\
& + n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \left(\frac{v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - v_{II,x,n}|_{i+1,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i} \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \left. \begin{aligned}
 & \frac{v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta y_j} + \frac{v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} \\
 & + \frac{(v_{II,x,n}|_{i+1,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + v_{II,x,n}|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})(n_{II}|_{i-\frac{3}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - n_{II}|_{i+\frac{3}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\delta_{x_i} + \delta_{x_{i-1}})} \\
 & + \frac{(v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j+1,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} + v_{II,y,n}|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})(n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{3}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\delta_{y_j} + \delta_{y_{j-1}})} \\
 & + \frac{(v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+1}^{m+\frac{1}{2}} + v_{II,z,n}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}})(n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{3}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{3}{2}}^{m+\frac{1}{2}})}{2(\delta_{z_k} + \delta_{z_{k-1}})}
 \end{aligned} \right) \quad (6.61)
 \end{aligned}$$

6.4.3. Condiciones de contorno

Todas las condiciones de contorno se imponen cada paso de tiempo del esquema de avance temporal mostrado en 6.6. En la región fotoactiva de la antena, en su interfaz con el vacío, aplicaremos condiciones de contorno. Las aplicaremos sobre la carga y sobre las velocidades expresadas por las ecuaciones 6.12-6.13 que describen la dinámica de los EF y HF.

Condiciones de contorno sobre la carga

Al igual que el transitorio de una antena semiconductoras sin campo magnetostático aplicado, tal y como se describe en el apartado 3.2.5 del capítulo 3, durante el régimen transitorio la carga en contacto con los contactos metálicos permanece constante. Esa es la razón de que la carga transitoria del subdominio I (por geometría el subdominio II no posee nodos en los punto de la interfaz región fotoconductiva vacío) que esta localizada en nodos de los contactos metálicos permanezca igual a cero todo el transitorio.

En nodos del subdominio I y II que están fuera de la región fotoconductiva no hay variables de carga definidas. Dado que no hay nodos del mallado del subdominio II sobre la interfaz que separa la zona fotoactiva del resto del universo (topologicamente hablando todos los nodos del subdominio II son interiores a la región fotoactiva), las condiciones de contorno sobre los nodos del subdominio II dependen de los valores de los nodos del subdominio I. Los valores de la carga de los nodos del subdominio I cumplen la condición

de contorno de Neumann:

$$\left. \frac{\partial n_I}{\partial \vec{n}} \right|_{\Omega_N} = 0 \quad (6.62)$$

$$\left. \frac{\partial p_I}{\partial \vec{n}} \right|_{\Omega_N} = 0 \quad (6.63)$$

Por otro lado y como se deduce de la figura 6.10 cualquier nodo del subdominio II

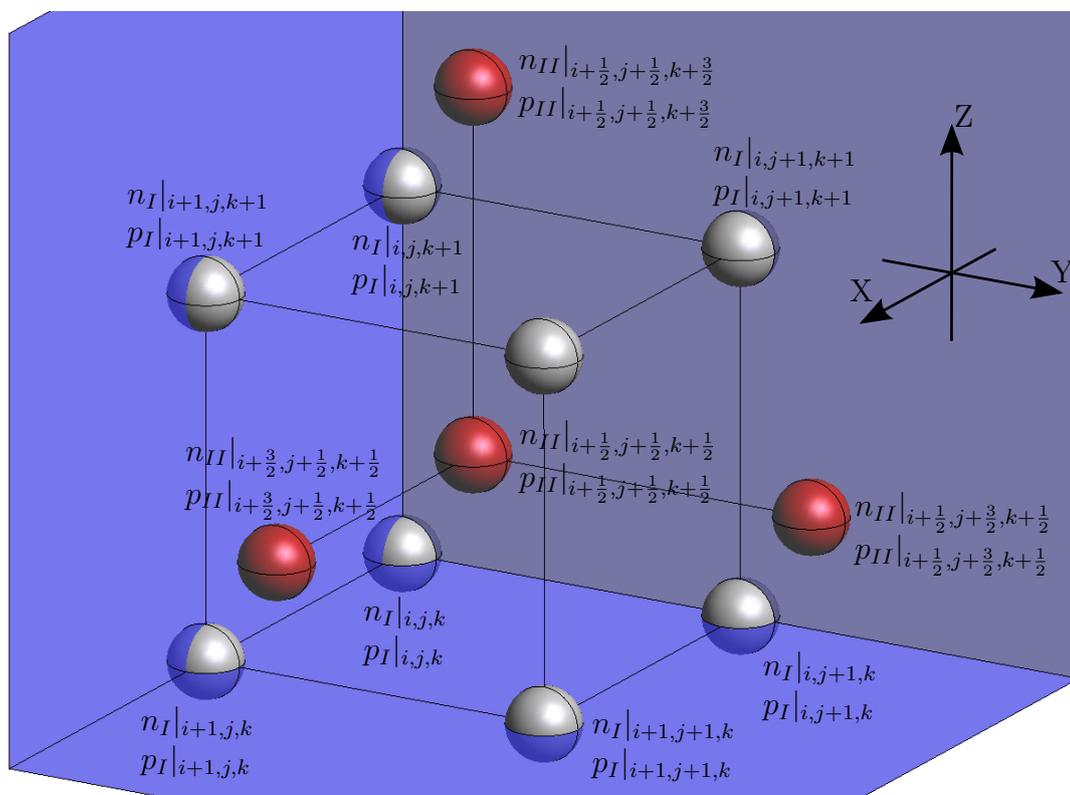


Figura 6.10: Las esferas rojas representan nodos del subdominio II donde se posicionan las variables que dan cuenta de la carga sobre el mallado. Las esferas de color azul son nodos del mallado correspondientes al subdominio I. La figura representa una esquina de la región fotoactiva, donde los planos de color azul separan la región fotoactiva de otro medio. Como se puede ver el nodo del subdominio II que está en la esquina (de color rojo), siempre está rodeado de nodos del subdominio I. Este esquema es extensible a cualquier nodo periférico del subdominio II que estará rodeado siempre por ocho nodos del subdominio I.

esta siempre rodeado por cuatro nodos del subdominio I. Lo que se hace con los nodos

periféricos del subdominio II es imponer su carga por interpolación de los ocho valores de la carga correspondientes a los nodos del subdominio I que rodean esos nodos periféricos del subdominio II. Como ejemplo práctico en la figura 6.10 la carga correspondiente al nodo $(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})$ del subdominio II se calcula como:

$$\begin{aligned} n_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{8}(n_I|_{i,j,k} + n_I|_{i+1,j,k} + n_I|_{i,j+1,k} + n_I|_{i,j,k+1} \\ &+ n_I|_{i+1,j+1,k} + n_I|_{i+1,j,k+1} + n_I|_{i,j+1,k+1} + n_I|_{i+1,j+1,k+1}) \\ p_{II}|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{8}(p_I|_{i,j,k} + p_I|_{i+1,j,k} + p_I|_{i,j+1,k} + p_I|_{i,j,k+1} \\ &+ p_I|_{i+1,j+1,k} + p_I|_{i+1,j,k+1} + p_I|_{i,j+1,k+1} + p_I|_{i+1,j+1,k+1}) \end{aligned}$$

Condiciones de contorno sobre la velocidades

Las condiciones de contorno de Neumann que aplicaremos sobre las velocidades en el subdominio I y II son las que preservan la carga en la región fotoactiva. Las componentes normales de las velocidades a la interfaz que rodea la zona fotoactiva Ω_N , han de ser nulas para no tener sumideros o fuentes no físicas de carga. En otras palabras $\vec{v}_{I,n}(\vec{r}, t) \cdot \hat{n} = 0$, $\vec{v}_{I,p}(\vec{r}, t) \cdot \hat{n} = 0$, $\vec{v}_{II,n}(\vec{r}, t) \cdot \hat{n} = 0$ y $\vec{v}_{II,p}(\vec{r}, t) \cdot \hat{n} = 0 \forall \vec{r} \in \Omega_N$. Donde \hat{n} es el versor normal a la interfaz Ω_N que separa la región fotoactiva del resto del universo. Para garantizar que la velocidad promedio no excede la velocidad de saturación de un electrón en un medio semiconductor, si la velocidad de un EF supera en módulo esa velocidad de saturación, automáticamente se impone como valor de esa variable, la velocidad de saturación. Para no perder el carácter vectorial, esto se hace escalando las componentes con el mismo factor hasta que los módulos coinciden. De igual modo se procede con los huecos. A modo de ejemplo ilustrativo vamos a suponer que $\vec{v}_{old} = (v_{x,old}, v_{y,old}, v_{z,old})$ es la velocidad de una partícula fluida de modo que $|\vec{v}_{old}| > v_{sat}$ entonces \vec{v}_{old} es sustituido por $\vec{v}_{new} = f\vec{v}_{old} = f(v_{x,old}, v_{y,old}, v_{z,old})$ donde $f = \frac{v_{sat}}{|\vec{v}_{old}|}$.

6.5. Estabilidad

Al respecto de la estabilidad del algoritmo desde un ángulo puramente numérico (es lo que se ha observado al hacer algunas simulaciones), la única restricción extra que las ecuaciones 6.12 y 6.13 imponen a Δ_t es dada por $\bar{\Lambda}_{A,n}$ y $\bar{\Lambda}_{A,p}$ que han de ser positivas, lo que implica que $\Delta_t < \tau$, es decir, el paso de avance temporal ha de ser menor que el

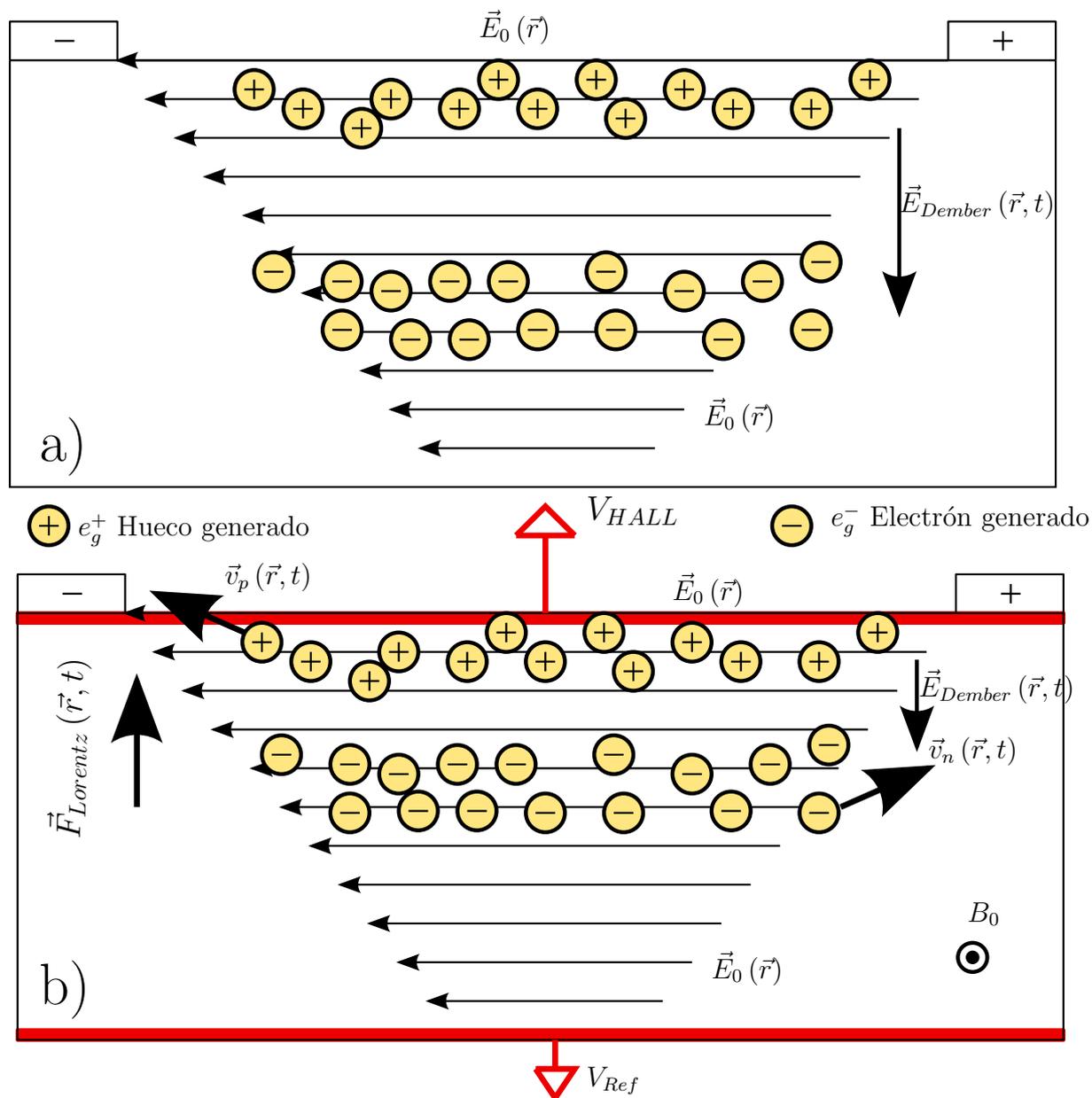


Figura 6.11: Las flechas horizontales representan la intensidad del campo electrostático $\vec{E}_0(\vec{r})$ debido a la fuente externa que polariza la región fotoactiva. a) Distribución de cargas generadas durante el transitorio en ausencia del campo magnetostático. b) Distribución de cargas generadas durante el transitorio en un semiconductor inmerso en un campo magnetostático.

tiempo de colisión o vuelo libre medio de un HF y un EF.

6.6. Conjetura teórica Dember-Lorentz-Hall

La figura 6.11 muestra la distribución de cargas generadas durante el transitorio. Como los electrones tienen mayor movilidad que los huecos estos penetran más rápidamente en el semiconductor generándose el llamado efecto foto Dember⁶⁹. Estos electrones

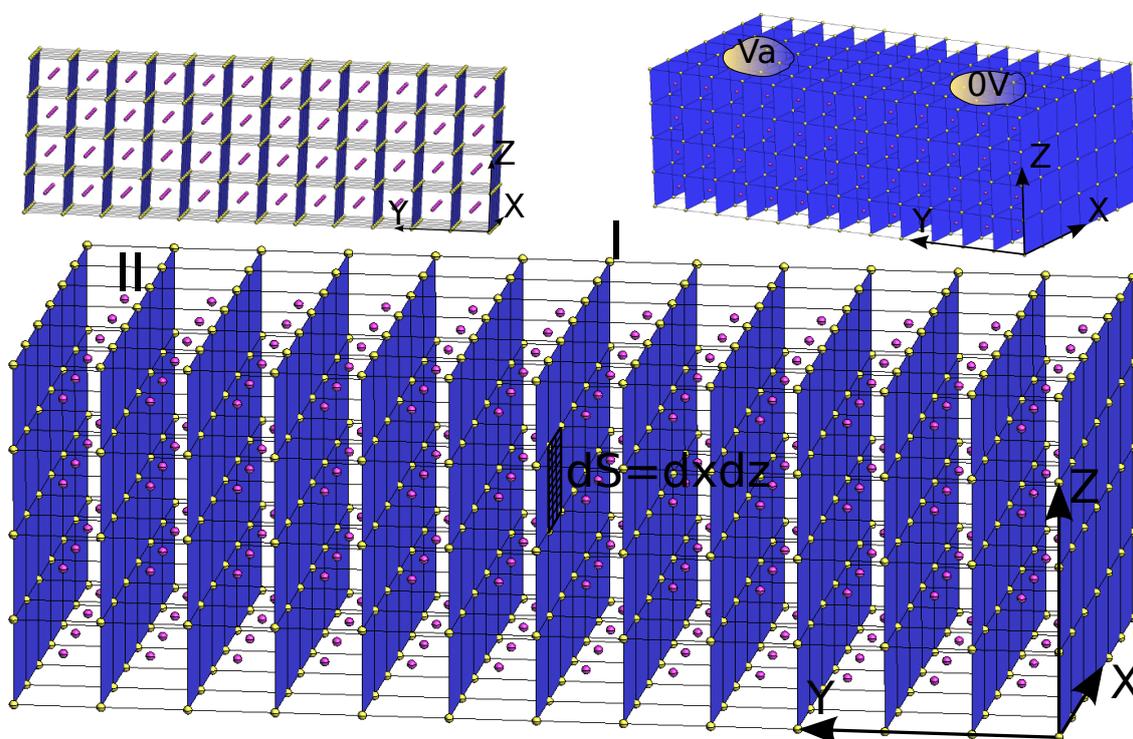


Figura 6.12: Cortes transversales de la antena sobre los que estudiar la densidad de corriente y carga a lo largo del proceso transitorio.

profundos sufren el campo de polarización de la fuente externa $\vec{E}_0(\vec{r}, t)$ con menor intensidad. De ahí que su contribución a la fotocorriente de generación de campo radiado sea menor. La distribución de cargas generadas en un semiconductor inmerso en un campo magnetostático, por la acción de la fuerza de Lorentz, que fija un potencial Hall en el estado estacionario, reduce el efecto foto Dember de un modo mínimo ya que la corriente

estacionaria es pequeña en comparación con la transitoria (varios ordenes de magnitud mayor). Durante el proceso transitorio la fuerza de Lorentz (debida al campo magnetostático) sobre el pulso temporal de fotocorriente empuja a los portadores de carga hacia la superficie del semiconductor (donde el campo electrostático es más intenso). Así los electrones fotogenerados no penetran tan profundamente en el material. Por ello esos electrones están dispuestos a conducir e incrementar la corriente inductora de radiación justo en la zona donde el campo electrostático $\vec{E}_0(\vec{r})$ es más intenso. Esta acción contrarresta la fuerza electromotriz foto Dember. Cuanto mayor sea el balance de variación de carga inducido por el efecto fotoeléctrico respecto del estado estacionario, mayor será el peso de la acción de Lorentz sobre el efecto Dember. En conjunto, el incremento de la corriente que radia el campo puede ser descrito por tres efectos que se relacionan, el efecto foto Dember, la ley de Lorentz y efecto Hall que no es más que una modificación del potencial electrostático. Esta es la conjetura llamada de Dember-Lorentz-Hall.

