

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UN DISPOSITIVO OPTOELECTRÓNICO MULTI-RESPUESTA A ESTÍMULOS TÉRMICO, ELÉCTRICO Y ÓPTICO BASADO EN LÁMINAS DELGADAS DE VO₂

L. BENAVIDES†, R. UGARTE^A

Facultad de Ingeniería Eléctrica, Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría, Cuba, leonard@electrica.cujae.edu.cu
†autor para la correspondencia

a) Facultad de Ingeniería Eléctrica, Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría, Cuba, ugar-te@electrica.cujae.edu.cu

Utilizando técnicas numéricas y de procesamiento de señales se obtiene un conjunto de resultados que permiten la simulación del comportamiento de un dispositivo optoelectrónico, basado en láminas delgadas de dióxido de vanadio, en respuesta a estímulos eléctricos, térmicos y ópticos. En el análisis se consideran las relaciones entre las entradas de voltaje directo, temperatura y energía de la radiación electromagnética incidente y las correspondientes salidas de intensidad de corriente, resistividad eléctrica y coeficiente de absorción de la radiación incidente. En cada caso se obtiene la característica correspondiente, la respuesta a frecuencias del dispositivo, así como el circuito digital que simula el comportamiento del sistema.

Using numerical approaches and signal processing a group of results is obtained that allows the simulation of the behavior of an optoelectronic device, based on thin films of vanadium dioxide, in response to electric, thermal and optical inputs. In the analysis are considered the relations among the inputs of direct voltage, temperature and energy of the incident electromagnetic radiation and the corresponding outputs of current intensity, electric resistivity and coefficient of absorption of the incident radiation. In each case the corresponding characteristic and the frequency response of the device are obtained, as well as the digital circuit that simulates the behavior of the system.

Palabras Clave. Metal-insulator transitions 71.30.+h, solid-solid transitions 64.70.K-.

INTRODUCCIÓN

Desde la segunda mitad del siglo pasado es bien conocido que varios óxidos de vanadio y, entre ellos, el dióxido de vanadio exhiben una transición de primer orden metalaislador, que se presenta acompañada de una variación brusca de su resistividad eléctrica, alrededor de la temperatura de 340K y, en general, presentan propiedades eléctricas, térmicas y ópticas que hacen que estos materiales sean muy factibles de utilizar en sensores y conmutadores optoelectrónicos 1-4.

A pesar de que se han realizado múltiples trabajos sobre el dióxido de vanadio, sus propiedades físicas y aplicaciones tecnológicas, sin embargo, el estudio de este material y sus potencialidades aun resultan de interés en la literatura científica actual 5-8.

En el presente trabajo, utilizando técnicas numéricas y de procesamiento de señales, se analiza el comportamiento de un dispositivo optoelectrónico, basado en láminas delgadas de dióxido de vanadio, que puede responder a estímulos

eléctricos, térmicos u ópticos. Se obtiene una simulación digital del dispositivo y se comparan los resultados con los obtenidos experimentalmente y reportados en la literatura científica internacional por otros autores.

DESARROLLO Y RESULTADOS

Análisis de la respuesta a estímulos eléctricos

Para nuestro análisis se consideraron láminas delgadas de VO₂, con orientación (100), depositadas epitaxialmente sobre un sustrato de zafiro cortado-R(Al₂O₃)⁹. El dispositivo de referencia fue considerado como un sistema de entrada-salida, en el cual la entrada está constituida por una secuencia de 25 señales de voltaje directo y la salida como una secuencia de 25 intensidades de corriente. En la figura 1 se muestra la característica I-V correspondiente para la fase metálica, en la cual los pequeños cuadrados representan los valores medidos experimentalmente y los pequeños círculos representan los valores obtenidos utilizando un polinomio de interpolación por mínimos cuadrados.

