



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS**

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**

**INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS**

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS**

**AMPLIFICACION DE LA ONDA ACUSTO-  
ELECTROMAGNÉTICA EN LOS CRISTALES GaN e InN.**

**TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE:  
MAESTRÍA EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS**

**Álvaro Julián Sánchez Sánchez**

**Directores:**

**Asesora: Dra. Svitlana Koshova**

**Co-Asesor: Dr. Volodymyr Grimalsky**

**CUERNAVACA, MORELOS**

**Junio 2018**

## **Resumen**

El presente trabajo trata sobre la investigación de la conductividad no lineal y el efecto piezoeléctrico en el Nitruro de Galio y en el Nitruro de Indio y sobre como estas características y las cualidades únicas de cada material sirven para la amplificación de ondas acusto-electromagneticas en el rango de TeraHertz.

Para poder tener percepción de la forma en que estos materiales amplifican las ondas acusto-electromagneticas se realizó una simulación haciendo uso del modelo hidrodinámico.

## **Abstract**

The present work is about the investigation of the nonlinear differential conductivity and the piezoelectric effect in Gallium Nitride and in Indium Nitride and about how the unique properties of each of these materials are used for the amplification of acoustic-electromagnetic waves in the range of Tera Hertz.

To have a perception of how these materials amplify the acoustic electromagnetic wave, a simulation was made performed on the base of the hydrodynamic model.

# Índice

Introducción.....	1
Estado del arte.....	1
Objetivos de la investigación .....	2
Alcances de la investigación.....	2
Contribución de la tesis .....	2
I.    Redes Cristalinas.....	3
Introducción .....	3
I.1.    Clasificación de redes cristalinas.....	3
I.2.    Estructura de bandas.....	5
I.3.    Efecto piezoeléctrico.....	6
I.4.    Elasticidad.....	8
I.5.    Efecto Gunn.....	10
I.6.    Conductividad diferencial negativa.....	12
I.7.    Semiconductores del grupo de Nitruros-III.....	14
I.8.    Semiconductores con banda prohibida ancha.....	15
I.9.    Semiconductores de banda prohibida angosta.....	16
II.   Ondas electromagnéticas.....	18
Introducción.....	18
$\neq 0$ .....	19
II.1.   Radiación en terahertz (THz).....	20
II.2.   Carga espacial.....	24
II.3.   Onda Acusto-electromagnética.....	24
III.  Nitruro de Galio (GaN) y Nitruro de Indio (InN).....	25
Introducción.....	25
III.1.  Características del nitruro de galio.....	26
III.2.  Características del nitruro de indio.....	28
IV.   Modelado y simulación.....	31
Introducción.....	31
IV.1.  Diferencias finitas.....	32
IV.2.  Ecuación del transporte de Boltzmann .....	34
IV.3.  Modelo hidrodinámico.....	35
IV.4.  Modelo aplicado.....	35

V.	Aplicaciones potenciales.....	51
	Introducción.....	51
	V.1 Detección de objetos enterrados.....	51
	V.2 Evaluación no destructiva de estructuras.....	52
VI.	Conclusiones y trabajos futuros.....	53
	VI.1. Conclusiones.....	53
	VI.2. Trabajos futuros.....	53
	Referencias.....	54
	Apéndice I Simulación de los incrementos espaciales.....	59
	Apéndice II Simulación del sistema de amplificación.....	77

## Índice de Figuras

Figura I.1. Estructura de Diamante.....	3
Figura I.2. Estructura zinc blende.....	4
Figura I.3. Estructura Wurzite.....	4
Figura I.4. Efecto piezoeléctrico directo .....	6
Figura I.5. Estructura de bandas en el GaN .....	11
Figura I.6. Gráfica característica de materiales con resistencia diferencial negativa.....	12
Figura I.7. Mínimos de la banda de conducción .....	13
Figura I.8. Curvas de velocidad de deriva contra campo eléctrico (i) mínimo con masa ligera y (ii) mínimo con masa pesada. ....	14
Figura II.1. Propagación de onda electromagnética .....	20
Figura II.2. Banda Terahertz en el espectro electromagnético .....	22
Figura II.3. Sistema de emisión de terahertz basado en diodos.....	23
Figura II.4. Sistema de detección de terahertz basado en mezcladores. ....	24
Figura III.1. Gráfica de velocidad de deriva contra el campo eléctrico para el GaN (1) Wurzite (2) Zinc Blende .....	28
Figura III.2. Gráfica de velocidad de deriva contra campo eléctrico para el InN con los dopamientos (1) $n = 1017 \text{ cm}^{-2}$ (2) $n = 1018 \text{ cm}^{-2}$ (3) $n = 3 \times$ $1018 \text{ cm}^{-2}$ .....	30
Figura IV.1. Gráfica de función, su derivada y sus aproximaciones, con un $p=0.571$ . ....	33
Figura IV.2 Gráfica de la dependencia ocupada en la simulación entre la velocidad de deriva y campo eléctrico en InN .....	45
Figura IV.3 Gráfica de la dependencia ocupada en la simulación entre el potencial eléctrico y campo eléctrico en InN .....	45
Figura IV.4. Diagrama del sistema .....	41
Figura IV.5 Incrementos espaciales con de la onda de carga espacial en el InN .....	38
Figura IV.6 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1 .....	41
Figura IV.7 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1 con $n_0 = 0.6 \times 10^{23}$ .....	42

Figura IV.8 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1 con $E_0 = 0.55 \times 10^7$ .....	42
Figura IV.9 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1 con $n_0 = 0.6 \times 10^{23}$ .....	43
Figura IV.10 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1 con $E_0 = 0.55 \times 10^7$ .....	43
Figura IV.11 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1 con $n_0 = 0.6 \times 10^{23}$ .....	44
Figura IV.12. Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1 con $E_0 = 0.55 \times 10^7$ .....	44
Figura IV.13 Gráfica de la deformación acústica en $t = 70$ .....	47
Figura IV.14 Gráfica de la deformación acústica en $t = 80$ .....	47
Figura IV.15 Gráfica de la deformación acústica en $t = 90$ .....	48
Figura IV.16 Gráfica de la deformación acústica en $t = 100$ .....	48
Figura IV.17 Gráfica de la deformación acústica en $t = 110$ .....	49
Figura IV.18 Gráfica de la deformación acústica en $t = 120$ .....	49
Figura IV.19 Gráfica de la deformación acústica en $t = 130$ .....	50

## Índice de tablas

Tabla I.1. Componentes independientes del módulo piezoeléctrico.....	7
Tabla I.2. Componentes independientes del módulo piezoeléctrico en notación matricial.....	7
Tabla I.3. Notación tensorial y notación matricial .....	8
Tabla II.1. Parámetros para medios genéricos.....	19
Tabla II.2. Conversiones de Terahertz .....	21
Tabla III.1. Propiedades del GaN .....	27
Tabla III.2. Propiedades del InN.....	29
Tabla IV.1 Parámetros de simulación.....	38



## Introducción

Hoy en día la generación de ondas en el rango de terahertz es posible por medio de las antenas foto-electrónicas, por láseres que trabajan en el rango de THz, por dispositivos de estado sólido y por medio de tubos de vacío. En esta investigación se propone un método alternativo para la excitación y amplificación de las ondas en rango de terahertz, el cual se basa en la inestabilidad de la onda de carga espacial en los semiconductores con conductividad diferencial negativa. La importancia de la investigación sobre la excitación y amplificación de las ondas en el rango de THz en las películas de InN y GaN se debe a que hay información reciente sobre la conductividad diferencial negativa en las películas InN y GaN con parámetros mejores de los que se tenían antes.

El GaN e InN son semiconductores con propiedades muy importantes para la generación y amplificación de ondas acusto-electromagnéticas en el rango de terahertz entre las que destacan la conductividad diferencial no lineal y el efecto piezoeléctrico

## Estado del arte

- La generación de ondas en terahertz por medio ópticos en guías de onda plana de GaAs (Vodopyanov y Avetisyan, 2008), este método ocupa un oscilador paramétrico óptico como fuente con una longitud de onda dual de cerca de  $2\ \mu\text{m}$  y una guía de onda plana hecha con una oblea de GaAs no dopado y semiaislado. La guía tiene una longitud de 7.5 mm, un ancho de 8 mm y un grosor de alrededor de  $61\ \mu\text{m}$ . Se eligió GaAs debido a que es uno de los cristales menos electro-ópticamente absorbente en frecuencia de terahertz, la radiación en terahertz se generaba por la mezcla de frecuencia provenientes de la fuente hacia la guía. En esta investigación obtuvieron una frecuencia de 2 terahertz casi sin ruido y una eficiencia de alrededor de 45%.

- Se ha generado radiación en terahertz haciendo uso de transistores de alta movilidad de electrones basados en InGaAs/ InAlAs, en los cuales la corriente inducida del colector-emisor es modulada de manera ultra rápida por una modulación óptica realizada por un láser que apunta a la base (Kondo y Hirakawa, 2005). En esta investigación la radiación se obtuvo con una frecuencia de 156 Gigahertz lo cual la coloca en la parte de baja de la banda terahertz.
- Se han desarrollado transistores de alta movilidad de electrones basados en GaN (Tirelli, 2014), los cuales tuvieron una frecuencia máxima de 94 Gigahertz, lo cual los coloca cerca de la banda terahertz, y también se desarrollaron transistores de alta movilidad de electrones basados en AlGaIn, los cuales obtuvieron una frecuencia máxima de 300 Gigahertz.

## Objetivos de la investigación

El objetivo de la investigación es simular un dispositivo que amplifique la onda acusto-electromagnética en el rango de terahertz, el dispositivo va a estar basado en las películas de GaN e InN, para así poder analizar, cómo afectan las propiedades de estos semiconductores en la amplificación.

## Alcances de la investigación

- Determinar cuáles son los parámetros óptimos para la amplificación de las ondas acusto-electromagnéticas en las películas de GaN e InN.
- Analizar posibles aplicaciones que se podrían realizar con dispositivos basados en los resultados obtenidos en la simulación.

## Contribución de la tesis

La aportación de este trabajo es la simulación de la excitación y amplificación de las ondas acusto-electromagnéticas en el rango de THz por medio del efecto piezoeléctrico y la conductividad diferencial negativa.

# I. Redes Cristalinas

## Introducción

Un cristal puede ser definido como un sólido que está constituido por patrones de átomos que se repiten así mismos de manera periódica en tres dimensiones. Este patrón puede estar constituido un conjunto en el cual todos los átomos son iguales o existen diferentes tipos de átomos, el grupo más pequeño de átomos que consisten en un patrón repetitivo se les llama celda unitaria y a la repetición periódica de este patrón se le llama estructura cristalina.

La importancia de las estructuras cristalinas reside en que determinan propiedades como la piezoelectricidad, piroelectricidad, polarización sin campo eléctrico e inclusive el comportamiento ferroeléctrico. La estructura cristalina de un material puede ser revelada a través de la formación macroscópica de un cristal o a través de métodos como la difracción de rayos-x, difracción de electrones o difracción de neutrones entre otros métodos.

### I.1. Clasificación de redes cristalinas.

Hoy en día la estructura cristalina más usada en la industria es la estructura de diamante, la cual puede ser vista en la Figura 1.1. En esta estructura cada átomo de la malla del diamante tiene una unión covalente con cuatro átomos adyacentes, juntos forman un tetraedro, esta malla puede formarse también de dos mallas cúbicas centradas en la cara, que se desplazan a lo largo del cuerpo, los átomos de dicha malla son iguales. (Koshova *et al.* 2014).

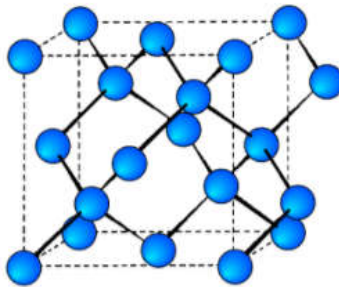


Figura I.1. Estructura de Diamante

La estructura Zinc Blende es similar a la estructura de diamante, pero contiene dos diferentes tipos de átomos. Cada átomo tiene cuatro uniones covalentes y tanto la estructura de diamante como la estructura de zinc-blende son mallas cúbicas, el nitruro de galio puede tener esta configuración, la estructura de zinc blende puede ser vista en la Figura 1.2.

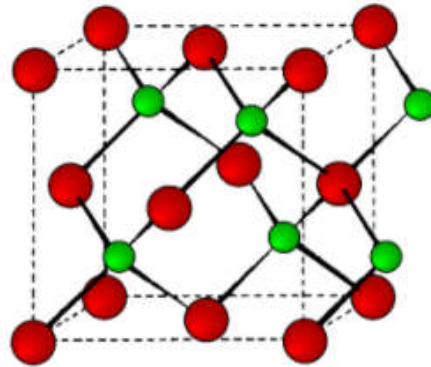


Figura 1.2. Estructura zinc blende

La estructura Wurzite tiene una celda unitaria hexagonal y dos mallas constantes  $c$  y  $a$  las cuales son representadas en la Figura 1.3 por el amarillo y rojo. Este tipo de estructura contiene 2 tipos diferentes de átomos y consiste de dos submallas hexagonales cercanamente empaquetadas. El nitruro de indio tiene esta configuración y el nitruro de galio puede tener esta configuración. La estructura de Wurzite es no centro simétrica, debido a esto, los cristales que tienen estructura de Wurzite generalmente tienen propiedades piezoeléctricas y pyroeléctricas.

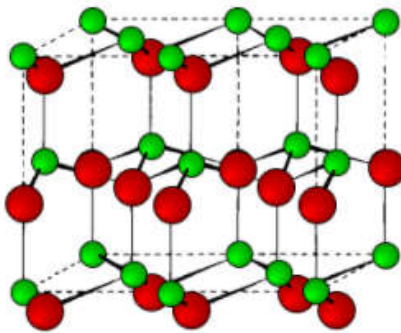


Figura 1.3. Estructura Wurzite

## 1.2. Estructura de bandas.

La estructura de bandas de un material describe el rango de energías que un electrón dentro del material puede tener. A estos rangos también se le llaman bandas de energía, A los rangos que no puede tener, se les llaman bandas prohibidas. Estas bandas se determinan al examinar las funciones de onda permitidas para los electrones en una gran red periódica de moléculas del material. A diferencia de los modelos de electrones libres en el material, la estructura de bandas explica porque los materiales pueden ser conductores, aislantes o semiconductores, además de explicar porque sus propiedades de conducción varían tanto con la temperatura y las propiedades de absorción óptica.

Las bandas de energía ocurren porque en un sólido, como una red cristalina, las órbitas de los átomos se traslapan y a causa del principio de exclusión de Pauli, cada órbita se divide en una cantidad discreta de orbitas moleculares cada una con un nivel de energía diferente. Debido a que el número de átomos en un sólido es muy grande ( $N \sim 10^{22}$ ), el número de orbitas también es muy grande, por lo cual están muy cerca en energía así que los niveles de energía adyacentes se pueden considerar continuos, por lo cual se consideran una banda de energía. La formación de la banda de energía es en su mayoría debido a que los electrones de la última orbita de los átomos, tienen una tendencia mayor a traslaparse en un sólido.

En cambio, las bandas prohibidas son esencialmente rangos de energía restantes los cuales no son cubiertos por las bandas de energía, esto es debido a que las bandas de energía tienen un ancho finito. El ancho de las bandas prohibidas en los semiconductores tiende a disminuir al incrementar la temperatura. Esto es a causa de que el espacio entre los átomos se incrementa cuando la magnitud de las vibraciones atómicas aumenta debido a la energía térmica, al incrementarse el espacio entre átomos se decrementa el potencial promedio de los electrones en el material lo cual es la causa de la reducción del ancho de banda prohibida.

### 1.3. Efecto piezoeléctrico.

Si un esfuerzo es aplicado a ciertos cristales, 'estos desarrollan un momento eléctrico, el cual tiene una magnitud proporcional al esfuerzo aplicado. A esto se le conoce como el efecto piezoeléctrico directo. Para que un cristal posea el efecto piezoeléctrico es necesario que no tenga centro de simetría.

El efecto piezoeléctrico se basa en que se altere el espacio entre los lugares positivos y negativos en cada una de las celdas unitarias, provocando así una polarización neta en la superficie del cristal, en (I. 1.) se describe este efecto.

$$P = d\sigma \quad (I. 1.)$$

En (I. 1.),  $\sigma$  representa el esfuerzo aplicado en el cristal,  $d$  es una constante llamada el módulo piezoeléctrico y  $P$  es la carga de polarización por unidad de área. Como se puede inferir de (I. 1.), un esfuerzo de compresión va a generar una carga de polarización en dirección opuesta a la que generaría un esfuerzo de tracción. Esto es representado en la Figura 1.4.

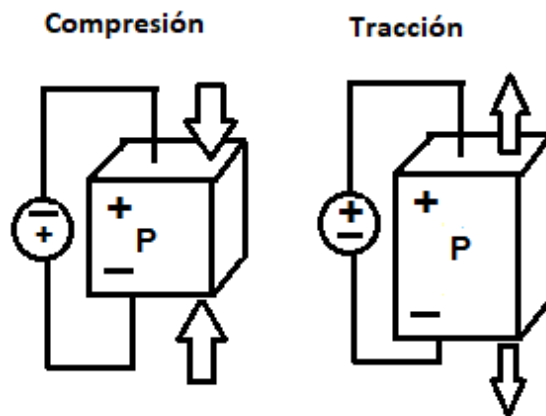


Figura 1.4. Efecto piezoeléctrico directo

Un esfuerzo mecánico se representa con un tensor de segundo orden con 9 componentes mientras que la polarización de un cristal es un vector por lo cual solo tiene 3 componentes. Cuando un esfuerzo  $\sigma_{ij}$  actúa en un cristal con efecto

piezoeléctrico cada componente de la polarización  $P_i$  está linealmente relacionado con todos los componentes de  $\sigma_{jk}$  y con los módulos piezoeléctricos  $d_{ijk}$ , (l. 2.) representa esta relación para los componentes de la polarización:

$$\begin{aligned}
 P_i = & d_{i11}\sigma_{11} + d_{i12}\sigma_{12} + d_{i13}\sigma_{13} + \\
 & d_{i21}\sigma_{21} + d_{i22}\sigma_{22} + d_{i23}\sigma_{23} + \\
 & d_{i31}\sigma_{31} + d_{i32}\sigma_{32} + d_{i33}\sigma_{33}
 \end{aligned}
 \tag{l. 2.}$$

De (l. 2.) se puede concluir que los módulos piezoeléctricos consisten en un tensor de 3 orden con 27 componentes de los cuales solo 18 son independientes debido a la simetría de  $d_{ijk}$  en  $j$  y  $k$ . Estos 18 componentes son los se pueden ver en la Tabla I.1.

Primera capa			Segunda capa			Tercera capa		
$d_{111}$	$d_{112}$	$d_{113}$	$d_{211}$	$d_{212}$	$d_{213}$	$d_{311}$	$d_{312}$	$d_{313}$
	$d_{122}$	$d_{123}$		$d_{222}$	$d_{223}$		$d_{322}$	$d_{323}$
		$d_{133}$			$d_{233}$			$d_{333}$

Tabla I.1. Componentes independientes del módulo piezoeléctrico

En caso de que un esfuerzo de tracción uniaxial definido por  $\sigma_{11}$  sea aplicado al cristal, resulta en una polarización con los siguientes componentes en (l. 3.).

$$P_1 = d_{111}\sigma_{11}, \quad P_2 = d_{211}\sigma_{11}, \quad P_3 = d_{311}\sigma_{11}
 \tag{l. 3.}$$

A lo largo de la tesis se ocupa una notación similar a la de la Tabla I.1. pero con los sufijos reducidos, por lo cual la Tabla I.1. es modificada en la Tabla I.2.

Primera capa			Segunda capa			Tercera capa		
$d_{11}$	$\frac{1}{2}d_{16}$	$\frac{1}{2}d_{15}$	$d_{21}$	$\frac{1}{2}d_{26}$	$\frac{1}{2}d_{25}$	$d_{31}$	$\frac{1}{2}d_{36}$	$\frac{1}{2}d_{35}$
	$d_{12}$	$\frac{1}{2}d_{14}$		$d_{22}$	$\frac{1}{2}d_{24}$		$d_{32}$	$\frac{1}{2}d_{34}$
		$d_{13}$			$d_{23}$			$d_{33}$

Tabla I.2. Componentes independientes del módulo piezoeléctrico en notación matricial

Se puede ver que en la nueva notación, el primer sufijo es el mismo pero el segundo y tercer sufijo son remplazados por número que van del 1 al 6, como se realizó el remplazamiento se puede ver en la Tabla I.3.

Notación tensorial	11	22	33	23,32	31,13	12,21
Notación matricial	1	2	3	4	5	6

Tabla I.3. Notación tensorial y notación matricial

También existe el efecto piezoeléctrico inverso el cual se genera cuando un campo eléctrico es aplicado a un cristal piezoeléctrico, provocando una deformación mecánica en el cristal. Esto se debe a una consecuencia termodinámica del efecto piezoeléctrico directo. El efecto piezoeléctrico inverso esta descrito por la fórmula (I. 4.).

$$\epsilon_{jk} = d_{ijk} \mathbf{E}_i \quad (\text{I. 4.})$$

En la fórmula 4  $\mathbf{E}_i$  es el vector del campo eléctrico aplicado,  $\epsilon_{jk}$  es la deformación física del cristal y  $d_{ijk}$  son los módulos piezoeléctricos.

#### I.4. Elasticidad.

Un sólido cambia su forma cuando está sujeto a un esfuerzo, siempre y cuando el esfuerzo sea menor a un valor límite llamado limite elástico el sólido recupera su forma original una vez que el esfuerzo es removido. La fórmula que calcula cuanto se va deformar un sólido cuando se le aplica un esfuerzo se llama la ley de Hooke (I. 5.).

$$\epsilon = \delta \sigma \quad (\text{I. 5.})$$

En I.5.  $\epsilon$  es la deformación,  $\delta$  es una constante llamada el coeficiente de elasticidad y  $\sigma$  es el esfuerzo aplicado. El coeficiente de elasticidad es un tensor de cuarto orden mientras que los esfuerzos y las deformaciones son tensores de



segundo orden y cuando un esfuerzo homogéneo  $\sigma_{ij}$  es aplicado a un cristal la resultante deformación homogénea  $\epsilon_{ij}$  es tal que cada componente esta linealmente relacionado con todos los componentes del esfuerzo, como se puede ver en (I. 6.).

$$\begin{aligned} \epsilon_{11} = & \delta_{1111}\sigma_{11} + \delta_{1112}\sigma_{12} + \delta_{1113}\sigma_{13} + \\ & \delta_{1121}\sigma_{21} + \delta_{1122}\sigma_{22} + \delta_{1123}\sigma_{23} + \\ & \delta_{1131}\sigma_{31} + \delta_{1132}\sigma_{32} + \delta_{1133}\sigma_{33} \end{aligned} \quad (I. 6.)$$

La ecuación (I. 7.) es una de 9 ecuaciones para los nueve componentes de  $\epsilon_{11}$ , las nueve ecuaciones se pueden escribir de manera generalizada (I. 7.).

$$\epsilon_{ij} = \delta_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (I. 7.)$$

La ecuación (I. 7.) indica que si aplicamos un esfuerzo con un solo componente como podría ser  $\sigma_{11}$  es posible que todos los componentes de la deformación sean diferentes a cero, lo cual indica que si a un bloque rectangular de un cristal se le aplica un esfuerzo de tensión uniaxial y paralelo a un conjunto de aristas, no solo se va a estirarse en la dirección del esfuerzo, si no que puede deformarse de tal manera que los ángulos ente las aristas se hagan diferentes a cero. Como alternativa a la ecuación (I. 7.) los esfuerzos pueden ser expresados con base en las deformaciones. En la ecuación (I. 8.),  $c_{ijkl}$  son los coeficientes de rigidez del cristal.

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\epsilon_{kl} \quad (I. 8.)$$

Debido a que los esfuerzos pueden ser siempre tomados como simétricos eso da origen a la relación (I. 9.) y a (I. 10.).

$$\delta_{ijkl} = \delta_{ijlk} \quad (I. 9.)$$

$$\delta_{ijkl} = \delta_{jilk} \quad (I. 10.)$$

De las relaciones (I. 9.) y (I. 10.) se concluye que solo 36 de los 81 coeficientes de elasticidad son independientes, las relaciones (I. 9.) y (I. 10.) también son aplicables para los coeficientes de rigidez, por lo cual también solo cuenta 36

componentes independientes, en (I. 11.) se muestran estos 36 componentes con los sufijos en forma de notación matricial de la tabla I.3.

$$\begin{array}{cccccc}
 \delta_{11} & \delta_{12} & \delta_{13} & \delta_{14} & \delta_{15} & \delta_{16} \\
 \delta_{21} & \delta_{22} & \delta_{23} & \delta_{24} & \delta_{25} & \delta_{26} \\
 \delta_{31} & \delta_{32} & \delta_{33} & \delta_{34} & \delta_{35} & \delta_{36} \\
 \delta_{41} & \delta_{42} & \delta_{43} & \delta_{44} & \delta_{45} & \delta_{46} \\
 \delta_{51} & \delta_{52} & \delta_{53} & \delta_{54} & \delta_{55} & \delta_{56} \\
 \delta_{61} & \delta_{62} & \delta_{63} & \delta_{64} & \delta_{65} & \delta_{66}
 \end{array} \tag{I. 11.}$$

La presencia de simetría en el cristal reduce todavía más la cantidad de coeficientes independientes esta última reducción varía según la estructura del cristal

### I.5. Efecto Gunn.

El efecto Gunn fue descubierto por J.B. Gunn en 1963. Él observó oscilaciones similares al ruido cuando le aplicaba al galio arsénico (GaAs) tipo N un campo eléctrico superior a cierto límite, también notó que la resistencia de las muestras disminuía, lo cual indica una región de resistencia diferencial negativa.

El efecto Gunn surge de la particular forma de la estructura de bandas de algunos semiconductores compuestos del grupo III/V como el GaAs, InP y el GaN, en la Figura I.5 se puede ver la estructura de las bandas del GaN. Estos materiales tienen banda prohibida directa, teniendo el mínimo de la banda de conducción en el punto  $\Gamma$ . Hay dos valles satélites en los puntos X y L en las direcciones [111] y [100] respectivamente.

En campos eléctricos bajos los electrones de la banda de conducción ocupan el fondo del valle central. Al aplicar un campo eléctrico, los electrones aceleran hasta que colisionan con las imperfecciones de la estructura cristalina, los electrones pierden un componente de su momentum, el cual es dirigido a lo largo del campo eléctrico y también se esparce en energía cinética, la cual calienta la estructura. A nivel que el campo eléctrico se incrementa, el promedio de la

energía de los electrones se aumenta y niveles de energía más altos pueden ser ocupados en la banda de conducción.

Cuando la energía cinética de los electrones alcanza el valle de en medio de transferencia de energía,  $\Delta E = E_L - E_{\Gamma}$  para el GaN este punto es 0.52 eV, los electrones tienen la opción adicional de ocupar uno de los valles satélites, mientras que haya una transferencia de momento adecuada también involucrada.

En los valles satélites, la curvatura es mayor y la masa efectiva de electrón puede llegar a ser hasta 6 veces la masa efectiva que tienen cuando están en el valle  $\Gamma$  (Hobson, 1974), los electrones con energía suficiente tienen la opción de ocupar cualquiera de los dos valles. Para estos electrones hay una mayor probabilidad de ocupar el valle satélite, el cual provee una alta densidad relativa de los estados.

En los valles satelitales, los electrones además de tener una mayor masa efectiva también pasan por un fuerte proceso de esparcimiento. Para campos eléctricos todavía más altos más electrones tienen ocupan un valle satélite. Aunque al incrementar el campo eléctrico debería llevar a una mayor velocidad de arrastre de los electrones en cada uno de los valles, la transferencia del valle de en medio compensa esto y resulta en movilidad diferencial negativa.

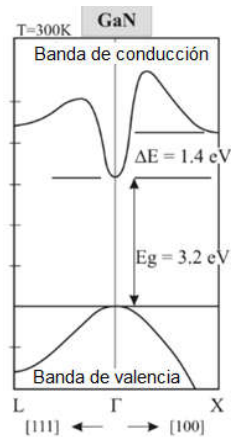


Figura I.5. Estructura de bandas en el GaN

## I.6. Conductividad diferencial negativa.

La importancia de la resistencia diferencial negativa reside en que cuando una onda electromagnética entra en un medio que tiene resistencia negativa es de esperarse que la onda se amplifique. En 1961 se discutió por primera vez la posibilidad de que ocurrieran efectos de resistencia negativa en semiconductores, pero como el comportamiento absoluto de resistencia negativa en semiconductores no se halló en la época se empezó a trabajar con resistencia diferencial negativa. Los materiales que tienen resistencia diferencial negativa tienen una gráfica característica de velocidad de deriva contra el campo eléctrico, en la cual la velocidad de deriva crece hasta un máximo justo antes de su saturación, después decrece y se satura. Esta gráfica puede ser vista en la Figura I.6.

Se puede notar en la Figura I.6, que hay regiones en la gráfica en las que la derivada de la velocidad de deriva con respecto al campo eléctrico es menor a cero y por tal razón se le llama conductividad diferencial negativa.