En la figura 6.12 se ilustran los planos XZ que coinciden con el mallado I sobre la región fotoactiva definida en el apartado 1.2 del capítulo 1. Haciendo el mapa de densidades de corrientes por electrones y huecos separadamente sobre los planos de la figura 6.12 durante el transitorio se puede estudiar numéricamente las hipótesis lanzadas por la conjetura. Además, se podría integrar esa corriente sobre el plano XZ para ver si en computo de intensidad de la misma también aumenta cuando el sistema evoluciona en el seno del campo magnetostático, de ese modo se puede saber si el incremento en el campo radiado es un efecto de un incremento de la corriente o simplemente una reestructuración de la misma que hace que la antena sea más directiva.

Finalmente señalar que el método DH-FDTD no es exclusivo de antenas semiconductoras. Puede ser aplicado a plasmas formados en un gas ionizado. En ese caso el modelo matemático que describe el comportamiento de las corrientes plasmáticas generadas es $m\partial_t\vec{v} + m(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{v} = e\vec{E} + \frac{e}{c}\vec{v} \wedge \vec{B} - \gamma m\vec{v}$. En este modelo tomado de bibliografía¹⁴⁹, γ posee un carácter similar al definido aquí.

7

Conclusiones

Las conclusiones a las que conduce esta tesis se pueden enumerar como sigue:

- Para simular de un modo realista la fase transitoria de una antena fotoconductiva polarizada es necesario conocer su estado estacionario. La importancia de este hecho se recoge en una publicación que centra su atención sobre la movilidad de un modo particular y en el estado estacionario de un modo general⁴¹.
- El modelo de difusión y arrastre es un buen descriptor de la física que tiene lugar en una antena fotoconductiva (en las condiciones de aplicabilidad del modelo). Dos publicaciones ilustran los algoritmos que permiten al citado modelo sacar partido de su relativa simplicidad para expresar de un modo realista el comportamiento de una antena fotoconductiva durante el proceso transitorio de emisión^{42,43}.
- Es posible predecir mediante simulación la eficiencia de emisión de una antena fotoconductiva, hito de gran utilidad en el diseño y posterior desarrollo de la misma. Una publicación validada con datos experimentales fundamenta esta conclusión²⁷.
- Simulaciones llevadas a cabo con algoritmos especialmente desarrollados para tal fin, apuntan hacia la posibilidad de simular todo el proceso de emisión recepción. Incluyendo a las antenas completas. Este tipo de estudios se apoyan en dominios con diferente escala tanto espacial como temporal.
- Ir mas allá del modelo de difusión y arrastre es necesario porque hay evidencias experimentales que requieren de la inclusión de la acción de Lorentz en los algoritmos. El modelo magnetohidrodinámico puede ser abordado en diferencias finitas con el método DH-FDTD.

Todas ellas redundan en una única conclusión, el uso de algoritmos capaces de simular la realidad física que tiene lugar en dispositivos que operan en el rango de los terahercios, ayuda a comprender mejor su funcionamiento y posibilita construir herramientas para el diseño y desarrollo de esta tecnología.

Anexo I

Notas Matemáticas

I.a. La derivada central, hacia delante y hacia atrás de primer orden	188
I.a.1. La derivada central de primer orden	188
I.a.2. Derivada hacia delante y hacia atrás de primer orden	189
I.a.3. Derivada central de primer orden aproximada con un error de $O(\Delta_i^4)$	190
I.b. Producto \odot	191
I.c. Condiciones de contorno de Neumann	191
I.d. Solución aplicando el método numérico de Gauss-Seidel . .	195

I.a. La derivada central, hacia delante y hacia atrás de primer orden

Existen diferentes formas de aproximar una ecuación diferencial por combinaciones lineales de diferencias finitas. Aquí se explican algunas de ellas.

I.a.1. La derivada central de primer orden

Haciendo uso de la definición de derivada⁷⁶,

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x + \frac{h}{2}) - f(x - \frac{h}{2})}{h} \quad (\text{I.1})$$

y del teorema de Taylor⁷⁶ entorno a $x = x_i$,

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n f(x)}{dx^n} \right|_{x=x_i} (x - x_i)^n \quad (\text{I.2})$$

Si se tiene $\Delta_i = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$ con x_{i-1}, x_i y x_{i+1} elementos del dominio de $f(x)$ y $f \in C^\infty([0, X])$, se puede decir que:

$$\frac{f(x + \frac{\Delta_i}{2}) - f(x - \frac{\Delta_i}{2})}{\Delta_i} - f'(x) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f^n(x)}{n!} \frac{\Delta_i^{n-1}}{2^n} (1 - (-1)^n) \quad (\text{I.3})$$

Ya que haciendo un desarrollo en serie de Taylor alrededor de $x = x_i$,

$$\begin{aligned} f(x_i + \frac{\Delta_i}{2}) &= f(x_i) + f'(x_i) \frac{\Delta_i}{2} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f^n(x_i)}{n!} \left(\frac{\Delta_i}{2}\right)^n \\ f(x_i - \frac{\Delta_i}{2}) &= f(x_i) - f'(x_i) \frac{\Delta_i}{2} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f^n(x_i)}{n!} \left(\frac{-\Delta_i}{2}\right)^n \end{aligned}$$

Con lo que la derivada de $f(x)$ en $x = x_i$ se puede aproximar como:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + \frac{\Delta_i}{2}) - f(x_i - \frac{\Delta_i}{2})}{\Delta_i} + O(\Delta_i^2) \quad (\text{I.4})$$

ya que el término de mayor peso de la serie

$$O(\Delta_i^2) \equiv \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f^n(x_i) \Delta_i^n}{n! 2^n} (1 - (-1)^n)$$

va con Δ_i^2 .

Se define **la derivada central de primer orden** como la derivada de primer orden aproximada por diferencias centrales. Entendiéndose por diferencias centrales de $f(x)$ entorno a $x = x_i$ la diferencia $f(x_i + \frac{\Delta_i}{2}) - f(x_i - \frac{\Delta_i}{2})$.

I.a.2. Derivada hacia delante y hacia atrás de primer orden

Del mismo modo que se aproxima la derivada a partir de diferencias centrales se puede aproximar a partir de diferencias hacia delante y hacia atrás.

La derivada de $f(x)$ se aproxima en $x = x_i$ por diferencias hacia delante con un error del orden de Δ_i ,

$$\frac{f(x_i + \Delta_i) - f(x_i)}{\Delta_i} - f'(x_i) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f^n(x_i) \Delta_i^{n-1}}{n!} \equiv O(\Delta_i)$$

donde se entiende por diferencia hacia delante de $f(x)$ entorno a $x = x_i$ a la diferencia $f(x_i + \Delta_i) - f(x_i)$.

La derivada de $f(x)$ se aproxima en $x = x_i$ con diferencias hacia atrás con el mismo orden de error Δ_i ,

$$\frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta_i)}{\Delta_i} - f'(x_i) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f^n(x_i) (-\Delta_i)^{n-1}}{n!} \equiv O(\Delta_i)$$

donde se entiende por diferencia hacia atrás de $f(x)$ entorno a $x = x_i$ a la diferencia $f(x_i) - f(x_i - \Delta_i)$.

Se define **la derivada hacia delante de primer orden** como la derivada aproximada por diferencias hacia delante y **la derivada hacia atrás de primer orden** como la derivada de primer orden aproximada por diferencias hacia atrás.

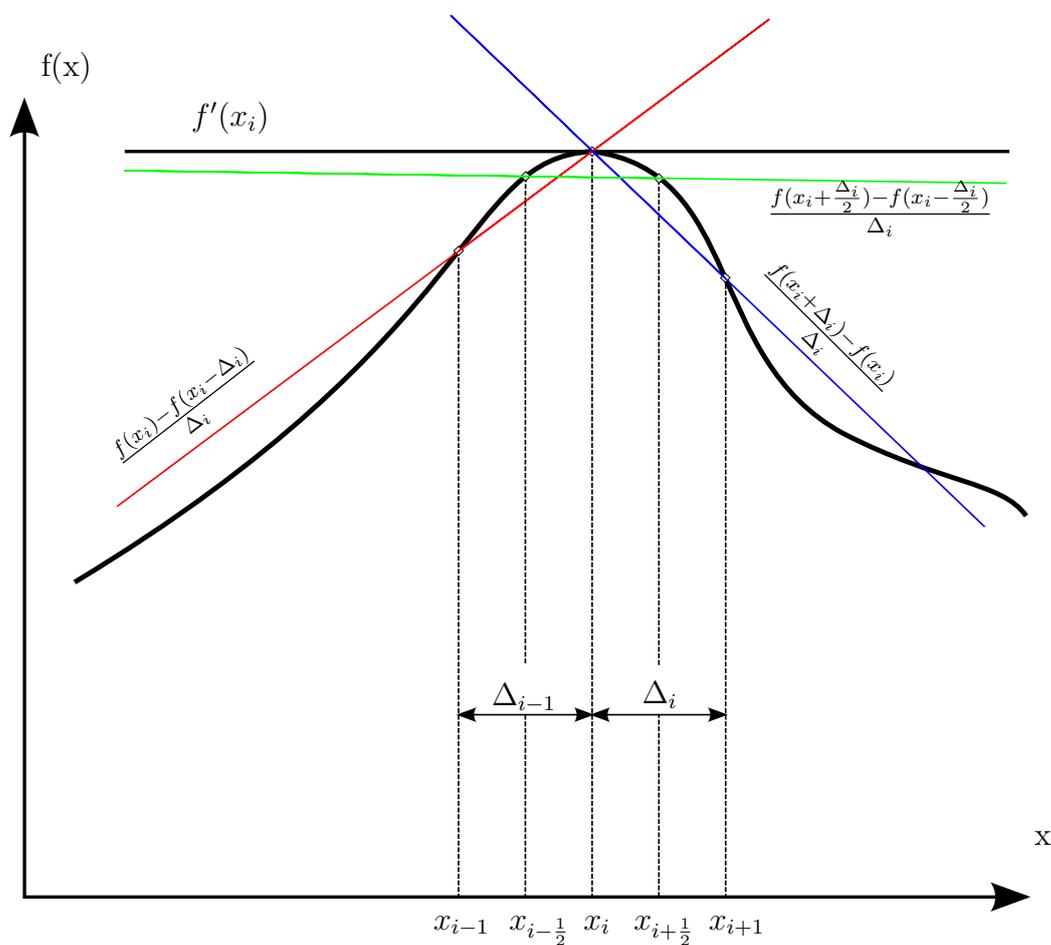


Figura I.1: Derivada de primer orden de $f(x)$ entorno a $x = x_i$ aproximada por diferencias centrales, hacia delante y hacia atrás.

I.a.3. Derivada central de primer orden aproximada con un error de $O(\Delta_i^4)$

La derivada central se puede aproximar por diferencias centrales con una mayor precisión cuando se recurre a segundos vecinos además de los vecinos próximos.

$$f'(x_i) = \frac{9}{8} \left(\frac{f(x_i + \frac{\Delta_i}{2}) - f(x_i - \frac{\Delta_i}{2})}{\Delta_i} \right) - \frac{1}{24} \left(\frac{f(x_i + \frac{3\Delta_i}{2}) - f(x_i - \frac{3\Delta_i}{2})}{\Delta_i} \right) + O(\Delta_i^4) \quad (\text{I.5})$$

donde,

$$O(\Delta_i^4) \equiv \sum_{n=3}^{\infty} \frac{f^n(x)}{2^{n+3}n!} (1 - (-1)^n) (9\Delta_i^{n-1} - (3\Delta_i)^{n-1})$$

El inconveniente de esta aproximación de mayor precisión es la reducción del paso temporal Δt empleado en FDTD que pasa de ser $\Delta t \leq \frac{\Delta}{c\sqrt{3}}$ a $\Delta t \leq \frac{6\Delta}{7c\sqrt{3}}$, donde se ha supuesto un grid uniforme $\Delta = \Delta_x = \Delta_y = \Delta_z$. Dato tomado de la bibliografía³⁵.

I.b. Producto \odot

La operación producto interno elemento a elemento \odot , se define:

$$\begin{aligned} \odot : \mathfrak{R}^n &\rightarrow \mathfrak{R}^n \\ \bar{a}, \bar{b} &\rightarrow \bar{c} = \bar{a} \odot \bar{b} \end{aligned}$$

Con lo que definimos una aplicación que, dados dos elementos $\bar{a} = (a_1, \dots, a_n)$ y $\bar{b} = (b_1, \dots, b_n)$ de \mathfrak{R}^n , les asigna un elemento $\bar{c} = (c_1, \dots, c_n)$ de \mathfrak{R}^n .

$\forall \bar{a}, \bar{b} \in \mathfrak{R}^n : \exists! \bar{c} \in \mathfrak{R}^n / \bar{c} = \bar{a} \odot \bar{b}$. De tal modo que $(c_1, \dots, c_n) = (a_1 b_1, \dots, a_n b_n)$.

El producto \odot cumple la propiedad distributiva de la multiplicación sobre la suma. Un ejemplo de aplicación se encuentra en el producto de las corrientes de difusión y arrastre 2.20.

$$\begin{aligned} -q\bar{\mu}_n(\psi, \vec{r}) \odot \left(n(\vec{r}, t) \overrightarrow{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - V_T \overrightarrow{\nabla} n(\vec{r}, t) \right) = \\ -qn(\vec{r}, t) \bar{\mu}_n(\psi, \vec{r}) \odot \overrightarrow{\nabla} \psi(\vec{r}, t) + qV_T \bar{\mu}_n(\psi, \vec{r}) \odot \overrightarrow{\nabla} n(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

Ejemplo de aplicación del producto \odot ,

$$\begin{aligned} \bar{\mu}_n(\psi, \vec{r}) \odot \overrightarrow{\nabla} \psi(\vec{r}, t) = \\ (\mu_{nx}(\psi, \vec{r}) \partial_x \psi(\vec{r}, t), \mu_{ny}(\psi, \vec{r}) \partial_y \psi(\vec{r}, t), \mu_{nz}(\psi, \vec{r}) \partial_z \psi(\vec{r}, t)) \end{aligned}$$

I.c. Condiciones de contorno de Neumann

Todas las antenas simuladas tienen en común que su zona fotoactiva ha sido considerada un paralelepípedo ortogonal. Aplicar las condiciones de Neumann en este particular

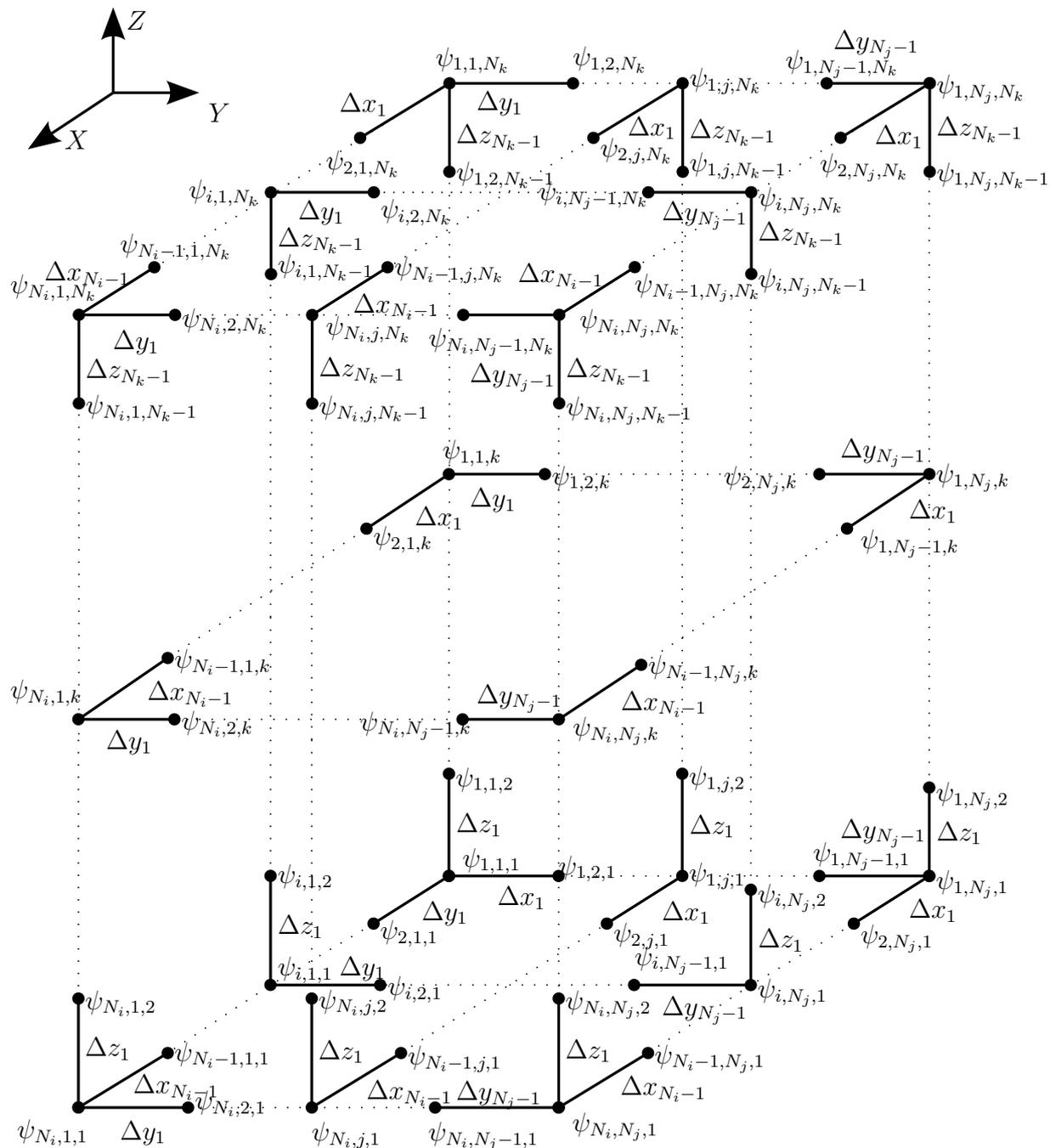


Figura I.2: Condiciones de contorno de Neumann posibles en esquinas y lados para el potencial. Para la carga tendríamos exactamente las mismas.