La interpolación se obtuvo utilizando un polinomio de grado 24, para el cual resulta en este caso mínimo el error de interpolación. Al obtener un polinomio algebraico que reproduce el comportamiento I-V del sistema, esto permite poder conocer en cada caso cómo se comporta la conductancia eléctrica del dispositivo para los diferentes estados de excitación que se consideren. Utilizando los mismos valores de entrada-salida de voltajes e intensidades de corriente, se obtuvo la función transferencial del sistema, en este caso, utilizando la transformada rápida de Fourier, lo cual permite estimar la respuesta a frecuencias que presenta el sistema. En la figura 2 se muestra la respuesta de amplitud del sistema.

Como era de esperarse la respuesta de amplitud muestra que el sistema no presenta distorsión de amplitud, lo cual confirma las posibilidades de utilización del sistema como dispositivo para aplicaciones eléctricas.

Para obtener el circuito digital que simula el comportamiento del dispositivo en este caso, se aplicó la transformada Z a las secuencias de entrada-salida, teniendo en cuenta que:

$$H(z) = \frac{Y(z)}{X(z)} \quad (1)$$

donde $H(z)$ representa la función transferencial del sistema en términos de la transformada Z; $Y(z)$ representa la transformada Z de la secuencia de intensidades de corriente a la salida y $X(z)$ representa la transformada Z de la secuencia de voltajes a la entrada del sistema. A partir de aquí se obtuvo la forma explícita de $H(z)$ y con ella la forma que adopta el circuito digital que simula el comportamiento del dispositivo y que se ilustra en la figura 3.

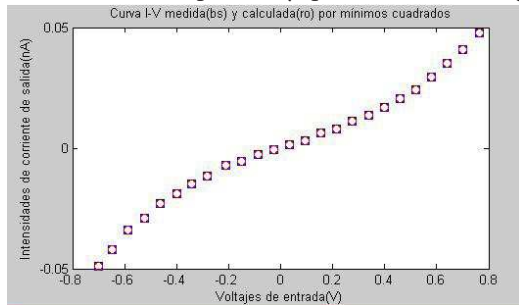


Figura 1. Característica I-V, para la fase metálica, medida y calculada por mínimos cuadrados

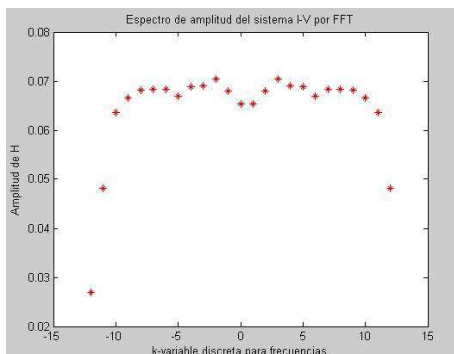


Figura 2 Respuesta de amplitud del sistema I-V utilizando la transformada rápida de Fourier.

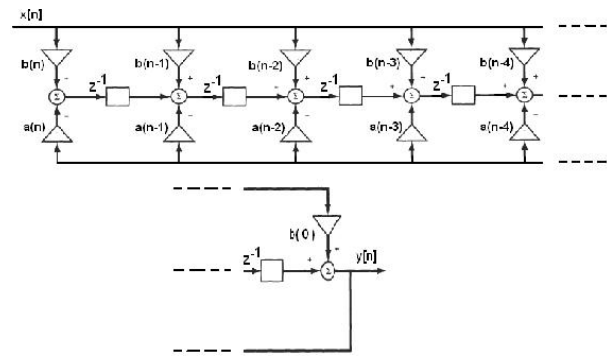


Figura 3 Circuito digital que simula el comportamiento del sistema I-V

El circuito de la figura 3 está constituido por amplificadores operacionales, elementos sumadores y elementos retardadores unitarios de fase. El valor de n corresponde con el grado del sistema analizado y con el número de valores de entrada-salida I-V que se haya considerado. En este caso $n=24$. Los parámetros $a(n)$, $a(n-1)$, ..., $a(1)$ y $b(n)$, $b(n-1)$, ..., $b(0)$, constituyen las ganancias de los correspondientes amplificadores operacionales y sus valores dependen de los parámetros físicos del sistema, es decir: el espesor de la lámina delgada de VO₂, la morfología de la superficie, la naturaleza y temperatura del sustrato, el método utilizado para obtener la lámina delgada y otras condiciones. Adicionalmente $x[n]$ y $y[n]$ representan las secuencias de los voltajes de entrada e intensidades de corrientes de salida respectivamente. De esta forma, el circuito representado en la figura 3 permite