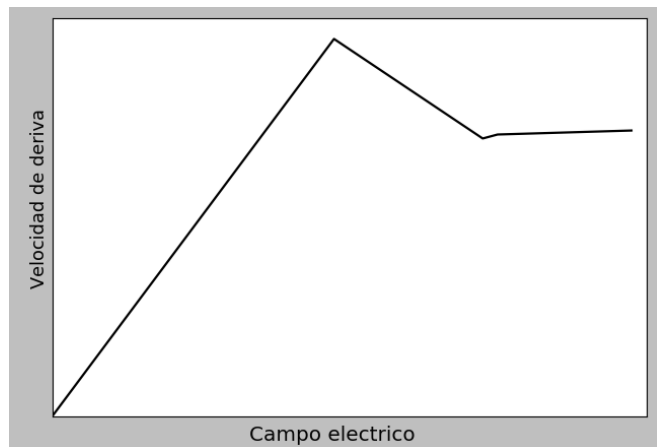


Figura I.6. Gráfica característica de materiales con resistencia diferencial negativa.

La explicación de la resistencia diferencial negativa se establece en la teoría de Ridley-Watkins-Hilsum y se basa en la combinación de ciertas características en la estructura de bandas de energía que pueden llegar a tener ciertos semiconductores, se necesita que el semiconductor tenga una masa ligera en el extremo de la banda de conducción y cerca de esta banda, pero debe de ser un poco mayor en energía y tener una masa mayor en el mínimo superior, ii en la

Figura I.7, entonces se espera que los electrones en el mínimo inferior con una masa menor, i en la Figura I.7, exhiban una gran movilidad en comparación con cualquiera en el mínimo superior.

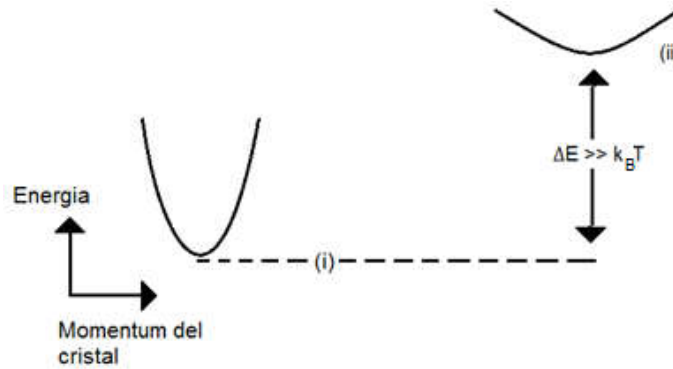


Figura I.7. Mínimos de la banda de conducción

Pero la separación de energía entre el mínimo inferior y el mínimo superior ( $\Delta E$ ) es tal que a temperatura ambiente la curva de la velocidad observada se espera que se caracterice por los electrones exclusivamente confinados al extremo de la banda. Esta curva sería la línea i en la Figura I.8. Como vaya incrementando el campo eléctrico aplicado, los electrones ligeros ganan energía de manera rápido del campo eléctrico debido a su alta movilidad y es posible que en campos eléctricos moderados los electrones tengan una alta energía promedio ( $1500^\circ\text{K}^{18}$ ), así que aunque  $\Delta E \gg k_B T$ , los electrones pueden comenzar a transferirse al mínimo superior.

Asumiendo que a un campo eléctrico definido una transferencia total de los electrones ocurre, entonces la curva de velocidad observada debe cambiar de la curva característica para el mínimo de la masa ligera, línea i en la Figura I.8, a la curva característica para el mínimo de la masa pesada línea ii en la Figura I.8; La curva resultante de tal transferencia sería la línea discontinua en la Figura I.8 y se puede ver que demanda una reducción en la densidad de corriente y por lo tanto una región de resistencia diferencial negativa a partir de un campo limite  $E_T$ .

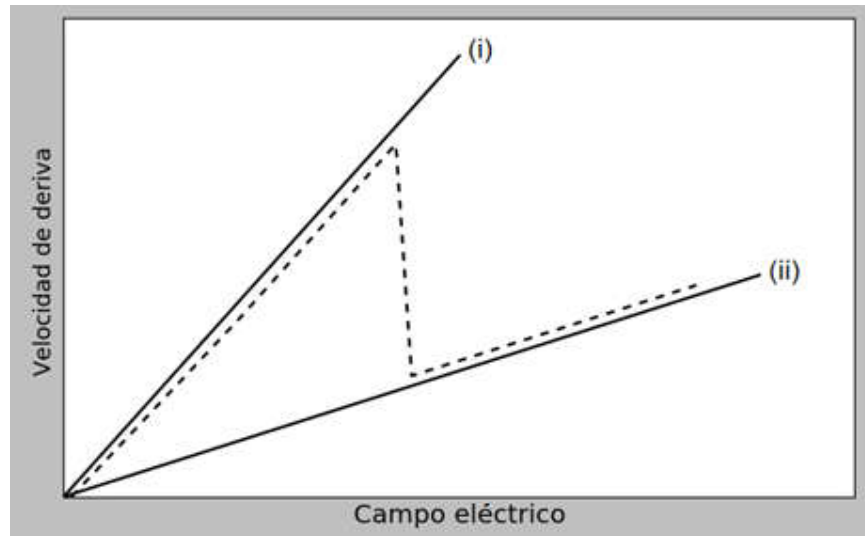


Figura I.8. Curvas de velocidad de deriva contra campo eléctrico (i) mínimo con masa ligera y (ii) mínimo con masa pesada.

### I.7. Semiconductores del grupo de Nitruros-III.

Los semiconductores del grupo nitruros-III se forman debido a la unión de uno o más elementos elemento del grupo III como el aluminio, galio, indio o boro y el elemento del grupo V el nitrógeno, he incluyen al GaN, InN AlN, InGaN y a el AlInGaN. Estos materiales tienen estructura wurzite en su forma estable con una simetría hexagonal, la gran diferencia en electronegatividad entre el grupo III y el grupo V resulta en enlaces químicos muy fuertes, los cuales son el origen para múltiples de sus propiedades como lo es su alto punto de fusión, su resistencia mecánica y su estabilidad química, lo cual hace que los dispositivos basados en ellos puedan resistir un ambiente abrasivo mucho mejor que los dispositivos basados en semiconductores convencionales como el Si, Ge o el GaAs.

Todos los semiconductores del grupo Nitruros-III tienen banda prohibida directa y la banda prohibida varía de entre 0.7 eV hasta 6.2 eV y ciertas uniones como el InAlN y el AlGaIn tienen una banda prohibida ajustable la cual cubre todo el espectro de luz visible y parte de la región ultravioleta profundo, También tienen propiedades de piezoelectricidad, piroelectricidad (Bykshovsfo *et al.*, 1996) y generación de segundo armónico (Miragliotta *et al.*, 1993) y poseen una alta conductividad térmica, además tienen una masa efectiva mayor a los

semiconductores convencionales lo cual conlleva una menor movilidad de portadores, también cuentan con altas velocidades de deriva de saturación.

Recientemente se han hecho avances notorios en la investigación y desarrollo de estos materiales y dispositivos basados en ellos como lo son los diodos emisores de luz azul-verde-blanca de alta potencia y alta brillantez y los diodos láser azules, entre otros dispositivos optoelectrónicos, también se han hecho múltiples dispositivos electrónicos basados en estos semiconductores como es el transistor de alta movilidad de electrones, el transistor bipolar de heterounión, el diodo Schottky y el transistor de efecto de campo metal-óxido-semiconductor.

Las principales características que los hacen adecuados para ser usados en los electrónicos de alta potencia y de alta frecuencia son su alta movilidad de electrones, su alta velocidad de saturación y su alta conducción térmica. Otra ventaja de los semiconductores del grupo de nitruros-III es que los dispositivos que se basen en ellos son más amigables con el medio ambiente debido a que no contienen elementos tóxicos como el arsénico que es ocupado en la fabricación dispositivos basados en GaAS.

## 1.8. Semiconductores con banda prohibida ancha.

Los semiconductores con banda prohibida ancha han atraído mucha atención en los últimos años de debido a sus aplicaciones optoelectrónicas y electrónicas. La razón por la cual surge este interés se debe a que estos semiconductores tienen propiedades físicas muy diferentes y a veces superiores a las del silicio. Los semiconductores de banda prohibida ancha son típicamente producidos con una estructura de wurzita y tienen una banda prohibida de 2 eV a 6 eV. Que tengan una banda prohibida tan grande es útil para su uso en diodos emisores de luz los cuales emitan la luz en una longitud de onda corta y para dispositivos electrónicos de alta potencia.

Los semiconductores de banda prohibida ancha también tienen aplicaciones relacionadas a la radio frecuencia esto se debe a su transportación rápida de

portadores debido a su alta concentración intrínseca de electrones. La banda prohibida ancha ( $E_g$ ) resulta en un alto voltaje de ruptura ( $E_c$ ), lo cual permite la aplicación de un alto voltaje y que aunque la temperatura del material se seleve este siga siendo operativo, el voltaje de ruptura de los semiconductores de banda ancha prohibida llega a ser hasta un orden de magnitud más alto el voltaje de ruptura de semiconductores convencionales como el silicio o el Arseniuro de galio.

### I.9. Semiconductores de banda prohibida angosta.

Se considera que cualquier semiconductor con una banda prohibida menor a 1.11 eV es un semiconductor con banda prohibida angosta. Recientemente ha crecido el interés sobre los semiconductores con banda prohibida angosta, una de las causas primarias de este interés se debe a que la pequeña banda prohibida que poseen lo cual los hace el material a ocupar para aplicaciones como sensores infrarrojos y sensores de temperatura, además la facilidad de realizar un contacto eléctrico con algunos materiales de banda angosta como puede ser un contacto óhmico con n-InAs, ha hecho que sean muy ocupados para la realización de nanoestructuras eléctricas, un ejemplo de un semiconductor de banda prohibida angosta es el nitruro de indio InN ya que su banda prohibida es de 0.65 eV.

Las propiedades más importantes de los semiconductores de banda angosta incluyen masas efectivas pequeñas para los huecos ligeros y para electrones de conducción, una superficie inusual, facilidad para permitir interfaces y la posibilidad de incorporar el 0.1% de iones magnéticos como el Fe o el Mn. La teoría  $k \cdot p$  establece que una masa efectiva pequeña esta naturalmente relacionada con una banda prohibida pequeña (Kittel, 1963). La masa efectiva de la banda de conducción y de los huecos ligeros en el caso de los cristales con estructura zinc blende está definida por la relación (I. 12.) de la cual se puede concluir la razón por la cual los semiconductores de banda angosta tienen masas efectivas pequeñas.



La masa efectiva pequeña y su banda prohibida angosta hace que estos materiales sean ocupados para observar efectos de confinamiento cuántico en dimensiones más grandes que los materiales con una masa mayor o con una banda prohibida mayor.

Pero las características más interesantes de los semiconductores de banda angosta se encuentran en su superficie y sus propiedades de interface, para semiconductores con una banda ancha mayor muchas de las posiciones energéticas importantes para interfaces se encuentran en la banda prohibida, un ejemplo de esto es la posición del nivel de energía de fermi en una interface metal-semiconductor esta típicamente localizado dentro de la banda prohibida del semiconductor, lo cual provoca un comportamiento típico de barrera Schottky.

Con bandas prohibidas angostas las posibles locaciones de estas energías está más restringida lo que conlleva a posiciones inusuales para las energías en la interface, un ejemplo de esto es que en la interface entre un contacto óhmico y el InAs el nivel de energía de fermi del contacto está en la banda de conducción lo cual hace que se tenga un comportamiento similar a una barrera de Schottky negativa de 12 meV (Mead y Spitzer 1964).

## II. Ondas electromagnéticas.

### Introducción.

Una onda electromagnética en el vacío consiste en un campo eléctrico y un campo magnético que oscilan y son perpendiculares, por tal motivo es una onda transversal ya que los campos a su vez son perpendiculares a la dirección de propagación, dicha dirección de propagación es rectilínea. Todas las ondas electromagnéticas sin importar su frecuencia, viajan en el vacío exactamente a la misma velocidad durante todo su trayecto, esa velocidad es la velocidad de la luz ( $c = 299792458$  m/s).

La frecuencia  $f$  y la longitud de onda  $\lambda$  de una onda electromagnética en el vacío están relacionadas por la fórmula (II. 1.), donde  $\omega$  es la frecuencia angular.

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{c}{\omega/2\pi} \quad (\text{II. 1.})$$

La velocidad de una onda electromagnética varía según el medio de propagación, pero la frecuencia de la onda permanece constante al pasar de un medio a otro medio, las propiedades del medio que influyen como se propagan las ondas electromagnéticas en él son las siguientes:

- Permitividad o constante dieléctrica se representa con la letra  $\epsilon$  y es la capacidad de un medio para almacenar energía electrostática y se calcula según la fórmula (II. 2.), donde  $\mathbf{D}$  es la intensidad del flujo eléctrico y  $\mathbf{E}$  es la intensidad del campo eléctrico.

$$\epsilon = \frac{\mathbf{D}}{\mathbf{E}} \quad (\text{II. 2.})$$

- Permeabilidad magnética es representada con la letra  $\mu$  y es la capacidad de un medio para permitir el flujo de un campo magnético y se calcula según la fórmula (II. 3.), donde  $\mathbf{B}$  es la intensidad del campo magnético y  $\mathbf{H}$  intensidad del flujo magnético en el medio.

$$\mu = \frac{\mathbf{B}}{\mathbf{H}} \quad (\text{II. 3.})$$

- Conductividad es representada por la letra  $\sigma$  y es capacidad de un medio para conducir una corriente eléctrica y se calcula según la formula (II. 4.) donde  $\rho$  es la resistividad del medio.

$$\sigma = \frac{1}{\rho} \quad (\text{II. 4.})$$

El valor de estos parámetros para distintos medios genéricos se muestra en la Tabla II.1.

Medio	$\sigma$	$\epsilon$	$\mu$
Vacío	0	$\epsilon_0$	$\epsilon_r \mu_0$
Dialéctrico sin pérdidas	0	$\epsilon_r \epsilon_0$	$\epsilon_r \mu_0$
Dialectrico con pérdidas	$\neq 0$	$\epsilon_r \epsilon_0$	$\epsilon_r \mu_0$
Conductor	$\approx \infty$	$\epsilon_0$	$\epsilon_r \mu_0$

Tabla II.1. Parámetros para medios genéricos

Para calcular la propagación de una onda electromagnética en un medio se ocupa la formula (II. 5.), pero si el medio es un conductor la propagación es inexistente, esto se debe a que la onda electromagnética es absolutamente reflejada al impactar con el conductor.

$$v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}} \quad (\text{II. 5.})$$

Todos los fenómenos electromagnéticos clásicos son descritos por las ecuaciones de Maxwell las cuales se muestran en forma diferencial de la fórmula (II. 6.) a la fórmula (II. 9.).

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (\text{II. 6.})$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (\text{II. 7.})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (\text{II. 8.})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{II. 9.})$$

La fórmula (II. 6.) es conocida como la ley de inducción de Faraday, una interpretación de esta ley es que los campos magnéticos variables en el tiempo generan campos eléctricos. La fórmula (II. 7.) es la ley de Ampere-Maxwell y una interpretación es que un campo eléctrico que varía en el tiempo genera un campo magnético.

La fórmula (II. 8.) es la ley de Gauss para el campo eléctrico la cual indica que el flujo eléctrico entrando a cualquier superficie cerrada es igual a la carga contenida en esa región en otras palabras es que las líneas del campo eléctrico solo inician y acaban en las cargas. La fórmula (II. 9.) es la ley de Gauss para el campo magnético la cual indica que el campo magnético no tiene divergencia alguna lo cual significa que acaban donde inician.

Estas cuatro formulas en conjunto permiten explicar la generación y propagación de las ondas electromagnéticas, como ejemplo de esto, una corriente  $J$  que varía en el tiempo en una antena genera un campo magnético  $H$  a su alrededor. Este campo magnético también varía en el tiempo, lo cual por la ley de Faraday genera un campo eléctrico  $E$  el cual varía en el tiempo. Este campo eléctrico a su vez, por la ley de Ampere, genera un campo magnético y el ciclo de generación continua, en la Figura II.1. se puede ver una representación de la generación y propagación de la onda electromagnética y de que la onda eléctrica esta  $90^\circ$  de la onda magnética.

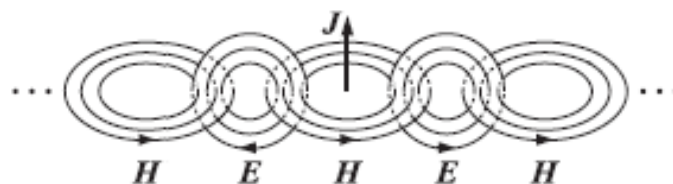


Figura II.1. Propagación de onda electromagnética

## II.1. Radiación en terahertz (THz).

La radiación en terahertz son ondas electromagnéticas cuya frecuencia se encuentra entre las regiones de microondas e infrarrojo. No se puede ver la

radiación en terahertz, pero se puede llegar a sentir su calor debido a que comparte espectro con la región de infrarrojo lejano.

Naturalmente la radiación en THz es parte de nuestra vida diaria y aun así esta parte del espectro electromagnético continúa siendo la región menos explorada. Esto se debe principalmente a las dificultades técnicas involucradas al realizar un una fuente o detector de radiación THz la cual sea eficiente y compacta. La ausencia de tecnologías aptas conllevó á que la banda de THz comenzará a ser llamada la Brecha THz la cual es mostrada en la Figura II.2..

La región de terahertz contiene una gran cantidad de características espectrales asociadas con procesos fundamentales de la física como las transiciones rotacionales de las moléculas, las vibraciones de red en los sólidos, transiciones interbanda en semiconductores y brechas de energía en los superconductores, por lo cual se ha trabajado en estas últimas dos décadas para que esta brecha tecnológica se reduzca de manera rápida, las tecnologías ópticas han realizado tremendos avances en el área de alta frecuencia. A su vez, las tecnologías de microondas han comenzado a ser adaptadas para ser ocupadas en el rango de THz. Los terahertz pueden ser convertidos en múltiples unidades la Tabla II.2. se muestran algunas de estas conversiones, en Tabla II.2.  $f$  es la frecuencia,  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío,  $h$  es la constante de Planck y  $k_B$  es la constante de Boltzmann.

Magnitud	1 THz es igual a
Frecuencia angular	$\omega = 2\pi f = 6.28\text{THZ}$
Periodo	$T = 1 / f = 1 \text{ ps}$
Longitud de onda	$\lambda = c / f = 0.3 \text{ mm} = 300 \mu\text{m}$
Número de onda	$1 / \lambda = 33.3\text{cm}^{-1}$
Energía del fotón	$h\nu = \hbar\omega = 4.14 \text{ meV}$
Temperatura	$T = h\nu/k_B = 48 \text{ K}$

Tabla II.2. Conversiones de Terahertz

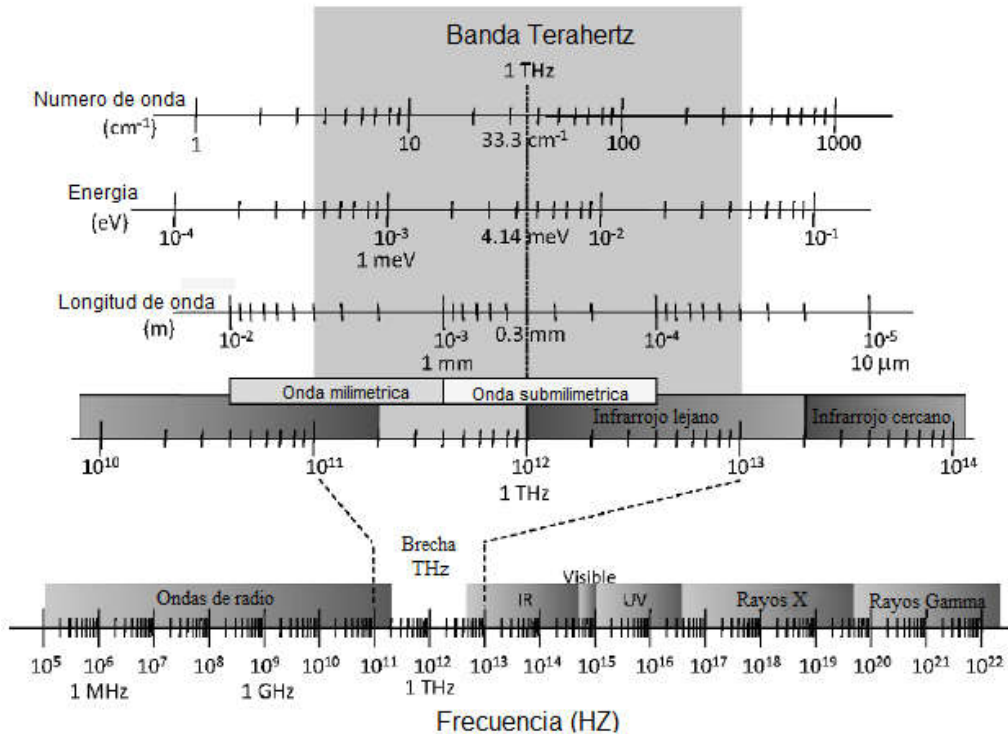


Figura II.2. Banda Terahertz en el espectro electromagnético

La banda terahertz actualmente no tiene una definición estándar. Las definiciones que comúnmente se ocupan abarcan la región de 0.1 a 30 THz. Una manera de generar radiación en terahertz es hacer uso de un medio no lineal, en el cual las ondas electromagnéticas incidentes pasen por una conversión no lineal de la frecuencia. Algunos métodos basados en la óptica para la generación de radiación en terahertz son la rectificación óptica y la generación de diferencia de frecuencia (DFG) son procesos ópticos no lineales de segundo orden, en los cuales un fotón en terahertz a una frecuencia  $\omega_T$ , es creado por una interacción de dos fotones ópticos a frecuencias  $\omega_1$  y  $\omega_2$  con un cristal no lineal tal que  $\omega_T = \omega_1 - \omega_2$ .

Los generadores de terahertz de estado sólido se basan en la conversión de microondas en sus ondas armónicas utilizando diodos con características de intensidad-voltaje no lineales. Un diagrama de este proceso se muestra en la Figura II.3. La radiación en terahertz también puede ser generada por una antena fotoconductor polarizada excitada por rayos láser. Este proceso consiste en que un el rayo láser ilumine la separación entre los electrodos de la antena

generando fotoreceptores y un campo estático polarizado, el cual acelerará a los receptores libres. Esta corriente fotoeléctrica varía acorde a la intensidad del rayo láser. Por consiguiente, pulsos del láser que sean muy cortos pueden llegar a producir pulsos en terahertz de banda ancha.



Figura II.3. Sistema de emisión de terahertz basado en diodos.

La detección de terahertz se divide en técnicas coherentes e incoherentes. Esta división se realiza debido a que las técnicas coherentes miden tanto la amplitud como la fase, mientras que las incoherentes solo miden la intensidad. Las técnicas coherentes están fuertemente relacionadas con las técnicas de generación debido a que ocupan los mismos mecanismos y componentes.

Un método de detección de terahertz basado en óptica es cuando un campo en terahertz induce doble refracción en un cristal óptico no lineal. La doble refracción inducida es proporcional a la amplitud del campo y la fase es determinada por una sonda óptica, que mide la doble refracción inducida en función del tiempo.

La detección de terahertz también se puede realizar al hacer uso de dispositivos de estado sólido. Esta técnica es incoherente y se basa en el uso de dispositivos llamados mezcladores. Un mezclador lo que hace es cambiar la frecuencia, en este caso la disminuye. Eso se hace al mezclar la señal en terahertz en una frecuencia  $\omega_S$  con una señal en una frecuencia fija  $\omega_{LO}$ . El mezclador produce una señal de salida en una frecuencia determinada por  $\omega_d = |\omega_S - \omega_{LO}|$ . La amplitud de la señal de salida es proporcional a la amplitud de la señal en terahertz. Una representación del proceso de detección por medio de mezcladores se puede ver en la Figura II.4.



Figura II.4. Sistema de detección de terahertz basado en mezcladores.

## II.2. Carga espacial.

La carga espacial es un exceso de carga eléctrica difundidas en un volumen y tratadas como si fueran una distribución continua en vez de una distribución de cargas puntuales. Esto aplica típicamente cuando los portadores han sido emitidos desde una región de un sólido, el gas de los portadores puede formar una región de carga espacial, si están lo suficientemente dispersos, o los átomos cargados dejados en el sólido pueden formar una región de carga espacial.

La carga espacial usualmente solo ocurre en dieléctricos o en el vacío debido a que en los conductores la carga tiene de a ser rápidamente neutralizada o sufrir apantallamiento eléctrico, la carga espacial puede ser positiva o negativa. Un ejemplo de la generación de una carga espacial es el exceso de carga negativa en la región alrededor de un metal cuando éste es calentado hasta el punto de incandescencia en el vacío. Este efecto también es llamado efecto Edison. La carga espacial es un fenómeno significativo en múltiples dispositivos electrónicos de estado sólido y de vacío. En el caso de los dispositivos de estado sólido, esto se debe a que las cargas espaciales pueden ocurrir cuando un dieléctrico esta sometido a un campo eléctrico de gran magnitud.

## II.3. Onda Acusto-electromagnética.

Una Onda acusto-electromagnética es una onda híbrida que está compuesta por el acoplamiento entre una onda con carga espacial y una onda acústica, la propagación de estas ondas es en la dirección piezoactiva del medio.



### III. Nitruro de Galio (GaN) y Nitruro de Indio (InN).

#### Introducción.

El nitruro de galio es probablemente el semiconductor más importante desde el silicio ya que se piensa que es el material clave para la siguiente generación de transistores de alta frecuencia y alta potencia que sean capaces de operar a una alta temperatura. El nitruro de galio es una aleación de los semiconductores del grupo del boro(III) y los semiconductores del grupo del nitrógeno(V).

El gran problema con el nitruro de galio es el costo de fabricación ya que se requiere un proceso especial para crecer un cristal de nitruro de galio u oblea sobre la cual puedan ser fabricados transistores o circuitos integrados, pero si el proceso llega a implementarse a gran escala los costos de producción deberían de bajar aunque seguirían siendo más costosos que los dispositivos basados en silicio. El costo mayor de los dispositivos basados en nitruro de galio se vería reflejado en las ventajas sobre los dispositivos basados en silicio. Algunas de esas ventajas se pueden ver a continuación:

- Poder tener una salida de alta potencia y conservar un tamaño pequeño.
- Alta velocidad de conmutación.
- Poder operar a potencias mayores.

Por su parte, el InN ha atraído mucha atención a consecuencia de su banda prohibida y de sus propiedades de transporte ya que estas permiten que sea considerado como un semiconductor a ser usado en electrónica de alta frecuencia (Kong *et al.*, 2005). Además, de posibles aplicaciones en optoelectrónica (Wu *et al.*, 2002) y en aplicaciones fotovoltaicas (Wu *et al.*, 2002). Adicionalmente, el InN ha abierto un nuevo campo de interés como un material emisor de radiación THz, esto se debe a que la estructura de su banda prohibida permite una potencia de salida mayor en esta frecuencia a la que otorgan los semiconductores que se ocupan. Actualmente, un ejemplo de esto es que con la investigación actual los emisores de radiación en THz ya superan a los emisores de radiación en THz basados en GaAs y en InAs (Ascázubi *et al.*, 2004).

### III.1. Características del nitruro de galio.

El GaN al ser un material con banda prohibida directa, el mínimo de banda de conducción está directamente sobre el máximo de la banda de valencia en el plano E-k en la región  $\Gamma$  donde  $k=0$ , la banda prohibida del GaN con estructura de wurzite a 0 K se reporta que esta entre 3.38 eV (Su *et al.*, 2002) y 3.56 eV (Piprek., 2007), tomando la media de estos valores y sustituyendo en la expresión de Varshni (III. 1.) resulta en 3.46 eV a una temperatura de 300 K.

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (\text{III. 1.})$$

En (III. 1.)  $E_g(0)$  es la banda prohibida a 0 K en el plano E-k en la región  $\Gamma$ ,  $\alpha$  y  $\beta$  son los parámetros de Varshini, los cuales tienen un valor (Rumyanstev *et al.*, 1994) de  $\alpha = 9.09 \times 10^{-4} \text{ eVK}^{-1}$  y  $\beta = 830 \text{ K}$ .

El GaN con estructura de wurzite es un material con moléculas polares ya que tiene partículas de galio que son positivas y partículas de nitrógeno la cuales son negativas en dos caras del cristal, los dos tipos de polarización que se manifiestan en GaN con estructura de wurzita es polarización debida al efecto piezoeléctrico y polarización espontánea, debida a la asimetría intrínseca del enlace covalente del galio y el nitrógeno en equilibrio en la estructura del cristal. Los efectos de la polarización en el GaN se modelan por (III. 2.)-(III. 4.) (Yu *et al.*, 1997).

$$P = P_{sp} + P_{pz} \quad (\text{III. 2.})$$

$$P_{pz} = 2 \epsilon \left( \beta_{31} - \frac{c_{13}}{c_{33}} \beta_{33} \right) \quad (\text{III. 3.})$$

$$\epsilon = \frac{(1-r)(a_0 - a)}{a} \quad (\text{III. 4.})$$

En (III. 2.)  $P$  es la polarización total,  $P_{sp}$  es la polarización espontánea,  $P_{pz}$  es la polarización por el efecto piezoeléctrico,  $\beta_{31}$  y  $\beta_{33}$  son las constantes piezoeléctricas,  $c_{13}$  y  $c_{33}$  son las constantes elásticas,  $r$  es el parámetro que controla la extensión de la polarización por el efecto piezoeléctrico,  $a_0$  es la constante de la red cuando está deformada y  $a$  es la constante de la red sin deformación.