caso topológico es relativamente simple. En las caras del paralelepípedo ortogonal la condiciones de contorno se resumen en:

$$\Xi = \psi, \mathbf{n}, \mathbf{p}$$

$$\left. \frac{\partial \Xi}{\partial \vec{n}} \right|_{\Omega_N} = 0 \Rightarrow \left. \frac{\partial \Xi}{\partial \vec{n}} \right|_{\Omega_N} = \begin{cases} \left. \frac{\partial \Xi}{\partial x} \right|_{x=0, Lx} = 0 & \text{cuando } \vec{n} = \hat{x} \\ \left. \frac{\partial \Xi}{\partial y} \right|_{y=0, Ly} = 0 & \text{cuando } \vec{n} = \hat{y} \\ \left. \frac{\partial \Xi}{\partial z} \right|_{z=0, Lz} = 0 & \text{cuando } \vec{n} = \hat{z} \end{cases} \quad (\text{I.6})$$

En las aristas y esquinas del paralelepípedo ortogonal la aplicación de las condiciones de Neumann no es inmediata. Lo que se hace es estos casos es interpolar, de ahí que la solución global no sea única. Para interpolar definimos tres funciones:

$$\begin{aligned} \zeta(\vartheta) &= \cos(\arctan(\vartheta)) \\ CC(\vartheta, \xi) &= \cos(\arctan(\vartheta)) \cos(\arctan(\xi)) \\ CS(\vartheta, \xi) &= \cos(\arctan(\vartheta)) \sin(\arctan(\xi)) \end{aligned}$$

Si ahora escogemos el punto $z = \sum_{l=1}^k \Delta z_l$ de la arista Z con $x = L_x = \sum_{i=1}^{N_i} \Delta x_i$ e $y = L_y = \sum_{j=1}^{N_j} \Delta y_j$, la condición de contorno de Neumann será:

$$\Xi = \psi, \mathbf{n}, \mathbf{p}$$

$$\Xi_{N_i, N_j, k} = \frac{\Delta y_{N_j-1}^{-1} \zeta\left(\frac{\Delta y_{N_j-1}}{\Delta x_{N_i-1}}\right) \Xi_{N_i, N_j-1, k} + \Delta x_{N_i-1}^{-1} \zeta\left(\frac{\Delta x_{N_i-1}}{\Delta y_{N_j-1}}\right) \Xi_{N_i-1, N_j, k}}{\Delta y_{N_j-1}^{-1} \zeta\left(\frac{\Delta y_{N_j-1}}{\Delta x_{N_i-1}}\right) + \Delta x_{N_i-1}^{-1} \zeta\left(\frac{\Delta x_{N_i-1}}{\Delta y_{N_j-1}}\right)}. \quad (\text{I.7})$$

Si queremos calcular la condición de Neumann en la esquina (L_x, L_y, L_z) tendremos:

$$\Xi = \psi, \mathbf{n}, \mathbf{p}$$

$$\begin{aligned} \Xi_{N_i, N_j, N_k} &= \left[\Delta x_{N_i-1}^{-1} CC\left(\frac{\sqrt{\Delta x_{N_i-1}^2 + \Delta y_{N_j-1}^2}}{\Delta z_{N_k-1}}, \frac{\Delta x_{N_i-1}}{\Delta y_{N_j-1}}\right) \Xi_{2,1,1} \right. \\ &\quad \left. + \Delta y_{N_j-1}^{-1} CS\left(\frac{\sqrt{\Delta x_{N_i-1}^2 + \Delta y_{N_j-1}^2}}{\Delta z_{N_k-1}}, \frac{\Delta x_{N_i-1}}{\Delta y_{N_j-1}}\right) \Xi_{1,2,1} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\Delta z_{N_k-1}^{-1} \zeta \left(\frac{\sqrt{\Delta x_{N_i-1}^2 + \Delta y_{N_j-1}^2}}{\Delta z_{N_k-1}} \right) \Xi_{1,1,2} \Bigg] / \left[\Delta x_{N_i-1}^{-1} CC \left(\frac{\sqrt{\Delta x_{N_i-1}^2 + \Delta y_{N_j-1}^2}}{\Delta z_{N_k-1}}, \frac{\Delta x_{N_i-1}}{\Delta y_{N_j-1}} \right) \right. \\
& \left. +\Delta y_1^{-1} CS \left(\frac{\sqrt{\Delta x_{N_i-1}^2 + \Delta y_{N_j-1}^2}}{\Delta z_{N_k-1}}, \frac{\Delta y_{N_j-1}}{\Delta x_{N_i-1}} \right) + \Delta z_{N_k-1}^{-1} \zeta \left(\frac{\sqrt{\Delta x_{N_i-1}^2 + \Delta y_{N_j-1}^2}}{\Delta z_{N_k-1}} \right) \right] \quad (I.8)
\end{aligned}$$

O en la esquina (0,0,0):

$$\begin{aligned}
& \Xi = \psi, \mathbf{n}, \mathbf{p} \\
\Xi_{1,1,1} = & \left[\Delta x_1^{-1} CC \left(\frac{\sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta y_1^2}}{\Delta z_1}, \frac{\Delta x_1}{\Delta y_1} \right) \Xi_{2,1,1} + \Delta y_1^{-1} CS \left(\frac{\sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta y_1^2}}{\Delta z_1}, \frac{\Delta y_1}{\Delta x_1} \right) \Xi_{1,2,1} \right. \\
& \left. +\Delta z_1^{-1} \zeta \left(\frac{\sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta y_1^2}}{\Delta z_1} \right) \Xi_{1,1,2} \right] / \left[\Delta x_1^{-1} CC \left(\frac{\sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta y_1^2}}{\Delta z_1}, \frac{\Delta x_1}{\Delta y_1} \right) \right. \\
& \left. +\Delta y_1^{-1} CS \left(\frac{\sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta y_1^2}}{\Delta z_1}, \frac{\Delta y_1}{\Delta x_1} \right) + \Delta z_1^{-1} \zeta \left(\frac{\sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta y_1^2}}{\Delta z_1} \right) \right] \quad (I.9)
\end{aligned}$$

No obstante cuando el mallado es uniforme y regular $\Delta x_i = \Delta y_j = \Delta z_k \forall i, j, k$, las ecuaciones anteriores en lados y esquinas se reducen a:

$$\begin{aligned}
\psi_{N_i, N_j, k} &= \frac{\psi_{N_i, N_j-1, k} + \psi_{N_i-1, N_j, k}}{2} \quad \forall k \in [2, N_k - 1] \\
\psi_{N_i, N_j, N_k} &= \frac{\psi_{N_i-1, N_j, N_k} + \psi_{N_i, N_j-1, N_k} + \psi_{N_i, N_j, N_k-1}}{3}
\end{aligned}$$

Todas las condiciones de contorno sobre esquinas y lados del paralelepípedo ortogonal de la región fotoactiva son mostradas en la figura I.2.

I.d. Solución aplicando el método numérico de Gauss-Seidel

El método de Gauss-Seidel (GS) converge globalmente y monotonamente con respecto a $\|\cdot\|_\infty$ si el criterio de la suma estricta de la fila

$$\sum_{j=1, j \neq i}^M |a_{ij}| < |a_{ii}| \quad \text{para todo } i=1, M \quad (\text{I.10})$$

se satisface¹⁵⁰. Aplicando el método de Gauss-Seidel como se indica en el diagrama de flujo I.3 sobre el sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales discretizadas (2.30,2.50,2.51), se obtiene la solución del estado estacionario. En la práctica, este diagrama puede ser simplificado cuando se implementa el algoritmo. Además cumplir la condición de convergencia I.10 en la práctica, significa reducir el mallado. La ecuación 2.30 apropiadamente reescrita para aplicar el método de GS conduce a la ecuación I.11. En condiciones de equilibrio $p_{i,j,k} - n_{i,j,k} + C_{i,j,k} = 0$ para todo i, j, k . Con lo que en primera instancia se resuelve la ecuación de Laplace por el método de Gauss-Seidel. A partir del potencial de Laplace se determina con el modelo de movilidad escogida la movilidad de electrones y huecos.

$$\begin{aligned} \psi_{i,j,k} = & \left[\frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_i} \psi_{i+1,j,k} + \frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_{i-1}} \psi_{i-1,j,k} + \frac{4\delta_{x_i}\delta_{z_k}}{\Delta y_j} \psi_{i,j+1,k} + \frac{4\delta_{x_i}\delta_{z_k}}{\Delta y_{j-1}} \psi_{i,j-1,k} + \right. \\ & \left. \frac{4\delta_{x_i}\delta_{y_j}}{\Delta z_k} \psi_{i,j,k+1} + \frac{4\delta_{x_i}\delta_{y_j}}{\Delta z_{k-1}} \psi_{i,j,k-1} + 8\delta_{x_i}\delta_{y_j}\delta_{z_k} (p_{i,j,k} - n_{i,j,k} + C_{i,j,k}) \right] \cdot \\ & \left[\left(\frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_i} + \frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_{i-1}} \right) + \left(\frac{4\delta_{x_i}\delta_{z_k}}{\Delta y_j} + \frac{4\delta_{x_i}\delta_{z_k}}{\Delta y_{j-1}} \right) + \left(\frac{4\delta_{x_i}\delta_{y_j}}{\Delta z_k} + \frac{4\delta_{x_i}\delta_{y_j}}{\Delta z_{k-1}} \right) \right]^{-1} \quad (\text{I.11}) \end{aligned}$$

El siguiente paso es aplicar el método de Gauss-Seidel a la carga. Para ello convertimos la ecuación 2.50 en la ecuación I.12 y la ecuación 2.51 en la ecuación I.13.

$$n_{i,j,k} = \left[\mu_n |_{i+\frac{1}{2},j,k} (\psi_{i+1,j,k}, \psi_{i,j,k}) B \left(\frac{\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{V_T} \right) \frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_i} n_{i+1,j,k} \right]$$

$$\begin{aligned}
& +\mu_n|_{i-\frac{1}{2},j,k}(\psi_{i-1,j,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i-1,j,k}-\psi_{i,j,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_{i-1}}n_{i-1,j,k} \\
& +\mu_n|_{i,j+\frac{1}{2},k}(\psi_{i,j+1,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j+1,k}-\psi_{i,j,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{z_k}}{\Delta y_j}n_{i,j+1,k} \\
& +\mu_n|_{i,j-\frac{1}{2},k}(\psi_{i,j-1,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j-1,k}-\psi_{i,j,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{z_k}}{\Delta y_{j-1}}n_{i,j-1,k} \\
& +\mu_n|_{i,j,k+\frac{1}{2}}(\psi_{i,j,k+1}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k+1}-\psi_{i,j,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{y_j}}{\Delta z_k}n_{i,j,k+1} \\
& +\mu_n|_{i,j,k-\frac{1}{2}}(\psi_{i,j,k-1}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k-1}-\psi_{i,j,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{y_j}}{\Delta z_{k-1}}n_{i,j,k-1} \\
& -\frac{8\delta_{x_i}\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{V_T}R_{i,j,k}\left]\cdot\left[\mu_n|_{i+\frac{1}{2},j,k}(\psi_{i+1,j,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i+1,j,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_i}+\right. \\
& \quad \mu_n|_{i-\frac{1}{2},j,k}(\psi_{i-1,j,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i-1,j,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_{i-1}}+ \\
& \quad \mu_n|_{i,j+\frac{1}{2},k}(\psi_{i,j+1,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i,j+1,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{z_k}}{\Delta y_j}+ \\
& \quad \mu_n|_{i,j-\frac{1}{2},k}(\psi_{i,j-1,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i,j-1,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{z_k}}{\Delta y_{j-1}}+ \\
& \quad \mu_n|_{i,j,k+\frac{1}{2}}(\psi_{i,j,k+1}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i,j,k+1}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{y_j}}{\Delta z_k}+ \\
& \quad \left.\mu_n|_{i,j,k-\frac{1}{2}}(\psi_{i,j,k-1}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i,j,k-1}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{y_j}}{\Delta z_{k-1}}\right]^{-1} \tag{I.12} \\
p_{i,j,k} & =\left[\mu_p|_{i+\frac{1}{2},j,k}(\psi_{i+1,j,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i+1,j,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_i}p_{i+1,j,k}\right. \\
& +\mu_p|_{i-\frac{1}{2},j,k}(\psi_{i-1,j,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i-1,j,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_{i-1}}p_{i-1,j,k} \\
& +\mu_p|_{i,j+\frac{1}{2},k}(\psi_{i,j+1,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i,j+1,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{z_k}}{\Delta y_j}p_{i,j+1,k} \\
& +\mu_p|_{i,j-\frac{1}{2},k}(\psi_{i,j-1,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i,j-1,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{z_k}}{\Delta y_{j-1}}p_{i,j-1,k} \\
& +\mu_p|_{i,j,k+\frac{1}{2}}(\psi_{i,j,k+1}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i,j,k+1}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{y_j}}{\Delta z_k}p_{i,j,k+1} \\
& +\mu_p|_{i,j,k-\frac{1}{2}}(\psi_{i,j,k-1}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i,j,k-1}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{x_i}\delta_{y_j}}{\Delta z_{k-1}}p_{i,j,k-1} \\
& -\frac{8\delta_{x_i}\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{V_T}R_{i,j,k}\left]\cdot\left[\mu_n|_{i+\frac{1}{2},j,k}(\psi_{i+1,j,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i+1,j,k}-\psi_{i,j,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_i}\right. \\
& \quad \left.+\mu_n|_{i-\frac{1}{2},j,k}(\psi_{i+1,j,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i-1,j,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta x_{i-1}}\right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\mu_n|_{i,j+\frac{1}{2},k}(\psi_{i+1,j,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j+1,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta y_j} \\
& +\mu_n|_{i,j-\frac{1}{2},k}(\psi_{i-1,j,k}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{y_j}\delta_{z_k}}{\Delta y_{j-1}} \\
& +\mu_n|_{i,j,k+\frac{1}{2}}(\psi_{i,j,k+1}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k+1}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{y_j}\delta_{x_i}}{\Delta z_k} \\
& +\mu_n|_{i,j,k-\frac{1}{2}}(\psi_{i,j,k-1}, \psi_{i,j,k})B\left(\frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1}}{V_T}\right)\frac{4\delta_{y_j}\delta_{x_i}}{\Delta z_{k-1}}\Big]^{-1} \tag{I.13}
\end{aligned}$$

Tras determinar la carga, el siguiente paso es obtener el potencial nuevamente, pero en este caso si resolvemos la ecuación de Poisson. Lo hacemos empleando el método de Gauss-Seidel sobre la ecuación I.11 con la carga obtenida. Después comparamos esta solución con la obtenida de Laplace. Si la divergencia entre soluciones es mayor que una tolerancia entre ambas, elegida por nosotros, con el nuevo potencial calculado determinamos la movilidad y volvemos a calcular la carga. Repetiremos este proceso tantas veces sea necesario hasta obtener un grado de convergencia aceptable sobre el potencial. Hay que tener en cuenta, que en cada cálculo de la carga usamos la última solución del potencial dado por Poisson. Además, cada potencial obtenido de Poisson es comparado con el que se había obtenido antes de la solución de esta ecuación, de modo que como se ha dicho, la convergencia que detiene el proceso de simulación es impuesta solamente sobre el potencial.