simular el comportamiento eléctrico del dispositivo para cualquier secuencia de voltajes de entrada, lo cual constituye una herramienta adicional para el análisis de las posibles aplicaciones de estos sistemas. Finalmente, en las figuras 4 y 5 se pueden apreciar las respuestas de amplitud y fase del dispositivo de dióxido de vanadio en términos de la transformada de Fourier para señales discretas.

Con ambas respuestas se puede verificar la linealidad del dispositivo en este caso, así como la ausencia de distorsión, si no se tienen en cuenta los efectos de ruido que, como se sabe, siempre están presentes en este tipo de mediciones y de sistemas. Los resultados recientemente mostrados se corresponden completamente con los obtenidos y mostrados en las figuras y cálculos anteriores, lo cual permite confirmar más aun las posibilidades de este sistema para su utilización en diferentes aplicaciones tecnológicas.

Hasta aquí se han mostrado algunas características de la respuesta del dispositivo a estímulos eléctricos en la fase metálica. Sin embargo, como ya recordamos, las láminas de dióxido de vanadio experimentan una transición metalaislador en las proximidades de la temperatura de 340 K. Los resultados anteriores se pueden obtener similarmente para la fase aislante del dispositivo, lo cual confirma las propiedades físicas conocidas de este tipo de sistemas.

Análisis de la respuesta a estímulos térmicos.

En este caso para nuestro análisis se consideraron láminas delgadas de alta calidad de VO₂, con un espesor de 70 nm., que fueron obtenidas sobre un sustrato de Al₂O₃ utilizando el método de deposición por laser pulsado y crecidas epitaxialmente con su eje c normal al sustrato¹⁰. El dispositivo de referencia fue considerado como un sistema de entrada-salida, en el cual la entrada está constituida por una secuencia de 25 valores de temperatura (T) y la salida como una secuencia de 25 valores de resistividad eléctrica (p).

En la figura 6 se muestra la característica p-T correspondiente, en la cual los pequeños cuadrados representan los valores medidos experimentalmente y los pequeños círculos representan los valores obtenidos utilizando un polinomio de interpolación por mínimos cuadrados.

La interpolación se obtuvo utilizando un polinomio de grado 11 para el cual el error de interpolación en este caso es mínimo. La característica mostrada en la figura 6 corresponde al proceso de calentamiento y en ella se puede apreciar que ocurre una brusca caída de la resistividad a temperaturas próximas a 340 K, que corresponde con la temperatura de transición de la fase monoclinica aislante a la fase tetragonal metálica.

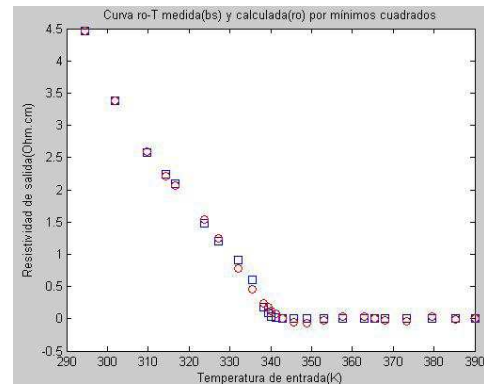


Figura 6 Característica p-T medida y calculada por mínimos cuadrados en el proceso de calentamiento del dispositivo

Es posible verificar que en el proceso de enfriamiento de la muestra desde 380K hasta 300K ocurre igualmente una variación brusca de la resistividad a una temperatura próxima a 340K, pero en este caso se aprecia que existe una histéresis en el proceso de enfriamiento, de manera que la transición de fases es de primer orden, lo cual es consistente con lo reportado en la literatura por varios autores¹¹⁻¹⁶.