En la Tabla III.1 se pueden ver los valores de múltiples propiedades del nitruro de galio

Propiedad	Valor	
Estructura del cristal	Wurzite	Zinc Blende
Peso molecular(g/mol)	128.83	
Densidad (g cm <sup>-3</sup> )	6.15 (Harima, 2002)	
Constante dieléctrica.	8.9-9.5(Mohammed y Morkoc,1996)	9.7
Constante dieléctrica en altas frecuencias.	5.35 (Monemar, 1999)	5.3 (Goldhan y Shokhovets, 2002)
Movilidad de los electrones (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	~1000(Heying <i>et al.</i> , 2000)	≤ 1000(Kim <i>et al.</i> , 1994)
Movilidad de los huecos (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	≤ 200(Gaskil <i>et al.</i> , 1995)	≤ 350(Florescu <i>et al.</i> , 200)
Coeficiente de difusión de los electrones (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	25	25
Coeficiente de difusión de los huecos (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	5	9
Contante piezoeléctrica en e <sub>15</sub>	-0.30 (Bernardini y Fiorentini, 2002)	
Contante piezoeléctrica en e <sub>31</sub>	(-0.3) – (-0.55) (Bernardini y Fiorentini, 2002)	
Contante piezoeléctrica en e <sub>33</sub>	-0.65 (Bernardini y Fiorentini, 2002)	
Contante piezoeléctrica en e <sub>14</sub>		0.4 (Shur, <i>et al.</i> , 1996)
Punto de fusión(K)	1373	

Tabla III.1. Propiedades del GaN

El nitruro de Galio también posee resistencia diferencial negativa tanto en su estructura de wurzite como en la de Zinc Blende, la gráfica que muestra la velocidad de deriva contra el campo eléctrico se puede ver en la Figura III.1..

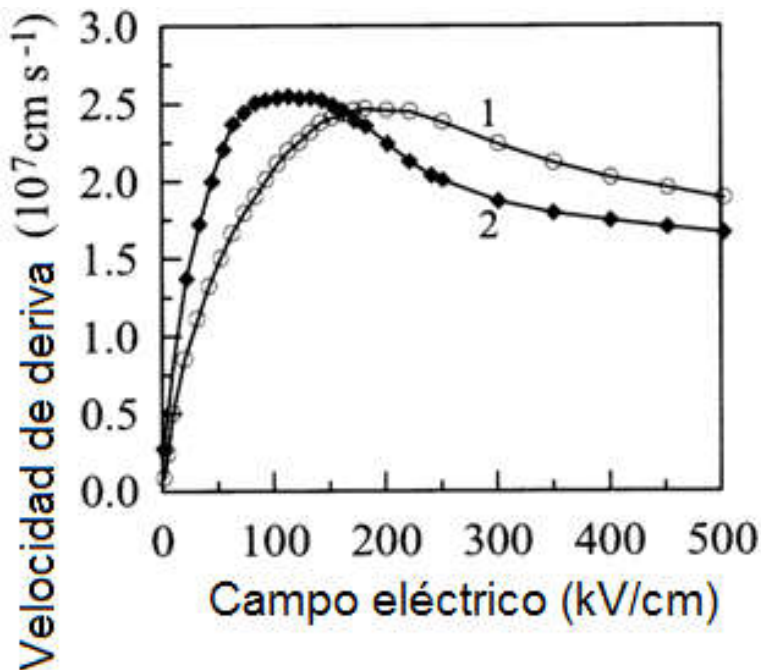


Figura III.1. Gráfica de velocidad de deriva contra el campo eléctrico para el GaN (1) Wuzite (2) Zinc Blende

### III.2. Características del nitruro de indio.

Hasta hace poco todos los semiconductores del grupo de nitruros-III eran clasificados como semiconductores de banda ancha. Esto se debe a que estudios anteriores sobre películas de InN crecidas por el método de pulverización catódica sugirieron que se tenía una banda prohibida directa de aproximadamente 2 eV (Osamura *et al.*, 1975, Tansley y Foley, 1986). Recientemente, la caracterización de las películas de InN crecidas por el método de crecimiento epitaxial por haces moleculares (Davydov *et al.*, 2002) y también la caracterización de los crecidos por el método de deposición de vapor mediante procesos químicos organometálicos (Matsuoka, *et al.*, 2002) proveyeron evidencia de que la verdadera banda prohibida del InN es de alrededor de 0.7 eV a temperatura ambiente. Este valor es muy cercano al valor de 0.8 eV, el cual fue obtenido por cálculos de pseudopotencial.

Las primeras mediciones de la masa efectiva de los electrones en películas de InN fuertemente dopado ( $n > 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ) otorgaron valores que iban desde

0.11 $m_0$  a 0.24 $m_0$  (Inushima *et al.*, 1999). En una medición reciente en películas de InN crecidas por el método de crecimiento epitaxial por haces moleculares y fuertemente dopadas ( $n > 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ) y se obtuvo una masa efectiva de los electrones libres de  $m^* = 0.14m_0$  (Kasic *et al.*, 2002). La medición se realizó por medio de elipsometría espectroscópica infrarroja, en la Tabla III.2 se muestran los valores de múltiples propiedades del InN.

Propiedad	Valor
Estructura del cristal	Wurzite
Peso molecular(g/mol)	128.83
Densidad (g cm <sup>-3</sup> )	6.81-6.89 (Tansley, 1994)
Constante dieléctrica.	15(Tansley, 1994)-15.3(Monemar <i>et al.</i> , 1996)
Constante dieléctrica en altas frecuencias.	6.7-8.4 (Monemar <i>et al.</i> , 1996), 5.8-9.3(Kasic <i>et al.</i> , 2002)
Banda prohibida(eV)	0.7
Movilidad de los electrones (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	2700 (Tansley, 1994), 1000 - 1900 (Yu <i>et al.</i> , 2002)
Coefficiente de difusión de los electrones (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	80
Contante piezoeléctrica en e <sub>31</sub>	-0.45 - 0.56 (Bernardini y Fiorentini, 2002)
Contante piezoeléctrica en e <sub>33</sub>	0.81 – 1.09 (Bernardini y Fiorentini, 2002)
Punto de fusión(K)	1370

Tabla III.2. Propiedades del InN

Una de las características más importantes en el InN es el tener resistencia diferencial negativa esto puede ser visto en la Figura III.2.

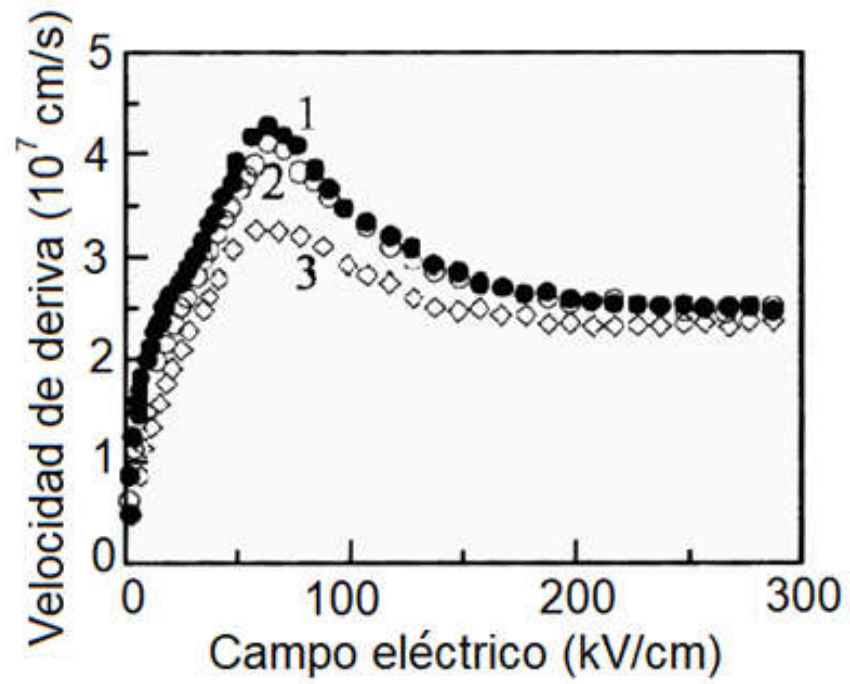


Figura III.2. Gráfica de velocidad de deriva contra campo eléctrico para el InN con los dopamientos (1)  $n = 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  (2)  $n = 10^{18} \text{ cm}^{-2}$  (3)  $n = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$

## **IV. Modelado y simulación.**

### **Introducción.**

El modelado es el proceso de producir un modelo el cual es una representación de la estructura y funcionamiento de un sistema de interés, los modelos suelen ser más simples que el sistema que representan, pero contienen las características esenciales del sistema. Un propósito de un modelo es permitir al usuario predecir los efectos de cambios aplicados a un sistema. Se considera que un buen modelo es una combinación entre realismo y simplicidad. Esto se debe a que los modelos demasiado complejos suelen complicar el entender el comportamiento del sistema.

Los modelos que se ocupan para simulación basada en cómputo son modelos que solo constan de ecuaciones matemáticas. A esta clase de modelos se les llama modelos matemáticos, la clasificación de estos modelos con base en sus entradas es la siguiente:

- **Deterministas:** Las variables de entrada tienen un valor fijo.
- **Estocásticos:** Por lo menos una de las variables de entrada es probabilística.

Y la clasificación de los modelos matemáticos con base en su comportamiento en el tiempo es la siguiente:

- **Estáticos:** El tiempo no se considera en el modelo.
- **Dinámicos:** El tiempo es un factor en el modelo.

En esta tesis solo se ocuparán modelos deterministas-dinámicos debido a la naturaleza cambiante en el tiempo del sistema.

La simulación de un sistema es la operación del modelo del sistema, la simulación es de gran importancia, ya que permite realizar las siguientes tareas:

- Estudiar las interacciones en el modelo y con esto, inferir las interacciones en el sistema.
- Analizar como se ve afectado el modelo por distintos cambios ambientales.
- Permite saber cómo funcionará un sistema antes de su creación.

- Permite evaluar el comportamiento de un sistema en diferentes configuraciones de interés.
- Optimizar parámetros del sistema.
- Poner a prueba una hipótesis.

#### IV.1. Diferencias finitas

Las diferencias finitas son un método numérico universal para resolver ecuaciones diferenciales, unos de los conceptos fundamentales en las diferencias finitas son las aproximaciones ya que estas permiten convertir una ecuación diferencial en una ecuación en diferencias. Para realizar esto, se tienen que hacer los siguientes pasos:

1. Sustituir el dominio de variación continua del argumento por un conjunto discreto de puntos usualmente llamado malla.
2. Realizar la sustitución de los términos que contengan derivadas por sus respectivas aproximaciones de diferencias finitas.

Las mallas, también llamadas redes, se clasifican de la siguiente manera:

- Malla uniforme: Se compone de un conjunto de  $N$  nodos los cuales tienen una separación uniforme uno del otro, dicha separación tiene el valor de  $\frac{1}{N}$ , la cual suele simbolizarse por  $p$  y comúnmente se le llama paso.
- Malla no uniforme: La malla se divide en  $N$  partes mediante puntos arbitrarios.

Las mallas sirven porque permiten que en lugar de estudiar una función de argumento continuo, se estudia una función de argumento discreto, como puede ser  $y(x_i) = y_i$ , en la cual el argumento discreto es  $x_i$  y representa al nodo número  $i$  de la malla. A esta clase de funciones se les denomina reticular. Las funciones reticulares pueden ser representadas como un vector. Un ejemplo de esto se presenta en la fórmula (IV. 1.).

$$\mathbf{Y} = y_0, y_1, \dots, y_{N-1}, y_N \quad (\text{IV. 1.})$$



De la fórmula (IV. 1.) se puede concluir que la cantidad total de valores que contiene  $Y$  es igual a  $N+1$ . La aproximación en la malla del operador diferencial,  $L$ , se realiza de un modo local, es decir en cualquier punto fijo de la red. Para realizar estas aproximaciones se ocupan ecuaciones llamadas estenciles o moldes. Estos estenciles están compuestos por combinaciones lineales de los valores de la función en los puntos de la malla.

Estos estenciles provienen del truncamiento de las series de Taylor, algunos de estos estenciles para la aproximación de la primera derivada se muestran de la ecuación (IV. 2.) a la ecuación (IV. 4.), siendo la formula (IV. 2.) el estencil hacia adelante, la (IV. 3.) el estencil hacia atrás y la (IV. 4.) el estencil centrado.

$$\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x} \quad (IV. 2.)$$

$$\frac{f(x_i) - f(x_{i-1}))}{\Delta x} \quad (IV. 3.)$$

$$\frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2\Delta x} \quad (IV. 4.)$$

En estas fórmulas  $x_i$  es el punto en el cual se quiere obtener la derivada,  $f$  es la función por derivar y  $\Delta x$  es el paso entre los puntos. En la Figura IV.1. se puede ver la aproximación que realizan estos estenciles a una función.

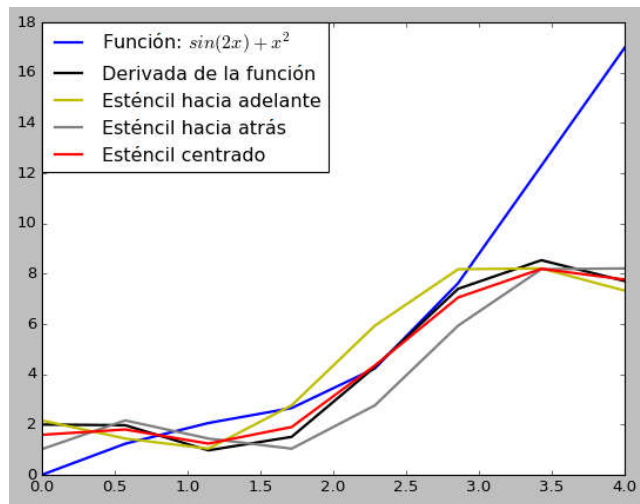


Figura IV.1. Gráfica de función, su derivada y sus aproximaciones, con un valor  $\Delta x$  de 0.571.

Como se puede ver en la Figura IV.1., el estencil centrado es el que mejor se aproxima a la derivada. Esto se debe a que este estencil tiene un error  $O(\Delta x^2)$ , mientras que los otros dos estenciles tienen un error  $O(\Delta x)$ . Es común que las ecuaciones diferenciales tengan ciertas condiciones complementarias como son las condiciones iniciales o condiciones de contorno. Dichas condiciones complementarias también se deben de aproximar para poder pasarlas a las ecuaciones en diferencias.

El método de diferencias finitas de múltiples dimensiones se divide en dos clases de esquemas:

- Esquemas explícitos: Son aquellos esquemas en donde el cálculo de una variable se realiza con base valores anteriores, un ejemplo de un esquema explícito es la fórmula (IV. 5.).

$$f(t + \Delta t) = f(t) + z(t) \quad (\text{IV. 5.})$$

- Esquemas implícitos: Estos esquemas calculan una variable con base en los valores actuales y valores anteriores. Un ejemplo de un esquema implícito es la fórmula (IV. 6.).

$$f(t + \Delta t) = f(t) + z(t + \Delta t) \quad (\text{IV. 6.})$$

Los esquemas implícitos suelen involucrar el uso de una matriz o una técnica iterativa, además son más complejos de programar y ocupan más recursos computacionales, pero su estabilidad numérica es incondicional, lo cual significa que la solución se comporta de una manera adecuada para pasos en el tiempo arbitrariamente grandes. En cambio, la estabilidad numérica de los métodos explícitos es condicional.

## IV.2. Ecuación del transporte de Boltzmann

La ecuación del transporte de Boltzmann (IV. 7.) fue diseñada para describir el comportamiento de los gases a un nivel cinético y muestra el balance entre los efectos de las colisiones, representados por el lado derecho de la ecuación, y la advección sin colisiones, representado por el lado izquierdo de la ecuación, en

(IV. 7.)  $t$  es el tiempo,  $F$  es el campo eléctrico actuando sobre las partículas,  $m^*$  es la masa efectiva,  $v$  es la velocidad de las moléculas,  $r$  es el vector de posición espacial.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} = \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{F}{m^*} \cdot \frac{\partial f}{\partial v} \quad (IV. 7.)$$

### IV.3. Modelo hidrodinámico

El modelo hidrodinámico se basa en la ecuación de transporte de Boltzmann.

Primero se tienen que multiplicar los dos lados por  $\phi_1 = 1$ ,  $\phi_2 = \hbar k$  y  $\phi_3 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ , y después, integrar cada lado de la ecuación.

Las ecuaciones resultantes esencialmente dictan la continuidad (IV. 8.), el balance del momento (IV. 9.) y el balance de la energía (IV. 10.). En estas ecuaciones  $n$  es la densidad de electrones,  $u$  es la velocidad promedio de los electrones,  $T_n$  es la temperatura de los electrones,  $\omega_n = \frac{3}{2}kT_n$  es la energía interna del gas de los electrones y  $-K_n \nabla T_n$  es el flujo térmico donde  $K_n$  es la conductividad térmica de los electrones.

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}}(nu) = \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{col} = 0 \quad (IV. 8.)$$

$$\frac{\partial m_n^* nu}{\partial t} + \nabla \cdot (m_n^* nu + nkT_n) = -enE + \left(\frac{\partial m_n^* nu}{\partial t}\right)_{col} \quad (IV. 9.)$$

$$\frac{\partial n\omega_n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\omega_n u + nkT_n u) = -enE \cdot u - \nabla \cdot (-K_n \nabla T_n) + \left(\frac{\partial n\omega_n}{\partial t}\right)_{col} \quad (IV. 10.)$$

### IV.4. Modelo aplicado

Se ocupa el modelo hidrodinámico, el flujo de electrones es descrito por la concentración total de electrones  $n$  para todo el conjunto de los valles, la velocidad promedio de los electrones  $v$  y la energía promedio de los electrones  $w$ . Las ecuaciones del balance de las partículas (IV. 11.), el balance del momento (IV. 12.) y el balance de la energía (IV. 13.).

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) = 0 \quad (\text{IV. 11.})$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} = \frac{e\vec{E}}{m^*(w)} - \frac{1}{nm^*(w)}\nabla(nT) - \mathbf{v}v_p(w) \quad (\text{IV. 12.})$$

$$\frac{dw}{dt} = e\vec{E}\mathbf{v} - \frac{1}{n}\nabla((n\mathbf{v} - K\nabla)T) - (w - w_{00})v_w(w) \quad (\text{IV. 13.})$$

Donde:

$$T = \frac{2}{3}\left(w - \frac{m^*(w)v^2}{2}\right) \quad (\text{IV. 14.})$$

$$K = \frac{5nT}{2m^*v_p(w)} \quad (\text{IV. 15.})$$

Donde  $v_p$  es el momento y  $v_w$  es la frecuencia de relajación de la energía,  $m^*$  es la masa efectiva,  $T$  es la temperatura promedio de los electrones en unidades energéticas,  $K$  es el coeficiente de la conductividad térmica,  $w_{00} = 0.039$  eV es la energía del electrón a 300 K. Es asumido que  $v_p, v_w, m^*$  son funciones de la energía promedio de los electrones  $w$ . La conductividad térmica no es esencial para la dinámica de las ondas con carga espacial hasta las frecuencias de 2-3 THz. La energía cinética de electrón es un orden menor la energía promedio del electrón, por lo cual,  $T \approx \left(\frac{2}{3}\right)w$ .

Las dependencias  $v_p, v_w$  pueden ser calculadas de las ecuaciones (IV. 11.) bajo el caso estático  $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ . La frecuencia de relajación del momento es  $v_p \gg v_w$  por lo cual, para las frecuencias de la onda cargada espacialmente  $f < 1$  THz es posible ignorarla por la inercia de los electrones (IV. 16.).

$$\mathbf{v} \approx \frac{e}{m^*v_p}\mathbf{E} - \frac{1}{nm^*v_p}\nabla(nT) = \mu(w)\mathbf{E} - \frac{D}{nw}\nabla(nw) \quad (\text{IV. 16.})$$

Donde:

$$\mu = \frac{e}{m^*v_p} \quad (\text{IV. 17.})$$

$$D = \frac{T}{m^*v_p} = \frac{\mu}{e}T \quad (\text{IV. 18.})$$

Para investigar la amplificación lineal de las ondas de carga espacial de las soluciones de (IV. 11.) linealizadas como onda progresiva se considera (IV. 19.).

$$\tilde{n}, \tilde{w}, \varphi \sim \exp(i(\omega t - kz)) \quad (\text{IV. 19.})$$

La frecuencia angular  $\omega$  es real, mientras que el número de la onda  $k$  es complejo. La amplificación de la onda de carga espacial toma lugar cuando  $k'' > 0$ . Para la simulación de los incrementos espaciales de la amplificación de la onda de carga espacial se ocupan los valores del coeficiente de la difusión que están en el marco del modelo local, por lo que, este coeficiente puede ser calculado por medio de (IV. 17.). Cuando múltiples valles son tomados en cuenta (Garcia *et al.*, 2006) una influencia en la no localidad de la dependencia de la velocidad de deriva y el campo eléctrico en la amplificación de la onda de carga espacial conlleva a la modificación de la resistencia diferencia negativa (IV. 20.).

$$\frac{dv}{dE} = \mu \cdot \left(1 - \frac{v_w}{\bar{v}_w}\right) + \frac{dv}{dE} \frac{v_w}{\bar{v}_w} \quad (\text{IV. 20.})$$

$$\bar{v}_w \approx v_w - \frac{4}{3}i\omega \quad (\text{IV. 21.})$$

En la Figura IV.2, se muestran los resultados de las simulaciones de los incrementos espaciales con los parámetros de Tabla IV.1. y se puede ver que el intervalo de las frecuencias de la amplificación es amplio y cubre la parte baja del espectro THz, el programa de esta simulacion se puede observar en el Apéndice I. Las películas tienen un grosor de  $0.2\mu\text{m} = 2l$ , la permitividad por debajo de la película es de  $\epsilon_1 = 4$  y por encima de la película es de  $\epsilon_1 = 1$ . La

influencia de la no localidad es esencial para las frecuencias mayores a los 250 GHz en el InN.

Parámetro	Valor
$n_0$	$0.5 \times 10^5 \text{ m}^{-3}$
$E_0$	$0.52 \times 10^7 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$
$z_0$	$10 \mu\text{m}$
$z_1$	$50 \mu\text{m}$
$z_2$	$29 \mu\text{m}$
$t_0$	$5 \text{ ps}$
$t_1$	$10 \text{ ps}$

Tabla IV.1 Parámetros de simulación

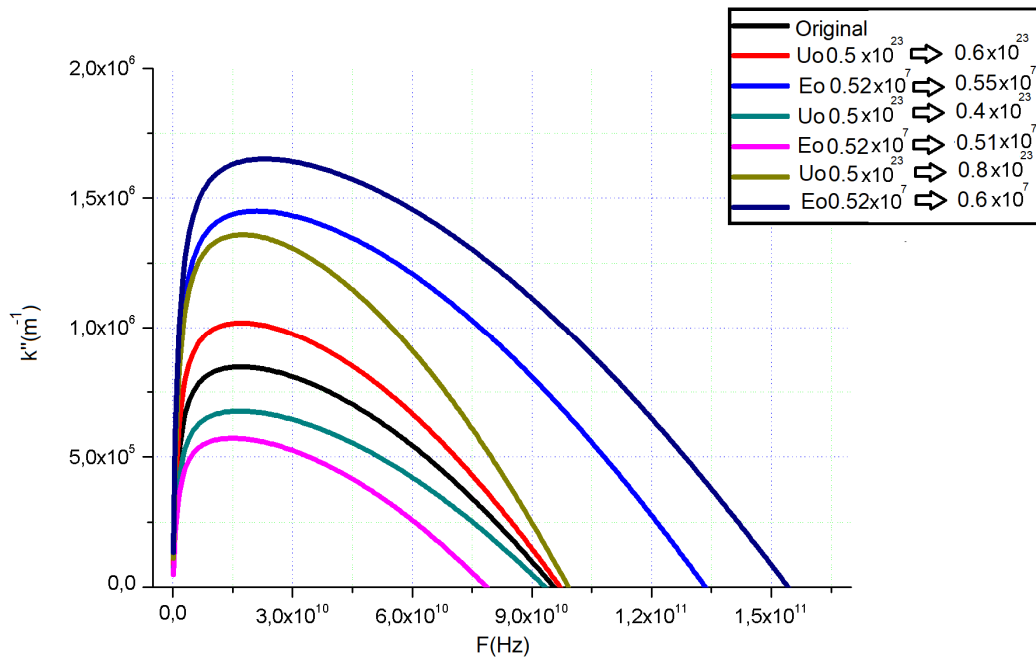


Figura IV.2 Incrementos espaciales de la onda de carga espacial en el InN contra la frecuencia

La dinámica no lineal de las ondas cargadas espacialmente ha sido simulada en el marco del modelo de difusión y arrastre, para la concentración de electrones  $n$  en conjunto con la ecuación de Poisson para el potencial eléctrico añadido por

las condiciones de frontera. Las ecuaciones del modelo de difusión y arrastre son (IV. 22.) a (IV. 24). En estas ecuaciones se ocupan (IV. 25.) a (IV. 31).

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_z}{\partial z} = 0 \quad (\text{IV. 22.})$$

$$j_x = nv_x - D \frac{\partial n}{\partial x} \quad (\text{IV. 23.})$$

$$j_z = nv_z - D \frac{\partial n}{\partial z} \quad (\text{IV. 24.})$$

$$v_x = \mu(\mathbf{w})E_x \quad (\text{IV. 25.})$$

$$v_z = \mu(\mathbf{E})E_z \quad (\text{IV. 26.})$$

$$\mu(\mathbf{E}) = \frac{v}{E} \quad (\text{IV. 27.})$$

$$v_d(\mathbf{E}) = \frac{4}{3v_w} \frac{\partial v}{\partial t} + v \quad (\text{IV. 28.})$$

$$E = (E_z^2 + E_x^2)^{1/2} \quad (\text{IV. 29.})$$

$$E_z = E_0 - \frac{\partial \varphi}{\partial z} \quad (\text{IV. 30.})$$

$$E_x = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad (\text{IV. 31.})$$

La ecuación de Poisson para el potencial eléctrico es (IV. 32.).

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = \begin{cases} -\frac{e(n - n_0)}{\epsilon_0 \epsilon_2}, & 0 < x < 2l \\ 0, & x < 0 \text{ o } x > 2l \end{cases} \quad (\text{IV. 32.})$$

Se ocupa un modelo de dependencia no local para la velocidad de deriva  $v$ . Esto se hace acorde a (IV. 20.), la dependencia ordinaria local es  $v = v_d(\mathbf{E})$ . Se asume la ausencia de carga superficial en los extremos de la película, esto resulta en las condiciones de frontera (IV. 33.).

$$j_x = nv_x - D \frac{\partial n}{\partial x} = 0 \quad (\text{IV. 33.})$$

En los extremos de la película  $z=0$  y  $z= L$  las condiciones de frontera para la concentración de los electrones son las de los contactos óhmicos ( $\frac{\partial n}{\partial z} = 0$ ) y para el potencial eléctrico de la onda carga espacial es  $\varphi=0$ . La ecuación de Poisson para el potencial eléctrico  $\varphi$  fue resuelta por medio de la transformada rápida de Fourier de la variable  $z$ .

Se asume que la onda con carga espacial es excitada por medio de la guía de onda, el campo de excitación es (IV. 34.).

$$E_z^{\text{exc}} = A \exp\left(-\left(\frac{t-t_1}{t_0}\right)^2\right) \exp\left(-\left(\frac{z-z_1}{z_0}\right)^2\right) \quad (\text{IV. 34.})$$

Donde  $z_1, z_0$  son las coordenadas del centro del elemento de excitación y la mitad del grosor,  $A$  es la amplitud de la señal de entrada,  $A \ll E_0$ . La señal de entrada es un pulso Gaussiano con parámetros  $t_1$  y  $t_0$ . El campo eléctrico de excitación es uniforme con respecto a las coordenadas  $x$ ,  $0 < x < 2l$ .

Cuando el campo eléctrico  $E_0$  corresponde al incremento máximo de la amplificación, el pulso de entrada sufre una fuerte amplificación. Pero el pulso es deformado y múltiples oscilaciones ocurren en la salida del sistema. Por lo tanto, el campo eléctrico  $E_0$  tiene que ser ligeramente superior al límite de la conductividad diferencial negativa. En este caso la amplificación lineal es menor, pero en la etapa no lineal un impulso con un alto valor máximo es formado en la salida del sistema  $z = z_2 < L_z$ .