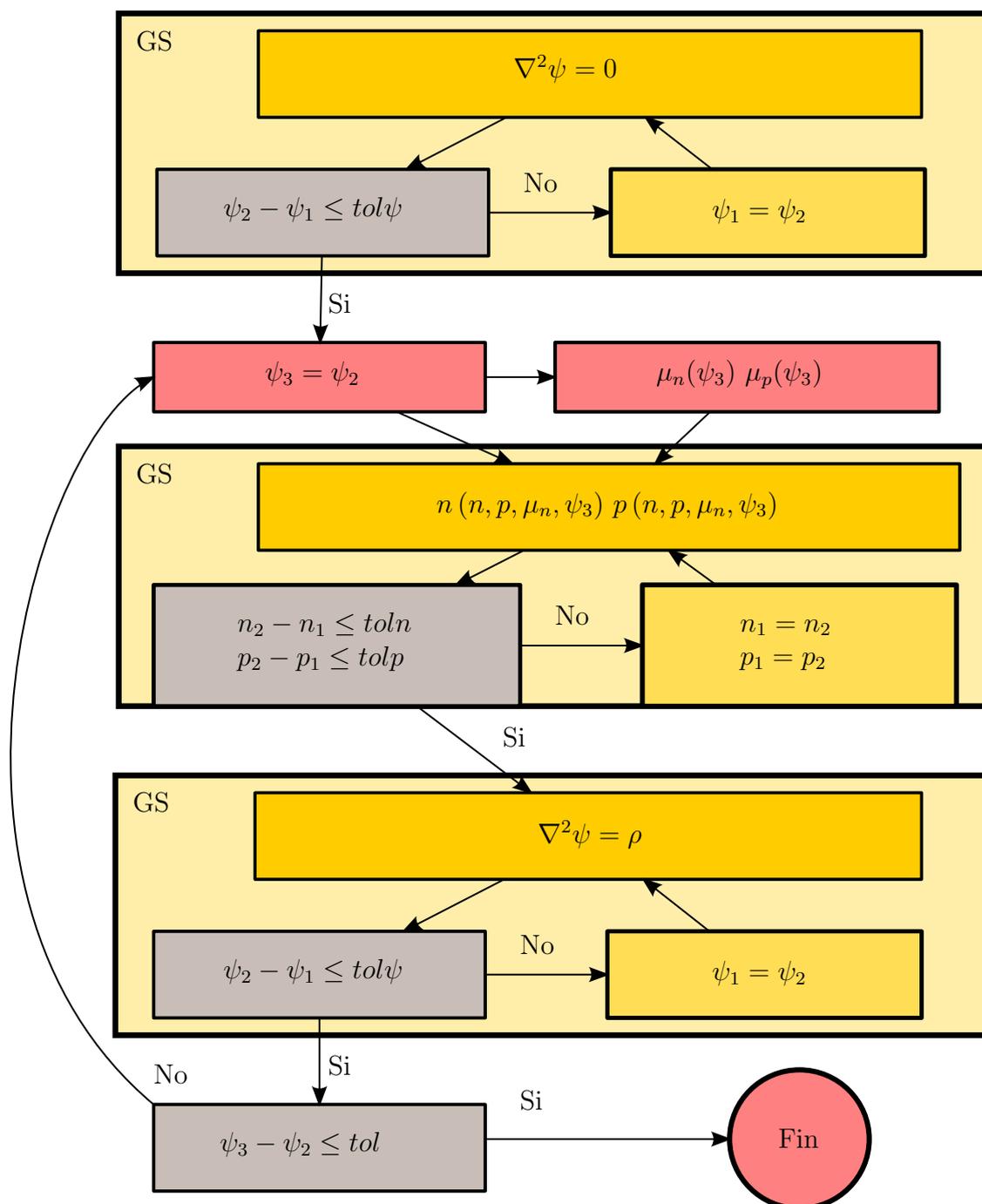


Figura I.3: Diagrama de flujo del algoritmo de resolución del estado estacionario empleando el método de Gauss-Seidel.

Anexo II

Notas Matemáticas

II.a. Funciones especiales	200
II.a.1. La función hermite-gausiana	200
II.a.2. La función laguerre-gausiana	200
II.b. Estimación de FWHM espacial	200
II.c. Magnitudes empleadas en la discretización de las ecuaciones diferenciales	200
II.c.1. El operador de Bernoulli \mathbb{B}	203
II.c.2. Las matrices de Bernoulli y otras magnitudes auxiliares	204
II.d. Los coeficientes $\bar{C}a(\vec{r}, t)$ y $\bar{C}b(\vec{r}, t)$ en la región fotoactiva . .	205
II.e. Divergencia de la densidad de corriente	207

II.a. Funciones especiales

Estas funciones fueron definidas aquí para complementar el apartado 3.1.

II.a.1. La función hermite-gausiana

Sean los polinomios de Hermite¹⁵¹ $\mathbb{H}_l(u)$ $l = 0, 1, 2, \dots$ que se definen recursivamente a partir de la expresión $\mathbb{H}_{l+1}(u) = 2u\mathbb{H}_l(u) - 2l\mathbb{H}_{l-1}(u)$ con $\mathbb{H}_0(u) = 1$ y $\mathbb{H}_1(u) = 2u$, permiten definir la función de hermite-gausiana¹¹² como:

$$\mathbb{G}_l(u) = \mathbb{H}_l(u)e^{-\left(\frac{u}{\sqrt{2}}\right)^2} \quad (\text{II.1})$$

II.a.2. La función laguerre-gausiana

Sean los polinomios de Laguerre¹⁵¹ dados por la formula de Rodriguez $\mathbb{L}_{l,m}(x) = \frac{x^{-l}e^x}{m!} \frac{d^m}{dx^m}(x^{m+l}e^{-x})$, permiten definir la función de laguerre-gausiana¹¹² como:

$$\mathbb{Q}_{l,m}(u) = u^l e^{-u^2} \mathbb{L}_{l,m}(2u^2) \quad (\text{II.2})$$

II.b. Estimación de FWHM espacial

Como buena estimación de FWHM espacial de acuerdo al estándar ISO 11146 se sugiere¹¹¹ emplear el segundo momento de la distribución de la intensidad óptica cuando $z=0$, de modo que:

$$(\sigma_x^*, \sigma_y^*) = \left(\sqrt{\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 I_1(x, y) dx dy}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} I_1(x, y) dx dy}}, \sqrt{\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y^2 I_1(x, y) dx dy}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} I_1(x, y) dx dy}} \right) \quad (\text{II.3})$$

II.c. Magnitudes empleadas en la discretización de las ecuaciones diferenciales

En un mallado compuesto por hexaedros uniformes regulares o no, tomado un nodo cualquiera del mismo, se define una magnitud de conexión a primer orden (MCPO) como una matriz cuadrada de orden tres que contiene a la magnitud localizada en el

nodo escogido y al conjunto de magnitudes que rodean a esta, de forma tal, que los caminos de conexión entre nodos coinciden con el mallado. Geométricamente hablando, si escogemos en nodo (i,j,k) del mallado estos caminos de conexión serían los ilustrados por la figura II.1 y toda magnitud \tilde{M} definida como:

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} \bar{M}_1 \\ \bar{M}_2 \\ \bar{M}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{i+1,j,k} & M_{i,j,k} & M_{i-1,j,k} \\ M_{i,j+1,k} & M_{i,j,k} & M_{i,j-1,k} \\ M_{i,j,k+1} & M_{i,j,k} & M_{i,j,k-1} \end{pmatrix} \quad (II.4)$$

es una magnitud de conexión a primer orden y a su vez las magnitudes

$$\bar{M}_1 = (M_{i+1,j,k}, M_{i,j,k}, M_{i-1,j,k}),$$

$$\bar{M}_2 = (M_{i,j+1,k}, M_{i,j,k}, M_{i,j-1,k}) \text{ y}$$

$$\bar{M}_3 = (M_{i,j,k+1}, M_{i,j,k}, M_{i,j,k-1})$$

son magnitudes de conexión direccional de primer orden en el eje X, Y y Z respectivamente. Estas son matrices fila de tres elementos contienen al nodo en si y a sus vecinos en la dirección de los ejes citados. Se pueden transponer para formar una matriz columna.

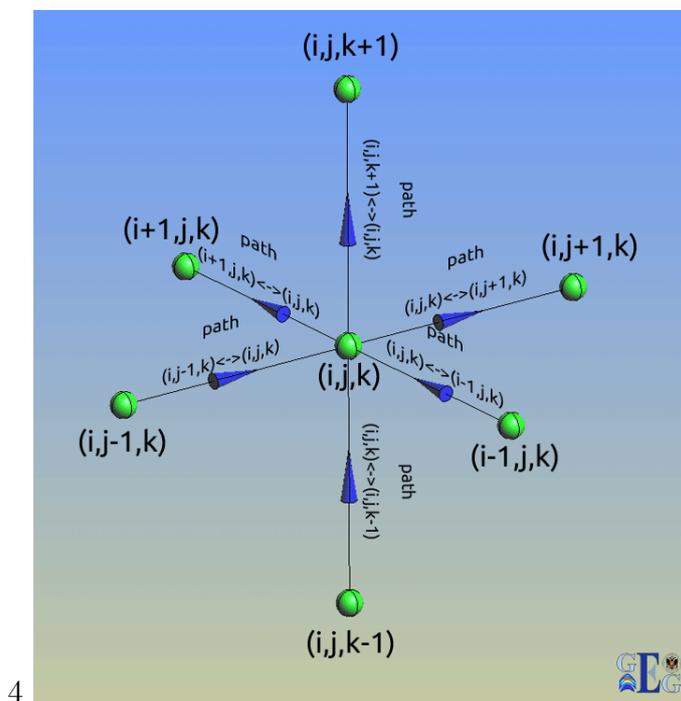


Figura II.1: Estructura de una magnitud de conexión de primer orden.

A partir de la definición anterior se definen las magnitudes de conexión a primer orden \tilde{n}^m , $\tilde{n}^{m+\frac{1}{2}}$, \tilde{p}^m , $\tilde{p}^{m+\frac{1}{2}}$ como:

$$\tilde{n}^m = \begin{pmatrix} \bar{n}_1^m \\ \bar{n}_2^m \\ \bar{n}_3^m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_{i+1,j,k}^m & n_{i,j,k}^m & n_{i-1,j,k}^m \\ n_{i,j+1,k}^m & n_{i,j,k}^m & n_{i,j-1,k}^m \\ n_{i,j,k+1}^m & n_{i,j,k}^m & n_{i,j,k-1}^m \end{pmatrix} \quad (\text{II.5})$$

$$\tilde{p}^m = \begin{pmatrix} \bar{p}_1^m \\ \bar{p}_2^m \\ \bar{p}_3^m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{i+1,j,k}^m & p_{i,j,k}^m & p_{i-1,j,k}^m \\ p_{i,j+1,k}^m & p_{i,j,k}^m & p_{i,j-1,k}^m \\ p_{i,j,k+1}^m & p_{i,j,k}^m & p_{i,j,k-1}^m \end{pmatrix} \quad (\text{II.6})$$

$$\tilde{n}^{m+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \bar{n}_1^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{n}_2^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{n}_3^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_{i+1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} & n_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} & n_{i-1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \\ n_{i,j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} & n_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} & n_{i,j-1,k}^{m+\frac{1}{2}} \\ n_{i,j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} & n_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} & n_{i,j,k-1}^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.7})$$

$$\tilde{p}^{m+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \bar{p}_1^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{p}_2^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{p}_3^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{i+1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} & p_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} & p_{i-1,j,k}^{m+\frac{1}{2}} \\ p_{i,j+1,k}^{m+\frac{1}{2}} & p_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} & p_{i,j-1,k}^{m+\frac{1}{2}} \\ p_{i,j,k+1}^{m+\frac{1}{2}} & p_{i,j,k}^{m+\frac{1}{2}} & p_{i,j,k-1}^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.8})$$

Nuevamente en un mallado compuesto por hexaedros uniformes regulares o no, tomado un nodo cualquiera del mismo, se define una magnitud ausente rodeada de conexiones a primer orden (MARCPO) como una matriz 2x3 que no conteniendo a la magnitud localizada en el nodo escogido, contiene al conjunto de seis magnitudes localizadas en los nodos vecinos de primer orden. Geométricamente hablando, si escogemos en nodo (i,j,k) del mallado estos caminos de conexión serían los ilustrados por la figura II.1 y toda magnitud \tilde{M} definida como:

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} \bar{M}_1 \\ \bar{M}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{i+1,j,k} & M_{i,j+1,k} & M_{i,j,k+1} \\ M_{i-1,j,k} & M_{i,j-1,k} & M_{i,j,k-1} \end{pmatrix} \quad (\text{II.9})$$

es una magnitud ausente rodeada de conexiones a primer orden.

A partir de la definición anterior, se definen las magnitudes ausentes rodeadas de conexiones a primer orden \tilde{d} , $\tilde{\mu}_n$, $\tilde{\mu}_p$, $\tilde{\mu}_n^*$ y $\tilde{\mu}_n^*$ como:

$$\tilde{d} = \begin{pmatrix} \bar{d}_1 \\ \bar{d}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{i+1,j,k} & d_{i,j+1,k} & d_{i,j,k+1} \\ d_{i-1,j,k} & d_{i,j-1,k} & d_{i,j,k-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\delta_{x_i}^{-1}}{\Delta x_i} & \frac{\delta_{y_j}^{-1}}{\Delta y_j} & \frac{\delta_{z_k}^{-1}}{\Delta z_k} \\ \frac{\delta_{x_i}^{-1}}{\Delta x_{i-1}} & \frac{\delta_{y_j}^{-1}}{\Delta y_{j-1}} & \frac{\delta_{z_k}^{-1}}{\Delta z_{k-1}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.10})$$

$$\tilde{\mu}_n = \begin{pmatrix} \bar{\mu}_{n_1} \\ \bar{\mu}_{n_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_n|_{i+\frac{1}{2},j,k} & \mu_n|_{i,j+\frac{1}{2},k} & \mu_n|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \\ \mu_n|_{i-\frac{1}{2},j,k} & \mu_n|_{i,j-\frac{1}{2},k} & \mu_n|_{i,j,k-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.11})$$

$$\tilde{\mu}_p = \begin{pmatrix} \bar{\mu}_{p_1} \\ \bar{\mu}_{p_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_p|_{i+\frac{1}{2},j,k} & \mu_p|_{i,j+\frac{1}{2},k} & \mu_p|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \\ \mu_p|_{i-\frac{1}{2},j,k} & \mu_p|_{i,j-\frac{1}{2},k} & \mu_p|_{i,j,k-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.12})$$

$$\tilde{\mu}_n^* = \begin{pmatrix} \bar{\mu}_{n_1}^* \\ \bar{\mu}_{n_2}^* \end{pmatrix} = \tilde{d} \odot \tilde{\mu}_n = \begin{pmatrix} d_{i+1,j,k} \mu_{n_{i+1,j,k}} & d_{i,j+1,k} \mu_{n_{i,j+1,k}} & d_{i,j,k+1} \mu_{n_{i,j,k+1}} \\ d_{i-1,j,k} \mu_{n_{i-1,j,k}} & d_{i,j-1,k} \mu_{n_{i,j-1,k}} & d_{i,j,k-1} \mu_{n_{i,j,k-1}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.13})$$

$$\tilde{\mu}_p^* = \begin{pmatrix} \bar{\mu}_{p_1}^* \\ \bar{\mu}_{p_2}^* \end{pmatrix} = \tilde{d} \odot \tilde{\mu}_p = \begin{pmatrix} d_{i+1,j,k} \mu_{p_{i+1,j,k}} & d_{i,j+1,k} \mu_{p_{i,j+1,k}} & d_{i,j,k+1} \mu_{p_{i,j,k+1}} \\ d_{i-1,j,k} \mu_{p_{i-1,j,k}} & d_{i,j-1,k} \mu_{p_{i,j-1,k}} & d_{i,j,k-1} \mu_{p_{i,j,k-1}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.14})$$

Notar que en la definición de $\tilde{\mu}_n^*$ y $\tilde{\mu}_p^*$ se ha usado el producto \odot definido en I.b. Se definen las MARCPO \tilde{E}^m y $\tilde{E}^{m+\frac{1}{2}}$ como:

$$\tilde{E}^m = \begin{pmatrix} \bar{E}_1^m \\ \bar{E}_2^m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m & E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^m & E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^m \\ E_x|_{i-\frac{1}{2},j,k}^m & E_y|_{i,j-\frac{1}{2},k}^m & E_z|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^m \end{pmatrix} \quad (\text{II.15})$$

$$\tilde{E}^{m+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \bar{E}_1^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{E}_2^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} & E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} & E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\ E_x|_{i-\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} & E_y|_{i,j-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} & E_z|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.16})$$

II.c.1. El operador de Bernoulli \mathbb{B}

Este operador se define a partir de la función de Bernoulli introducida en 2.37 con el fin de compactar la notación.

Dada la función real de variable real llamada de Bernoulli

$$\begin{aligned} \mathbb{B} : \mathfrak{R} &\rightarrow \mathfrak{R} \\ x &\rightarrow B(x) = \frac{x}{e^x - 1} \end{aligned}$$

Se define el operador \mathbb{B} llamado de Bernoulli: como aquel que asocia a $\bar{x} \in \mathfrak{R}^n$ un

$$\begin{aligned} \mathbb{B} : \mathfrak{R}^n &\rightarrow \mathfrak{R}^n \\ \bar{x} &\rightarrow \mathbb{B}(\bar{x}) = (B(x_1), \dots, B(x_n)) \end{aligned}$$

$\bar{y} \in \mathfrak{R}^n$; $\bar{y} = \mathbb{B}(\bar{x})$ de modo que cada elemento de \bar{y} resulta de la aplicación de la función de Bernoulli sobre cada elemento de \bar{x} , así $\bar{y} = (y_1 = B(x_1), \dots, y_n = B(x_n))$.