La aproximación de la característica por medio de polinomios de potencias de la variable temperatura, permite obtener una expresión que nos indica cómo varía la resistividad del dispositivo en función de la temperatura para un valor cualquiera de T que pertenezca al intervalo entre 300K y 390K, lo cual puede ser útil para instrumentar diferentes aplicaciones prácticas de este dispositivo.

El hecho de que este sistema experimente una transición de fases metal-aislador en la zona correspondiente a temperaturas ambientes constituye una de las propiedades que facilita la utilización de los dispositivos, basados en láminas delgadas de dióxido de vanadio, como conmutadores optoelectrónicos. Si ahora se aplica la transformada Z a las secuencias de entrada-salida del sistema se obtienen las expresiones Yz y Xz. A partir de esas expresiones y utilizando la relación (1) se puede verificar que el circuito digital de simulación del comportamiento del sistema p-T es similar al mostrado en la figura 3, sólo que con valores diferentes para los parámetros a y b, que representan las ganancias de los amplificadores.

También de forma similar a como se procedió para el sistema I-V, en este caso es posible obtener la respuesta a frecuencias del sistema p-T utilizando la transformada

de Fourier para señales discretas. En las figuras (7) y (8) se muestran las curvas correspondientes a las respuestas de amplitud y fase del sistema p-T expresadas en términos de la transformada de Fourier para señales discretas.

A partir del análisis de las respuestas de amplitud y fase del sistema p-T, tales como se muestran en las figuras (7) y (8), se puede comprender perfectamente las características espectrales del comportamiento de este tipo de sistemas.

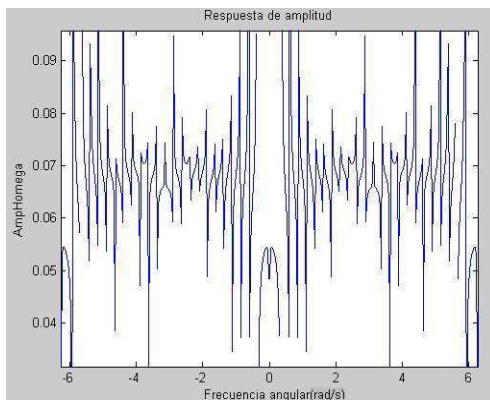


Figura 4 Respuesta de amplitud del sistema I-V en términos de la transformada de Fourier para señales discretas

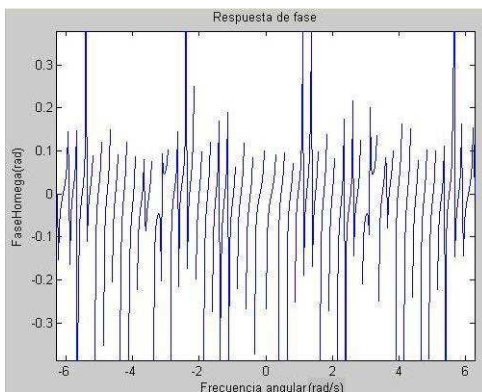


Figura 5 Respuesta de fase del sistema I-V en términos de la transformada de Fourier para señales discretas.

En la figura (8) se puede apreciar que el sistema presenta una respuesta con fase 0 centrada para cualquier frecuencia del espectro. Los resultados numéricos y espectrales obtenidos ofrecen herramientas adicionales para el análisis e implementación de aplicaciones prácticas del sistema.

Análisis de la respuesta a estímulos ópticos.