Los resultados del sistema son mostrados de la Figura IV.4 a la Figura IV.10, donde la dependencia del tiempo  $t$  de la parte variable de componente  $z$  del campo eléctrico de la onda de carga espaciales presentada por  $a_{ez}(nz_{\text{obs}}, nx)$  y es descrita por (IV. 35.). La simulación de donde se obtiene estas figuras se puede ver en el apéndice III.

$$E_z(z = z_2, x = 2l, t) = E_z - E_0 \quad (\text{IV. 35.})$$

De la Figura IV.4 a la Figura IV.10, el substrato que se utiliza es  $\text{SiO}_2$  y tiene  $\varepsilon_1=4$ , el aire por encima de la película tiene  $\varepsilon_3=1$  y en la Figura IV.3 se puede ver



el diagrama del sistema que se simuló en este sistema. La antena de la entrada está a 5 micras del extremo izquierdo, su tamaño es de 1 micra, la película es de 30 micras de longitud y el impulso de entrada tiene la duración  $t_0 = 5$  ps, el centro del impulso está en  $t_1 = 10$  ps y el máximo del impulso es  $u_0 = 0.003 \times 10^5$  V/m.

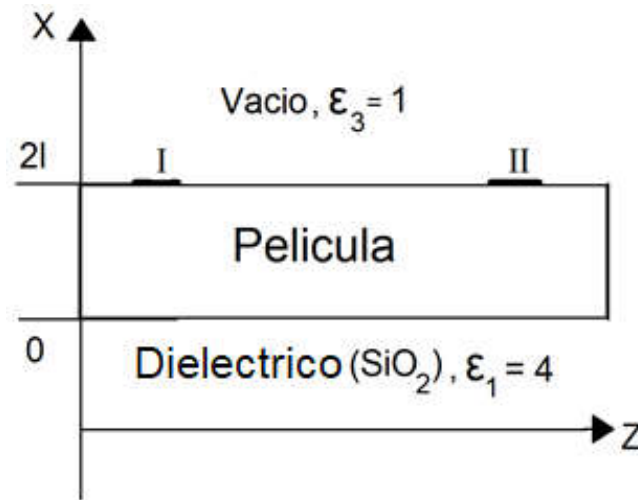


Figura IV.3. Diagrama del dispositivo que se simuló modelo

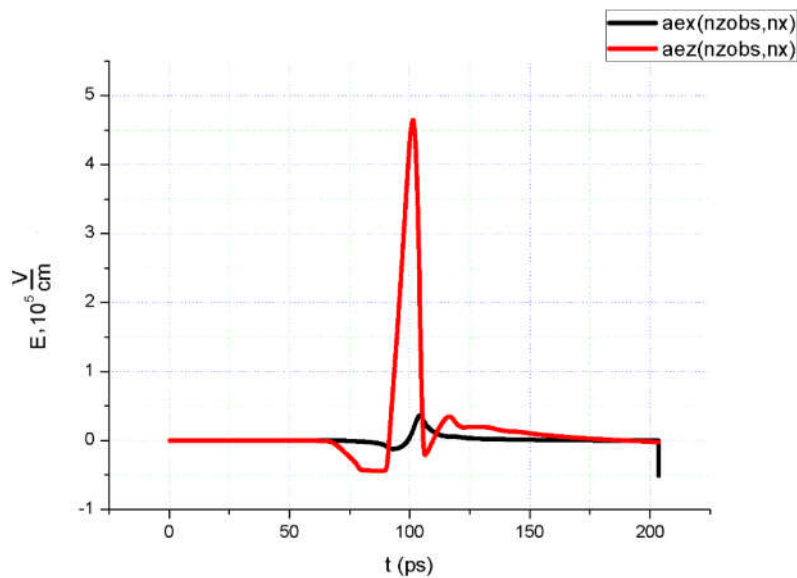


Figura IV.4 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1 , el impulso de entrada inicia en 5 ps y termina en 10 ps

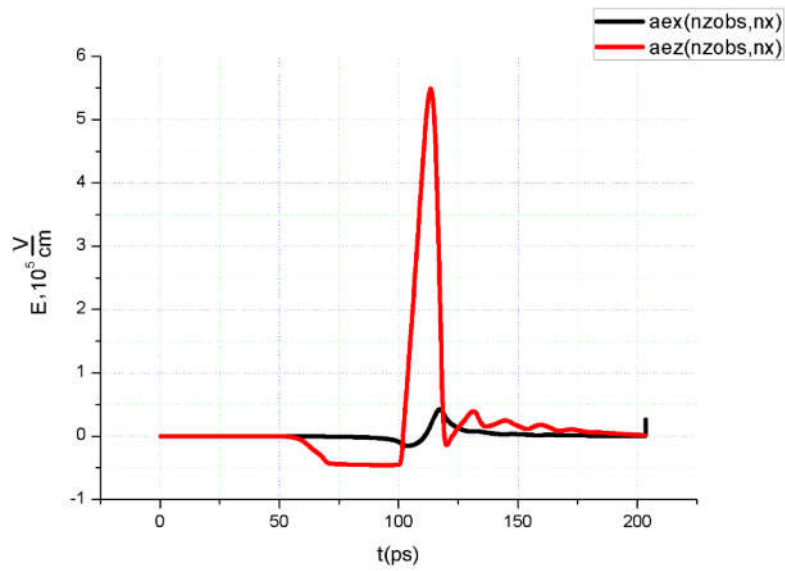


Figura IV.5 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1, con  $n_0 = 0.6 \times 10^{23}$ , el impulso de entrada inicia en 5 ps y termina en 10 ps

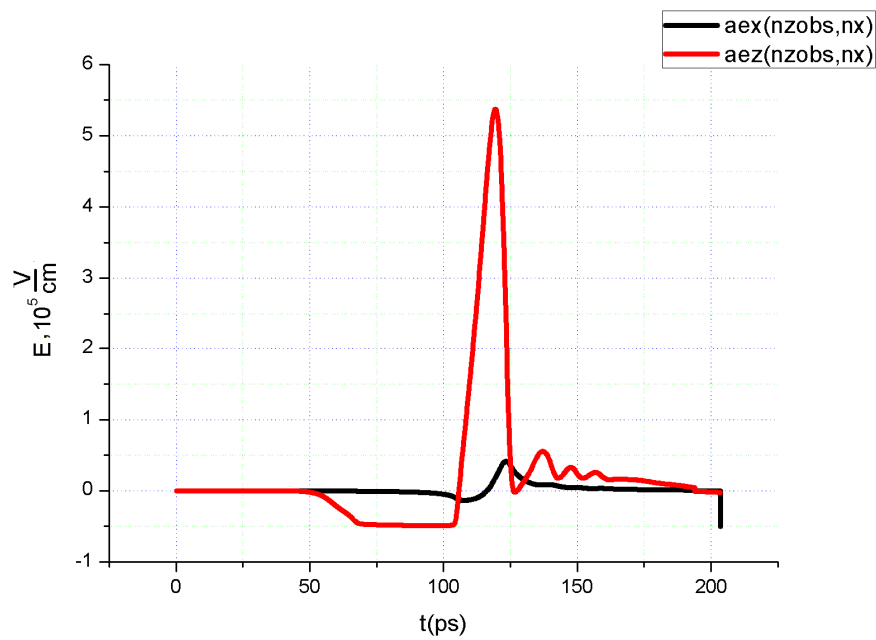


Figura IV.6 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1 con  $E_0 = 0.55 \times 10^7$ , el impulso de entrada inicia en 5 ps y termina en 10 ps

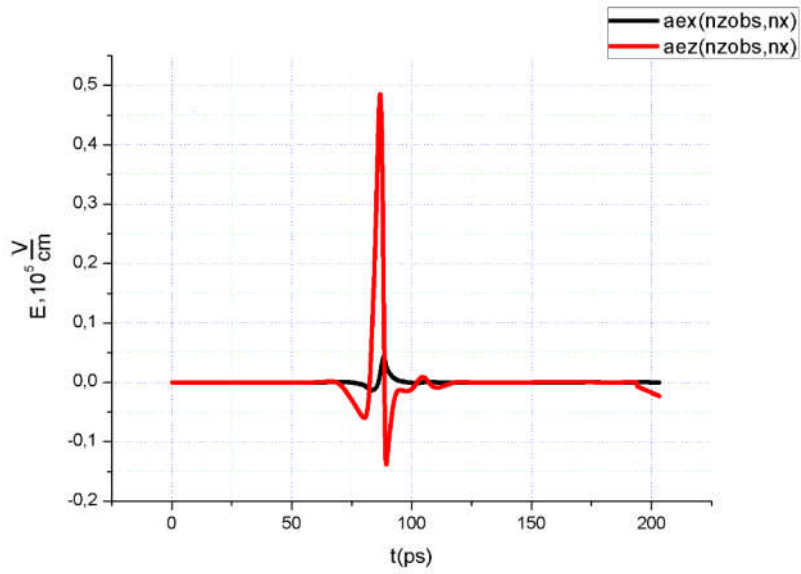


Figura IV.7 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1, con  $n_0 = 0.6 \times 10^{23}$ , el impulso de entrada inicia en 5 ps y termina en 10 ps

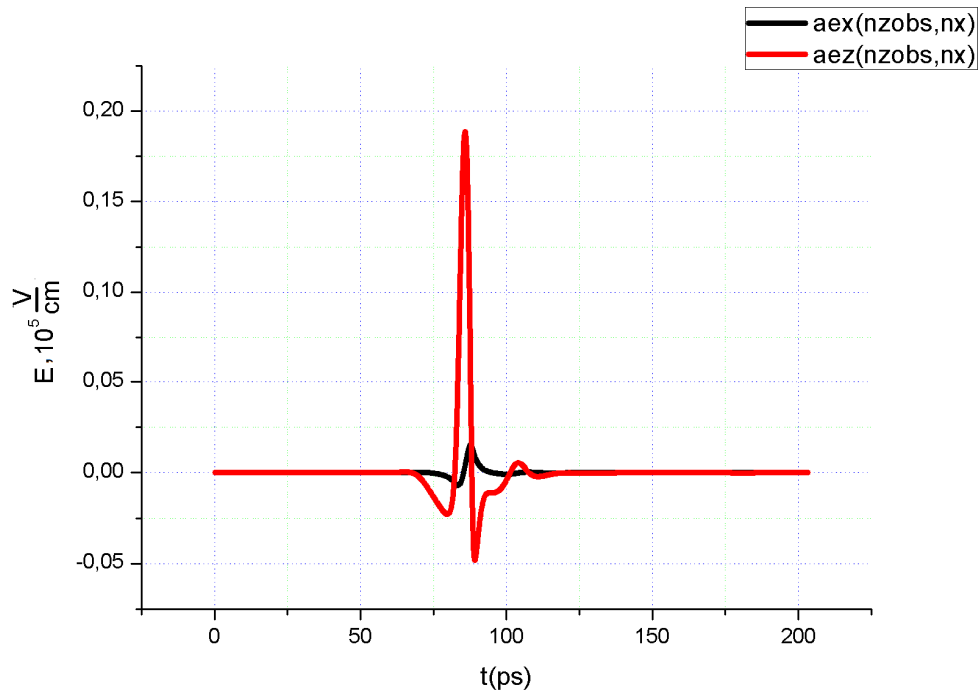


Figura IV.8 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1, con  $E_0 = 0.55 \times 10^7$ , el impulso de entrada inicia en 5 ps y termina en 10 ps

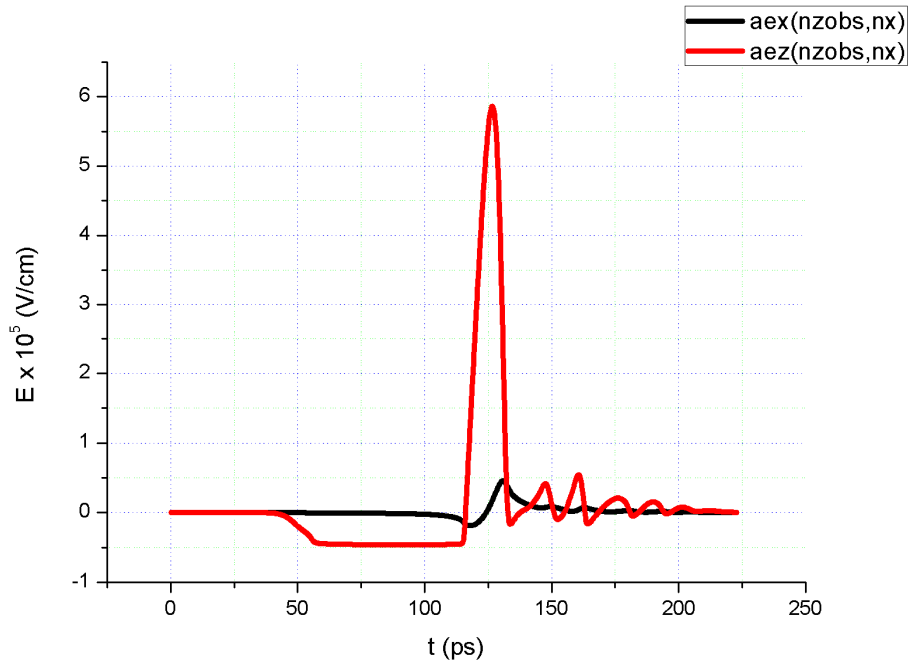


Figura IV.9 Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1, con  $n_0 = 0.6 \times 10^{23}$ , el impulso de entrada inicia en 5 ps y termina en 10 ps

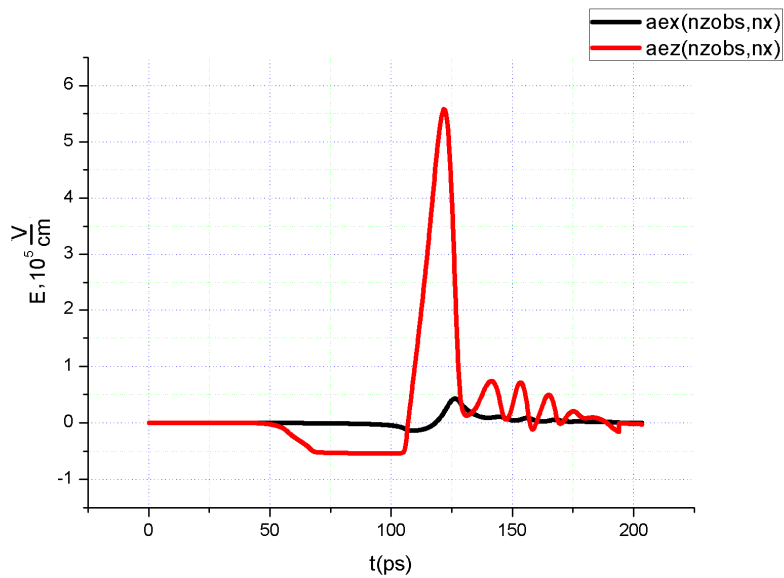


Figura IV.10. Gráfica de los resultados con los parámetros de la Tabla IV.1, con  $E_0 = 0.55 \times 10^7$ , el impulso de entrada inicia en 5 ps y termina en 10 ps

Es posible notar que las Figura IV.4, IV.9 y IV.10 son las que menor cantidad de oscilaciones tienen, pero la Figura IV.4 a diferencia de las Figuras IV.9 y IV.10,

el campo eléctrico al final del pulso apenas llega a ser negativo. Esto indica que se deforma menos el pulso en la Figura IV.6 que en las Figuras IV.9 y IV.10.

En la Figura IV.11, se puede ver la gráfica de la dependencia de la velocidad de deriva contra el campo eléctrico para el InN ocupado en el modelo. En la Figura IV.12, se puede apreciar la dependencia de la energía promedio de los electrones  $w$  en el campo eléctrico  $E$  ocupado en el modelo.

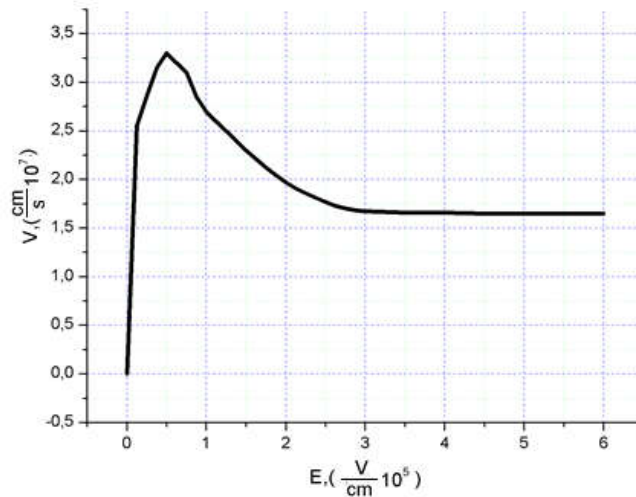


Figura IV.11 Gráfica de la dependencia obtenida con la simulación entre la velocidad de deriva y campo eléctrico en InN

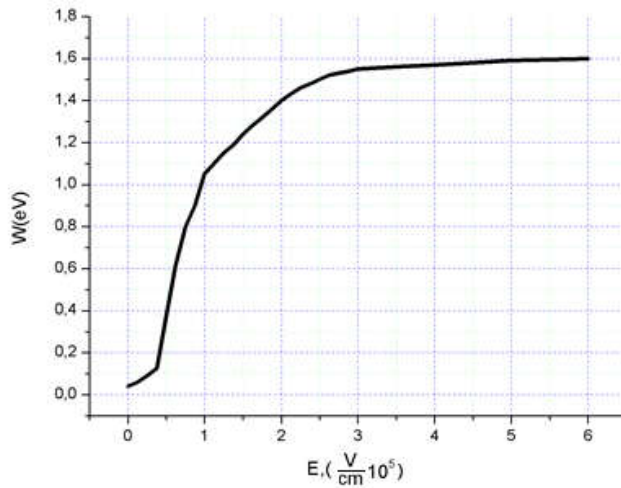


Figura IV.12 Gráfica de la dependencia ocupada obtenida con la simulación entre el potencial eléctrico y campo eléctrico en InN

Se forman fuertes pulsos debidas la conductividad diferencial negativa en las películas ya que bajo la amplificación lineal de los pulsos de la onda con carga espacial el valor del campo eléctrico en el centro del pulso incrementa y corresponden a los valores realzados de la conductividad diferencial negativa de la película ( $-dv/dE$ ). Por lo tanto, la amplificación pasa por un régimen no lineal en el centro del pulso. Además, en la periferia del pulso el campo eléctrico total corresponde a la ausencia de conductividad diferencial negativa ( $E < E_c$ ). El máximo espectro de la salida está en el rango bajo de la banda THz  $f \sim 150 - 300$  GHz.

Estos monoimpulsos difieren de los dominios del campo eléctrico fuerte en los cristales volumétricos con conductividad diferencial negativa, ya que el campo eléctrico afuera de los dominios es menor que el límite de la conductividad diferencial negativa,

Es posible la formación de monoimpulsos cortos y de gran magnitud con una duración de entre 3 y 10 ps. Estos monoimpulsos son formados por impulsos de entrada con pequeñas amplitudes. Los pulsos de las ondas cargadas espacialmente están sujetos a una amplificación lineal y después a una etapa de amplificación no lineal.

De la Figura IV.13. a la Figura IV.19. se presentan Gráficas que muestran cómo se desplaza la deformación acústica en la película y se puede notar que deformación es grande, pero solo cerca de la frontera de la película. Esto se hizo para excitar las ondas acústicas, en cuales se mueven las ondas de carga espacial, El grosor de las películas es un parámetro de optimización, ya que se tiene que ocupar un grosor que sea resonante para la frecuencia de la onda de carga espacial. Estas gráficas se obtienen del programa en el Apéndice II.

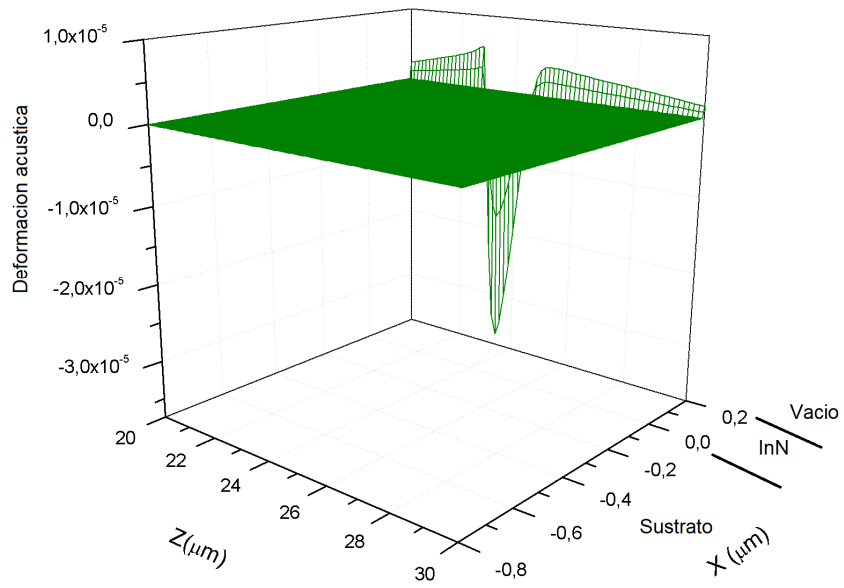


Figura IV.13 Gráfica de la deformación acústica en  $t= 70$  ps

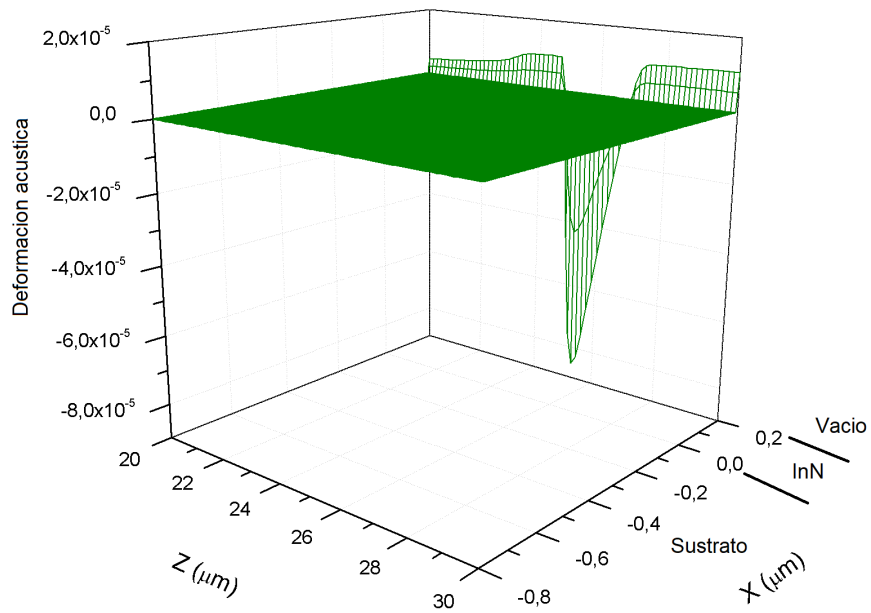


Figura IV.14 Gráfica de la deformación acústica en  $t= 80$  ps

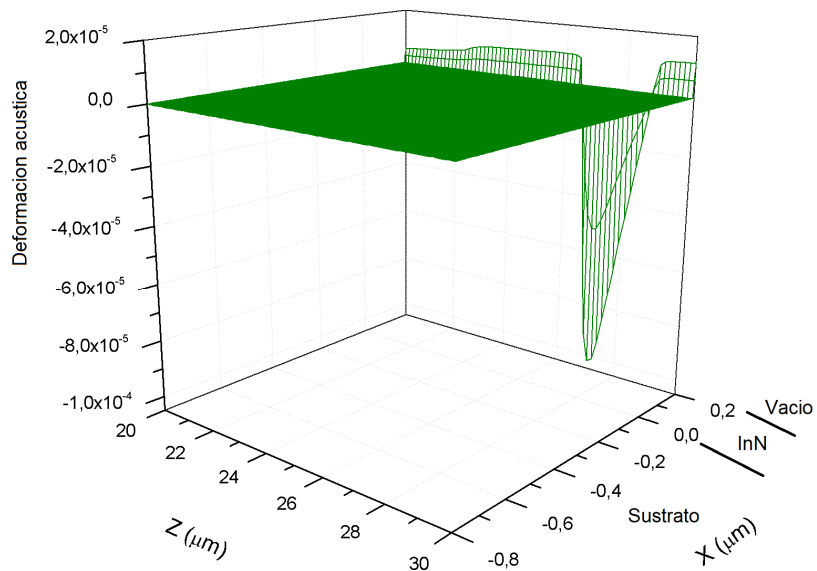


Figura IV.15 Gráfica de la deformación acústica en t= 90 ps

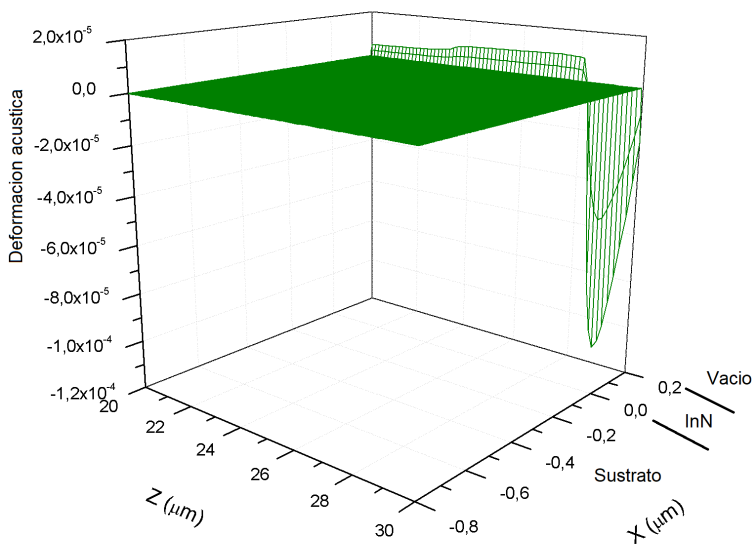


Figura IV.16 Gráfica de la deformación acústica en t= 100 ps



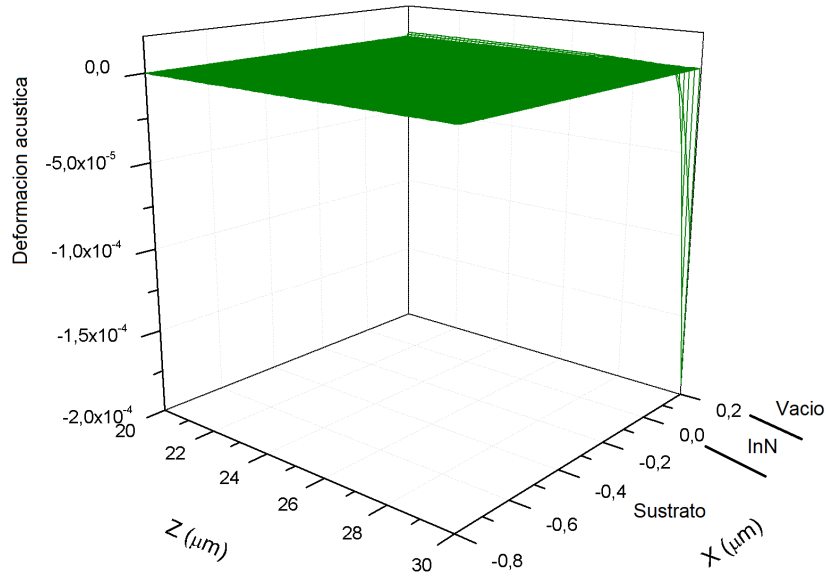


Figura IV.17 Gráfica de la deformación acústica en  $t = 110$  ps

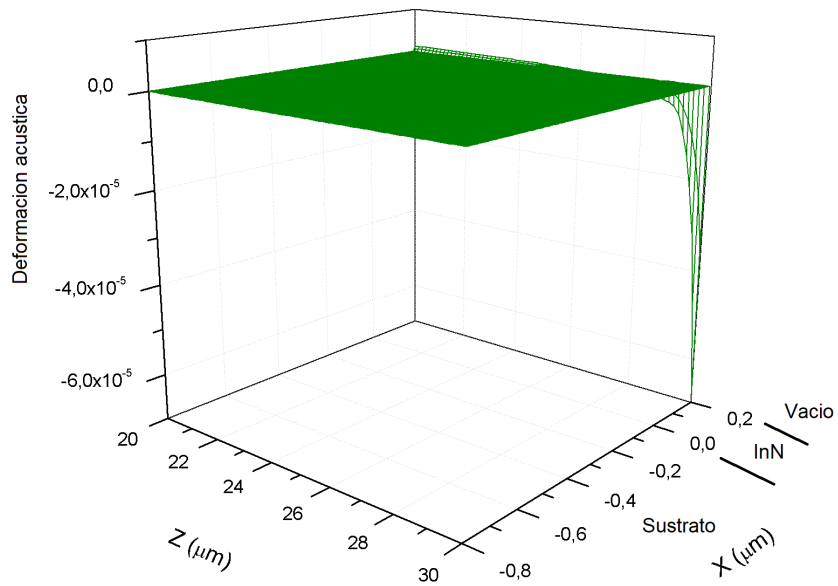


Figura IV.18 Gráfica de la deformación acústica en  $t = 120$  ps

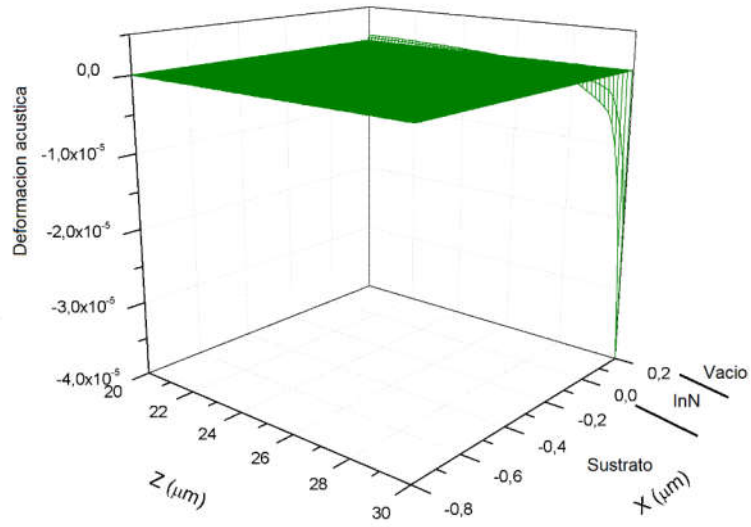


Figura IV.19 Gráfica de la deformación acústica en  $t = 130$  ps

## V. Aplicaciones potenciales.

### Introducción.

Las ondas acusto-electromagnéticas en el rango de terahertz tiene múltiples aplicaciones potenciales, debido a que al ser ondas híbridas se puede ocupar para el diseño de sensores duales.