II.c.2. Las matrices de Bernoulli y otras magnitudes auxiliares

Además de las magnitudes definidas, existen otras de carácter matricial, necesarias para llegar a las que llamaremos matrices de Bernoulli. Se define $\tilde{\Lambda}$ como:

$$\tilde{\Lambda} = \begin{pmatrix} \bar{\Lambda}_1 \\ \bar{\Lambda}_2 \\ \bar{\Lambda}_3 \\ \bar{\Lambda}_4 \end{pmatrix} = V_T^{-1} \begin{pmatrix} -\Delta x_i & -\Delta y_j & -\Delta z_k \\ \Delta x_i & \Delta y_j & \Delta z_k \\ -\Delta x_{i-1} & -\Delta y_{j-1} & -\Delta z_{k-1} \\ \Delta x_{i-1} & \Delta y_{j-1} & \Delta z_{k-1} \end{pmatrix} \quad (\text{II.17})$$

Esta magnitud que posee unidades de inversa de campo eléctrico, permite definir dos magnitudes auxiliares de extrema importancia para definir las matrices de Bernoulli, estas magnitudes son $\tilde{\zeta}_n$ y $\tilde{\zeta}_p$ que se definen como:

$$\tilde{\zeta}_n^m = \begin{pmatrix} \bar{\zeta}_{n_1}^m \\ \bar{\zeta}_{n_2}^m \\ \bar{\zeta}_{n_3}^m \\ \bar{\zeta}_{n_4}^m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\mu}_{n_1}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_1 \odot \bar{E}_1^m) \\ \bar{\mu}_{n_1}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_2 \odot \bar{E}_1^m) \\ \bar{\mu}_{n_2}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_3 \odot \bar{E}_2^m) \\ \bar{\mu}_{n_2}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_4 \odot \bar{E}_2^m) \end{pmatrix} \quad (\text{II.18})$$

$$\tilde{\zeta}_p^m = \begin{pmatrix} \bar{\zeta}_{p_1}^m \\ \bar{\zeta}_{p_1}^m \\ \bar{\zeta}_{p_1}^m \\ \bar{\zeta}_{p_1}^m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\mu}_{p_1}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_1 \odot \bar{E}_1^m) \\ \bar{\mu}_{p_1}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_2 \odot \bar{E}_1^m) \\ \bar{\mu}_{p_2}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_3 \odot \bar{E}_2^m) \\ \bar{\mu}_{p_2}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_4 \odot \bar{E}_2^m) \end{pmatrix} \quad (\text{II.19})$$

$$\tilde{\zeta}_n^{m+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \bar{\zeta}_{n_1}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\zeta}_{n_2}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\zeta}_{n_3}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\zeta}_{n_4}^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\mu}_{n_1}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_1 \odot \bar{E}_1^{m+\frac{1}{2}}) \\ \bar{\mu}_{n_1}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_2 \odot \bar{E}_1^{m+\frac{1}{2}}) \\ \bar{\mu}_{n_2}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_3 \odot \bar{E}_2^{m+\frac{1}{2}}) \\ \bar{\mu}_{n_2}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_4 \odot \bar{E}_2^{m+\frac{1}{2}}) \end{pmatrix} \quad (\text{II.20})$$

$$\tilde{\zeta}_p^{m+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \bar{\zeta}_{p_1}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\zeta}_{p_1}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\zeta}_{p_1}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\zeta}_{p_1}^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\mu}_{p_1}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_1 \odot \bar{E}_1^{m+\frac{1}{2}}) \\ \bar{\mu}_{p_1}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_2 \odot \bar{E}_1^{m+\frac{1}{2}}) \\ \bar{\mu}_{p_2}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_3 \odot \bar{E}_2^{m+\frac{1}{2}}) \\ \bar{\mu}_{p_2}^* \odot \mathbb{B} (\bar{\Lambda}_4 \odot \bar{E}_2^{m+\frac{1}{2}}) \end{pmatrix} \quad (\text{II.21})$$

Es de destacar que en la definición de estas variables se ha empleado el operador de Bernoulli \mathbb{B} definido en II.c.1 y el producto \odot definido en I.b, y finalmente, a partir de las magnitudes auxiliares (II.18-II.20) se definen las matrices de Bernoulli como:

$$\tilde{\beta}_n^m = \begin{pmatrix} \bar{\beta}_{n1}^m \\ \bar{\beta}_{n2}^m \\ \bar{\beta}_{n3}^m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\zeta}_{n1}^m \\ -\bar{\zeta}_{n2}^m - \bar{\zeta}_{n3}^m \\ \bar{\zeta}_{n4}^m \end{pmatrix} \quad (\text{II.22})$$

$$\tilde{\beta}_p^m = \begin{pmatrix} \bar{\beta}_{p1}^m \\ \bar{\beta}_{p2}^m \\ \bar{\beta}_{p3}^m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\zeta}_{p3}^m \\ -\bar{\zeta}_{p1}^m - \bar{\zeta}_{p4}^m \\ \bar{\zeta}_{p2}^m \end{pmatrix} \quad (\text{II.23})$$

$$\tilde{\beta}_n^{m+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \bar{\beta}_{n1}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\beta}_{n2}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\beta}_{n3}^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\zeta}_{n1}^{m+\frac{1}{2}} \\ -\bar{\zeta}_{n2}^{m+\frac{1}{2}} - \bar{\zeta}_{n3}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\zeta}_{n4}^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.24})$$

$$\tilde{\beta}_p^{m+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \bar{\beta}_{p1}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\beta}_{p2}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\beta}_{p3}^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\zeta}_{p3}^{m+\frac{1}{2}} \\ -\bar{\zeta}_{p1}^{m+\frac{1}{2}} - \bar{\zeta}_{p4}^{m+\frac{1}{2}} \\ \bar{\zeta}_{p2}^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.25})$$

II.d. Los coeficientes $\bar{C}a(\vec{r}, t)$ y $\bar{C}b(\vec{r}, t)$ en la región fotoactiva

La ecuación 3.42 temporalmente discretizada se puede escribir como:

$$\frac{\vec{E}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{E}^{m-\frac{1}{2}}}{\Delta_t} = \varepsilon^{-1} \left(\vec{\nabla} \wedge \vec{H}^m - \vec{J}_s^m - (\bar{\sigma}^m + \bar{\sigma}_0) \odot \frac{\vec{E}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{E}^{m-\frac{1}{2}}}{2} \right) \quad (\text{II.26})$$

Donde $\vec{J}_s^m = \bar{\sigma}^m \odot \vec{E}_0 + qV_T (\bar{\mu}_n \odot \vec{\nabla} n^m - \bar{\mu}_p \odot \vec{\nabla} p^m)$. Si ahora se discretiza espacialmente la componente X de esta expresión:

$$\frac{E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} - E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}}}{\Delta_t} =$$

$$\varepsilon^{-1} \left[\frac{H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - H_z|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^m}{\delta_{y_j}} - \frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^m}{\delta_{z_k}} - J_{sx}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m - \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) \frac{E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} + E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}}}{2} \right]$$

con una corriente,

$$J_{sx}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = \sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m E_{0x}|_{i+\frac{1}{2},j,k} + qV_T \left(\frac{\mu_n|_{i+\frac{1}{2},j,k} (n_{i+1,j,k}^m - n_{i,j,k}^m) - \mu_p|_{i+\frac{1}{2},j,k} (p_{i+1,j,k}^m - p_{i,j,k}^m)}{\Delta x_i} \right),$$

la conductividad,

$$\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = q(\mu_n|_{i+\frac{1}{2},j,k} n_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \mu_p|_{i+\frac{1}{2},j,k} p_{i+\frac{1}{2},j,k}^m)$$

y la estacionaria,

$$\sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} = q(\mu_n|_{i+\frac{1}{2},j,k} n_{0,i+\frac{1}{2},j,k} + \mu_p|_{i+\frac{1}{2},j,k} p_{0,i+\frac{1}{2},j,k}).$$

Reagrupando se llega a la expresión:

$$\left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2\varepsilon} \right) E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m+\frac{1}{2}} = \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2\varepsilon} \right) E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{m-\frac{1}{2}} + \varepsilon^{-1} \left[\frac{H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^m - H_z|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^m}{\delta_{y_j}} - \frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^m - H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^m}{\delta_{z_k}} - J_{sx}|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m \right]$$

De la que es fácil obtener:

$$Ca_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = \frac{2\varepsilon - \Delta t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right)}{2\varepsilon + \Delta t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right)}$$

$$Cb_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = \frac{2\Delta t}{2\varepsilon + \Delta t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right)}$$

Para obtener los coeficientes en las componentes Y y Z, se procede de igual modo. No obstante, estos coeficientes pueden ser origen de inestabilidades numéricas cuando Ca es menor que cero. Para evitarlo se hace la transformación de coeficientes de acuerdo a la bibliografía¹⁵², si $2\varepsilon < \Delta_t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right)$ entonces:

$$Ca_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = e^{-\left(\frac{\Delta_t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right)}{\varepsilon} \right)}$$

$$Cb_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^m = \frac{1 - e^{-\left(\frac{\Delta_t \left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right)}{\varepsilon} \right)}}{\left(\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k}^m + \sigma_0|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right)}$$

II.e. Divergencia de la densidad de corriente

La divergencia de la densidad de corriente se calcula mediante las componentes conocidas, los campos y concentraciones de cargas, con la ayuda de la función de Bernoulli $B(x) = \frac{x}{e^x - 1}$. Para la divergencia de la concentración por electrones podemos escribir:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n|_{i,j,k} = & \frac{\mu_n|_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \delta_{x_i}} \left(B \left(\frac{-\Delta x_i}{V_T} Ex|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) n_{i+1,j,k} - B \left(\frac{\Delta x_i}{V_T} Ex|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) n_{i,j,k} \right) \\ & - \frac{\mu_n|_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \delta_{x_i}} \left(B \left(\frac{-\Delta x_{i-1}}{V_T} Ex|_{i-\frac{1}{2},j,k} \right) n_{i,j,k} - B \left(\frac{\Delta x_{i-1}}{V_T} Ex|_{i-\frac{1}{2},j,k} \right) n_{i-1,j,k} \right) \\ & + \frac{\mu_n|_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \delta_{y_j}} \left(B \left(\frac{-\Delta y_j}{V_T} Ey|_{i,j+\frac{1}{2},k} \right) n_{i,j+1,k} - B \left(\frac{\Delta y_j}{V_T} Ey|_{i,j+\frac{1}{2},k} \right) n_{i,j,k} \right) \\ & - \frac{\mu_n|_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \delta_{y_j}} \left(B \left(\frac{-\Delta y_{j-1}}{V_T} Ey|_{i,j-\frac{1}{2},k} \right) n_{i,j,k} - B \left(\frac{\Delta y_{j-1}}{V_T} Ey|_{i,j-\frac{1}{2},k} \right) n_{i,j-1,k} \right) \\ & + \frac{\mu_n|_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \delta_{z_k}} \left(B \left(\frac{-\Delta z_k}{V_T} Ez|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right) n_{i,j,k+1} - B \left(\frac{\Delta z_k}{V_T} Ez|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right) n_{i,j,k} \right) \\ & - \frac{\mu_n|_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \delta_{z_k}} \left(B \left(\frac{-\Delta z_{k-1}}{V_T} Ez|_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right) n_{i,j,k} - B \left(\frac{\Delta z_{k-1}}{V_T} Ez|_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right) n_{i,j,k-1} \right) \end{aligned} \quad (\text{II.27})$$

Mientras que para los huecos:

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p|_{i,j,k} = & \\
& \frac{\mu_p|_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \delta_{x_i}} \left(B \left(\frac{-\Delta x_i}{V_T} Ex|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) p_{i,j,k} - B \left(\frac{\Delta x_i}{V_T} Ex|_{i+\frac{1}{2},j,k} \right) p_{i+1,j,k} \right) \\
& - \frac{\mu_p|_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \delta_{x_i}} \left(B \left(\frac{-\Delta x_{i-1}}{V_T} Ex|_{i-\frac{1}{2},j,k} \right) p_{i-1,j,k} - B \left(\frac{\Delta x_{i-1}}{V_T} Ex|_{i-\frac{1}{2},j,k} \right) p_{i,j,k} \right) \\
& + \frac{\mu_p|_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \delta_{y_j}} \left(B \left(\frac{-\Delta y_j}{V_T} Ey|_{i,j+\frac{1}{2},k} \right) p_{i,j,k} - B \left(\frac{\Delta y_j}{V_T} Ey|_{i,j+\frac{1}{2},k} \right) p_{i,j+1,k} \right) \\
& - \frac{\mu_p|_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \delta_{y_j}} \left(B \left(\frac{-\Delta y_{j-1}}{V_T} Ey|_{i,j-\frac{1}{2},k} \right) p_{i,j-1,k} - B \left(\frac{\Delta y_{j-1}}{V_T} Ey|_{i,j-\frac{1}{2},k} \right) p_{i,j,k} \right) \\
& + \frac{\mu_p|_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \delta_{z_k}} \left(B \left(\frac{-\Delta z_k}{V_T} Ez|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right) p_{i,j,k} - B \left(\frac{\Delta z_k}{V_T} Ez|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right) p_{i,j,k+1} \right) \\
& - \frac{\mu_p|_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \delta_{z_k}} \left(B \left(\frac{-\Delta z_{k-1}}{V_T} Ez|_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right) p_{i,j,k-1} - B \left(\frac{\Delta z_{k-1}}{V_T} Ez|_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right) p_{i,j,k} \right) \quad (\text{II.28})
\end{aligned}$$

En ambas expresiones, no nos referimos a campos transitorios o estacionarios propiamente, pueden ser cualquiera de los dos o una composición de ambos. Igualmente podemos decir de las concentraciones de los portadores de carga. Como calculamos $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{nT}|_{i,j,k} = \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n|_{i,j,k} - \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{n0}|_{i,j,k}$ y $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{pT}|_{i,j,k} = \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p|_{i,j,k} - \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{p0}|_{i,j,k}$, las expresiones II.5-II.8 son agrupaciones de las concentraciones de carga y II.15-II.16 lo son de los campos eléctricos.

Anexo III

Notas Matemáticas

III.a. Tensor de masas efectivas	210
III.b. Movilidades efectivas	211
III.c. Tiempos efectivos de colisión $\bar{\gamma}_n$ y $\bar{\gamma}_p$	211
III.c.1. El operador inversión φ	212
III.d. Deducción de los coeficientes de la discretización temporal de las ecuaciones magnetohidrodinámicas	212

III.a. Tensor de masas efectivas

El tensor de masas efectivas es una forma de incluir la ligadura de acción periódica de los núcleos atómicos del cristal en la masa de los portadores de carga de forma que estos se puedan considerar como partículas libres. A efectos prácticos se interpretan los portadores de carga como partículas libres con diferentes masas dependiendo de la dirección del movimiento en referencia a la orientación de los ejes de la red cristalina.