Una de las principales aplicaciones potenciales de los dispositivos basados en láminas delgadas de dióxido de vanadio consiste en su utilización como rápidos conmutadores optoelectrónicos¹⁷⁻¹⁸

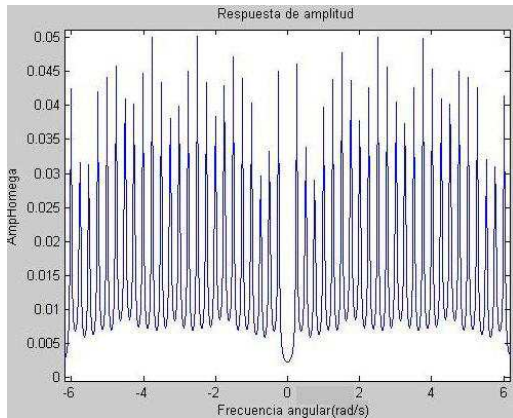


Figura 7 Respuesta de amplitud del sistema p-T en términos de la transformada de Fourier para señales discretas.

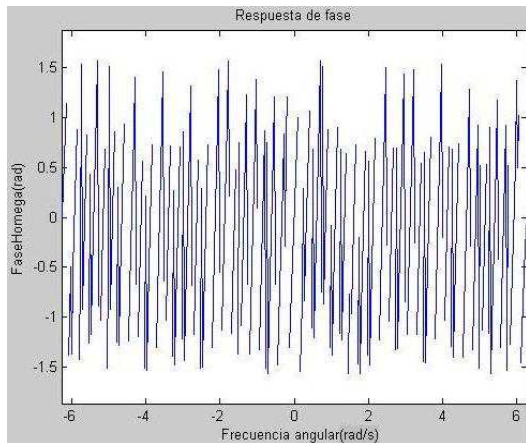


Figura 8 Respuesta de fase del sistema p-T en términos de la transformada de Fourier para señales discretas.

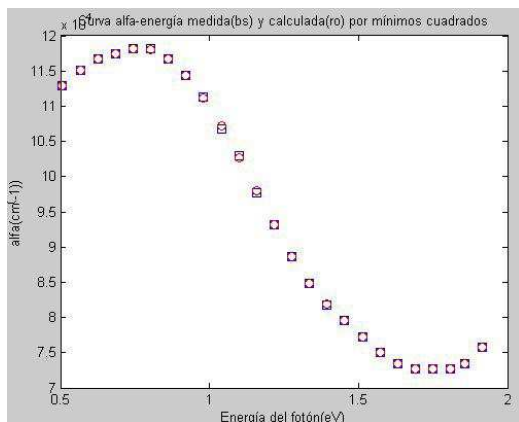


Figura 9 Característica α -E medida y calculada por mínimos cuadrados

Para el análisis de la respuesta a estímulos ópticos que presenta este dispositivo, igual que en la respuesta a estímulos eléctricos, se consideran láminas delgadas de VO₂, con orientación (100), depositadas epitaxialmente sobre un sustrato de zafiro cortado-R(Al₂O₃)₉. En este caso el dispositivo se consideró con una secuencia de entrada correspondiente a la energía (E) en eV de los fotones de la radiación electromagnética incidente y la secuencia de salida se tomó como los valores en cm⁻¹ del coeficiente (α), tomado a 340 K, de absorción de la radiación incidente.

En la figura 9 se muestra la característica α -E correspondiente, en la cual los pequeños cuadrados representan los valores medidos experimentalmente y los pequeños círculos representan los valores obtenidos utilizando un polinomio de interpolación por mínimos cuadrados.

La interpolación se obtuvo utilizando un polinomio de grado 17, para el cual resulta en este caso mínimo el error de interpolación. Las ventajas de la utilización de un polinomio de interpolación para el ajuste de la característica α -E son las mismas que las que analizamos en sus momentos para las características I-V y α -T.

En la figura 10 se muestra el ajuste obtenido utilizando polinomios de splines cúbicos.