#### V.1 Detección de objetos enterrados.

La detección de objetos enterrados es una aplicación interesada a nivel civil tanto como militar. A nivel militar es donde más investigación se ha realizado. Esto se debe a que existen alrededor de 45 millones de minas alrededor del mundo todavía activas (MacDonald *et al.*, 2003), las cuales generan miles de víctimas cada año.

El problema con la detección de minas reside en las minas antipersonal de explosión es muy complejo de abordar por métodos convencionales debido a que estas minas se encuentran en recipientes plásticos y contienen poco metal. A diferencia de las minas de fragmentación, lo cual hace que no se puedan detectar con detectores de metales. Para los cuales se han desarrollado múltiples sistemas de detección de minas. El problema es que la mayoría de estos sistemas tienen una alta razón de falsos positivos lo cual hace que se pierda mucho tiempo examinando cada caso. De estos sistemas, el más usado actualmente es el radar de penetración de suelos, el cual consiste en la emisión de ondas electromagnéticas hacia el suelo y el procesamiento de las mismas ondas después de que rebotan en el suelo o los objetos enterrados.

Otro sistema para la detección de minas de explosión ocupa ondas acústicas (MacDonald *et al.*, 2003). Este sistema acopla ondas acústicas con ondas sísmicas, donde ondas acústicas son emitidas desde una fuente colocada a cierta distancia de la tierra para así acoplar estas ondas y producir ondas Biot del tipo II las cuales se propagan en los espacios con aire en la tierra. Estas ondas llegan a alcanzar una profundidad de 0.5 m dentro de la tierra. La interacción de las ondas con el contenedor de la mina produce anomalías en su

propagación, las cuales son ocupadas para su detección. Estas anomalías son detectadas por un vibrometro Doppler laser el cual mide el desplazamiento de la tierra. Este sistema tiene la desventaja de un mal desempeño en áreas con vegetación y con topografía no plana.

La aplicación potencial de las ondas acusto electromagnéticas en el rango de terahertz requiere el uso de espectroscopía para poder visualizar las minas.

## V.2 Evaluación no destructiva de estructuras

La evaluación de la integridad estructural es una tarea de vital importancia ya que salva vidas y disminuye costos a largo plazo. Un sistema de ondas acusto electromagnéticas para la evaluación se realiza al emitir la onda y que la parte acústica sirva para la excitación mecánica mientras que la parte electromagnética sirve para la medición como un sistema radar para detectar el componente Doppler. Esto serviría debido a la relación entre el componente Doppler en fisuras que pueden estar en la subsuperficie, delaminaciones o refuerzos metálicos.

## **VI. Conclusiones y trabajos futuros.**

### **VI.1. Conclusiones**

En este trabajo de investigación se realizó la simulación de un sistema capaz de amplificar ondas acusto-electromagnéticas en el rango de terahertz. Este sistema tiene como parte fundamental de su funcionamiento el uso de la conductividad diferencial negativa y el sistema puede hacer uso de InN o de GaN. Se notó que las señales de salida del sistema son casi independientes de la forma de las señales de entrada al sistema. Parte del trabajo que se realizó en esta investigación se publicó en un artículo con el DOI: 10.1109/MRRS.2017.8075050.

También, se estudió la deformación acústica en la película en el sistema. Se encontró que la deformación que sufre la película es significativa pero no es lo suficientemente grande para causar un daño en el sistema, y se comprobó que los parámetros que se ocuparon en el sistema son óptimos para evitar en lo posible la deformación de la onda.

### **VI.2. Trabajos futuros**

Se requiere una investigación experimental para verificar que exista correspondencia entre resultados obtenidos en la simulación y los resultados del mundo real. También con los resultados de la experimentación se podría comprobar que las aplicaciones que se plantean son factibles.

Se tiene que realizar un análisis sobre los límites a los cuales puede llegar el grosor de la película en el sistema, sin afectar su funcionamiento. Esto es útil debido a que para obtener una buena amplificación el grosor de la película debe ser acorde a la frecuencia de resonancia de la entrada. Al realizar el análisis sobre los límites factibles del grosor, se podrían obtener los límites factibles de la entrada.

## Referencias

(Vodopyanov y Avetisyan, 2008), K. L. Vodopyanov and Yu. H. Avetisyan, "Optical terahertz wave generation in a planar GaAs waveguide," *Opt. Lett.* 33, 2314-2316 (2008)

(Kondo y Hirakawa, 2005), T. Kondo and K. Hirakawa, "Terahertz radiation from high electron mobility transistors induced by ultrafast optical gate switching," 2005 Joint 30th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 13th International Conference on Terahertz Electronics, 2005, pp. 459-460 vol. 2.

(Tirelli, 2014), Tirelli, S. (2014). GaN-based HEMTs for High Power RF Applications (Doctoral Thesis). Diss., Eidgenössische Technische Hochschule ETH Zürich, Nr. 22138, 116-118.

(Koshova *et al.* 2014), Koshova, V. Grimalsky, M. F. Díaz Ayala S. 2014. Excitación de hipersonido en películas de GaAs y GaN., Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 6-7.

(Hobson, 1974), Hobson, G. S. (1974). The Gunn Effect. Oxford: Clarendon Pr.

(Bykhovski *et al.*, 1996), Bykhovski, A. D., Kaminski, V. V., Shur, M. S., Chen, Q. C., & Khan, M. A. (1996). Pyroelectricity in gallium nitride thin films. *Applied Physics Letters*, 69(21), 3254-3256. doi:10.1063/1.118027

(Miragliotta *et al.*, 1993), J. Miragliotta, D.K. Wickenden, T.J. Kistenmacher, and W.A. Bryden, "Linear- and nonlinear-optical properties of GaN thin films" *J. Opt. Soc. Am. B* 10, 1447 - 1457

(Kittel, 1963), Kittel, C. (1963). Introduction to solid state physics. New York: Wiley, 253-254.

(Mead y Spitzer 1964), Mead, C. A., & Spitzer, W. G. (1963). Fermi Level Position at Semiconductor Surfaces. *Physical Review Letters*, 10(11), 471-472

(Kong *et al.*, 2005), Kong, Y., Zheng, Y., Zhou, C., Deng, Y., Shen S, B. Shen, S.L. Gu, R. Zhang, P. Han, R.L. Jiang, Y. Shi, (2005). A novel  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{InN}$  heterostructure field-effect transistor with extremely high two-dimensional electron-gas sheet density. *Solid-State Electronics*,49(2), 199-203.

(Wu *et al.*, 2002), Wu, J., Walukiewicz, W., Yu, K. M., Ager, J. W., Haller, E. E., Lu, H.,Nanishi, Y. (2002). Unusual properties of the fundamental band gap of  $\text{InN}$ . *Applied Physics Letters*,80(21), 3967-3969.

(Wu *et al.*, 2002), Wu, J.; Walukiewicz, W.; Yu, K.M.; Ager III, J.W.; Haller, E.E.; Lu, H.; et al.(2002). Indium nitride: A narrow gap semiconductor. Lawrence Berkeley National Laboratory

(Ascázubi *et al.*, 2004), Ascázubi, R., Wilke, I., Denniston, K., Lu, H., & Schaff, W. J. (2004). Terahertz emission by  $\text{InN}$ . *Applied Physics Letters*,84(23), 4810-4812.

(Su *et al.*, 2002), Su, C., Palosz, W., Zhu, S., Lehoczky, S., Grzegory, I., Perlin, P., & Suski, T. (2002). Energy gap in  $\text{GaN}$  bulk single crystal between 293 and 1237K. *Journal of Crystal Growth*,235(1-4), 111-114.

(Yu *et al.*, 1999), Yu, G., Wang, G., Ishikawa, H., Umeno, M., Soga, T., Egawa, T., . . . Jimbo, T. (1997). Optical properties of wurtzite structure  $\text{GaN}$  on sapphire around fundamental absorption edge (0.78–4.77 eV) by spectroscopic ellipsometry and the optical transmission method. *Applied Physics Letters*,70(24), 3209-3211.

(Harima, 2002), Harima, H. (2002). Properties of  $\text{GaN}$  and related compounds studied by means of Raman scattering. *Journal of Physics: Condensed Matter*,14(38). doi:10.1088/0953-8984/14/38/201

(Mohammed y Morkoc,1996), Mohammad, S., & Morkoç, H. (1996). Progress and prospects of group-III nitride semiconductors. *Progress in Quantum Electronics*,20(5-6), 361-525.

(Monemar, 1999), B. Monemar, "III-V nitrides-important future electronic materials", *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 10, 227-254 (1999)

(Goldhan y Shokhovets, 2002), R. Goldhan, S. Shokhovets, in *III-nitride semiconductors optical properties II*, M.O. Manasreh, H.X. Jiang, editors, Taylor & Francis, 2002, p.73 63

(Heying *et al.*, 2000), Heying, B., Smorchkova, I., Poblentz, C., Elsass, C., Fini, P., Baars, S. D., . . . Speck, J. S. (2000). Optimization of the surface morphologies and electron mobilities in GaN grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy. *Applied Physics Letters*,77(18), 2885-2887. doi:10.1063/1.1322370

(Kim *et al.*, 1994), Kim, J. G., Frenkel, A. C., Liu, H., & Park, R. M. (1994). Growth by molecular beam epitaxy and electrical characterization of Si-doped zinc blende GaN films deposited on  $\beta$ -SiC coated (001) Si substrates. *Applied Physics Letters*,65(1), 91-93.

(Gaskil *et al.*, 1995), Gaskill, D. K., Brandt, C. D., & Nemanich, R. J. (1996). III-Nitride, SiC, and diamond materials for electronic devices: symposium held April, 1996, San Francisco, California, U.S.A.Pittsburgh, PA: Materials Research Society.

(Florescu *et al.*, 2000), Florescu, D. I., Asnin, V. M., Pollak, F. H., Molnar, R. J., & Wood, C. E. (2000). High spatial resolution thermal conductivity and Raman spectroscopy investigation of hydride vapor phase epitaxy grown n-GaN/sapphire (0001): Doping dependence. *Journal of Applied Physics*,88(6), 3295-3300.

(Bernardini y Fiorentini, 2002), Bernardini, F., & Fiorentini, V. (2002). First-principles calculation of the piezoelectric tensor  $d_{11}$  of III-V nitrides. *Applied Physics Letters*,80(22), 4145-4147. doi:10.1063/1.1482796

(Shur, *et al.*, 1996), M. S. Shur, B. Gelmont and A. Khan, "Electron mobility in two-dimensional electron gas inAlGaIn/GaN heterostructures and in bulk GaN", *J. Electronic Materials* 25, 777-785 (1996)



(Osamura *et al.*, 1975), Osamura, K., Naka, S., & Murakami, Y. (1975). Preparation and optical properties of Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>N thin films. *Journal of Applied Physics*,46(8), 3432-3437.

(Tansley y Foley, 1986),Tansley, T. L., & Foley, C. P. (1986). Optical band gap of indium nitride. *Journal of Applied Physics*,59(9), 3241-3244. doi:10.1063/1.336906

(Davydov *et al.*, 2002), Davydov, V.Yu., Klochikhin, A.A., Seisyan, R.P., Emtsev, V.V., Ivanov, S.V., Bechstedt, F., Furthmüller, J., Harima, H., Mudryi, A.V., Aderhold, J., Semchinova, O. and Graul, J. (2002), Absorption and Emission of Hexagonal InN. Evidence of Narrow Fundamental Band Gap. , *Physica Status Solidi B-Basic Research* 229

(Matsuoka, *et al.*, 2002), Matsuoka, T., Okamoto, H., Nakao, M., Harima, H., & Kurimoto, E. (2002). Optical bandgap energy of wurtzite InN. *Applied Physics Letters*,81(7), 1246-1248.

(Inushima *et al.*, 1999), Inushima, T., Shiraishi, T., & Davydov, V. (1999). Phonon structure of InN grown by atomic layer epitaxy. *Solid State Communications*,110(9), 491-495

(Kasic *et al.*, 2002), Kasic, A., Valcheva, E., Monemar, B., Lu, H., & Schaff, W. J. (2004). InN dielectric function from the midinfrared to the ultraviolet range. *Physical Review B*,70(11).

(Tansley, 1994), T. L. Tansley. (1994). Properties of group III nitrides. London: INSPEC, the Institution of Electrical Engineers, 35-40.

(Monemar *et al.*, 1996), Monemar, B., Bergman, J., Lundström, T., Harris, C., Amano, H., Akasaki, I., Sawaki, N. (1997). Optical characterisation of GaN and related materials. *Solid-State Electronics*,41(2), 181-184.

(Kasic *et al.*, 2002), Kasic, A., Schubert, M., Saito, Y., Nanishi, Y., & Wagner, G. (2002). Effective electron mass and phonon modes in-type hexagonal InN. *Physical Review B*,65(11).

(Yu *et al.*, 2002), V. Yu. Davydov, A. A. Klochikhin, R. P. Seisyan, V. V. Emtsev, S. V. Ivanov, F. Bechstedt, J. Furthmuller, H. Harima, A. V. Mudryi, J. Aderhold, O. Semchinova, and J. Graul, "Absorption and emission of hexagonal InN. Evidence of Narrow fundamental band gap" *Phys. Stat. Sol. b*, 229 (2002) R1-R3

(Bernardini y Fiorentini, 2002), Bernardini, F., & Fiorentini, V. (2002). First-principles calculation of the piezoelectric tensor  $d_{ij}$  of III-V nitrides. *Applied Physics Letters*, 80(22), 4145-4147.

(Baccarani y Wordeman, 1985), Baccarani, G., & Wordeman, M. (1985). An investigation of steady-state velocity overshoot in silicon. *Solid-State Electronics*, 28(4), 407-416.

(MacDonald *et al.*, 2003), MacDonald, Jacqueline and J. R. Lockwood. *Alternatives for Landmine Detection*. Santa Monica, CA: RAND Corporation, 2003.

## Apéndice I Simulacion de los incrementos espaciales

```

    implicit real*8 (a,b,d-h,o-z), complex*16 (c)
    complex*16 ca(2),cr(2),an,ar,aex(-40:140),aez(-40:140)
    :,arj(-40:140),arn(-40:140)
real*8 ap(10)
    common eps_1,eps_2,eps_3,rn_0,r11,v_0,cd_n,rk,om_m,com_n,rmu
    :,c_gam,qeps2
    common /r/an(2,2),ar(2,2),ct1,ct2,calf,cbet
    common /vel/axv(25),ayv(25),ay2v(25)
    common /en/axw(25),ayw(25),ay2w(25)
    common /velw/axvw(25),ayvw(25),ay2vw(25)
    common /enw/axww(25),ayww(25),ay2ww(25)
    common /indif/ ind,fd
    common /WGs/ om_1c,eps_2h,eps_1h,r1
cccc note: r1 is the half-thickness of the film (m)
cccc only symm. WG and symm. OR anti-symm. TE modes:eps_3h=eps_1h
    real*8 ark(8001,8),aincr(8001,8),aincr_d(8001,8)
    real*8 aincrk(8001,8),aincrk_d(8001,8)
    real*8 arealom(8001,8),arealom_d(8001,8)
    real*8 aerr(8001,8),aerr_d(8001,8)
ccc
    real*8 ax(-40:140)
    :,aex_w(8001,8)
    f_m(w)=rm_0*(1.+gam_m*w)
    f_mw(w)=rm_0w*(1.+gam_mw*w)
    external fe_WGs,fe_WGa
    open(7,file='In_N_incr_nloc_s3.dat')
    open(8,file='In_N_incr_nloc_tot_s3.dat')
cccc increment for INSTABILITY of SCW in InN
cccc A SIMPLE VERSION - WITHOUT ACOUSTICS
ccc Zinc Blende structure (and for wurtzite, too!!!)
cccc with diffusion
cccc AND the simplest model of nonlocality (complex rmu_d)
cccc ALSO COMPARISON ZINC BLENDE - WURTZITE for high speed!!!!!!!!!!!!!!
cccc
cccc a possibility to modify the diffusion
ccc input of e(V/m),v(10^5 m/s)
cccc but recalculation to SI UNITS
cccc ALSO THE MATCHING CONDITIONS for 3-wave interaction
cccc and OVERLAP INTEGRAL
    pi=3.1415926536
    vc=3.d8
    cj=(0.,1.)
    pil=2.*pi
    e_ch=1.6d-19
ccc here e(V/m),v(m/s)
ccc eff. mass (to el. mass)
    rm_0=.054
ccc for Wurtzite
    rm_0w=.04
ccc nonparabolicity (eV-1)
ccc some change of coefficient!!!!!!!!!!!!!!
    gam_m=4.2
ccc
    gam_mw=1.4
ccc
ccc critical freq. for the forbidden gap
    h_p=1.034d-34

```

```

e_gap=0.75
om_gap=e_gap*e_ch/h_p
write(7,*) ' e (V/m) v (m/s) fd (m^2/V/s) '
ccc 1
do l=1,25
axv(l)=axv(l)*1.d7
ayv(l)=ayv(l)*1.d5
c write(7,200) axv(l),ayv(l)
end do
ccc 1
call spline(axv,ayv,25,1.d+50,1.d+50,ay2v)
ind=1
d_e=axv(25)/50.
ccc 1
do l=1,50
e_c=d_e*l
c e_c=axv(l)
v_c=fv(e_c)
write(7,200) e_c,v_c,fd
end do
ccc 1
cccccccccccc
write(7,*) ' e (V/m) w '
ccc 1
do l=1,25
axw(l)=axw(l)*1.d7
write(7,200) axw(l),ayw(l)
end do
ccc 1
call spline(axw,ayw,25,1.d+50,1.d+50,ay2w)
ccc also for wurtzite
ccc
write(7,*) ' ew (V/m) vw (m/s) fd (m^2/V/s) '
ccc 1
do l=1,25
axvw(l)=axvw(l)*1.d7
ayvw(l)=ayvw(l)*1.d5
c write(7,200) axvw(l),ayvw(l)
end do
ccc 1
call spline(axvw,ayvw,25,1.d+50,1.d+50,ay2vw)
d_e=axvw(25)/50.
ccc 1
do l=1,50
e_c=d_e*l
c e_c=axvw(l)
v_c=fvw(e_c)
write(7,200) e_c,v_c,fd
end do
ccc 1
cccccccccccc
write(7,*) ' ew (V/m) ww '
ccc 1
do l=1,25
axww(l)=axww(l)*1.d7
write(7,200) axww(l),ayww(l)
end do
ccc 1
call spline(axww,ayww,25,1.d+50,1.d+50,ay2ww)

```

```

ccc
ccc units: s,m,kg
      D_n=8.d-3
      ech=1.6d-19
      def_p=15.*ech
ccc the same for ZB and W
      eps_2=15.3
ccc opt. range 'high freq.'
      eps_2h=9.
cccccccccccc
      eps_0=8.86d-12
      ind_i=0
      qeps2=ech/(eps_0*eps_2)
ccc note: the depth of the film is r11=2*r1
1      write(6,*) ' input r1 (mkm), eps_1,eps_3(mm),eps_1h,eps_3h
(opt.) '
      read(*,*) r1,eps_1,eps_3,eps_1h,eps_3h
      r1=r1*1.d-6
      write(7,*) ' r1(m),eps_1,eps_3,eps_1h,eps_3h='
      :,r1,eps_1,eps_3,eps_1h,eps_3h
      write(6,*) ' r1(m),eps_1,eps_3,eps_1h,eps_3h='
      :,r1,eps_1,eps_3,eps_1h,eps_3h
cccccccccccccccccccccccccccccccc
      r11=2.*r1
      write(6,*) ' input ind_str (0-Zinc Blende, 1- Wurtzite)'
      read(*,*) ind_str
      write(7,*) ' ind_str(0-Zinc Blende, 1- Wurtzite)=' ,ind_str
      write(6,*) ' ind_str(0-Zinc Blende, 1- Wurtzite)=' ,ind_str
3      write(6,*) ' input E_0(V/m),rn_0(cm-3)'
      read(*,*) E_0,rn_0
      rn_0=rn_0*1.d6
      rn_02=rn_0*r11
      ind=1
      if(ind_str.eq.0) then
      v_0=fv(e_0)
      else
      v_0=fvw(e_0)
      end if
      fd0=fd
ccc rmu, gam
      rmu=v_0/e_0
      gam=rmu-fd
      om_m=ech*rn_0*rmu/(eps_0*eps_2)
      om_n=ech*rn_0*gam/(eps_0*eps_2)
      write(7,100) e_0,rn_0,v_0,fd,om_m,om_n
      write(6,100) e_0,rn_0,v_0,fd,om_m,om_n
100     format(' e_0,rn_0,v_0,fd,om_m,om_n=',6d12.4)
      write(6,*) ' input ind_task: 0 - change e_0, 1 - continue'
      read(*,*) ind_task
      if(ind_task.eq.0) go to 3
cccccccccccccccccccccccccccccccc
ccc dispersion eq. for SYMM. OR ANTI-SYMM. OPT. WG
cccccccccccc
      write(6,*) ' input freq_0 (GHz) - profile and overlap'
      read(*,*) freq_0
      freq_0=1.d9*freq_0
      om_0=pil*freq_0
cccc for choosing the proper om_1
      dom_0=om_0
cccccccccccccccccccccccccccccccc

```

```

        write(6,*)' input ind_sa: 0 - summ. WG modes, 1 - anti-symm.'
        read(*,*) ind_sa
        write(7,*)' ind_sa (0 - s, 1 - a-s WG modes)=' ,ind_sa
        write(6,*)' ind_sa (0 - s, 1 - a-s WG modes)=' ,ind_sa
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
om_1cc=pi/rl/dsqrt(eps_2h-eps_1h)
dom_1c=om_1cc/300.
om_1c=.1*om_1cc
rn_1h=dsqrt(eps_1h)
rn_2h=dsqrt(eps_2h)
cccc simplified
c  write(8,*)' i    om_1    rkb_1    rkb_2    rk_1    p_11    rk_2
c    :    p_21    rk_3    om_3    f_3 A_1 A_2 S_ov'
        write(6,*)' i    om_1    rkb_1    rkb_2    rk_1    p_11    rk_2
        :    p_21    rk_3    om_3    f_3 A_1 A_2 S_ov'
cccc i
do i=30,1000
om_1c=om_1c+dom_1c
om_1=om_1c*vc
cccc -rk_1!!!!
rkb_1=om_1c*rn_1h
rkb_2=om_1c*rn_2h
a=-rkb_2*.999
b=-rkb_1*1.001
h=(b-a)/10.
        if(ind_sa.eq.0) then
k=IR(a,b,fe_WGs,ap,1.d+2,h,3)
        else
k=IR(a,b,fe_WGa,ap,1.d+2,h,3)
        end if
        if(k.eq.0) then
c  write(7,*)' error!!!!'
c  stop
        else
om_1=om_1c*vc
write(7,900) om_1, (ap(1),l=1,k)
900 format(1x,d12.3,2x,3d12.3)
        end if
        if(k.gt.1) then
rk_1=-ap(1)
rk_2=-ap(2)
rk_3=rk_1-rk_2
om_3=rk_3*v_0
omm_1c1h=om_1c**2*eps_1h
omm_1c2h=om_1c**2*eps_2h
p_11=dsqrt(rk_1**2-omm_1c1h)*r1
p_21=dsqrt(rk_2**2-omm_1c1h)*r1
q_11=dsqrt(-rk_1**2+omm_1c2h)*r1
q_21=dsqrt(-rk_2**2+omm_1c2h)*r1
f_3=om_3/pi1
cccc normalizing to half-thickness
        if(ind_sa.eq.0) then
A_1=dsqrt(2./(1+.5*sin(2.*q_11)/q_11+cos(q_11)**2/p_11))
A_2=dsqrt(2./(1+.5*sin(2.*q_21)/q_21+cos(q_21)**2/p_21))
        else
A_1=dsqrt(2./(1-.5*sin(2.*q_11)/q_11+sin(q_11)**2/p_11))
A_2=dsqrt(2./(1-.5*sin(2.*q_21)/q_21+sin(q_21)**2/p_21))
        end if
cccc estimating S_ov
S_ov=.5*A_1*A_2*(sin(q_11+q_21)/(q_11+q_21))

```

```

      :+sin(q_11-q_21)/(q_11-q_21))
cccc simplified
c  write(8,901) i,om_1,rkb_1,rkb_2,rk_1,p_11,rk_2,p_21
c    : ,rk_3,om_3,f_3,A_1,A_2,S_ov
      write(6,901) i,om_1,rkb_1,rkb_2,rk_1,p_11,rk_2,p_21
      : ,rk_3,om_3,f_3,A_1,A_2,S_ov
901 format(1x,i4,13d12.4)
      dom_0_c=dabs(om_3-om_0)
          if(dom_0_c.lt.dom_0) then
              dom_0=dom_0_c
              om_1_0=om_1
              rk_1_0=rk_1
              rk_2_0=rk_2
              A_1_0=A_1
              A_2_0=A_2
              q_1_0=q_11/r1
              q_2_0=q_21/r1
          else
              end if
          else
              end if
      end do
cccc i
cccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccc calculations of rnu_p,rnu_w
cccccccccccccccccccccccccccccccccccc
      d_ex=.5d6
          j_0=e_0/d_ex
cccc for T = 300 K (in eV):
      w_00=.039
      write(7,*) '   for Zinc Blende'
      write(6,*) '   for Zinc Blende'
      write(7,*) ' e_x   v_x   w_x   rmu_x   rnu_p
      : rnu_w   rnu_weff   v*e r_cdif'
cccc j
      do j=3,50
          if(j.gt.3) then
              ve_x2=ve_x
              w_x2=w_x
              rmu_x2=rmu_x
          else
              end if
              e_x=d_ex*j
              e_x2=e_x**2
              v_x=fv(e_x)
              rmu_x=v_x/e_x
              w_x=fw(e_x)
              r_mx=.911d-30*f_m(w_x)
              rnu_p=ech/(rmu_x*r_mx)
              ve_x=v_x*e_x
              if(j.gt.3) then
                  d_rmuw=(rmu_x-rmu_x2)/(w_x-w_x2)
                  rnu_weff=(ve_x-ve_x2)/(w_x-w_x2)
                  :-e_x2*d_rmuw
                  rnu_w=ve_x/(w_x-w_00)
                  r_cdif=2.*e_x2/rnu_weff*d_rmuw
              else
                  end if
              if(j.eq.j_0.and.ind_str.eq.0) then
                  w_0=w_x

```

```

rnu_weff0=rnu_weff
rnu_w0=rnu_w
rnu_p0=rnu_p
r_cdif0=r_cdif
    else
    end if
    if(j.gt.3)
    :write(7,200) e_x,v_x,w_x,rmu_x,rnu_p,rnu_w,rnu_weff,ve_x,r_cdif
    end do
ccc j
write(7,202) e_0,w_0,rnu_p0,rnu_w0,rnu_weff0
202 format(' e_0,w_0,rnu_p0,rnu_w0,rnu_weff0=',5d12.3)
cccccccccccccccccc
write(7,*)' for Wurtzite'
write(6,*)' for Wurtzite'
write(7,*)' e_x v_x w_x rmu_x rnu_p
: rnu_w rnu_weff v*e r_cdif'
write(6,*)' e_x v_x w_x rmu_x rnu_p
: rnu_w rnu_weff v*e r_cdif'
ccc j
do j=3,50
    if(j.gt.3) then
ve_x2=ve_x
w_x2=w_x
rmu_x2=rmu_x
    else
    end if
e_x=d_ex*j
e_x2=e_x**2
v_x=fvw(e_x)
rmu_x=v_x/e_x
w_x=fww(e_x)
r_mx=.911d-30*f_mw(w_x)
rnu_p=ech/(rmu_x*r_mx)
ve_x=v_x*e_x
    if(j.gt.3) then
d_rmuw=(rmu_x-rmu_x2)/(w_x-w_x2)
rnu_weff=(ve_x-ve_x2)/(w_x-w_x2)
:-e_x2*d_rmuw
rnu_w=ve_x/(w_x-w_00)
r_cdif=2.*e_x2/rnu_weff*d_rmuw
    else
    end if
    if(j.eq.j_0.and.ind_str.eq.1) then
w_0=w_x
rnu_weff0=rnu_weff
rnu_w0=rnu_w
rnu_p0=rnu_p
r_cdif0=r_cdif
    else
    end if
    if(j.gt.3)
    :write(7,200) e_x,v_x,w_x,rmu_x,rnu_p,rnu_w,rnu_weff,ve_x,r_cdif
    end do
ccc j
cccccccccccccccccc
if(ind_str.eq.0) then
w_0=fw(e_0)
    else
w_0=fww(e_0)