Para interpretar el significado de una masa inerte expresada como una magnitud tensorial se partirá del concepto de masa derivado de la segunda ley de Newton. La masa es un invariante (si las velocidades son moderadas comparadas con la velocidad de la luz) que aparece como la resistencia que oponen los cuerpos a cambiar su estado de movimiento cuando sobre ellos actúa una fuerza. Siendo una magnitud escalar se concluye que el cuerpo sufre aceleración en la misma dirección y sentido en que se aplica la fuerza causante. Esto es así si existe isotropía. Puede ocurrir, sin embargo, que un objeto material responda de distinta manera al actuar sobre él fuerzas de distinta dirección, acelerándose más en unas direcciones que en otras para fuerzas aplicadas de igual módulo. En esas situaciones no es suficiente un escalar para representar la inercia del cuerpo, se necesita una magnitud capaz de dar cuenta de las distintas direcciones del espacio y sus combinaciones. En el espacio recíproco⁵⁸ las derivadas $m_{ij} = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \right)^{-1}$ nos proporcionan el tensor de masas efectiva:

$$\tilde{m}_n = \hbar^2 \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_x^2} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_x \partial k_y} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_x \partial k_z} \right)^{-1} \\ \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_y \partial k_x} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_y^2} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_y \partial k_z} \right)^{-1} \\ \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_z \partial k_x} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_z \partial k_y} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_z^2} \right)^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{n,xx} & m_{n,xy} & m_{n,xz} \\ m_{n,yx} & m_{n,yy} & m_{n,yz} \\ m_{n,zx} & m_{n,zy} & m_{n,zz} \end{pmatrix} \quad (\text{III.1})$$

$$\tilde{m}_p = \hbar^2 \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial^2 E_p}{\partial k_x^2} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_p}{\partial k_x \partial k_y} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_p}{\partial k_x \partial k_z} \right)^{-1} \\ \left(\frac{\partial^2 E_p}{\partial k_y \partial k_x} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_p}{\partial k_y^2} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_p}{\partial k_y \partial k_z} \right)^{-1} \\ \left(\frac{\partial^2 E_p}{\partial k_z \partial k_x} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_p}{\partial k_z \partial k_y} \right)^{-1} & \left(\frac{\partial^2 E_p}{\partial k_z^2} \right)^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{p,xx} & m_{p,xy} & m_{p,xz} \\ m_{p,yx} & m_{p,yy} & m_{p,yz} \\ m_{p,zx} & m_{p,zy} & m_{p,zz} \end{pmatrix} \quad (\text{III.2})$$

A partir del tensor de masas efectivas se define la masa efectiva de los electrones $\bar{m}_n = (m_{n,xx}, m_{n,yy}, m_{n,zz})$ y huecos $\bar{m}_p = (m_{p,xx}, m_{p,yy}, m_{p,zz})$ respectivamente. De la masa

efectiva se define asimismo la masa efectiva inversa de los electrones \bar{m}_n^* y huecos \bar{m}_p^* como:

$$\bar{m}_n^* = \left(\frac{1}{m_{n,xx}}, \frac{1}{m_{n,yy}}, \frac{1}{m_{n,zz}} \right) \quad (\text{III.3})$$

$$\bar{m}_p^* = \left(\frac{1}{m_{p,xx}}, \frac{1}{m_{p,yy}}, \frac{1}{m_{p,zz}} \right) \quad (\text{III.4})$$

De modo que $\bar{m}_p \odot \bar{m}_p^* = (1, 1, 1)$ y $\bar{m}_n \odot \bar{m}_n^* = (1, 1, 1)$

III.b. Movilidades efectivas

Se define la movilidad efectiva como la inversa de la movilidad definida en el apartado 3.3 del capítulo 3. Así la movilidad efectiva para electrones se define como:

$$\bar{\mu}_n^e(\vec{r}) = \left(\frac{1}{\mu_{n,x}(\vec{r})}, \frac{1}{\mu_{n,y}(\vec{r})}, \frac{1}{\mu_{n,z}(\vec{r})} \right), \quad (\text{III.5})$$

y para huecos

$$\bar{\mu}_p^e(\vec{r}) = \left(\frac{1}{\mu_{p,x}(\vec{r})}, \frac{1}{\mu_{p,y}(\vec{r})}, \frac{1}{\mu_{p,z}(\vec{r})} \right). \quad (\text{III.6})$$

III.c. Tiempos efectivos de colisión $\bar{\gamma}_n$ y $\bar{\gamma}_p$

El tiempo de colisión de una partícula cargada, ya sea un hueco o un electrón no ligado en el interior de un cristal, es el tiempo que pueden desplazarse sin sentir la acción de los potenciales periódicos debidos a los núcleos atómicos y otras acciones a distancia ponderables desde un punto de vista microscópico (como la interacción de los portadores de carga entre sí). Es lo que se conoce como tiempo de vuelo libre. Si en ausencia de campo la movilidad esta contenida en el tensor de masas efectivas, cuando aquí hablamos de tiempo de colisión efectivo hacemos referencia a un valor menor que en ausencia de campo. En relación al apartado anterior III.b, se entiende que estamos corrigiendo el incremento de probabilidad de colisión cuando se aplica un campo que reduce la movilidad y el tiempo de colisión.

El tiempo efectivo de colisión se define como la inversa del tiempo de colisión. Es una

magnitud vectorial en el sentido de que posee diferentes valores en función de la dirección del desplazamiento dentro del cristal. Se define el tiempo efectivo de colisión para huecos como:

$$\bar{\gamma}_p(\vec{r}) = q\bar{m}_p^*(\vec{r}) \odot \bar{\mu}_p^e(\vec{r}) = \left(\frac{1}{\tau_{px}(\vec{r})}, \frac{1}{\tau_{py}(\vec{r})}, \frac{1}{\tau_{pz}(\vec{r})} \right) = \quad (\text{III.7})$$

$$\left(\frac{q}{m_{px}(\vec{r})\mu_{px}(\vec{r})}, \frac{q}{m_{py}(\vec{r})\mu_{py}(\vec{r})}, \frac{q}{m_{pz}(\vec{r})\mu_{pz}(\vec{r})} \right), \quad (\text{III.8})$$

y para electrones

$$\bar{\gamma}_n(\vec{r}) = q\bar{m}_n^*(\vec{r}) \odot \bar{\mu}_n^e(\vec{r}) = \left(\frac{1}{\tau_{nx}(\vec{r})}, \frac{1}{\tau_{ny}(\vec{r})}, \frac{1}{\tau_{nz}(\vec{r})} \right) = \quad (\text{III.9})$$

$$\left(\frac{q}{m_{nx}(\vec{r})\mu_{nx}(\vec{r})}, \frac{q}{m_{ny}(\vec{r})\mu_{ny}(\vec{r})}, \frac{q}{m_{nz}(\vec{r})\mu_{nz}(\vec{r})} \right). \quad (\text{III.10})$$

III.c.1. El operador inversión \wp

Se define el operador \wp llamado de inversión:

$$\begin{aligned} \wp : \mathfrak{R}^n &\rightarrow \mathfrak{R}^n \\ \bar{x} &\rightarrow \wp(\bar{x}) = \left(\frac{1}{x_1}, \dots, \frac{1}{x_n} \right) \end{aligned}$$

Como aquel que asocia a $\bar{x} \in \mathfrak{R}^n$ un $\bar{y} \in \mathfrak{R}^n$; $\bar{y} = \wp(\bar{x})$ de modo que cada elemento de \bar{y} resulta de la aplicación de la inversión de cada elemento de $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n)$, así $\bar{y} = \left(\frac{1}{x_1}, \dots, \frac{1}{x_n} \right)$.

III.d. Deducción de los coeficientes de la discretización temporal de las ecuaciones magnetohidrodinámicas

En el subdominio II las velocidades no existen en el tiempo en que son requeridas por el esquema de avance temporal, y han de ser interpoladas. Tomemos las velocidades $\vec{v}_{II,p}^m = \frac{\vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{v}_{II,p}^{m-\frac{1}{2}}}{2}$ y $\vec{v}_{II,n}^m = \frac{\vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{v}_{II,n}^{m-\frac{1}{2}}}{2}$, y reescribamos la ecuación 6.12 y 6.13 como

sigue:

$$\begin{aligned} \frac{\vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{v}_{II,p}^{m-\frac{1}{2}}}{\Delta_t} + \bar{\gamma}_p \odot \frac{\vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{v}_{II,p}^{m-\frac{1}{2}}}{2} &= q\bar{m}_p^* \odot \left(\vec{E}_{II}^m + \vec{E}_{II,0} + \vec{L}_{II,p}^m \right) \\ &\quad - qV_T \bar{m}_p^* \odot \frac{\vec{\nabla} p_{II}^m}{p_{T,II}^m} - q\bar{m}_p^* \odot \vec{E}_{II,0} \frac{p0_{II}}{p_{T,II}^m} \\ \frac{\vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{v}_{II,n}^{m-\frac{1}{2}}}{\Delta_t} + \bar{\gamma}_n \odot \frac{\vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{v}_{II,n}^{m-\frac{1}{2}}}{2} &= -q\bar{m}_n^* \odot \left(\vec{E}_{II}^m + \vec{E}_{II,0} + \vec{L}_{II,n}^m \right) \\ &\quad - qV_T \bar{m}_n^* \odot \frac{\vec{\nabla} n_{II}^m}{n_{T,II}^m} - q\bar{m}_n^* \odot \vec{E}_{I,0} \frac{n0_{II}}{n_{T,II}^m} \end{aligned}$$

A su vez estas ecuaciones las podemos escribir como:

$$\begin{aligned} [\bar{+}]_p \vec{v}_{II,p}^{m+\frac{1}{2}} + [\bar{-}]_p \vec{v}_{II,p}^{m-\frac{1}{2}} &= q\bar{m}_p^* \odot \left(\vec{E}_{II}^m + \vec{E}_{II,0} + \vec{L}_{II,p}^m \right) \\ &\quad - qV_T \bar{m}_p^* \odot \frac{\vec{\nabla} p_{II}^m}{p_{T,II}^m} - q\bar{m}_p^* \odot \vec{E}_{II,0} \frac{p0_{II}}{p_{T,II}^m} \\ [\bar{+}]_n \vec{v}_{II,n}^{m+\frac{1}{2}} + [\bar{-}]_n \vec{v}_{II,n}^{m-\frac{1}{2}} &= -q\bar{m}_n^* \odot \left(\vec{E}_{II}^m + \vec{E}_{II,0} + \vec{L}_{II,n}^m \right) \\ &\quad - qV_T \bar{m}_n^* \odot \frac{\vec{\nabla} n_{II}^m}{n_{T,II}^m} - q\bar{m}_n^* \odot \vec{E}_{I,0} \frac{n0_{II}}{n_{T,II}^m} \end{aligned}$$

Donde los coeficientes $[\bar{+}]_p$, $[\bar{-}]_p$, $[\bar{-}]_n$ y $[\bar{+}]_n$ son:

$$\begin{aligned} [\bar{+}]_p &= \left(\frac{1}{\Delta_t} + \frac{1}{\tau_{px}}, \frac{1}{\Delta_t} + \frac{1}{\tau_{py}}, \frac{1}{\Delta_t} + \frac{1}{\tau_{pz}} \right) = \left(\frac{\tau_{px} + \Delta_t}{\tau_{px} \Delta_t}, \frac{\tau_{py} + \Delta_t}{\tau_{py} \Delta_t}, \frac{\tau_{pz} + \Delta_t}{\tau_{pz} \Delta_t} \right) \\ [\bar{-}]_p &= \left(\frac{1}{\tau_{px}} - \frac{1}{\Delta_t}, \frac{1}{\tau_{py}} - \frac{1}{\Delta_t}, \frac{1}{\tau_{pz}} - \frac{1}{\Delta_t} \right) = \left(\frac{\Delta_t - \tau_{px}}{\tau_{px} \Delta_t}, \frac{\Delta_t - \tau_{py}}{\tau_{py} \Delta_t}, \frac{\Delta_t - \tau_{pz}}{\tau_{pz} \Delta_t} \right) \\ [\bar{+}]_n &= \left(\frac{1}{\Delta_t} + \frac{1}{\tau_{nx}}, \frac{1}{\Delta_t} + \frac{1}{\tau_{ny}}, \frac{1}{\Delta_t} + \frac{1}{\tau_{nz}} \right) = \left(\frac{\tau_{nx} + \Delta_t}{\tau_{nx} \Delta_t}, \frac{\tau_{ny} + \Delta_t}{\tau_{ny} \Delta_t}, \frac{\tau_{nz} + \Delta_t}{\tau_{nz} \Delta_t} \right) \\ [\bar{-}]_n &= \left(\frac{1}{\tau_{nx}} - \frac{1}{\Delta_t}, \frac{1}{\tau_{ny}} - \frac{1}{\Delta_t}, \frac{1}{\tau_{nz}} - \frac{1}{\Delta_t} \right) = \left(\frac{\Delta_t - \tau_{nx}}{\tau_{nx} \Delta_t}, \frac{\Delta_t - \tau_{ny}}{\tau_{ny} \Delta_t}, \frac{\Delta_t - \tau_{nz}}{\tau_{nz} \Delta_t} \right) \end{aligned}$$

A partir de estos coeficientes es posible escribir los coeficientes de la ecuación diferencial 6.12 de un modo más elegante como:

$$\begin{aligned}
\bar{\Lambda}_{A,p} &= -\wp \left([\bar{+}]_p \right) \odot [\bar{-}]_p = \left(\frac{\tau_{px} - \Delta_t}{\tau_{px} + \Delta_t}, \frac{\tau_{py} - \Delta_t}{\tau_{py} + \Delta_t}, \frac{\tau_{pz} - \Delta_t}{\tau_{pz} + \Delta_t} \right) \\
\bar{\Lambda}_{B,p} &= q\bar{\Lambda}_{A,p} \odot \bar{m}_p^* = \left(\frac{q(\tau_{px} - \Delta_t)}{m_{p,xx}(\tau_{px} + \Delta_t)}, \frac{q(\tau_{py} - \Delta_t)}{m_{p,yy}(\tau_{py} + \Delta_t)}, \frac{q(\tau_{pz} - \Delta_t)}{m_{p,zz}(\tau_{pz} + \Delta_t)} \right) \\
\bar{\Lambda}_{C,p} &= -qV_T\bar{\Lambda}_{A,p} \odot \bar{m}_p^* = \left(\frac{qV_T(\Delta_t - \tau_{px})}{m_{p,xx}(\tau_{px} + \Delta_t)}, \frac{qV_T(\Delta_t - \tau_{py})}{m_{p,yy}(\tau_{py} + \Delta_t)}, \frac{qV_T(\Delta_t - \tau_{pz})}{m_{p,zz}(\tau_{pz} + \Delta_t)} \right) \\
\bar{\Lambda}_{D,p} &= -q\bar{\Lambda}_{A,p} \odot \bar{m}_p^* = -\bar{\Lambda}_{B,p} = \\
&= \left(\frac{q(\Delta_t - \tau_{px})}{m_{p,xx}(\tau_{px} + \Delta_t)}, \frac{q(\Delta_t - \tau_{py})}{m_{p,yy}(\tau_{py} + \Delta_t)}, \frac{q(\Delta_t - \tau_{pz})}{m_{p,zz}(\tau_{pz} + \Delta_t)} \right)
\end{aligned} \tag{III.11}$$

De igual modo es posible escribir los coeficientes de la ecuación diferencial 6.13 como:

$$\begin{aligned}
\bar{\Lambda}_{A,n} &= -\wp \left([\bar{+}]_n \right) \odot [\bar{-}]_n = \left(\frac{\tau_{nx} - \Delta_t}{\tau_{nx} + \Delta_t}, \frac{\tau_{ny} - \Delta_t}{\tau_{ny} + \Delta_t}, \frac{\tau_{nz} - \Delta_t}{\tau_{nz} + \Delta_t} \right) \\
\bar{\Lambda}_{B,n} &= -q\bar{\Lambda}_{A,n} \odot \bar{m}_n^* = \left(\frac{q(\Delta_t - \tau_{nx})}{m_{n,xx}(\tau_{nx} + \Delta_t)}, \frac{q(\Delta_t - \tau_{ny})}{m_{n,yy}(\tau_{ny} + \Delta_t)}, \frac{q(\Delta_t - \tau_{nz})}{m_{n,zz}(\tau_{nz} + \Delta_t)} \right) \\
\bar{\Lambda}_{C,n} &= -qV_T\bar{\Lambda}_{A,n} \odot \bar{m}_n^* = \left(\frac{qV_T(\Delta_t - \tau_{nx})}{m_{n,xx}(\tau_{nx} + \Delta_t)}, \frac{qV_T(\Delta_t - \tau_{ny})}{m_{n,yy}(\tau_{ny} + \Delta_t)}, \frac{qV_T(\Delta_t - \tau_{nz})}{m_{n,zz}(\tau_{nz} + \Delta_t)} \right) \\
\bar{\Lambda}_{D,n} &= -q\bar{\Lambda}_{A,n} \odot \bar{m}_n^* = -\bar{\Lambda}_{B,n} = \\
&= \left(\frac{q(\tau_{nx} - \Delta_t)}{m_{n,xx}(\tau_{nx} + \Delta_t)}, \frac{q(\tau_{ny} - \Delta_t)}{m_{n,yy}(\tau_{ny} + \Delta_t)}, \frac{q(\tau_{nz} - \Delta_t)}{m_{n,zz}(\tau_{nz} + \Delta_t)} \right)
\end{aligned} \tag{III.12}$$

Para el subdominio I estamos ante la misma ecuación diferencial:

$$\begin{aligned}
\frac{\bar{v}_{I,p}^{m+1} - \bar{v}_{I,p}^m}{\Delta_t} + \bar{\gamma}_p \odot \frac{\bar{v}_{I,p}^{m+1} + \bar{v}_{I,p}^m}{2} &= q\bar{m}_p^* \odot \left(\bar{E}_I^{m+\frac{1}{2}} + \bar{E}_{I,0} + \bar{L}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} \right) \\
&\quad - qV_T\bar{m}_p^* \odot \frac{\overrightarrow{\nabla} p_I^{m+\frac{1}{2}}}{p_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} - q\bar{m}_p^* \odot \bar{E}_{I,0} \frac{p_{0I}}{p_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} \\
\frac{\bar{v}_{I,n}^{m+1} - \bar{v}_{I,n}^m}{\Delta_t} + \bar{\gamma}_n \odot \frac{\bar{v}_{I,n}^{m+1} + \bar{v}_{I,n}^m}{2} &= -q\bar{m}_n^* \odot \left(\bar{E}_I^{m+\frac{1}{2}} + \bar{E}_{I,0} + \bar{L}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} \right)
\end{aligned}$$

$$-qV_T\bar{m}_n^* \odot \frac{\overrightarrow{\nabla} n_I^{m+\frac{1}{2}}}{n_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} - q\bar{m}_n^* \odot \vec{E}_{I,0} \frac{n0_I}{n_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}}$$

Donde también podemos escribir:

$$\begin{aligned} [\bar{+}]_p \bar{v}_{I,p}^{m+1} + [\bar{-}]_p \bar{v}_{I,p}^m &= q\bar{m}_p^* \odot \left(\vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}} + \vec{E}_{I,0} + \vec{L}_{I,p}^{m+\frac{1}{2}} \right) \\ &\quad - qV_T\bar{m}_p^* \odot \frac{\overrightarrow{\nabla} p_I^{m+\frac{1}{2}}}{p_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} - q\bar{m}_p^* \odot \vec{E}_{I,0} \frac{p0_I}{p_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} \\ [\bar{+}]_n \bar{v}_{I,n}^{m+1} + [\bar{-}]_n \bar{v}_{I,n}^m &= -q\bar{m}_n^* \odot \left(\vec{E}_I^{m+\frac{1}{2}} + \vec{E}_{I,0} + \vec{L}_{I,n}^{m+\frac{1}{2}} \right) \\ &\quad - qV_T\bar{m}_n^* \odot \frac{\overrightarrow{\nabla} n_I^{m+\frac{1}{2}}}{n_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} - q\bar{m}_n^* \odot \vec{E}_{I,0} \frac{n0_I}{n_{T,I}^{m+\frac{1}{2}}} \end{aligned}$$

Bibliografia

- [1] A. Redo-Sanchez and X.-C. Zhang, “Terahertz Science And Technology,” *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 14, no. 2, pp. 260–269, March 2008.
- [2] G. J. Wilmink, B. D. Rivest, B. L. Ibey, C. L. Roth, and J. Bernhard;, “Quantitative Investigation Of The Bioeffects Associated With Terahertz Radiation,” *SPIE Proceedings: Optical Interactions with Tissues and Cells XXI*, vol. 7562, 2010.
- [3] K. Ajito and Y. Ueno, “THz Chemical Imaging For Biological Applications,” *Terahertz Science and Technology, IEEE Transactions on*, vol. 1, no. 1, pp. 293–300, 2011.
- [4] M. C. Hoffmann, “Novel Techniques In THz-Time-Domain-Spectroscopy,” Ph.D. dissertation, 2006.
- [5] Y.-S. Lee, *Principles Of Terahertz Science And Technology*. Springer, 2009.
- [6] R. M. Smith and M. A. Arnold, “Terahertz Time-Domain Spectroscopy Of Solid Samples: Principles, Applications, And Challenges,” *Applied Spectroscopy Reviews*, vol. 46, no. 8, pp. 636–679, 2011.
- [7] C. M. Armstrong, “The Truth About Terahertz,” *IEEE Spectrum*, Tech. Rep., 2012.
- [8] P. W. S. L. Biaobin Jin, Cunlin Zhang, “Recent Progress Of Terahertz Spectroscopy On Medicine And Biology In China,” *Terahertz Science and Technology*, vol. 3, pp. 192–200, 2010.