A partir de los resultados que se muestran en la figura 9, se desprende que para la temperatura de 340K en el dispositivo está ocurriendo una transición de fases, razón por la cual algunos autores, basados en los valores de las diferentes constantes ópticas en la zona infrarroja mediana, sugieren que para esa temperatura coexisten las fases metálica y aislante, las cuales evolucionan dinámicamente a medida que la temperatura varía⁹. En la figura 9, por otra parte, se aprecia que en la región de las bajas energías, el coeficiente de absorción inicialmente aumenta, alcanza un pico y luego cae bruscamente a medida que aumenta la energía de los fotones incidentes. Esta zona de altos valores del coeficiente de absorción es característica de un comportamiento metálico, lo cual evidencia que para esa temperatura de 340K coexisten las fases metálica y aislante

Aunque no aparece ilustrado en la figura 9, se puede verificar que, a medida que aumenta la temperatura de la muestra, el peso espectral aumenta gradualmente en esa zona de las bajas energías, es decir, que en la zona de las bajas energías de la radiación incidente, a medida que aumenta la temperatura, se aprecia que también aumenta gradualmente el valor del coeficiente de absorción, lo cual indica que el sistema está conmutando cada vez más hacia la fase metálica.

Para el sistema α -E aquí analizado, se puede también verificar que el circuito digital que simula su comportamiento es análogo al representado en la figura 3, con sus valores correspondientes de los parámetros a y b.

En este caso la respuesta a frecuencias del sistema se puede hallar también utilizando la transformada de Fourier para señales dis-

cretas. De esta forma se obtiene la función transferencial Homega del sistema α -E.

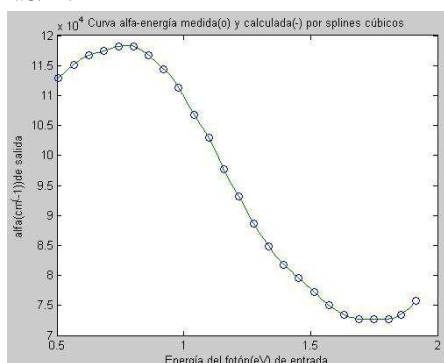


Figura 10 Característica α -E medida y calculada por splines cúbicos.

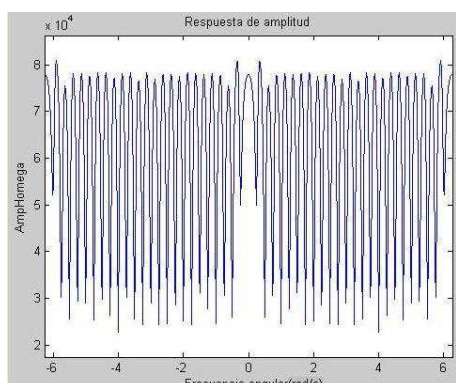


Figura 11 Respuesta de amplitud del sistema α -E en términos de la transformada de Fourier para señales discretas

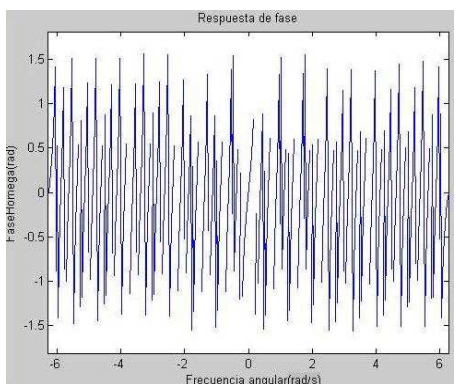


Figura 12 Respuesta de fase del sistema α -E en términos de la transformada de Fourier para señales discretas.

En las figuras 11 y 12 se ilustran las respuestas de amplitud y fase del sistema α -E en este caso, en términos de la transformada de Fourier para señales discretas.

Los resultados numéricos y espectrales obtenidos para el sistema -E se corresponden completamente con los reportados por otros autores en la literatura científica internacional.