```



```

        end if
fi_t=.66667*w_0
rnu_w=v_0*e_0/(w_0-w_00)
        if(ind_str.eq.0) then
rm_eff=.911d-30*f_m(w_0)
        else
rm_eff=.911d-30*f_mw(w_0)
        end if
cccccccccccccccc
write(6,*)' input ind_diff (0-diffusion unchanged, 1 - modified) '
read(*,*) ind_diff
        if(ind_diff.eq.1) then
ccc charact. frequencies and diffusion in center
cccc in Volts
ccc some estimations for error of temperature
rkin_en=.5*rm_eff*v_0**2/ech
write(7,888) w_0,rkin_en
write(6,888) w_0,rkin_en
888 format(' w_0,rkin_en=',2d12.3)
ccc
D_n=rmu*fi_t
ccc in Kelvins
rk_b=1.38d-23
temp_e=fi_t*ech/rk_b
        else
                if(ind_str.eq.0) then
D_n=ayv(2)/axv(2)*fi_t
                else
D_n=ayvw(2)/axvw(2)*fi_t
                end if
        end if
write(7,*)' d_n=',D_n
write(6,*)' d_n=',D_n
cccc
fd=fd0
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
dfreq=1.d8
dom=pil*dfreq
j_0=om_0/dom
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
nx=100
nxm=nx/2
dx=rll/nx
nx1=nx+1
nx2=nx-1
nx_1=nx+40
nx_2=-40
dx_1=10.*dx
dx_2=10.*dx
ca_010=-cj*D_n
ccc below - some modification of diffusion (also with the same coeff.)
ind_i=ind_i+1
rj_0=v_0*rn_0
write(6,*)' input ind_c (0 - local approx.,
: 1 - the simplest nonlocal one) '
read(*,*) ind_c
write(7,*)' ind_c (0 - local, 1 - nonlocal)=' ,ind_c
write(6,*)' ind_c (0 - local, 1 - nonlocal)=' ,ind_c
ccc
ccc calculation of TEMPORAL increment - complex frequency

```

```

drk=dom/v_0
ccc j
    do j=1,8000
        rk=j*drk
        rkk=rk**2
        om=rk*v_0
ccc complex coeff. for nonlocality
    if(ind_c.eq.0) then
        c_loc=1.
    else
cccc a bit more exact formula
        c_loc=1./(1.-1.3*cj*om/rnu_weff0)
        end if
        c_fd=c_loc*fd-rmu*(c_loc-1.)
        c_gam=rmu-c_fd
        com_n=ech*rn_0*c_gam/(eps_0*eps_2)
cccccccccccccccc
ccc calculation of complex frequency for 2d el. gas
ccc here modification of ca_01
        ca_01=ca_010*c_loc
        cd_n=d_n*c_loc
cccccccccccccccc
        com=om-ca_01*rkk+cj*rn_02*ech/eps_0/(eps_3+eps_1)*c_fd*rk
        freq=om/pil
        write(7,200) rk,freq,com
200 format(8(2x,d12.3,2x,2d12.4))
        ark(j,ind_i)=rk
        aincr(j,ind_i)=dimag(com)
        arealom(j,ind_i)=dreal(com)
        aerr(j,ind_i)=cdabs(cf(com))
cccc recalc. to spatial increment
        aincrk(j,ind_i)=-aincr(j,ind_i)/v_0
cccc
ccc
ccc correction with diffusion
ccc quadratic approx. (use of Taylor expansion)
        if(j.eq.0) then
            aincr_d(j,ind_i)=0.
        else
ccc iterations
            if(j.ne.1) com=com_0

            cdom=.001*com
ccc it
            do it=1,4
                com_0=com
                com_p=com_0+cdom
                com_m=com_0-cdom
                cf_0=cf(com_0)
                cf_p=cf(com_p)
                cf_m=cf(com_m)
ccccctest!!!!!!!!!!!!
ccc parabolic approximation
                cdf_1=.5*(cf_p-cf_m)/cdom
                cdf_2=(cf_p-2.*cf_0+cf_m)/cdom**2
                ca_02=.5*cdf_2
                ca(1)=cdf_1
                ca(2)=cf_0
                ca(1)=ca(1)/ca_02
                ca(2)=ca(2)/ca_02

```

```

c      call twor(ca,cr)
cccc use of the root with smallest imagine part
c  com_1=com_0+cr(1)
c  com_2=com_0+cr(2)
c  com=com_2
c      if(dimag(com).gt.dimag(com_1))
c      :com=com_1
ccc linear approx.
  com=com-cf_0/cdf_1
cccc!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
  cfx=cf(com)
  rfx=cdabs(cfx)
  write(7,*)' it,com,rfx(=0?)=',it,com,rfx
  end do
ccc it
  com_0=com
  aincr_d(j,ind_i)=dimag(com)
  arealom_d(j,ind_i)=dreal(com)
  aerr_d(j,ind_i)=cdabs(cf(com))
cccc recalc. to spatial increment
  aincrk_d(j,ind_i)=-aincr_d(j,ind_i)/v_0
cccc
cccc profile of Ez
  ca_1=1.
                                     if(cdabs(ar(1,2)).gt.cdabs(ar(2,2)))
then
  ca_2=-ca_1*ar(1,1)/ar(1,2)
                                     else
  ca_2=-ca_1*ar(2,1)/ar(2,2)
                                     end if
  cb_1=an(1,1)*ca_1+an(1,2)*ca_2
  cb_2=an(2,1)*ca_1+an(2,2)*ca_2
cccc use  $\square$ span>in  $10^{**22}$  m-3 units and the value of  $\square$ span>at x=0 is
 $10^{**22}$  m-3
cccc so Ex, Ez in V/m, j_x in A/m2
  c_coef=1./(ca_1+ca_2)*1.d22
  ca_1=ca_1*c_coef
  ca_2=ca_2*c_coef
  cb_1=cb_1*c_coef
  cb_2=cb_2*c_coef
ccc l
  do l=0,nx
  x=dx*l
  ax(l)=x
  cex1=cdexp(cj*ct1*x)
  cex2=cdexp(cj*ct2*x)
  cx_1=ca_1*cex1+ca_2/cex1
  cx_2=cb_1*cex2+cb_2/cex2
  arn(l)=cx_1+cx_2
  cfi=calf*cx_1+cbet*cx_2
                                     if(l.eq.0) c_c2=cfi
                                     if(l.eq.nx) c_c1=cfi
  aez(l)=cj*cfi*rk
  cx_1=ct1*(ca_1*cex1-ca_2/cex1)
  cx_2=ct2*(cb_1*cex2-cb_2/cex2)
  cdrn=cx_1+cx_2
  cdrn=cj*cdrn
  aex(l)=calf*cx_1+cbet*cx_2
  aex(l)=-cj*aex(l)
  arj(l)=cd_n*cdrn-rmu*rn_0*aex(l)

```

```

    arj(1)=ech*arj(1)
  end do
ccc 1
cccc calculate for x > r11
ccc 1
  do l=nx1,nx_1
    x_c=dx_1*(1-nx)
    ax(1)=x_c+r11
    cfi=c_c1*dexp(-rk*x_c)
    aex(1)=rk*cfi
    aez(1)=cj*aex(1)
    arj(1)=0.
    arn(1)=0.
  end do
ccc 1
cccc calculate for x < 0
ccc 1
  do l=nx_2,-1
    x=dx_2*l
    ax(1)=x
    cfi=c_c2*dexp(rk*x)
    aex(1)=-rk*cfi
    aez(1)=-cj*aex(1)
    arj(1)=0.
    arn(1)=0.
  end do
ccc 1
      if(j.eq.j_0) then
om_0=j_0*dom
freq_0=om_0/pil
write(7,777) j_0,om_0,freq_0
777 format(' j_0,om_0,freq_0=',i5,2d12.4)
      write(7,*) '      x          ex          ez          d_x
:      rj_x      rn'
ccc 1
  do l=nx_2,nx_1
    x=ax(1)
    ez=cdabs(aez(1))
    ex=cdabs(aex(1))
    rj_x=cdabs(arj(1))
    rn=cdabs(arn(1))
    if(1.lt.0) then
d_x=eps_0*eps_1*ex
    else if(1.le.nx) then
d_x=eps_0*eps_2*ex
    else
d_x=eps_0*eps_3*ex
    end if
write(7,300) x,ex,ez,d_x,rj_x,rn
300 format(1x, 6d15.4)
  end do
ccc 1
      else
    end if
  end if
end do
ccc j
cccc calculate overlap integral
cccc only for symm. case:eps_1=eps_3
write(7,903) A_1_0,A_2_0,q_1_0,q_2_0,arn(nx),r1

```

```

write(6,903) A_1_0,A_2_0,q_1_0,q_2_0,arn(nx),rl
903 format(' A_1_0,A_2_0,q_1_0,q_2_0,arn(nx),rl=',7d12.3)
cccc average rn
cccc another approach?
cccccccccccccccccccc!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
rn_av2=0.
ccc l
do l=nxm,nx
rn_av2=rn_av2+cdabs(arn(l))**2
end do
ccc l
rn_av2=rn_av2/nxm
rn_av=dsqrt(rn_av2)
cccccccccccccccccccc!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
write(7,906) rn_av
906 format(' rn_av=',d12.3)
cS_ov=0.
ccc l
do l=nxm,nx
x_d=dx*(l-nxm)
write(6,*) ' l,arn(l)=' ,l,arn(l)
if(ind_sa.eq.0) then
cS_ov=cS_ov+dx*A_1_0*A_2_0*cos(q_1_0*x_d)*cos(q_2_0*x_d)
:*arn(l)/rn_av/rl
else
cS_ov=cS_ov+dx*A_1_0*A_2_0*sin(q_1_0*x_d)*sin(q_2_0*x_d)
:*arn(l)/rn_av/rl

end if
end do
ccc l
S_ov=cdabs(cS_ov)
write(7,902) om_0,freq_0,om_1_0,om_gap,S_ov
write(6,902) om_0,freq_0,om_1_0,om_gap,S_ov
902 format(' om_0,freq_0,om_1_0,om_gap,S_ov=',5d12.3)
if(ind_i.eq.8) go to 2
cccccccccccccccccccccccc
write(6,*) ' input ind_t: 0 - stop, 1 - continue'
read(*,*) ind_t
if(ind_t.eq.1) go to 1
ccc j
2 do j=1,8000,5
om_0=ark(j,1)*v_0
freq_0=om_0/pil
write(8,210) freq_0,(ark(j,m),arealom(j,m),aincr(j,m)
:,aincrk(j,m),aerr(j,m)
:,arealom_d(j,m),aincr_d(j,m),aincrk_d(j,m),aerr_d(j,m)
:,m=1,ind_i),om_0
cccc
210 format(1x,150d12.4)
end do
ccc j
end
BLOCK DATA
implicit real*8 (a,b,d-h,o-z), complex*16 (c)
common /vel/axv(25),ayv(25),ay2v(25)
common /en/axw(25),ayw(25),ay2w(25)
common /velw/axvw(25),ayvw(25),ay2vw(25)
common /enw/axww(25),ayww(25),ay2ww(25)
real*8 axv/0.00,0.125,0.25,0.375,0.50,0.625,0.75,0.875,1.00

```

```

: ,1.125,1.25,1.375,1.50,1.625,1.75,1.875,2.00,2.125
: ,2.25,2.375,2.50,2.625,2.75,2.875,3.00/
  real*8 ayv/0.00,2.55, 2.85,3.15, 3.30,3.20, 3.10, 2.85,2.70
: ,2.60,2.50, 2.40, 2.30,2.21, 2.12,2.04,1.97, 1.91
: ,1.86,1.81,1.77,1.73,1.70, 1.68,1.67/
  real*8 axw/0.00,0.125,0.25,0.375,0.50,0.625,0.75,0.875,1.00
: ,1.125,1.25,1.375,1.50,1.625,1.75,1.875,2.00,2.125
: ,2.25,2.375,2.50,2.625,2.75,2.875,3.00/
real*8 ayw/0.039,0.06,0.09,.125,0.375, 0.62,0.80,0.90,1.05
: ,1.10,1.15,1.19,1.24,1.28,1.32,1.36,1.40,1.43
: ,1.46,1.48,1.50,1.52,1.53,1.54,1.55/
ccc
  real*8 axvw/0.00,0.125,0.25,0.375,0.50,0.625,0.75,0.875,1.00
: ,1.125,1.25,1.375,1.50,1.625,1.75,1.875,2.00,2.125
: ,2.25,2.375,2.50,2.625,2.75,2.875,3.00/
  real*8 ayvw/0.00,4.15, 5.25,5.55, 4.75,3.75, 3.25,2.75, 2.55
: ,2.35,2.15,2.05,1.95, 1.90, 1.85,1.80, 1.75,1.70
: ,1.66, 1.62, 1.59, 1.56,1.54,1.52,1.50/
  real*8 axww/0.00,0.125,0.25,0.375,0.50,0.625,0.75,0.875,1.00
: ,1.125,1.25,1.375,1.50,1.625,1.75,1.875,2.00,2.125
: ,2.25,2.375,2.50,2.625,2.75,2.875,3.00/
real*8 ayww/0.039, 0.06,0.09,.125,0.375, 0.62,0.80,0.90,1.05
: ,1.10, 1.15, 1.19,1.24,1.28, 1.32, 1.36,1.40, 1.43
: ,1.46,1.48,1.50,1.52,1.53,1.54,1.55/
ccc
end
  real*8 function fv(e)
  implicit real*8 (a-h,o-z)
  common /vel/ axv(25),ayv(25),ay2v(25)
  call splint(axv,ayv,ay2v,25,e,y)
  fv=y
  return
end
  real*8 function fw(e)
  implicit real*8 (a-h,o-z)
  common /en/ axw(25),ayw(25),ay2w(25)
  call splint(axw,ayw,ay2w,25,e,y)
  fw=y
  return
end
  real*8 function fvw(e)
  implicit real*8 (a-h,o-z)
  common /velw/ axvw(25),ayvw(25),ay2vw(25)
  call splint(axvw,ayvw,ay2vw,25,e,y)
  fvw=y
  return
end
  real*8 function fww(e)
  implicit real*8 (a-h,o-z)
  common /enw/ axww(25),ayww(25),ay2ww(25)
  call splint(axww,ayww,ay2ww,25,e,y)
  fww=y
  return
end
  SUBROUTINE spline(x,y,n,yp1,ypn,y2)
  INTEGER n,NMAX
  REAL*8 yp1,ypn,x(n),y(n),y2(n)
  PARAMETER (NMAX=500)
  INTEGER i,k
  REAL*8 p,qn,sig,un,u(NMAX)

```

```

    if (yp1.gt..99d30) then
        y2(1)=0.
        u(1)=0.
    else
        y2(1)=-0.5
        u(1)=(3./(x(2)-x(1)))*((y(2)-y(1))/(x(2)-x(1))-yp1)
    endif
    do 11 i=2,n-1
        sig=(x(i)-x(i-1))/(x(i+1)-x(i-1))
        p=sig*y2(i-1)+2.
        y2(i)=(sig-1.)/p
        u(i)=(6.*((y(i+1)-y(i))/(x(i+
*1)-x(i))-(y(i)-y(i-1))/(x(i)-x(i-1)))/(x(i+1)-x(i-1))-sig*
*u(i-1))/p
11    continue
        if (ypn.gt..99d30) then
            qn=0.
            un=0.
        else
            qn=0.5
            un=(3./(x(n)-x(n-1)))*(ypn-(y(n)-y(n-1))/(x(n)-x(n-1)))
        endif
        y2(n)=(un-qn*u(n-1))/(qn*y2(n-1)+1.)
    do 12 k=n-1,1,-1
        y2(k)=y2(k)*y2(k+1)+u(k)
12    continue
    return
    END

    SUBROUTINE splint(xa,ya,y2a,n,x,y)
ccc a bit modified; with calculating dericative!!!!!!!
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    INTEGER n
    REAL*8 x,y,xa(n),y2a(n),ya(n)
    INTEGER k,khi,klo
    REAL*8 a,b,h
    common /indif/ ind,fd
    klo=1
    khi=n
1    if (khi-klo.gt.1) then
        k=(khi+klo)/2
        if(xa(k).gt.x) then
            khi=k
        else
            klo=k
        endif
        goto 1
    endif
    h=xa(khi)-xa(klo)
    if (h.eq.0.) pause 'bad xa input in splint'
    a=(xa(khi)-x)/h
    b=(x-xa(klo))/h
ccc function
    y=a*ya(klo)+b*ya(khi)+((a**3-a)*y2a(klo)
    :+(b**3-b)*y2a(khi))*h**2)/6.
ccc derivative
    if(ind.eq.1) fd=(ya(khi)-ya(klo))/h
    :-(3.*a*a-1.)*y2a(klo)+(1.-3.*b*b)*y2a(khi))*h/6.
    return
    END
    subroutine twor(ca,cr)

```

```

implicit complex*16 (c)
complex*16 ca(2),cr(2)
cp=-.5*ca(1)
cd=cp**2-ca(2)
cd=cdsqrt(cd)
cr(1)=cp+cd
cr(2)=cp-cd
if(cdabs(cr(1)).lt.cdabs(cr(2))) then
cx=cr(1)
cr(1)=cr(2)
cr(2)=cx
else
end if
if(cdabs(cr(1)).ne.0.) cr(2)=ca(2)/cr(1)
return
end

complex*16 function cfdet(a,n)
implicit complex*16 (c), real*8 (d-h,o-z)
complex*16 a(n,n)
ccc function for determinant of complex matrix
cfdet=1.
c direct Gaussian path
ccc i
do i=1,n-1
rm=cdabs(a(i,i))
cc comparison
lmax=i
ccc l
do l=i+1,n
xm=cdabs(a(l,i))
if(xm.gt.rm) then
rm=xm
lmax=l
else
end if
end do
ccc l
cc checking fo zero:
if(rm.lt.1.d-30) then
cfdet=0.
return
else
end if
cc permutation (if it is needed)
if(lmax.ne.i) then
ccc j
do j=i,n
c1=a(i,j)
a(i,j)=a(lmax,j)
a(lmax,j)=c1
end do
ccc j
cfdet=-cfdet
else
end if
cc subtraction
ccc l
do l=i+1,n
cd=a(l,i)/a(i,i)
ccc j

```



```

        do j=n,i,-1
          a(1,j)=a(1,j)-a(i,j)*cd
        end do
ccc j
      end do
ccc l
          cfdet=cfdet*a(i,i)
      end do
ccc i
          cfdet=cfdet*a(n,n)
    return
  end
      complex*16 function cf(com)
      implicit complex*16 (c), real*8 (a,b,d-h,o-z)
      complex*16 aa(4,4),ca(2),cr(2)
      complex*16 am(2,2),ao(2,2),an,ap(2,2),aq(2,2),ar
      common eps_1,eps_2,eps_3,rn_0,r11,v_0,cd_n,rk,om_m,com_n,rmu
      : ,c_gam,qeps2
      common /r/an(2,2),ar(2,2),ct1,ct2,calf,cbet
c use units: m, kg, s
ccc note: modification od diffusion coeff.
      cj=(0.,1.)
      rkk=rk**2
ccc complex roots of quadratic equation
ccc for the partial solution within the film
      ca(1)=(cj*(com-rk*v_0)+om_m)/cd_n
      ca(2)=-com_n*rkk/cd_n
      call twor(ca,cr)
      ct1=cdsqrt(cr(1)-rkk)
      ct2=cdsqrt(cr(2)-rkk)
ccc multipliers
      calf=qeps2/cr(1)
      cbet=qeps2/cr(2)
ccc elements of the determinant
      cexp1=cdexp(cj*ct1*r11)
      cexp2=cdexp(cj*ct2*r11)
ccc boundary conditions at z=0
      c1=ct1*(1.+calf*rmu*rn_0/cd_n)
      c2=ct2*(1.+cbet*rmu*rn_0/cd_n)
      aa(1,1)=c1
      aa(1,2)=-c1
      aa(1,3)=c2
      aa(1,4)=-c2
ccc boundary conditions at z=r11
      aa(2,1)=c1*cexp1
      aa(2,2)=-c1/cexp1
      aa(2,3)=c2*cexp2
      aa(2,4)=-c2/cexp2
ccc boundary conditions at z=0
      aa(3,1)=calf*(-rk*eps_1+cj*eps_2*ct1)
      aa(3,2)=calf*(-rk*eps_1-cj*eps_2*ct1)
      aa(3,3)=cbet*(-rk*eps_1+cj*eps_2*ct2)
      aa(3,4)=cbet*(-rk*eps_1-cj*eps_2*ct2)
ccc boundary conditions at z=r11
      aa(4,1)=calf*(rk*eps_3+cj*eps_2*ct1)*cexp1
      aa(4,2)=calf*(rk*eps_3-cj*eps_2*ct1)/cexp1
      aa(4,3)=cbet*(rk*eps_3+cj*eps_2*ct2)*cexp2
      aa(4,4)=cbet*(rk*eps_3-cj*eps_2*ct2)/cexp2
ccc calling subroutine for determinant
      cf=cfdet(aa,4)

```

```

ccc also profile of Ez
am(1,1)=aa(1,1)
am(1,2)=aa(1,2)
am(2,1)=aa(2,1)
am(2,2)=aa(2,2)
an(1,1)=-aa(1,3)
an(1,2)=-aa(1,4)
an(2,1)=-aa(2,3)
an(2,2)=-aa(2,4)
      call inmat2(an,ao)
call mmat2(ao,am,an)
ap(1,1)=aa(3,1)
ap(1,2)=aa(3,2)
ap(2,1)=aa(4,1)
ap(2,2)=aa(4,2)
aq(1,1)=aa(3,3)
aq(1,2)=aa(3,4)
aq(2,2)=aa(4,3)
aq(2,2)=aa(4,4)
call mmat2(aq,an,ar)
call smat2(ap,ar)
      return
      end
      subroutine mmat2(a,b,c)
      complex*16 a(2,2),b(2,2),c(2,2)
      do 1 i=1,2
      do 1 j=1,2
c(i,j)=(0.,0.)
      do 11 k=1,2
c(i,j)=c(i,j)+a(i,k)*b(k,j)
11 continue
1 continue
      return
      end
      subroutine inmat2(a,b)
      complex*16 a(2,2),b(2,2),cd
      cd=a(1,1)*a(2,2)-a(1,2)*a(2,1)
      b(1,1)=a(2,2)/cd
      b(2,2)=a(1,1)/cd
      b(1,2)=-a(1,2)/cd
      b(2,1)=-a(2,1)/cd
      return
      end
      subroutine smat2(a,b)
c a+b ----->b!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
      complex*16 a(2,2),b(2,2)
      do 1 i=1,2
      do 1 j=1,2
      b(i,j)=a(i,j)+b(i,j)
1 continue
      return
      end
      real*8 function fe_WGs(rk_1)
      implicit real*8 (a-h, o-z)
      common /WGs/ om_1c,eps_2h,eps_1h,r1
ccc m, s
      rkk_1=rk_1**2
      omm_1c=om_1c**2
      q=dsqrt(omm_1c*eps_2h-rkk_1)
      p=dsqrt(-omm_1c*eps_1h+rkk_1)

```

```

    ql=q*r1
    fe_WGs=q*sin(ql)-p*cos(ql)
    return
end
real*8 function fe_WGa(rk_1)
implicit real*8 (a-h, o-z)
common /WGs/ om_1c,eps_2h,eps_1h,r1
ccc m, s
    rkk_1=rk_1**2
    omm_1c=om_1c**2
    q=dsqrt(omm_1c*eps_2h-rkk_1)
    p=dsqrt(-omm_1c*eps_1h+rkk_1)
    ql=q*r1
    fe_WGa=q*cos(ql)+p*sin(ql)
    return
end
FUNCTION IR(A,B,F,P,EPS,H,N)
ccc HERE IS A PROGRAM FOR SOLVING EQUATION F(x)=0 BY DIVIDING!!!!!!
cccc A is the beginning of the interval, b is the end,
cccc F is a function for F(x)=0, P is an array for roots,
cccc it must be described in external in main pgm. (for ex., flomn),
cccc eps is an accuracy (for ex. 1.d-6), h is the minimal distance
cccc between roots (for ex., 1.d-2), n is requested number of roots
cccc (for ex., 5)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    REAL*8 P(1),ETA/0./
    B1=A
    IR=0
12     A1=B1+ETA
        B1=A1+H
        ETA=0.
        IF(IR.GE.N.OR.B1.GT.B) GO TO 20
        F1=F(A1)
        F2=F(B1)
        IF(F1*F2) 1,2,12
2         IR=IR+1
        IF(F1) 4,5,4
5         P(IR)=A1
        GO TO 12
4         P(IR)=B1
        ETA=H
        GO TO 12
1         X1=A1
        X2=B1
13        X3=X1-(X2-X1)/(F2-F1)*F1
c         IF((ABS(F1).GT.ABS(F2).AND.X3-X1.GT.X2-X3)
c         :.OR.(ABS(F1).LT.ABS(F2).AND.X1-X3.LT.X2-X3)) X3=.5*(X1+X2)
        X3=.5*(X1+X2)
        IF(X2-X1.GE.EPS) GO TO 7
c         IF(X3-X1.GE.EPS.AND.X2-X3.GE.EPS) GO TO 7
6         IR=IR+1
        P(IR)=X3
        GO TO 12
7         F3=F(X3)
        IF(F3*F1) 8,6,9
8         X2=X3
        F2=F3
        GO TO 13
9         X1=X3
        F1=F3

```

20

```
GO TO 13  
RETURN  
END
```

## Apéndice II Simulación del sistema de amplificación

```

    implicit real*8 (a-h,o-z)
    real*8 axv,axw,ayv,ayw,ay2v,ay2w
    real*8 an(0:2048,0:100,2),afx(0:2048,0:100)
:   ,aez(0:2048,0:100),aex(0:2048,0:100)
:   ,avz(0:2048,0:100),avx(0:2048,0:100)
:   ,aes(0:2048,0:100),avs(0:2048,0:100,2)
:   ,am(0:2048,0:100),aze(0:2048)
:   ,ab(0:2048),ar(0:2048),afi(0:2048,0:100)
:   ,axi(0:2048,0:100)
    real*8 ad(0:2048,0:100)
    real*8 aom(3),au0(3),at0(3),at1(3)
    real*8 aem(0:32768)/32769*0.d0/,akt(0:40000)
:   ,akz(0:32768)
    real*8 yf(32768),and(0:100),afi_0x(0:10000),andx(0:40000)
:   , aex_0(0:100),arn_0(0:100),aex_0x(0:40000),arn_0x(0:40000)
:   ,afi_0(0:100),axix(0:40000)
    real*8 ae_r(1000)
    real*8 aul(1024:2048,-300:100,2),au3(1024:2048,-300:100,2)
    common /vel/axv(30),ayv(30),ay2v(30)
    common /velb/axvb(30),ayvb(30),ay2vb(30)
    common /ener/axw(30),ayw(30),ay2w(30)
    common /indif/ ind,fd
    external fv,fw
ccc nonparabolicity
    f_m(w)=rm_0*(1.+gam_m*w)
ccc distribution of doping
    fnd(x)=rnd_0*dexp(-(x-rlxm)/x_0d)**2)
ccc profile for v on x
    fvx(x)=dexp(-(x/x_0)**2)+dexp(-((rlx-x)/x_0)**2)
c NONLINEAR SPACE CHARGE WAVES IN El. GAS IN InN
cc consider different phases
cc positive charge!!!!!!!!!!!!!!
ccc perturbations of e~!!!!!!!!!!!!!!
ccc utilization of FFT for potential
ccc along Z - sine
cccc WITH A DEPENDENCE OF DIFFUSION ON A FIELD!!!!!!!!!!!!!!
cccccc HERE THE NODAL REPRESENTATION
ccc for mass - nonparabolicity only
ccc excitation by Ez component!!!!!!!!!!!!!!
ccc at 0<x<Lx!!!!!!!!!!!!!!
cccc probably, by coplanar line
cccc splitting with respect to phys. factors
cccc the simplest version!!!!!!!!!!!!!!
cccccc Use of the simplest central scheme
cccccc NONUNIFORM DEPENDENCE OF MOBILITY ON TRANSVERSE COORD. X
cccccc ALSO NONUNIFORM DOPING
cccccc Temperature is assumed as constant
cccccc SOME SPECIFICATION IN B.C. FOR X
cccccc also as a test - for the first half-step k=0...nx
cccccc note that at the boundaries the coeff. near dn/dt is 0.5
cccccc with feedback - monopulse regime
cccccc ALSO an influence of rnu_w on v(E) - simple case:
cccccc (1.5/rnu_w)*dv/dt)+v=v_d(E)
cccccc with the acoustic excitation due to piezoeffect
    open(7,file='fern_2ns7sma_local.dat')