- [9] C. Yu, S. Fan, Y. Sun, and E. Pickwell-MacPherson, “The Potential Of Terahertz Imaging For Cancer Diagnosis: A Review Of Investigations To Date,” *Quantitative Imaging in Medicine and Surgery*, vol. 2, pp. 33–45, 2012.
- [10] M. Freebody, “Challenges Not Insurmountable For Terahertz Spectroscopy,” *Biophotonic*, 2014.
- [11] R. . A. Cheville, *Terahertz Spectroscopy Principles And Applications*, S. L. . Dexheimer, Ed. CRC Press.
- [12] C. Seco-Martorell, V. López-Domínguez, G. Arauz-Garofalo, A. Redo-Sanchez, J. Palacios, and J. Tejada, “Goya’s Artwork Imaging With Terahertz Waves.”
- [13] C. A. Schmuttenmaer, “Exploring Dynamics In The Far-Infrared With Terahertz Spectroscopy,” *Chemical Reviews*, vol. 104, no. 4, pp. 1759–1780, 2004.
- [14] A. G. Davies, A. D. Burnett, W. Fan, E. H. Linfield, and J. E. Cunningham, “Terahertz Spectroscopy Of Explosives And Drugs ,” *Materials Today*, vol. 11, no. 3, pp. 18 – 26, 2008.
- [15] K. Kawase, Y. Ogawa, Y. Watanabe, and H. Inoue, “Non-Destructive Terahertz Imaging Of Illicit Drugs Using Spectral Fingerprints,” *Opt. Express*, vol. 11, no. 20, pp. 2549–2554, Oct 2003.
- [16] S. S. N, D. Dash, H. E. Madi, , and G. Gopalakrishnan, “WiGig And IEEE 802.11ad For Multi-Gigabyte-Per-Second WPAN And WLAN,” *Tensorcom Inc., 5900 Pasteur Court, Carlsbad, CA 92008*, 2012.
- [17] OECD, *OECD Compendium Of Agri-Environmental Indicators*, O. Publishing, Ed. OECD Publishing, 2013.
- [18] E.-A. Jung, M.-H. Lim, K.-W. Moon, Y.-W. Do, S.-S. Lee, H.-W. Han, H.-J. Choi, K.-S. Cho, and K.-R. Kim, “Terahertz Pulse Imaging Of Micro-Metastatic Lymph Nodes In Early-Stage Cervical Cancer Patients,” *Journal of the Optical Society of Korea*, vol. 15, pp. 155–160, 2011.
- [19] E. J. Martinez, “Next Generation Of Terahertz Sources And Detectors Sources And Detectors,” Microsystems Technology Office, Tech. Rep., 2000.

- [20] S. J. Oh, J. Kang, I. Maeng, J.-S. Suh, Y.-M. Huh, S. Haam, and J. H. Son, "Nanoparticle-Enabled Terahertz Imaging For Cancer Diagnosis," *Optics Express*, vol. 17, pp. 3469–3475, 2009.
- [21] R. Ullah, H. Li, and Y. Zhu, "Terahertz And FTIR Spectroscopy Of 'Bisphenol A'," *Journal of Molecular Structure*, vol. 1059, no. 0, pp. 255 – 259, 2014.
- [22] J. P. H.F. Tiedje, H.K. Haugen, "Measurement Of Nonlinear Absorption Coefficients In *GaAs*, InP And Si By An Optical Pump THz Probe Technique," *Optics Communications*, vol. 274, pp. 187–197, 2007.
- [23] S. Paine and R. Blundell, "The Terahertz Atmosphere," in *15th International Symposium on Space Terahertz Technology*, 2004.
- [24] G. Gallot and D. Grischkowsky, "Electro-Optic Detection Of Terahertz Radiation," *Optical Society of America*, vol. 16, pp. 1204–1212, 1999.
- [25] Y. Cai, I. Brener, J. Lopata, J. Wynn, L. Pfeiffer, and J. Federici, "Design And Performance Of Singular Electric Field Terahertz Photoconducting Antennas," *Applied Physics Letters*, vol. 71, no. 15, pp. 2076–2078, 1997.
- [26] D. Li, Y. Huang, Y.-C. Shen, and N. Khiabani, "Effects Of Substrate On The Performance Of Photoconductive THz Antennas," in *Antenna Technology (iWAT), 2010 International Workshop on*, 2010, pp. 1–4.
- [27] E. Moreno, M. Fernandez, A. Rubio Bretones, M. Cabello, and S. Gonzalez Garcia, "A Comparison Of The Performance Of THz Photoconductive Antennas," *Antennas and Wireless Propagation Letters, IEEE*, vol. PP, no. 99, pp. 1–1, 2014.
- [28] M. C. Beard, G. M. Turner, and C. A. Schmuttenmaer, "Subpicosecond Carrier Dynamics In Low-Temperature Grown *GaAs* As Measured By Time-Resolved Terahertz Spectroscopy," *Journal of Applied Physics*, vol. 90, no. 12, pp. 5915–5923, 2001.
- [29] D. C. Look, "Molecular Beam Epitaxial *GaAs* Grown At Low Temperatures ," *Thin Solid Films*, vol. 231, no. 1–2, pp. 61 – 73, 1993.

- [30] M. Tani, K. Sakai, H. Abe, S. ichi Nakashima, H. Harima, M. Hangyo, Y. Tokuda, K. Kanamoto, Y. Abe, and N. Tsukada, "Spectroscopic Characterization Of Low-Temperature Grown GaAs Epitaxial Films," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 33, no. Part 1, No. 9A, pp. 4807–4811, 1994.
- [31] H. S. Loka, S. D. Benjamin, and P. W. Smith, "Refractive Index And Absorption Changes In Low-Temperature-Grown GaAs ," *Optics Communications*, vol. 155, no. 1–3, pp. 206 – 212, 1998.
- [32] H. Němec, A. Pashkin, P. Kužel, M. Khazan, S. Schnüll, and I. Wilke, "Carrier Dynamics In Low-Temperature Grown GaAs Studied By Terahertz Emission Spectroscopy," *Journal of Applied Physics*, vol. 90, no. 3, pp. 1303–1306, 2001.
- [33] V. Ortiz, J. Nagle, J.-F. Lampin, E. Péronne, and A. Alexandrou, "Low-Temperature-Grown GaAs: Modeling Of Transient Reflectivity Experiments," *Journal of Applied Physics*, vol. 102, no. 4, pp.–, 2007.
- [34] S. C. H. Allen Taflove, *Computational Electrodynamics The Finite-Differences Time Domain Method*, A. House, Ed. British Library, 2000.
- [35] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics The Finite-Differences Time Domain Method*, 2005.
- [36] W. Yu, R. Mittra, T. Su, Y. Liu, and X. Yang, *Parallel Finite-Difference Time-Domain Method*. ARTECH HOUSE, INC., 2006.
- [37] A. Elsherbeni and V. Demir, *The Finite-difference Time-domain Method for Electromagnetics with MATLAB Simulations*. SciTech Pub., 2009.
- [38] U. Inan and R. Marshall, *Numerical Electromagnetics: The FDTD Method*. Cambridge University Press, 2011.
- [39] A. Taflove, A. Oskooi, and S. Johnson, *Advances in FDTD Computational Electrodynamics: Photonics and Nanotechnology*, ser. Artech House antennas and propagation library. Artech House, 2013.
- [40] D. Sullivan, *Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method*. Wiley, 2013.

- [41] E. Moreno, M. Pantoja, F. Ruiz, J. Roldán, and S. García, “On The Numerical Modeling Of Terahertz Photoconductive Antennas,” *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, vol. 35, no. 5, pp. 432–444, 2014.
- [42] E. Moreno-Perez, M. Pantoja, S. Garcia, A. Bretones, and R. Martin, “Time Domain Simulation Of THz Photoconductive Antennas,” in *Antennas and Propagation (EUCAP), 2012 6th European Conference on*, March 2012, pp. 1054–1057.
- [43] E. Moreno, M. Pantoja, S. Garcia, A. Bretones, and R. Martin, “Time-Domain Numerical Modeling Of THz Photoconductive Antennas,” *Terahertz Science and Technology, IEEE Transactions on*, vol. PP, no. 99, pp. 1–11, 2014.
- [44] E. Castro-Camus, L. Fu, J. Lloyd-Hughes, H. H. Tan, C. Jagadish, and M. B. Johnston, “Photoconductive Response Correction For Detectors Of Terahertz Radiation,” *Journal of Applied Physics*, vol. 104, no. 5, pp.–, 2008.
- [45] X.-C. Zhang, Y. Jin, L. Kingsley, and M. Weiner, “Influence Of Electric And Magnetic Fields On THz Radiation,” *Applied Physics Letters*, vol. 62, no. 20, pp. 2477–2479, May 1993.
- [46] C. Weiss, R. Wallenstein, and R. Beigang, “Magnetic-Field-Enhanced Generation Of Terahertz Radiation In Semiconductor Surfaces,” *Applied Physics Letters*, vol. 77, no. 25, pp. 4160–4162, 2000.
- [47] M. Hangyo, M. Migita, and K. Nakayama, “Magnetic Field And Temperature Dependence Of Terahertz Radiation From InAs Surfaces Excited By Femtosecond Laser Pulses,” *Journal of Applied Physics*, vol. 90, no. 7, pp. 3409–3412, Oct 2001.
- [48] H. Takahashi, Y. Suzuki, A. Quema, M. Sakai, T. Yano, S. Ono, N. Sarukura, M. Hosomizu, T. Tsukamoto, G. Nishijima, and K. Watanabe, “Magnetic-Field-Induced Enhancement Of THz-Radiation Power From Femtosecond-Laser-Irradiated InAs Up To 27 T,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 42, no. 5B, p. L532, 2003.
- [49] J. Shan, T. Heinz, C. Weiss, R. Wallenstein, and R. Beigang, “Origin Of Magnetic Field Enhancement In The Generation Of THz Radiation From Semiconductor

- Surfaces,” in *Quantum Electronics and Laser Science Conference, 2001. QELS '01. Technical Digest. Summaries of Papers Presented at the*, May 2001, pp. 46–47.
- [50] M. Johnston, D. Whittaker, A. Corchia, A. Davies, and E. Linfield, “Theory Of Magnetic-Field Enhancement Of Surface-Field Terahertz Emission,” *Journal of Applied Physics*, vol. 91, no. 4, pp. 2104–2106, Feb 2002.
- [51] M. Johnston, A. Davies, E. Linfield, A. Corchia, R. Mclaughlin, D. Arnone, M. Pepper, and A. Dowd, “Magnetic-Field-Induced Enhancement Of Terahertz Emission From III-V Semiconductor Surfaces,” *UTSePress Research Home*, vol. 13, pp. 896–899, 2002.
- [52] M. Johnston, A. Corchia, A. Dowd, E. Linfield, A. Davies, R. Mclaughlin, D. Arnone, and M. Pepper, “Magnetic-Field-Induced Enhancement Of Terahertz Emission From III-V Semiconductor Surfaces,” *ePress UTS Publishing*, vol. 13, pp. 896–899, 2002.
- [53] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. John Wiley, 1962.
- [54] P. Lorrain and D. Corson, *Electromagnetism: Principles and Applications*. W.H. Freeman, 1990.
- [55] J. Jackson, *Classical Electrodynamics*. Wiley, 1998.
- [56] B. G. Streetman and S. Kumar Banerjee, *Solid State Electronic Devices*. Pearson Education, 2009.
- [57] B. G. Yacobi, *Semiconductor Materials An Introduction To Basic Principles*, <http://kluweronline.com>, Ed. Kluwer Academic Publishers, 2003.
- [58] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, H. C. Publishers, Ed. Dorothy Garbose Crane, 1976.
- [59] S. Selberherr, *Analysis And Semiconductor Devices*. Springer-Verlag, 1984.
- [60] A. Anselm, *Einführung in die Halbleitertheorie*. Akad.- Verlag, 1964.
- [61] M. Planck, *The Theory Of Heat Radiation.*, M. t. n. e. Masius, Ed. P. Blakiston’s Son & Co. OL 7154661M., 1914.

- [62] A. J. Dash, A. Finch, P. J. Gardner, and M. Cottrell, "Heat Capacity Of Gallium Arsenide," *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 19, no. 2, pp. 113–114, 1974.
- [63] [Online]. Available: <http://www.siliconfareast.com/sigegaas.htm>
- [64] G. Baccarani and A. Mazzone, "On the diffusion current in heavily doped semiconductors," *Solid-State Electronics*, vol. 18, no. 5, pp. 469 – 470, 1975.
- [65] P. Landsberg and S. Hope, "Diffusion currents in semiconductors," *Solid-State Electronics*, vol. 19, no. 2, pp. 173 – 174, 1976.
- [66] —, "Two formulations of semiconductor transport equations," *Solid-State Electronics*, vol. 20, no. 5, pp. 421 – 429, 1977.
- [67] B. R. Nag, "Diffusion equation for hot electrons," *Phys. Rev. B*, vol. 11, pp. 3031–3036, Apr 1975.
- [68] B. Nag and A. Chakravarti, "Comments on the generalized Einstein relation for semiconductors," *Solid-State Electronics*, vol. 18, no. 1, pp. 109 – 110, 1975.
- [69] K.V.Shalimova, *Physics Of Semiconductors*. Moscow, Mir, 1975.
- [70] K. Požela, "Electron Nonelastic Scattering By Confined And Interface Polar Optical Phonons In A Modulation-Doped AlGaAs/GaAs/AlGaAs Quantum Well," *Nauka/Interperiodica*, vol. 35, pp. 1305–1308, 2001.
- [71] I. d'Electronique Fondamentale, "Can Velocity Overshoot Or Ballistic Transport Be Efficient In Submicron Devices?," *Microelectronics Journal*, vol. 13, no. 6, pp. 18 – 22, 1982.
- [72] T. S. E. Sano, T. Nagatsuma and A. Iwata, "Generation Of Picosecond Electrical Pulses By A Pulse Forming Optoelectronic Device," *Applied Physics Letters*, vol. Volume 55, Issue 2, p. 151, 1989.
- [73] E. Sano and T. Shibata, "Fullwave Analysis Of Picosecond Photoconductive Switches," *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 26, pp. 372 – 377, 1990.

- [74] C. C. B. J. A. Reineix, M. Ariaudo, "Theoretical Analysis Of Photoconducting Dipole Antennas," *Microwave and Optical Technology Letters*, vol. 15, pp. 110–113, 1997.
- [75] P. Kirawanich, "A Full Wave Analysis Of A Terahertz-Pulse Generation For Wide-Bandgap Photoconductive Antennas Using A Field-Carrier Transport Scheme," *Electrical Engineering/Electronics, Computer, Telecommunications and Information Technology, 2009. ECTI-CON 2009. 6th International Conference*, vol. 6, pp. 940–943, 2009.
- [76] T. Apostol, *Calculus*, J. W. . Sons, Ed. Wiley, 1967.
- [77] M. Sotoodeh, A. H. Khalid, and A. A. Rezazadeh, "Empirical Low-Field Mobility Model For III–V Compounds Applicable In Device Simulation Codes," *Journal of Applied Physics*, vol. 87, no. 6, pp. 2890–2900, 2000.
- [78] I. Silvaco, *Atlas User's Manual Device Simulation Software.*, 4701 Patrick Henry Drive, Bldg. 2 Santa Clara, CA 95054, 2013.
- [79] R. Caughey, D.M.; Thomas, "Carrier Mobilities In Silicon Empirically Related To Doping And Field," *Proceedings of the IEEE*, vol. 55, no. 12, pp. 2192–2193, 1967.
- [80] *MINIMOS-NT 2.1 User's Guide. Technische Universität Wien, Austria, 2004.*, 2004. [Online]. Available: <http://www.iue.tuwien.ac.at/software>
- [81] P. Arifin, E. M. Goldys, and T. L. Tansley, "Electron Mobility In Low Temperature Grown Gallium Arsenide," *Materials Science and Engineering B*, vol. 35, no. 1-3, pp. 330 – 333, 1995.
- [82] K. Yamaguchi, "Field-Dependent Mobility Model For Two-Dimensional Numerical Analysis Of MOSFET's," *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 26, no. 7, pp. 1068–1074, 1979.
- [83] C. Lombardi, S. Manzini, A. Saporito, and M. Vanzi, "A Physically Based Mobility Model For Numerical Simulation Of Nonplanar Devices," *Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, IEEE Transactions on*, vol. 7, no. 11, pp. 1164–1171, 1988.