CONCLUSIONES

Se han obtenido algunos resultados numéricos y espectrales que ayudan a la simulación del comportamiento del dispositi-

vo optoelectrónico, basado en láminas delgadas de dióxido de vanadio (α), en respuesta a estímulos eléctricos, térmicos y ópticos. En todo el trabajo se ha considerado que el sistema es lineal e invariante temporal y su análisis se ha basado en las relaciones entrada-salida, lo cual se conoce como descripción externa del sistema.

Sin embargo, es posible también aplicar el método de representación de los sistemas en el espacio de estado, lo cual se conoce como descripción interna de los sistemas. La utilización de este segundo método de trabajo permitiría: una vista interior sobre el comportamiento del sistema; una manipulación sistemática de los sistemas con entradas y salidas múltiples, como ocurre en este caso y una extensión al caso de sistemas no lineales. Estos serán los objetivos de un próximo trabajo.

- [1]Morin, E.J., Oxides which show a metal-to-insulator transition at the Neel temperature. *Physical Review Letters*, 1959. 3(1): p. 34-36.
- [2]Heckingbottom, R. and Linnett, J.W., Structure of Vanadium Dioxide. *Nature*, 1962. 194(678).
- [3]Ohashi, T. and A. Watanabe, Temperature De-pendence of Electrical Resistivity of VO2 Powder. *Journal of the American Ceramic Society*, 1966. 49(9): p. 519-520.
- [4]The Two Components of the Crystallographic Transition in VO2. *Journal of Solid State Chemistry*, 1971. 3: p. 490-500.
- [5]RGoodenough, J., Kuzmetov, Dmitry, et al., Three-terminal field effect devices utilizing thin film vanadium oxide as the channel layer. *Journal of Applied Physics*, 2010. 107(114516): p. 30.
- [6]Pergament, A.L., et al., Switching effect and the metal-insulator transition in electric field. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2010. 71(6): p. 874-879.
- [7]Koshibae, W., Furukawa, N., and Nagaosa, N., Photo-induced insulator-metal transition of a spin-electron coupled system. 2010: p. 3.
- [8]Jones, Andrew C. et al., Nano-optical Investigations of the Metal-Insulator Phase Behavior of Individual VO2 Microcrystals. *Nano Lett.*, 2010. 10(5): p. 1574-1581.
- [9]Chang, Y.J., et al., Phase coexistence in the metal-insulator transition of a VO2 thin film. *Thin Solid Films*, 2005. 486(2005).
- [10]Koo, C.H., et al., Optical investigations on electronic structure changes related to the metal-insulator transition in VO2 film. *Thin Solid Films*, 2005. 486(46).
- [11]Andreev, V.N., T.V. Smirnova, and F.A. Chud-novskii, Electrical conductivity of vanadium dioxide films in the vicinity of the metal-semiconductor phase transition. *physica status solidi (b)*, 1976. 77(2): p. K97-K101.
- [12]Cavalleri, A., et al., Evidence for a structurally-driven Insulator-to-metal Transition in VO2: a View from the Ultrafast Timescale. 2003: p. 17.
- [13]Chae, B.G., et al., Fabrication and Electrical Prop-erties of Pure VO2 Films. 2003: p. 5.
- [14]Chae, B.-G., et al., Abrupt metal-insulator transition observed in VO2 thin films induced by a switching voltage pulse. 2005.
- [15]Cobden David, Metal-insulator transition in vana-dium dioxide, in *Nat.Nanotech.* 2009, *Physics Today Online Physics Update.* p. 1.
- [16]Pergament, A., et al., Electrical and optical proper-ties of hydrated amorphous vanadium oxide. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2008. 41(22): p. 3.
- [17] Jan, M.T. and B. Silke, Optical properties of corre-lated materials - Or why intelligent windows may look dirty. *physica status solidi (b)*, 2009. 246(9): p. 1996-2005.
- [18] Tomczak, JanM and BiermannSilke, Optical prop-erties of correlated materials-Generalized Peierls approach and its application to VO2. 2009: p. 15.