```

```

open(8,file='fern_2ns7sma_f_local.dat')
open(9,file='fern_2ns7sma_d_local.dat')
open(10,file='fern_2ns7sma_ezx_c_local.dat')
open(11,file='fern_2ns7sma_ezx_out_local.dat')
open(12,file='fern_2ns7sma_ac_local.dat')
open(4,file='inp_fern_2n7ma_local')
pi=4.d0*datan(1.d0)
pil=2.*pi
alog2=dlog(2.d0)
ccc basic norming parameters
cccc SI UNITS !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
cccc electron charge
ech=1.6d-19
cccc electron mass
rme=0.911d-30
cccc electric field (V/m) - for InN
ee=1.d+7
cccc electron volt (characteristic electron energy in SI)
we=1.6d-19
ccc distance, m
rln=1.d-7
cccc electron velocity
ve=1.d+5
cccc voltage
u0=1.
cccc volume electron concentration (m^-3)
rne=1.d+23
cccc dielectric constant (F/m)
eps0=8.85d-12
cccc relative lattice dielectric permittivity of InN - modified
value!!!!
eps=15.3
write(6,*) ' input eps_1,eps_3~10.'
read(*,*) eps_1,eps_3
write(7,*) ' eps_1,eps_3=', eps_1,eps_3
write(6,*) ' eps_1,eps_3=', eps_1,eps_3
cccccccccccccccccccc
ccc nonparabolicity (eV-1)
gam_m=1.43
ccc eff. mass (to el. mass)
rm_0=.054
ccc el. energy fot T= 300 K, eV
w_00=0.039
ccc
ccc input parameters for dependencies on the drift field
cccc velocity IN THE CENTER OF FILM
read(4,*) (axv(i),i=1,30)
read(4,*) (ayv(i),i=1,30)
cccc velocity IN THE BOUNDARY OF FILM
read(4,*) (axvb(i),i=1,30)
read(4,*) (ayvb(i),i=1,30)
cccc average energy
read(4,*) (axw(i),i=1,30)
read(4,*) (ayw(i),i=1,30)
ccc
write(7,*) ' dependence v(e) - center'
ccc j
do j=1,30
write(7,610) axv(j),ayv(j)
end do

```

```

ccc j
    write(7,*) ' dependence v(e) - boundary'
ccc j
    do j=1,30
    write(7,610) axvb(j),ayvb(j)
    end do
ccc j
    write(7,*) ' dependence w(e): eV'
ccc j
    do j=1,30
    write(7,610) axw(j),ayw(j)
    end do
ccc j
610    format(2d12.3)
ccc building-up splines to approximate carriers dynamics in InN
cccc velocity in InN - center
        call spline(axv,ayv,30,1.d+50,1.d+50,ay2v)
cccc velocity in InN - boundary
        call spline(axvb,ayvb,30,1.d+50,1.d+50,ay2vb)
cccc mean energy for InN
        call spline(axw,ayw,30,1.d+50,1.d+50,ay2w)
ccc input of parameters
    write(6,*) ' input rnd_0(m-3 units),e0 (V/m)
    : ,rlz,rlx,x_0d,x_0(m),nz<=2048 (here 2**),nx<=100,rz,ntp
    : ,tm(undim.) '
    read(4,*) rnd_0,e0,rlz,rlx,x_0d,x_0,nz,nx,rz,ntp,tm
    write(6,*) ' input aom(1,2,3) (sec^-1),au0(1,2,3) (undim.)
    : ,at0(1,2,3) (undim.),at1(1,2,3) (undim.) '
    read(4,*) aom,au0,at0,at1
ccc equal norming scales: rlnx=rlnz=rln
cccc frequency
    om0=ve/rln
cccc time, s
    tn=1./om0
cccc
    rgam_1=rme*ve**2/(ee*rln*ech)
    write(7,*) ' rgam_1=',rgam_1
    write(6,*) ' rgam_1=',rgam_1
ccc basic conductivity parameters
cccc and undimensional ratios
cccc used in calculations
    rnd_0=rnd_0/rne
    e0=e0/ee
    rlz=rlz/rln
    rlx=rlx/rln
    x_0d=x_0d/rln
    x_0=x_0/rln
    rlxm=.5*rlx
ccc l
    do l=1,3
    aom(l)=aom(l)/om0
    end do
ccc l
    rkappa=ech*rne*rln/(eps*eps0*ee)
    write(7,*) ' rkappa=',rkappa
    write(6,*) ' rkappa=',rkappa
ccc
ind=1
v0=fv(e0)
vd=fd

```

```

write(7,*) 'v0, vd(undim.)=', v0, vd
write(6,*) 'v0, vd=', v0, vd
w=fw(e0)
rm=f_m(w)
rT=.666666666667*(w-.5*rgam_1*rm*v0**2)
d=v0/e0*rT
fi_t=rT
cccccc
ccc calc. of rnu_w, 10^-12 s
rnu_w=v0*e0/(w-w_00)
write(7,*) ' w(eV), rnu_w(10^-12 s)=' , w, rnu_w
write(7,*) ' w(eV), rnu_w(10^-12 s)=' , w, rnu_w
write(6,*) ' input ind_rnu_w: 0 - without non-local correction
: , 1- with'
read(*,*) ind_rnu_w
write(7,*) ' ind_rnu_w(0 - without non-local correction
: , 1- with)=' , ind_rnu_w
write(6,*) ' ind_rnu_w(0 - without non-local correction,
: 1- with)=' , ind_rnu_w
cccccccccccc
nz2=nz-1
nz4=nz-2
nz1=nz+1
nx2=nx-1
nx4=nx-2
ndz=nz/200
if(ndz.eq.0) ndz=1
ndz0=nz/20
if(ndz0.eq.0) ndz0=1
ndx=nx/40
if(ndx.eq.0) ndx=1
ndx0=nx/20
if(ndx0.eq.0) ndx0=1
dz=rlz/nz
nzm=nz/2
dX=rlX/nX
nXm=nX/2
dt=rz*dz
cccccc
ccccccc some coeff.
dtnu_w=1.5/(dt*rnu_w)
cccccc
dz2=.5*dz
dx2=.5*dX
dz1=2.*dz
dx1=2.*dX
dxx=dx**2
r2z=.5*rz
rx=dt/dx
r2x=.5*rx
write(6,*) ' input ind_nu: 0 - uniform case, 1 - nonuniform case
with
: v=f1(E)*(1-(x/l)^2+f2(E)*(x/l)^2'
read(*,*) ind_nu
write(7,*) ' ind_nu=' , ind_nu
write(6,*) ' ind_nu=' , ind_nu
if(ind_nu.eq.0) then
else
ccc compute init. distribution more accurately
1112 write(6,*) ' input kn~10 - multiplier for nx_x'

```



```

read(*,*) kn
nx_x=kn*nx
  if(nx_x.gt.40000) go to 1112
nx_x2=nx_x-1
nx_x4=nx_x-2
dx_x=dx/kn
dx_x1=2.*dx_x
dx_x2=.5*dx_x
dxx_x=dxx/kn**2
ccc calculation of TRUE rnd_0
s=0.
ccc k
do k=0,nx_x
x=dx_x*k
rmult=1.
  if(k.eq.0.or.k.eq.nx_x) rmult=.5
rnd=fnd(x)
s=s+dx_x*rnd*rmult
end do
ccc k
rnd_0=rnd_0*rlx/s
  end if
  write(7,300) rln,tn,rnd_0,e0,v0,rlz,rlx,x_0d,x_0,nz,nx
: ,dz,dx,dt,ntp,tm,aom,au0,at0,at1
300  format(' rln(m),tn,rnd_0(renorm.),e0,v0,rlz,rlx,x_0d,x_0,nz
: ,nx,dz,dx,dt,ntp,tm=',9d12.4,2i6
: ,5d12.4/' aom,au0,at0,at1=',4(5x,3d12.4))
  pirlz=pi/rlz
ccc j
  do j=1,nz
j2=j-1
  rkz=pirlz*j2
  akz(j)=rkz
  end do
ccc j
ccc computing afi_0, arn_0
  if(ind_nu.eq.0) then
ccc k
do k=0,nx
afi_0(k)=0.
aex_0(k)=0.
arn_0(k)=rnd_0
and(k)=rnd_0
end do
ccc k
  else
rn_02=0.
ccc k
do k=0,nx_x
x=dx_x*k
afi_0x(k)=0.
  axix(k)=0.
  andx(k)=fnd(x)
rmult=1.
  if(k.eq.0.or.k.eq.nx_x) rmult=.5
rn_02=rn_02+dx_x*andx(k)*rmult
end do
ccc k
rnd_0c=rn_02/rlx
rnd_0p=rnd_0*(rnd_0/rnd_0c)

```

```

write(7,705) rn_02,rnd_0c,rnd_0p
705 format(' rn_02(undim.),rnd_0c,rnd_0p(undim.)=',3d12.3)
      r_c=rn_02/rlx
ccc iterations
      ab(0)=0.
      ar(0)=0.
      alf_m=1./dxx_x
      alf_p=alf_m
ccc it
      do it=1,200
ccc direct factorization
ccc k
      do k=1,nx_x2
      k1=k+1
      k2=k-1
      arn_0x(k)=r_c*dexp(-afi_0x(k)/fi_t)
      alf_0=-2./dxx_x-rkappa/fi_t*arn_0x(k)
      fx=(afi_0x(k1)-2.*afi_0x(k)+afi_0x(k2))/dxx_x
      :+rkappa*(arn_0x(k)-andx(k))
      fx=-fx
      fx=fx-alf_m*ar(k2)
      alf_0=alf_0+ab(k2)*alf_m
      ab(k)=-alf_p/alf_0
      ar(k)=fx/alf_0
      end do
ccc k
ccc inverse factorization
      xi_m=0.
      s_n=0.
ccc k
      do k=nx_x2,1,-1
      k1=k+1
      axix(k)=ab(k)*axix(k1)+ar(k)
      xi_c=dabs(axix(k))
      if(xi_m.lt.xi_c) then
      xi_m=xi_c
      k_m=k
      else
      end if
      afi_0x(k)=afi_0x(k)+axix(k)
      s_n=s_n+dx_x*dexp(-afi_0x(k)/fi_t)
      end do
ccc k
      s_n=s_n+dx_x2*(dexp(-afi_0x(0)/fi_t)+dexp(-afi_0x(nx_x)/fi_t))
      r_c=rn_02/s_n
      if(xi_m.lt.1.d-20) go to 1111
      end do
ccc it
1111 write(7,*) ' it,xi_m,k_m=',it,xi_m,k_m
write(6,*) ' it,xi_m,k_m=',it,xi_m,k_m
write(7,*) ' x fi_0 ex_0 rnd rn_0 fx(=0?)'
ccc k
      do k=0,nx_x
      x=dx_x*k
      arn_0x(k)=r_c*dexp(-afi_0x(k)/fi_t)
      if(k.eq.0.or.k.eq.nx_x) then
      aex_0x(k)=0.
      else
      k1=k+1
      k2=k-1

```

```

aex_0x(k)=- (afi_0x(k1)-afi_0x(k2))/dx_x1
end if
cccc this is ordinary k
k_ord=k/kn
if(k_ord*kn.eq.k) then
aex_0(k_ord)=aex_0x(k)
arn_0(k_ord)=arn_0x(k)
and(k_ord)=andx(k)
afi_0(k_ord)=afi_0x(k)
else
end if
end do
ccc k
ccc some test!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
ccc another method for aex_0
cccc k
c do k=1,nx2
c k_x=kn*k
c k_x1=k_x+1
c k_x2=k_x-1
c aex_0(k)=fi_t/dx_x1*(arn_0x(k_x1)-arn_0x(k_x2))/arn_0x(k_x)
c end do
cccc k
ccc checking for current
write(7,*)' x rjx'
rjx=0.
ccc k
do k=0,nx2
rjxm=rjx
k1=k+1
ex=.5*(aex_0(k)+aex_0(k1))
q=dx*ex/fi_t
c q=- (afi_0(k1)-afi_0(k))/fi_t
call gumm(q,exp_x,g_x)
rjx=fi_t*(arn_0(k1)-arn_0(k)*exp_x)/g_x/dx
if(k.gt.0) then
drjx=(rjx-rjxm)/dx
else
drjx=0.
end if
x=dx*k
write(7,*)' x,rjx,drjx=',x,rjx,drjx
end do
ccc k
ccc
ccc k
do k=0,nx,ndx
x=dx*k
if(k.eq.0) then
dn=(-.5*arn_0x(2)+2.*arn_0x(1)-1.5*arn_0x(0))/dx_x
else if(k.eq.nx) then
dn=(1.5*arn_0x(nx_x)-2.*arn_0x(nx_x2)+.5*arn_0x(nx_x4))/dx_x
else
k_x=kn*k
k_x1=k_x+1
k_x2=k_x-1
dn=(arn_0x(k_x1)-arn_0x(k_x2))/dx_x1
end if
fx=arn_0(k)*aex_0(k)-fi_t*dn
write(7,210) x,afi_0(k),aex_0(k),and(k),arn_0(k),fx

```

```

    end do
ccc k
    write(7,*)'      x      rmu      rmud      vx_0      vz_0'
ccc k
    do k=0,nx,ndx
    x=dx*k
    ez=e0
    ex=aex_0(k)
    es=dsqrt(ex**2+ez**2)
    f1=fv(es)
    fd1=fd
        f2=fvb(es)
    fd2=fd
    rvx=fvx(x)
    vs=f1+(f2-f1)*rvx
        fx=vs/es
    fd=fd1+(fd2-fd1)*rvx
        vz_0=ez*fx
        vx_0=ex*fx
    write(7,210) x,fx,fd,vx_0,vz_0
    end do
ccc k
    end if
cccccccccccc
        S2=0.
ccc j
    do j=0,nz
ccc k
    do k=0,nx
        rmsx=1.
        if(k.eq.0.or.k.eq.nx) rmsx=.5
    afi(j,k)=0.
    an(j,k,1)=arn_0(k)
    an(j,k,2)=arn_0(k)
    avs(j,k,1)=v0
    avs(j,k,2)=v0
        S2=S2+an(j,k,2)*rmsx
    end do
ccc k
    end do
ccc j
    dzdx=dz*dx
        S2=S2*dzdx
    t=0.
    tp=-1.d-5
    ddzz=1./dz**2
    dtzz=ddzz*dt
    ddxx=1./dx**2
    dtxx=ddxx*dt
    dtxx1=2.*dtxx
11111 write(6,*)' input nif0 (2048,4096,8192,16384,32768)'
        read(*,*) nif0
        ni0=dlog(nif0+1.d-8)/alog2+1.d-4
        if(2**ni0.ne.nif0) then
write(6,*)' change nif0!'
go to 11111
        else
        end if
write(8,*)' nif0=',nif0
write(6,*)' nif0=',nif0

```

```

        nif02=nif0-1
        nif0m=nif0/2
        akt0=pil/(nif0*dt)
ccc i
        do i=0,1000
            akt(i)=akt0*i
        end do
ccc i
        write(6,*)'      rlz,rlx=', rlz,rlx,' input rlz1,rlz0,rlz2
: (the central points of perturbations,
: and half-width, and observation points)'
        read(*,*) rlz1,rlz0,rlz2
        write(7,*)' rlz0,rlz1,rlz2='
: ,rlz0,rlz1,rlz2
        write(6,*)' rlz0,rlz1,rlz2='
: ,rlz0,rlz1,rlz2
        nzobs=rlz2/dz
ccc profile of the field at the input antenna
cccc on the upper surface of the film
ccc j
        do j=0,nz
            z=j*dz
            aze(j)=dexp(-((z-rlz1)/rlz0)**2)
        end do
ccc j
ccc
        num_t=0
        write(6,*)' input ind_f (0 - filtering, 1 - no)'
        read(*,*) ind_f
        write(7,*)' ind_f=',ind_f
        write(6,*)' ind_f=',ind_f
        if(ind_f.eq.0) then
write(6,*)' nz=',nz,' input nz_filt < nz'
        read(*,*) nz_filt
        write(7,*)' nz_filt=',nz_filt
        write(6,*)' nz_filt=',nz_filt
        else
            end if
write(6,*)' input itm - number of iterations'
        read(*,*) itm
        write(7,*)' itm=',itm
        write(6,*)' itm=',itm
44444 write(6,*)' input t_ret(time of delay for feedback, ~10^-12 s)
: , Ret_c(< 1, feedback coeff.)'
        read(*,*) t_ret,Ret_c
        write(7,*)' t_ret(s),Ret_c=',t_ret,Ret_c
        write(6,*)' t_ret(s),Ret_c=',t_ret,Ret_c
ccc undim.
        t_ret=t_ret/tn
        l_ret=t_ret/dt
        if(l_ret.gt.1000) then
write(6,*)' change t_ret: too big!!!'
        go to 44444
        else
write(7,*)' l_ret=',l_ret
        write(6,*)' l_ret=',l_ret
        end if
ccc l
        do l=1,1000
            ae_r(l)=0.

```

```

end do
ccc l
write(11,*) '      t aex(nzobs,nx) aez(nzobs,nx) '
write(6,*) ' input acoustic parameters SI:
:ro_1,c11_1,c13_1,c33_1,c44_1 (substrate)
,ro_2,c11_2,c13_2,c33_2,c44_2,e31,e33,e15 (film) '
read(4,*) ro_1,c11_1,c13_1,c33_1,c44_1
read(4,*) ro_2,c11_2,c13_2,c33_2,c44_2,e31,e33,e15
write(12,*) ' ro_1,c11_1,c13_1,c33_1,c44_1='
: ,ro_1,c11_1,c13_1,c33_1,c44_1
write(12,*) ' ro_2,c11_2,c13_2,c33_2,c44_2,e31,e33,e15='
: ,ro_2,c11_2,c13_2,c33_2,c44_2,e31,e33,e15
dtt=dt**2
dxz4=4.*dx*dz
dz3=4.*dz
dzz=dz**2
ccc undim.
ro_n=1.d3
v_n=1.d5
c_n=ro_n*v_n**2
e_n=1.d7
e31_n=c_n/e_n
ro_l=ro_1/ro_n
c11_1=c11_1/c_n
c13_1=c13_1/c_n
c33_1=c33_1/c_n
c44_1=c44_1/c_n
c11_2=c11_2/c_n
c13_2=c13_2/c_n
c33_2=c33_2/c_n
c44_2=c44_2/c_n
e31=e31/e31_n
e33=e33/e31_n
e15=e15/e31_n
cccccccc
write(6,*) ' nx_1(from below),input rlz_i(dim.
: dist. from the end) '
read(4,*) nx_1,rlz_i
rlz_i=rlz_i/rln
write(7,*) ' nx_1,rlz_i(undim.)=',nx_1,rlz_i
rlz_i=rlz-rlz_i
nz_i=rlz_i/dz+1.d-20
nz_i1=nz_i+1
nx_12=nx_1-1
ccc j
do j=nz_i,nz
ccc k
do k=-nx_1,nx
au1(j,k,1)=0.
au1(j,k,2)=0.
au3(j,k,1)=0.
au3(j,k,2)=0.
end do
ccc k
end do
ccc j
cccccccccccccc
! t=t+dt
ccc k
do k=0,nx

```

```

        an(0,k,2)=arn_0(k)
    end do
ccc k
    ep=0.
ccc l
    do l=1,3
ccc cos!!!!!!!!
        ep=ep+au0(l)*dcos(aom(l)*t)
        : *dexp(-((t-at1(l))/at0(l))**2)
    end do
ccc l
    ep=ep+ae_r(l_ret)*Ret_c
ccc j
    do j=0,nz
ccc k
        do k=0,nx
            an(j,k,1)=an(j,k,2)
            avs(j,k,1)=avs(j,k,2)
        end do
ccc k
    end do
ccc j
c iterations
ccc it
    do it=1,itm
cc calculations of potential
ccc FFT by sin!!!!!!!!!!!!!!
cc Fourier transform on z (j)
ccc k
    do k=0,nx
ccc j
        do j=1,nz
            j2=j-1
            yf(j)=an(j2,k,2)-arn_0(k)
ccc some filtering:
            if(dabs(yf(j)).lt.1.d-20) yf(j)=0.
        end do
ccc j
        call sinft(yf,nz)
ccc j
        do j=1,nz
            axi(j,k)=yf(j)
        end do
ccc j
        axi(1,k)=0.
    end do
ccc k
cc solving Poisson eq.
ccc j
    do j=2,nz
ccc direct factorization
        alfm=1.
        alfp=1.
        det=1.+eps_1/eps*akz(j)*dx
        ab(0)=1./det
        ar(0)=0.
ccc k
        do k=1,nx2
            k2=k-1
            alf0=-2.-akz(j)**2*dxx

```

```

    det=alf0+alfm*ab(k2)
    fx=-rkappa*axi(j,k)*dxx
    fx=fx-alfm*ar(k2)
    ab(k)=-alfp/det
    ar(k)=fx/det
end do
ccc k
ccc inverse factorization
ccc k
    do k=nx,0,-1
        if(k.eq.nx) then
cccc also eps_3 for upper half-space
        alf0=1.+akz(j)*dx/eps*eps_3
        det=alf0-ab(nx2)
        axi(j,nx)=ar(nx2)/det
        else
            k1=k+1
            axi(j,k)=ab(k)*axi(j,k1)+ar(k)
        end if
    end do
ccc k
end do
ccc j
cc inverse transform on z (j) for potential
ccc k
    do k=0,nx
ccc j
        do j=1,nz
            yf(j)=axi(j,k)/nzm
        end do
ccc j
        call sinft(yf,nz)
ccc j
        do j=1,nz1
            if(j.eq.nz1) then
                afi(nz,k)=0.
            else
                j2=j-1
                afi(j2,k)=yf(j)
            end if
        end do
ccc j
    end do
ccc k
cc calculations of field by difference method
ccc j
    do j=0,nz
        j2=j-1
        j1=j+1
ccc k
        do k=0,nx
            k2=k-1
            k1=k+1
            if(j.ne.0.and.j.ne.nz) then
                aez(j,k)=-(afi(j1,k)-afi(j2,k))/dz1
            else if(j.eq.0) then
                aez(0,k)=(1.5*afi(0,k)-2.*afi(1,k)+.5*afi(2,k))/dz
            else
                aez(nz,k)=-(1.5*afi(nz,k)-2.*afi(nz2,k)+.5*afi(nz4,k))/dz
            end if
        end do
    end do

```



```

                if(k.ne.0.and.k.ne.nx) then
aex(j,k)=- (afi(j,k1)-afi(j,k2))/dx1
                else if(k.eq.0) then
aex(j,0)=(1.5*afi(j,0)-2.*afi(j,1)+.5*afi(j,2))/dx
                else
aex(j,nx)=- (1.5*afi(j,nx)-2.*afi(j,nx2)+.5*afi(j,nx4))/dx
                end if
ccc note: an excitation at 0<x<Lx!!!!!!!!!!!!!!!
                aez(j,k)=aez(j,k)+ep*aze(j)
                if(dabs(aez(j,k)).lt.1.d-50) aez(j,k)=0.
                if(dabs(aex(j,k)).lt.1.d-50) aex(j,k)=0.
                end do
ccc k
                end do
ccc j
cc calculation of Es and vz, vx, ad IN LOCAL APPROXIMATION
ccc j
                do j=0,nz
ccc k
                do k=0,nx
x=dx*k
                ez=e0+aez(j,k)
                ex=aex_0(k)+aex(j,k)
                aes(j,k)=dsqrt(ez**2+ex**2)
ccc here the possibility of nonuniform dependence of drift velocity
on distance
                if(ind_nu.eq.0) then
                vs_c=fv(aes(j,k))
                else
f1=fv(aes(j,k))
                f2=fvb(aes(j,k))
rvx=fvx(x)
                vs_c=f1+(f2-f1)*rvx
                end if
cccc some correction, due to rnu_w
                if(ind_rnu_w.eq.0) then
avs(j,k,2)=vs_c
                else
avs(j,k,2)=(vs_c+dtnu_w*avs(j,k,1))/(1.+dtnu_w)
                end if
                fx=avs(j,k,2)/aes(j,k)
                avz(j,k)=ez*fx
                avx(j,k)=ex*fx
                w=fw(aes(j,k))
                rm=f_m(w)
                vs2=avs(j,k,2)**2
                rT=.666666666667*(w-.5*rgam_1*rm*vs2)
                ad(j,k)=rT*fx
                axi(j,k)=0.
                end do
ccc k
                end do
ccc j
c calculation of n (total)
cc using splitting with respect to phys. factors
cc along z-axis - the first half-step
ccc k
                do k=0,nx
ccc direct factorization
                ab(0)=0.

```

```

      ar(0)=arn_0(k)
ccc j
      do j=1,nz2
      j2=j-1
      j1=j+1
      alfm=-r2z*avz(j2,k)
      alfp=r2z*avz(j1,k)
      alf0=0.
      adzm=.5*(ad(j2,k)+ad(j,k))
      rx2=dtzz*adzm
      adzp=.5*(ad(j,k)+ad(j1,k))
      rx1=dtzz*adzp
      alfm=alfm-rx2
      alfp=alfp-rx1
      alf0=1.+alf0+rx2+rx1
      det=alf0+alfm*ab(j2)
      fx=an(j,k,1)
      fx=fx-alfm*ar(j2)
      ab(j)=-alfp/det
      ar(j)=fx/det
      end do
ccc j
ccc inverse factorization
ccc j
      do j=nz,0,-1
      if(j.eq.nz) then
      an(nz,k,2)=ar(nz2)/(1.-ab(nz2))
      else
      j1=j+1
      an(j,k,2)=ab(j)*an(j1,k,2)+ar(j)
      end if
      end do
ccc j
      end do
ccc k
cc along x-axis - the second half-step
ccc j
      do j=1,nz
      j1=j+1
      j2=j-1
ccc direct factorization
      v_p=.5*(avx(j,0)+avx(j,1))
      d_p=.5*(ad(j,0)+ad(j,1))
ccc HERE SOME SPECIFICATION, WHEN COMPARED WITH version 4
ccc note coeff. 0.5 near dn/dt at the boundaries
      rx0=dtxx1*d_p
      rx1=rx*v_p
      alf0=1.+rx1+rx0
      alfp=rx1-rx0
      ab(0)=-alfp/alf0
      ar(0)=an(j,0,2)/alf0
ccc k
      do k=1,nx2
      k2=k-1
      k1=k+1
      alfm=-r2x*avx(j,k2)
      alfp=r2x*avx(j,k1)
      alf0=0.
      adxm=.5*(ad(j,k2)+ad(j,k))
      adxp=.5*(ad(j,k)+ad(j,k1))

```

```

        rx2=dtxx*adxm
        rx1=dtxx*adxp
        alfm=alfm-rx2
        alfp=alfp-rx1
        alf0=1.+alf0+rx2+rx1
        det=alf0+alfm*ab(k2)
        fx=an(j,k,2)
        fx=fx-alfm*ar(k2)
        ab(k)=-alfp/det
        ar(k)=fx/det
    end do
ccc k
ccc inverse factorization
ccc k
        do k=nx,0,-1
            if(k.eq.nx) then
                v_p=.5*(avx(j,nx)+avx(j,nx2))
                d_p=.5*(ad(j,nx)+ad(j,nx2))
ccc HERE SOME SPECIFICATION, WHEN COMPARED WITH version 4
                rx0=dtxx1*d_p
                rx1=rx*v_p
                alf0=1.-rx1+rx0
                alfm=-rx1-rx0
                det=alf0+alfm*ab(nx2)
                fx=an(j,nx,2)-alfm*ar(nx2)
                an(j,nx,2)=fx/det
            else
                k1=k+1
                an(j,k,2)=ab(k)*an(j,k1,2)+ar(k)
            end if
ccc limitation
        if(an(j,k,2).lt.0.) an(j,k,2)=0.
ccc some filtering:
        if(dabs(an(j,k,2)-arn_0(k)).lt.1.d-20)
            : an(j,k,2)=arn_0(k)
        end do
ccc k
    end do
ccc j
    end do
ccc it
ccc i
    do i=1,nif02
        il=i+1
        aem(i)=aem(il)
    end do
ccc i
    aem(nif0)=aez(nzobs,nx)
ccc test
    S1=S2
    S2=0.
ccc k
    do k=0,nx
        rmsx=1.
        if(k.eq.0.or.k.eq.nx) rmsx=.5
ccc j
    do j=0,nz
        S2=S2+an(j,k,2)*rmsx
    end do
ccc j