- [84] K. P. G., “Deviation From Matthiessen’s Rule And Lattice Thermal Conductivity Of Alloys,” *Australian Journal of Physics*, vol. 12, p. 199, 1959.
- [85] T. S. Sosnowski, T. B. Norris, H. H. Wang, P. Grenier, J. F. Whitaker, and C. Y. Sung, “High-Carrier-Density Electron Dynamics In Low-Temperature-Grown GaAs,” *Applied Physics Letters*, vol. 70, no. 24, pp. 3245–3247, 1997.
- [86] N. Hozhabri, J. Montoya, and K. Alavi, “Photocurrent Study Of Molecular Beam Epitaxy GaAs Grown At Low Temperature,” *Journal of Applied Physics*, vol. 87, no. 5, pp. 2353–2356, 2000.
- [87] J. B. Gayé, *Formalismo Y Métodos De La Termodinámica*. Reverte, 1997.
- [88] W. Engl, H. Dirks, and B. Meinerzhagen, “Device modeling,” *Proceedings of the IEEE*, vol. 71, no. 1, pp. 10 – 33, jan. 1983.
- [89] U. Strauss, W. W. Ruhle, and K. Kohler, “Auger Recombination In Intrinsic GaAs,” *Applied Physics Letters*, vol. 62, no. 1, pp. 55 –57, jan 1993.
- [90] M. C. Richard S. Muller, Theodore I. Kamins, *Device Electronics For Integrated Circuits*. John Wiley & Sons; 3rd edition, 2002.
- [91] M. Kalusmeier-Brown, M. Lundstrom, and M. Melloch, “The effects of heavy impurity doping on AlGaAs/GaAs bipolar transistors,” *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 36, no. 10, pp. 2146 –2155, oct 1989.
- [92] M. M. Sigalas, C. M. Soukoulis, C. T. Chan, and K. M. Ho, “Electromagnetic-Wave Propagation Through Dispersive And Absorptive Photonic-Band-Gap Materials,” *Phys. Rev. B*, vol. 49, no. 16, pp. 11 080–11 087, Apr 1994.
- [93] H. Harde and D. Grischkowsky, “Coherent Transients Excited By Subpicosecond Pulses Of Terahertz Radiation,” *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 8, no. 8, pp. 1642–1651, Aug 1991.
- [94] P. U. Jepsen and S. R. Keiding, “Radiation Patterns From Lens-Coupled Terahertz Antennas,” *Opt. Lett.*, vol. 20, no. 8, pp. 807–809, Apr 1995.

- [95] K. S. Masahiko Tani, Shuji Matsuura and S. ichi Nakashima, "Emission Characteristics Of Photoconductive Antennas Based On Low-Temperature-Grown GaAs And Semi-Insulating GaAs," *Optical Society of America*, vol. 36, pp. 7853–7859, 1997.
- [96] K. S. Masahiko Tani and H. Mimura, "Ultrafast Photoconductive Detectors Based On Semi-Insulating GaAs And InP," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 36, pp. 1175–1178, 1997.
- [97] M. Schall, H. Helm, and S. Keiding, "THz Time-Domain Spectroscopy Of Electro-Optic Crystals," in *Terahertz Electronics Proceedings, 1998. THz Ninety Eight. 1998 IEEE Sixth International Conference on*, 1998, pp. 194–195.
- [98] Y. Cai, I. Brener, J. Lopata, J. Wynn, L. Pfeiffer, J. Stark, Q. Wu, X.-C. Zhang, and J. Federici, "Coherent Terahertz Radiation Detection: Direct Comparison Between Free-Space Electro-Optic Sampling And Antenna Detection," *Applied Physics Letters*, vol. 73, no. 4, pp. 444–446, 1998.
- [99] M. Tani, K.-S. Lee, and X.-C. Zhang, "Detection Of Terahertz Radiation With Low-Temperature-Grown GaAs-Based Photoconductive Antenna Using $1.55\mu\text{m}$ probe," *Applied Physics Letters*, vol. 77, no. 9, pp. 1396–1398, 2000.
- [100] Y. B. S. S. K. Zhang, J.; Hong, "Terahertz Pulse Generation And Detection With LT-GaAs Photoconductive Antenna," *IEE Proceedings - Optoelectronics*, vol. 151, pp. 98–101, 2004, sIN LEER.
- [101] T.-A. Liu, C.-L. Pan, M. Tani, M. Nakajima, M. Hangyo, K. Sakai, and S. ichi Nakashima, "Ultrabroadband Terahertz Field Detection By Proton-Bombarded InP Photoconductive Antennas," in *14th International Conference on Ultrafast Phenomena*. Optical Society of America, 2004, p. ThD5.
- [102] M. Tani, Y. Hirota, C. Que, S. Tanaka, R. Hattori, M. Yamaguchi, S. Nishizawa, and M. Hangyo, "Novel Terahertz Photoconductive Antennas," *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, vol. 27, pp. 531–546, 2006.
- [103] J. Lampin, E. Peytavit, T. Akalin, L. Desplanque, G. Mouret, F. Hindle, and D. Bigourd, "TEM-Horn Antennas For Generation And Detection Of Terahertz Pulses,"

- in *Infrared and Millimeter Waves, 2007 and the 2007 15th International Conference on Terahertz Electronics. IRMMW-THz. Joint 32nd International Conference on*, 2007, pp. 799–800.
- [104] P. C. Upadhyaya, W. Fan, A. Burnett, J. Cunningham, A. G. Davies, E. H. Linfield, J. Lloyd-Hughes, E. Castro-Camus, M. B. Johnston, and H. Beere, “Excitation-Density-Dependent Generation Of Broadband Terahertz Radiation In An Asymmetrically Excited Photoconductive Antenna,” *Opt. Lett.*, vol. 32, no. 16, pp. 2297–2299, Aug 2007.
- [105] F. Peter, S. Winnerl, S. Nitsche, A. Dreyhaupt, H. Schneider, and M. Helm, “Coherent Terahertz Detection With A Large-Area Photoconductive Antenna,” *Applied Physics Letters*, vol. 91, no. 8, pp. 081 109–081 109–3, 2007.
- [106] R. Faulks, M. Evans, H. Page, S. Malik, I. Gregory, I. Farrer, D. Ritchie, and M. Pepper, “Enhanced Terahertz Receiver Using a Distributed Bragg Reflector Coupled To A Photoconductive Antenna,” *Photonics Technology Letters, IEEE*, vol. 21, no. 21, pp. 1603–1605, 2009.
- [107] N. Khiabani, Y. Huang, and Y. chun Shen, “Comparison Of Ultra-Wideband THz Generation And Detection Systems,” in *Antennas and Propagation (EUCAP), Proceedings of the 5th European Conference on*, april 2011, pp. 457 –461.
- [108] J. S. Jo, T.-I. Jeon, and D. Grischkowsky, “Prototype 250 GHz Bandwidth Chip To Chip Electrical Interconnect, Characterized With Ultrafast Optoelectronics,” *Terahertz Science and Technology, IEEE Transactions on*, vol. 3, no. 4, pp. 453–460, 2013.
- [109] M. Bernier, F. Garet, and J. Coutaz, “Precise Determination Of The Refractive Index Of Samples Showing Low Transmission Bands By THz Time-Domain Spectroscopy,” *Terahertz Science and Technology, IEEE Transactions on*, vol. 3, no. 3, pp. 295–301, 2013.
- [110] W. Baughman, H. Yokus, S. Balci, D. Wilbert, P. Kung, and S. Kim, “Observation Of Hydrofluoric Acid Burns On Osseous Tissues By Means Of Terahertz Spectroscopic Imaging,” *Biomedical and Health Informatics, IEEE Journal of*, vol. 17, no. 4, pp. 798–805, 2013.

- [111] R. Paschotta, *Encyclopedia Of Laser Physics And Technology*. Wiley-VCH, Berlin, 2008.
- [112] B. E. S. M.C.Teich, *Fundamentals Of Photonics*, Wiley, Ed. Wiley Series in Pure and Applied Optics, 2007.
- [113] P. Bouguer, *Essai D'optique Sur La Gradation De La Lumière*. Paris, France: Claude Jombert, 1729.
- [114] J. Lambert, *Photometria Sive De Mensura Et Gradibus Luminis, Colorum Et Umbrae (Photometry, Or, On The Measure And Gradations Of Light, Colors, And Shade)*, E. Klett, Ed. Augsburg, Augusta Vindelicorum, Germany, 1760.
- [115] Beer, "Bestimmung der Absorption Des Rothen Lichts In Farbigen Flüssigkeiten (Determination Of The Absorption Of Red Light In Colored Liquids)," *Annalen der Physik und Chemie*, vol. 88, p. 78–88, 1852.
- [116] P. Dirac, *Principles Of Quantum Mechanics*. Oxford at the Clarendon Press, 1958.
- [117] S. Hughes, M. Tani, and K. Sakai, "Vector Analysis Of Terahertz Transients Generated By Photoconductive Antennas In Near- And Far-Field Regimes," *Journal of Applied Physics*, vol. 93, no. 8, pp. 4880–4884, 2003.
- [118] Z.-S. P. M. T. K. Sakai, "Analysis Of THz Pulses Using The FDTD Calculation Method," *Ultrafast Devices and Lasers*, vol. 3940, pp. 184–191, 2000.
- [119] J. Zhang, Z. Chen, and X. Chen, "FDTD Analysis Of Photoconducting Antennas For Millimeter-Wave Generation," *International Journal of RF and Microwave Computer-Aided Engineering*, vol. 10, no. 4, pp. 213–220, 2000.
- [120] P. Kirawanich, S. Yakura, and N. Islam, "Study Of High-Power Wideband Terahertz-Pulse Generation Using Integrated High-Speed Photoconductive Semiconductor Switches," *Plasma Science, IEEE Transactions on*, vol. 37, no. 1, pp. 219–228, 2009.

- [121] N. Khiabani, Y. Huang, Y.-C. Shen, and S. Boyes, "Time Variant Source Resistance In The THz Photoconductive Antenna," in *Antennas and Propagation Conference (LAPC), 2011 Loughborough*, 2011, pp. 1–3.
- [122] N. Khiabani, Y. Huang, Y. chun Shen, and S. Boyes, "Theoretical Modeling Of A Photoconductive Antenna In A Terahertz Pulsed System," *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, vol. 61, no. 4, pp. 1538–1546, 2013.
- [123] P. U. Jepsen, R. H. Jacobsen, and S. R. Keiding, "Generation And Detection Of Terahertz Pulses From Biased Semiconductor Antennas," *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 13, no. 11, pp. 2424–2436, Nov 1996.
- [124] N. Khiabani, Y. Huang, and Y.-C. Shen, "Discussions On The Main Parameters Of THz Photoconductive Antennas As Emitters," in *Antennas and Propagation (EUCAP), Proceedings of the 5th European Conference on*, 2011, pp. 462–466.
- [125] D. Saeedkia, "Terahertz Photoconductive Antennas: Principles And Applications," in *Antennas and Propagation (EUCAP), Proceedings of the 5th European Conference on*, 2011, pp. 3326–3328.
- [126] A. Booysen, "Aperture theory and the equivalence theorem," in *Communications and Signal Processing, 1998. COMSIG '98. Proceedings of the 1998 South African Symposium on*, Sep 1998, pp. 353–358.
- [127] —, "Aperture theory and the equivalence theorem," in *Antennas and Propagation Society International Symposium, 1999. IEEE*, vol. 2, July 1999, pp. 1258–1261.
- [128] S. Barmada, A. Musolino, and M. Raugi, "Equivalence theorem boundary conditions for FDTD formulations," *Magnetics, IEEE Transactions on*, vol. 40, no. 2, pp. 1049–1052, March 2004.
- [129] T. Martin, "An Improved Near- To Far-Zone Transformation For The Finite-Difference Time-Domain Method," *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, vol. 46, no. 9, pp. 1263 –1271, sep 1998.

- [130] K. Motojima, S. Kozaki, and N. Takada, "A precision near-to-far-field transformation for FDTD method," in *Microwave Conference, 2000 Asia-Pacific*, 2000, pp. 374–377.
- [131] R. Luebbers, K. S. Kunz, M. Schneider, and F. Hunsberger, "A finite-difference time-domain near zone to far zone transformation [electromagnetic scattering]," *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, vol. 39, no. 4, pp. 429–433, Apr 1991.
- [132] C. A. Balanis, *Antenna Theory: Analysis And Design*. Wiley, 2005.
- [133] H. Nyquist, "Certain Topics In Telegraph Transmission Theory," *American Institute of Electrical Engineers, Transactions of the*, vol. 47, no. 2, pp. 617–644, April 1928.
- [134] C. Shannon, "Communication In The Presence Of Noise," *Proceedings of the IEEE*, vol. 86, no. 2, pp. 447–457, Feb 1998.
- [135] R. Martin, A. Bretones, and S. Garcia, "Some Thoughts About Transient Radiation By Straight Thin Wires," *Antennas and Propagation Magazine, IEEE*, vol. 41, no. 3, pp. 24–33, Jun 1999.
- [136] S. Preu, G. H. Döhler, S. Malzer, L. J. Wang, and A. C. Gossard, "Tunable, Continuous-Wave Terahertz Photomixer Sources And Applications," *Journal Of Applied Physics*, vol. 109, no. 6, pp.–, 2011.
- [137] M. Tani, K. Yamamoto, E. Estacio, C. Que, H. Nakajima, M. Hibi, F. Miyamaru, S. Nishizawa, and M. Hangyo, "Photoconductive Emission And Detection Of Terahertz Pulsed Radiation Using Semiconductors And Semiconductor Devices," *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, vol. 33, no. 4, pp. 393–404, 2012.
- [138] [Online]. Available: <http://www.filmetrics.com/refractive-index-database/gaas/gallium-arsenide>
- [139] J. Lampin, E. Peytavit, T. Akalin, G. Ducournau, J. Klier, S. Wohnsiedler, J. Jonuscheit, and R. Beigang, "The Transverse Electromagnetic Horn Antenna As

- An Efficient THz Pulse Emitter,” in *Infrared, Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz), 2011 36th International Conference on*, Oct 2011, pp. 1–2.
- [140] D. Rutledge and M. S. Muha, “Imaging Antenna Arrays,” *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, vol. 30, no. 4, pp. 535–540, Jul 1982.
- [141] B. G. Olmedo, *Fundamentos De Electromagnetismo (Iniciación Al Cálculo Numérico En Electromagnetismo)*. Universidad de Granada, 2006.
- [142] D. C. Champeney, *Fourier Transforms In Physics*, A. Hilger, Ed. Bristol Library, 1985.
- [143] M. Clerici, M. Peccianti, B. E. Schmidt, L. Caspani, M. Shalaby, M. Giguère, A. Lotti, A. Couairon, F. m. c. Légaré, T. Ozaki, D. Faccio, and R. Morandotti, “Wavelength Scaling Of Terahertz Generation By Gas Ionization,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 253901, Jun 2013.
- [144] A. Couairon and A. Mysyrowicz, “Femtosecond Filamentation In Transparent Media,” *Physics Reports*, vol. 441, no. 2–4, pp. 47 – 189, 2007.
- [145] L. Bergé, S. Skupin, C. Köhler, I. Babushkin, and J. Herrmann, “3D Numerical Simulations Of THz Generation By Two-Color Laser Filaments,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 073901, Feb 2013.
- [146] A. Fuller, *Microwaves*, ser. The Commonwealth and international library. Applied electricity and electronics division. Pergamon Press, 1969.
- [147] R. J. Goldston and P. H. Rutherford, *Introduction To Plasma Physics*. Institute of Physics Publishing, 1995.
- [148] I. Newton, *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*, S. Pepys, Ed. Royal Society, 1687.
- [149] A. V. Balakin, A. V. Borodin, I. A. Kotelnikov, and A. P. Shkurinov, “Terahertz Emission From A Femtosecond Laser Focus In A Two-Color Scheme,” *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 27, no. 1, pp. 16–26, Jan 2010.

- [150] P. Knabner and L. Angermann, *Numerical Methods For Elliptic And Parabolic Partial Differential Equations*, Springer-Verlag, Ed. J.E. Marsden, 2003.
- [151] A. F. Nikiforov and V. B. Uvarov, *Special Functions Of Mathematical Physics: A Unified Introduction With Applications*. Hardcover, 1988.
- [152] P. Petropoulos, “Analysis Of Exponential Time-Differencing For FDTD In Lossy Dielectrics,” *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, vol. 45, no. 6, pp. 1054–1057, 1997.