```

```

        end do
ccc k
    S2=S2*dzdx
    if(num_t.eq.20) then
num_t=0
ccc l
    do l=l_ret,1,-1
        if(l.gt.1) then
l2=l-1
ae_r(l)=ae_r(l2)
        else
ae_r(l)=aez(nzobs,nx)
        end if
    end do
ccc l
    write(6,*) ' t,s2,ae_r(l_ret)=' ,t,s2,ae_r(l_ret)
    write(6,220) (aez(j,0),j=0,nz,ndz0)
    write(6,220) (aex(j,0),j=0,nz,ndz0)
    write(6,220) (aex(j,nx),j=0,nz,ndz0)
    write(11,230) t,aex(nzobs,nx),aez(nzobs,nx)
ccc filtering
        if(ind_f.eq.0) then
ccc k
            do k=0,nx
ccc j
                do j=1,nz
j2=j-1
yf(j)=an(j2,k,2)-arn_0(k)
                end do
ccc j
                    call sinft(yf,nz)
ccc j
                        do j=1,nz
                            if(j.le.nz_filt) then
                                yf(j)=yf(j)/nzm
                            else
                                yf(j)=0.
                            end if
                        end do
ccc j
                            call sinft(yf,nz)
ccc j
                                do j=1,nz
j2=j-1
an(j2,k,2)=arn_0(k)+yf(j)
                                end do
ccc j
                                    end do
ccc k
                                        else
                                        end if
ccc j
                                            do j=0,nz,ndz0
afx(j,0)=an(j,0,2)-arn_0(0)
                                            end do
ccc j
                                                write(6,220) (afx(j,0),j=0,nz,ndz0)
                                                else
num_t=num_t+1
                                                end if

```

```

ccc
ccc acoustic excitation - explicit scheme
cccc undim. aul, au3 - to 10^-7 m
ccc j
  do j=0,nz
ccc k
  do k=-nx_1,nx
    aul(j,k,1)=2.*aul(j,k,2)-aul(j,k,1)
    au3(j,k,1)=2.*au3(j,k,2)-au3(j,k,1)
  end do
ccc k
  end do
ccc j
cccccccccccccccc
ccc j
  do j=nz_i,nz
    j1=j+1
    j2=j-1
    if(j.eq.nz_i) j2=j1
    if(j.eq.nz) j1=j2
ccc k
  do k=-nx_12,nx2
    k1=k+1
    k2=k-1
    if(k.lt.0) then
      ro=ro_1
      ds11_1=c11_1*(aul(j1,k,2)-2.*aul(j,k,2)+aul(j2,k,2))/dzz
      :+c13_1*(au3(j1,k1,2)-au3(j1,k2,2)
      :-au3(j2,k1,2)+au3(j2,k2,2))/dxz4
      ds13_3=c44_1*((aul(j,k1,2)-2.*aul(j,k,2)+aul(j,k2,2))/dxx
      :+(au3(j1,k1,2)-au3(j1,k2,2)-au3(j2,k1,2)+au3(j2,k2,2))/dxz4)
      ds31_1=c44_1*((au3(j1,k,2)-2.*au3(j,k,2)+au3(j2,k,2))/dzz
      :+(aul(j1,k1,2)-aul(j1,k2,2)-aul(j2,k1,2)+aul(j2,k2,2))/dxz4)
      ds33_3=c13_1*(aul(j1,k1,2)-aul(j1,k2,2)
      :-aul(j2,k1,2)+aul(j2,k2,2))/dxz4
      :+c33_1*(au3(j,k1,2)-2.*au3(j,k,2)+au3(j,k2,2))/dxx
    else if(k.eq.0) then
      ro=.5*(ro_1+ro_2)
      ds11_1=.5*(c11_1+c11_2)*(aul(j1,k,2)
      :-2.*aul(j,k,2)+aul(j2,k,2))/dzz
      :+(c13_2*(au3(j1,k1,2)-au3(j1,k,2)-au3(j2,k1,2)+au3(j2,k,2))
      :+c13_1*(au3(j1,k,2)-au3(j1,k2,2)
      :-au3(j2,k,2)+au3(j2,k2,2)))/dxz4
      :-.5*e31*(aex(j1,k)-aex(j2,k))/dz1
cccc
    s13_p=c44_2*((aul(j,k1,2)-aul(j,k,2))/dx
    :+(au3(j1,k1,2)+au3(j1,k,2)
    :-au3(j2,k1,2)-au3(j2,k,2))/dz3)
    :-.5*e15*(aex(j,k1)+aex(j,k))
    s13_m=c44_1*((aul(j,k,2)-aul(j,k2,2))/dx
    :+(au3(j1,k,2)+au3(j1,k2,2)
    :-au3(j2,k,2)-au3(j2,k2,2))/dz3)
    ds13_3=(s13_p-s13_m)/dx
    ds31_1=c44_2*(aul(j1,k1,2)-aul(j1,k,2)
    :-aul(j2,k1,2)+aul(j2,k,2))/dxz4
    :+c44_1*(aul(j1,k,2)-aul(j1,k2,2)
    :-aul(j2,k,2)+aul(j2,k2,2))/dxz4
    :+.5*(c44_2+c44_1)*(au3(j1,k,2)-2.*au3(j,k,2)+au3(j2,k,2))/dzz
    :-.5*e15*(aex(j1,k)-aex(j2,k))/dz1
    s33_p=c13_2*(aul(j1,k1,2)+aul(j1,k,2)

```

```

    :-au1(j2,k1,2)-au1(j2,k,2))/dz3
    :+c33_2*(au3(j,k1,2)-au3(j,k,2))/dx
    :-0.5*e33*(aex(j,k1)+aex(j,k))
s33_m=c13_1*(au1(j1,k,2)+au1(j1,k2,2))
    :-au1(j2,k,2)-au1(j2,k2,2))/dz3
    :+c33_1*(au3(j,k,2)-au3(j,k2,2))/dx
ds33_3=(s33_p-s33_m)/dx
    else
ds11_1=c11_2*(au1(j1,k,2)-2.*au1(j,k,2)+au1(j2,k,2))/dzz
    :+c13_2*(au3(j1,k1,2)-au3(j1,k2,2))
    :-au3(j2,k1,2)+au3(j2,k2,2))/dxz4
    :-e31*(aex(j1,k)-aex(j2,k))/dz1
ds13_3=c44_2*((au1(j,k1,2)-2.*au1(j,k,2)+au1(j,k2,2))/dxx
    :+(au3(j1,k1,2)-au3(j1,k2,2)-au3(j2,k1,2)+au3(j2,k2,2))/dxz4)
    :-e15*(aex(j,k1)-aex(j,k2))/dx1
ds31_1=c44_2*((au3(j1,k,2)-2.*au3(j,k,2)+au3(j2,k,2))/dzz
    :+(au1(j1,k1,2)-au1(j1,k2,2)-au1(j2,k1,2)+au1(j2,k2,2))/dxz4)
    :-e15*(aex(j1,k)-aex(j2,k))/dz1
ds33_3=c13_2*(au1(j1,k1,2)-au1(j1,k2,2))
    :-au1(j2,k1,2)+au1(j2,k2,2))/dxz4
    :+c33_2*(au3(j,k1,2)-2.*au3(j,k,2)+au3(j,k2,2))/dxx
    :-e33*(aex(j,k1)-aex(j,k2))/dx1
    end if
au1(j,k,1)=au1(j,k,1)+dtt/ro*(ds11_1+ds13_3)
au3(j,k,1)=au3(j,k,1)+dtt/ro*(ds31_1+ds33_3)
    if(dabs(au1(j,k,1)).lt.1.d-90) au1(j,k,1)=0.
    if(dabs(au3(j,k,1)).lt.1.d-90) au3(j,k,1)=0.
end do
ccc k
    end do
ccc j
ccc j
    do j=nz_i,nz
ccc k
    do k=-nx_12,nx2
u1c=au1(j,k,2)
u3c=au3(j,k,2)
au1(j,k,2)=au1(j,k,1)
au3(j,k,2)=au3(j,k,1)
au1(j,k,1)=u1c
au3(j,k,1)=u3c
    end do
ccc k
    end do
ccc j
cccccc
ccc j
    do j=nz_i,nz
        if(j.eq.nz_i) then
au1(j,nx,1)=au1(j,nx,2)
au3(j,nx,1)=au3(j,nx,2)
au1(j,nx,2)=au1(j,nx2,2)+e15*aex(j,nx)*dx/c44_2
au3(j,nx,2)=au3(j,nx2,2)+e33*aex(j,nx)*dx/c33_2
        else
au1(j,nx,1)=au1(j,nx,2)
au3(j,nx,1)=au3(j,nx,2)
c_11=c44_2/dx
c_12=c44_2/dz
c_21=c13_2/dz
c_22=c33_2/dx

```

```

f_1=e15*aex(j,nx)+c_11*au1(j,nx2,2)+c_12*au3(j2,nx,2)
f_2=e33*aex(j,nx)+c_21*au1(j2,nx,2)+c_22*au3(j,nx2,2)
det=c_11*c_22-c_12*c_21
au1(j,nx,2)=(f_1*c_22-f_2*c_12)/det
au3(j,nx,2)=(f_2*c_11-f_1*c_21)/det
    end if
    if(dabs(au1(j,nx,2)).lt.1.d-90) au1(j,nx,2)=0.
    if(dabs(au3(j,nx,2)).lt.1.d-90) au3(j,nx,2)=0.
end do
ccc j
                if(t-tp) 1,2,2
2            tp=tp+dt
                DS=(S2-S1)/dt
ccc checking to zero (eqs. for n and fi)
    fx_m=0.
    fx_mf=0.
ccc k
    do k=1,nx2
    k1=k+1
    k2=k-1
ccc j
    do j=1,nz2
    j1=j+1
    j2=j-1
    adzm=.5*(ad(j2,k)+ad(j,k))
    adzp=.5*(ad(j,k)+ad(j1,k))
    fx=(an(j,k,2)-an(j,k,1))/dt
    :+(avz(j1,k)*an(j1,k,2)-avz(j2,k)*an(j2,k,2))/dz1
    :-(adzp*(an(j1,k,2)-an(j,k,2))/dz
    :-adzm*(an(j,k,2)-an(j2,k,2))/dz)/dz
    adxm=.5*(ad(j,k2)+ad(j,k))
    adxp=.5*(ad(j,k)+ad(j,k1))
    fx=fx
    :+(avx(j,k1)*an(j,k1,2)-avx(j,k2)*an(j,k2,2))/dx1
    :-(adxp*(an(j,k1,2)-an(j,k,2))/dx
    :-adxm*(an(j,k,2)-an(j,k2,2))/dx)/dx
    fx=dabs(fx)
        if(fx_m.lt.fx) then
    fx_m=fx
    j_m=j
    k_m=k
        else
        end if
    fx=((afi(j1,k)-afi(j,k))/dz-(afi(j,k)-afi(j2,k))/dz)/dz
    :+(afi(j,k1)-afi(j,k))/dx-(afi(j,k)-afi(j,k2))/dx)/dx
    :+rkappa*(an(j,k,2)-arn_0(k))
    fx=dabs(fx)
        if(fx_mf.lt.fx) then
    fx_mf=fx
    j_mf=j
    k_mf=k
        else
        end if
    end do
ccc j
end do
ccc k
    write(7,100) t,dt,S2,DS,fx_m,j_m,k_m,fx_mf,j_mf,k_mf
    write(8,100) t,dt,S2,DS,fx_m,j_m,k_m,fx_mf,j_mf,k_mf
    write(9,100) t,dt,S2,DS,fx_m,j_m,k_m,fx_mf,j_mf,k_mf

```

```

        write(10,100) t,dt,S2,DS,fx_m,j_m,k_m,fx_mf,j_mf,k_mf
        write(12,100) t,dt,S2,DS,fx_m,j_m,k_m,fx_mf,j_mf,k_mf
        write(6,100) t,dt,S2,DS,fx_m,j_m,k_m,fx_mf,j_mf,k_mf
100    format(' t,dt=',2d9.2,' S2,DS=',2d9.2
:,' f_x,j_m,k_m=',d9.2,2i6,' f_xf,j_mf,k_mf=',d9.2,2i6)
        write(7,*)' an~:'
        write(6,*)' an~:'

    fx_m=0.
ccc k
        do k=0,nx
ccc j
        do j=0,nz
            afx(j,k)=an(j,k,2)-arn_0(k)
            if(dabs(fx_m).lt.dabs(afx(j,k))) then
                fx_m=afx(j,k)
                j_m=j
                k_m=k
            else
            end if
        end do
ccc j
        end do
ccc k
        write(7,*)' fx_m,j_m,k_m=', fx_m,j_m,k_m
ccc k
        do k=0,nx,ndx
            write(7,210) (afx(j,k),j=0,nz,ndz)
        end do
ccc k
ccc k
        do k=0,nx,ndx0
ccc j
        do j=0,nz,ndz0
            afx(j,k)=an(j,k,2)-arn_0(k)
        end do
ccc j
        write(6,220) (afx(j,k),j=0,nz,ndz0)
        end do
ccc k
            write(7,*)' afi~:'
            write(6,*)' afi~:'
ccc k
        do k=0,nx,ndx
            write(7,210) (afi(j,k),j=0,nz,ndz)
        end do
ccc k
ccc k
        do k=0,nx,ndx0
            write(6,220) (afi(j,k),j=0,nz,ndz0)
        end do
ccc k
            write(7,*)' aez~:'
            write(6,*)' aez~:'
            write(9,*)' aez~:'

    ez_m=0.
ccc k
        do k=0,nx
ccc j
        do j=0,nz

```



```

        if(dabs(ez_m).lt.dabs(aez(j,k))) then
ez_m=aez(j,k)
j_m=j
k_m=k
        else
        end if
    end do
ccc j
    end do
ccc k
    write(7,*)' ez_m,j_m,k_m=',ez_m,j_m,k_m
ccc k
        do k=0,nx,ndx
        write(7,210) (aez(j,k),j=0,nz,ndz)
        write(9,210) (aez(j,k),j=0,nz,ndz)
        end do
ccc k
ccc k
        do k=0,nx,ndx0
        write(6,220) (aez(j,k),j=0,nz,ndz0)
        end do
ccc k
                write(7,*)' aex~:'
                write(6,*)' aex~:'
                write(9,*)' aex~:'
ex_m=0.
ccc k
        do k=0,nx
ccc j
        do j=0,nz
            if(dabs(ex_m).lt.dabs(aex(j,k))) then
ex_m=aex(j,k)
j_m=j
k_m=k
            else
            end if
        end do
ccc j
        end do
ccc k
        write(7,*)' ex_m,j_m,k_m=',ex_m,j_m,k_m
ccc k
        do k=0,nx,ndx
        write(7,210) (aex(j,k),j=0,nz,ndz)
        write(9,210) (aex(j,k),j=0,nz,ndz)
        end do
ccc k
ccc k
        do k=0,nx,ndx0
        write(6,220) (aex(j,k),j=0,nz,ndz0)
        end do
ccc k
                write(7,*)' avz:'
                write(6,*)' avz:'
ccc k
        do k=0,nx,ndx
        write(7,210) (avz(j,k),j=0,nz,ndz)
        end do
ccc k
ccc k

```

```

do k=0,nx,ndx0
write(6,220) (avz(j,k),j=0,nz,ndx0)
end do
ccc k
write(7,*)' avx:'
write(6,*)' avx:'
ccc k
do k=0,nx,ndx
write(7,210) (avx(j,k),j=0,nz,ndx)
end do
ccc k
ccc k
do k=0,nx,ndx0
write(6,220) (avx(j,k),j=0,nz,ndx0)
end do
ccc k
write(7,*)' avs:'
ccc k
do k=0,nx,ndx
write(7,210) (avs(j,k,2),j=0,nz,ndx)
end do
ccc k
write(7,*)' aes:'
ccc k
do k=0,nx,ndx
write(7,210) (aes(j,k),j=0,nz,ndx)
end do
ccc k
write(7,*)' ad(undim.):'
ccc k
do k=0,nx,ndx
write(7,210) (ad(j,k),j=0,nz,ndx)
end do
ccc k
write(12,*)' au1(undim.)'
ccc k
do k=-nx_1,nx,ndx
write(12,210) (au1(j,k,2),j=nz_i,nz,ndx)
end do
ccc k
write(12,*)' au3(undim.)'
ccc k
do k=-nx_1,nx,ndx
write(12,210) (au3(j,k,2),j=nz_i,nz,ndx)
end do
ccc k
cccc deformation
write(12,*)' u11'
ccc k
do k=-nx_1,nx,ndx
if(k.eq.-nx_1) then
ccc j
do j=nz_i,nz,ndx
ar(j)=0.
end do
ccc j
else
ccc j
do j=nz_i,nz,ndx

```

```

                if(j.eq.nz_i) then
ar(nz_i)=0.
                else if(j.eq.nz) then
ar(nz)=0.
                else
j1=j+1
j2=j-1
ar(j)=(au1(j1,k,2)-au1(j2,k,2))/dz1
                end if
                if(dabs(ar(j)).lt.0.) ar(j)=0.
end do
ccc j
                end if
write(12,210) (ar(j),j=nz_i,nz,ndz)
end do
ccc k
cccccc
                write(12,*)' u13'
ccc k
do k=-nx_1,nx,ndx
                if(k.eq.-nx_1) then
ccc j
do j=nz_i,nz,ndz
ar(j)=0.
end do
ccc j
                else if(k.eq.nx) then
ccc j
do j=nz_i,nz,ndz
                if(j.eq.nz_i) then
ar(nz_i)=.5*(au1(nz_i,nx,2)-au1(nz_i,nx2,2))/dx
                else if(j.eq.nz) then
ar(nz)=.5*(au1(nz,nx,2)-au1(nz,nx2,2))/dx
                else
j1=j+1
j2=j-1
ar(j)=.5*(au3(j1,nx,2)-au3(j2,nx,2))/dz1
:+.5*(au1(j,nx,2)-au1(j,nx2,2))/dx
                end if
                if(dabs(ar(j)).lt.0.) ar(j)=0.
end do
ccc j
                else
k1=k+1
k2=k-1
ccc j
do j=nz_i,nz,ndz
                if(j.eq.nz_i) then
ar(nz_i)=.5*(au1(nz_i,k1,2)-au1(nz_i,k2,2))/dx1
                else if(j.eq.nz) then
ar(nz)=.5*(au1(nz,k1,2)-au1(nz,k2,2))/dx1
                else
j1=j+1
j2=j-1
ar(j)=.5*(au3(j1,k,2)-au3(j2,k,2))/dz1
:+.5*(au1(j,k1,2)-au1(j,k2,2))/dx1
                end if
                if(dabs(ar(j)).lt.0.) ar(j)=0.

```

```

    end do
ccc j
    end if
    write(12,210) (ar(j),j=nz_i,nz,ndz)
    end do
ccc k
cccccc
        write(12,*) ' u33'
ccc k
    do k=-nx_1,nx,ndx
        if(k.eq.-nx_1) then
ccc j
            do j=nz_i,nz,ndz
                ar(j)=0.
            end do
ccc j
            else if(k.eq.nx) then
ccc j
                do j=nz_i,nz,ndz
                    ar(j)=(au3(j,nx,2)-au3(j,nx2,2))/dx
                    if(dabs(ar(j)).lt.0.) ar(j)=0.
                end do
ccc j
                else
                    k1=k+1
                    k2=k-1
ccc j
                    do j=nz_i,nz,ndz
                        ar(j)=(au3(j,k1,2)-au3(j,k2,2))/dx1
                        if(dabs(ar(j)).lt.0.) ar(j)=0.
                    end do
ccc j
                    end if
                    write(12,210) (ar(j),j=nz_i,nz,ndz)
                    end do
ccc k
cccccccccccccccccccc
210     format(1x,210d12.3)
220     format(1x,31d9.2)
ccc j
    do j=0,nz
        z=dz*j
        write(10,210) z, aez(j,nxm), aex(j,nxm)
    end do
ccc j
ccc i
        do i=1,nif0
            i2=i-1
            yf(i)=aem(i2)
        end do
ccc i
    call realft(yf,nif0,1)
ccc i
    do i=0,1000
        if(i.eq.0) then
            df=dabs(yf(1))
        else if(i.eq.nif0m) then
            df=dabs(yf(2))
        else
            ifu=2*i+1

```

```

        iful=ifu+1
        df=dsqrt(yf(ifu)**2+yf(iful)**2)
            end if
            if(df.eq.0.) df=1.d-50
        dfdb=20.*dlog(df)
        write(8,230) akt(i),df,dfdb
    end do
ccc i
230    format(5x,3d15.4)
        if(t-tm) 1,1,3
3      stop
      end
      real*8 function fv(e)
      implicit real*8 (a-h,o-z)
      common /vel/ axv(30),ayv(30),ay2v(30)
      call splint(axv,ayv,ay2v,30,e,y)
      fv=y
      return
      end
      real*8 function fvb(e)
      implicit real*8 (a-h,o-z)
      common /velb/ axvb(30),ayvb(30),ay2vb(30)
      call splint(axvb,ayvb,ay2vb,30,e,y)
      fvb=y
      return
      end
      real*8 function fw(e)
      implicit real*8 (a-h,o-z)
      common /ener/ axw(30),ayw(30),ay2w(30)
      call splint(axw,ayw,ay2w,30,e,y)
      fw=y
      return
      end
      SUBROUTINE spline(x,y,n,yp1,ypn,y2)
      INTEGER n,NMAX
      REAL*8 yp1,ypn,x(n),y(n),y2(n)
      PARAMETER (NMAX=500)
      INTEGER i,k
      REAL*8 p,qn,sig,un,u(NMAX)
      if (yp1.gt..99d30) then
          y2(1)=0.
          u(1)=0.
      else
          y2(1)=-0.5
          u(1)=(3./(x(2)-x(1)))*((y(2)-y(1))/(x(2)-x(1))-yp1)
      endif
      do 11 i=2,n-1
          sig=(x(i)-x(i-1))/(x(i+1)-x(i-1))
          p=sig*y2(i-1)+2.
          y2(i)=(sig-1.)/p
          u(i)=(6.*((y(i+1)-y(i))/(x(i+1)-x(i-1)))-
*1)-x(i)-(y(i)-y(i-1))/(x(i)-x(i-1)))/(x(i+1)-x(i-1))-sig*
*u(i-1))/p
11      continue
      if (ypn.gt..99d30) then
          qn=0.
          un=0.
      else
          qn=0.5
          un=(3./(x(n)-x(n-1)))*(ypn-(y(n)-y(n-1))/(x(n)-x(n-1)))

```

```

endif
y2(n)=(un-qn*u(n-1))/(qn*y2(n-1)+1.)
do 12 k=n-1,1,-1
  y2(k)=y2(k)*y2(k+1)+u(k)
12 continue
return
END
      SUBROUTINE splint(xa,ya,y2a,n,x,y)
ccc a bit modified; with calculating derivative!!!!!!!
      implicit real*8 (a-h,o-z)
      INTEGER n
      REAL*8 x,y,xa(n),y2a(n),ya(n)
      INTEGER k,khi,klo
      REAL*8 a,b,h
      common /indif/ ind,fd
      klo=1
      khi=n
1  if (khi-klo.gt.1) then
      k=(khi+klo)/2
      if(xa(k).gt.x) then
        khi=k
      else
        klo=k
      endif
      goto 1
    endif
      h=xa(khi)-xa(klo)
      if (h.eq.0.) pause 'bad xa input in splint'
      a=(xa(khi)-x)/h
      b=(x-xa(klo))/h
ccc function
      y=a*ya(klo)+b*ya(khi)+((a**3-a)*y2a(klo)
      :+(b**3-b)*y2a(khi))*h**2)/6.
ccc derivative
      if(ind.eq.1) fd=(ya(khi)-ya(klo))/h
      :-(3.*a*a-1.)*y2a(klo)+(1.-3.*b*b)*y2a(khi))*h/6.
      return
      END
      SUBROUTINE sinft(y,n)
implicit real*8 (a-h,o-z)
      INTEGER n
      REAL*8 y(1)
CU  USES realft
      INTEGER j
      REAL*8 sum,y1,y2
      REAL*8 theta,wi,wpi,wpr,wr,wtemp
      theta=3.141592653589793d0/dbl(n)
      wr=1.0d0
      wi=0.0d0
      wpr=-2.0d0*dsin(0.5d0*theta)**2
      wpi=dsin(theta)
      y(1)=0.0
      do 11 j=1,n/2
        wtemp=wr
        wr=wr*wpr-wi*wpi+wr
        wi=wi*wpr+wtemp*wpi+wi
        y1=wi*(y(j+1)+y(n-j+1))
        y2=0.5*(y(j+1)-y(n-j+1))
        y(j+1)=y1+y2
        y(n-j+1)=y1-y2

```

```

11  continue
    call realft(y,n,+1)
    sum=0.0
    y(1)=0.5*y(1)
    y(2)=0.0
    do 12 j=1,n-1,2
        sum=sum+y(j)
        y(j)=y(j+1)
        y(j+1)=sum
12  continue
    return
    END

    SUBROUTINE cosft1(y,n)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    INTEGER n
    REAL*8 y(1)
CU  USES realft
    INTEGER j
    REAL*8 sum,y1,y2
    real*8 theta,wi,wpi,wpr,wr,wtemp
    theta=3.141592653589793d0/n
    wr=1.0d0
    wi=0.0d0
    wpr=-2.0d0*dsin(0.5d0*theta)**2
    wpi=dsin(theta)
    sum=0.5*(y(1)-y(n+1))
    y(1)=0.5*(y(1)+y(n+1))
    do 11 j=1,n/2-1
        wtemp=wr
        wr=wr*wpr-wi*wpi+wr
        wi=wi*wpr+wtemp*wpi+wi
        y1=0.5*(y(j+1)+y(n-j+1))
        y2=(y(j+1)-y(n-j+1))
        y(j+1)=y1-wi*y2
        y(n-j+1)=y1+wi*y2
        sum=sum+wr*y2
11  continue
    call realft(y,n,+1)
    y(n+1)=y(2)
    y(2)=sum
    do 12 j=4,n,2
        sum=sum+y(j)
        y(j)=sum
12  continue
    return
    END

    SUBROUTINE realft(data,n,isign)
implicit real*8 (a-h,o-z)
    INTEGER isign,n
    REAL*8 data(1)
CU  USES four1
    INTEGER i,i1,i2,i3,i4,n2p3
    REAL*8 c1,c2,h1i,h1r,h2i,h2r,wis,wrs
    REAL*8 theta,wi,wpi,wpr,wr,wtemp
    theta=3.141592653589793d0/dble(n/2)
    c1=0.5
    if (isign.eq.1) then
        c2=-0.5
        call four1(data,n/2,+1)
    else

```

```

c2=0.5
theta=-theta
endif
wpr=-2.0d0*dsin(0.5d0*theta)**2
wpi=dsin(theta)
wr=1.0d0+wpr
wi=wpi
n2p3=n+3
do 11 i=2,n/4
  i1=2*i-1
  i2=i1+1
  i3=n2p3-i2
  i4=i3+1
  wrs=wr
  wis=wi
  h1r=c1*(data(i1)+data(i3))
  h1i=c1*(data(i2)-data(i4))
  h2r=-c2*(data(i2)+data(i4))
  h2i=c2*(data(i1)-data(i3))
  data(i1)=h1r+wrs*h2r-wis*h2i
  data(i2)=h1i+wrs*h2i+wis*h2r
  data(i3)=h1r-wrs*h2r+wis*h2i
  data(i4)=-h1i+wrs*h2i+wis*h2r
  wtemp=wr
  wr=wr*wpr-wi*wpi+wr
  wi=wi*wpr+wtemp*wpi+wi
11 continue
if (isign.eq.1) then
  h1r=data(1)
  data(1)=h1r+data(2)
  data(2)=h1r-data(2)
else
  h1r=data(1)
  data(1)=c1*(h1r+data(2))
  data(2)=c1*(h1r-data(2))
  call four1(data,n/2,-1)
endif
return
END

```

```

SUBROUTINE four1(data,nn,isign)
implicit real*8 (a-h,o-z)
INTEGER isign,nn
REAL*8 data(1)
INTEGER i,istep,j,m,mmax,n
REAL*8 tempi,temp
REAL*8 theta,wi,wpi,wpr,wr,wtemp
n=2*nn
j=1
do 11 i=1,n,2
  if(j.gt.i) then
    tempr=data(j)
    tempi=data(j+1)
    data(j)=data(i)
    data(j+1)=data(i+1)
    data(i)=tempr
    data(i+1)=tempi
  endif
  m=n/2
11 if ((m.ge.2).and.(j.gt.m)) then

```



```

        j=j-m
        m=m/2
        goto 1
    endif
    j=j+m
11  continue
    mmax=2
2   if (n.gt.mmax) then
        istep=2*mmax
        theta=6.28318530717959d0/(isign*mmax)
        wpr=-2.d0*sin(0.5d0*theta)**2
        wpi=sin(theta)
        wr=1.d0
        wi=0.d0
        do 13 m=1,mmax,2
            do 12 i=m,n,istep
                j=i+mmax
                tempr=sngl(wr)*data(j)-sngl(wi)*data(j+1)
                tempi=sngl(wr)*data(j+1)+sngl(wi)*data(j)
                data(j)=data(i)-tempr
                data(j+1)=data(i+1)-tempi
                data(i)=data(i)+tempr
                data(i+1)=data(i+1)+tempi
12         continue
                wtemp=wr
                wr=wr*wpr-wi*wpi+wr
                wi=wi*wpr+wtemp*wpi+wi
13         continue
            mmax=istep
        goto 2
    endif
    return
END
subroutine gumm(x,exp_x,g_x)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    exp_x=dexp(x)
    if(dabs(x).ge.1.d-4) then
        g_x=(exp_x-1.d0)/x
    else
        g_x=1.d0+x/2.d0*(1.+x/3.d0*(1.+x/4.d0))
    end if
    return
end

```

