

Práctica de Electronica con ABACUS-Nanohub

Union PN

Daniel Vázquez Lago

18 de marzo de 2025

1. Objetivos
2. Modelo teórico: diodo ideal
3. Modelo teórico versus simulación: polarización directa
4. Conclusiones

Objetivos

Nuestro objetivo es la comparación entre la teoría (ecuaciones del diodo ideal) y una simulación (proporcionada por ABACUS-Nanohub versión old) de las principales características de la unión PN para dos diodos diferentes con los siguientes valores:

	m_p^*/m_e	m_n^*/m_e	μ_p [cm ² /(V·s)]	μ_n [cm ² /(V·s)]	T [K]	E_g [eV]
Diodo 1	0.81	1.19	460	1360	300	1.12
Diodo 2	0.81	1.19	460	1360	300	1.12

	τ_n [s]	τ_p [s]	x_{1n} [μm]	x_{1p} [μm]	N_D [cm ⁻³]	N_A [cm ⁻³]
Diodo 1	10^{-10}	10^{-10}	10	10	$3.5 \cdot 10^{16}$	$3.5 \cdot 10^{16}$
Diodo 2	10^{-10}	10^{-10}	10	10	$3.5 \cdot 10^{17}$	$3.5 \cdot 10^{16}$

donde m_p^* es la masa efectiva del hueco, m_n^* la masa efectiva del electrón, μ_p la movilidad del hueco, μ_n la movilidad del electrón, T la temperatura, E_g la energía del gap, τ_n la vida media del electrón, τ_p la vida media del hueco, x_{1n} el tamaño de la zona N, x_{1p} el tamaño de la zona P, N_D el dopado de donadores en la zona N y N_A el dopado de aceptores en la zona P.

Marco teórico: zona de vaciamiento

Llamamos al diodo 1 diodo simétrico y al diodo 2 diodo no simétrico. En esta diapositiva presentaremos más definiciones de interés: zona de vaciamiento y zonas masivas. La zona de vacimiento se define como una región del dispositivo en la que $n, p \ll N_D, N_A$, la zona masiva P en la que $p = N_A$ y la zona masiva N en la que $n = N_D$. Estas zonas tienen 2 límites internos, que son x_p y x_n :

$$x_p = \left[\frac{2K_S \epsilon_0}{q} \frac{N_D}{N_A(N_A + N_D)} V_{bi} \right] \quad x_n = \left[\frac{2K_S \epsilon_0}{q} \frac{N_A}{N_D(N_A + N_D)} V_{bi} \right]$$

$$V_{bi} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_A N_D}{n_i^2} \right)$$

En la siguiente imagen representamos cual es la forma del dispositivo.

Las aproximaciones que vamos a realizar a lo largo de la presentación:

- Podemos hacer la aproximación de la zona de vaciamiento.
- Estado estacionario.
- No existe recombinación ni generación de portadores en la región de vaciamiento.
- Bajo nivel de inyección en todo el dispositivo.
- No hay degeneración.
- Toda la tensión cae en la zona de vaciamiento. Contactos óhmicos perfectos y conductor perfecto en zonas masivas.
- Las regiones masivas y la región de vacimineto están dopadas uniformemente.
- Los cuasi-niveles de Fermi son constantes en la zona de transición.

La densidad de carga ρ viene dada por:

$$\rho(x) = \begin{cases} -qN_A & -x_p \leq x \leq 0 \\ qN_D & 0 \leq x \leq x_n \end{cases}$$

siendo cero en las zonas masivas. El campo eléctrico se calcula a partir de la ecuación de Maxwell

$$\nabla \cdot \mathcal{E} = \frac{\rho}{K_S \epsilon_0}$$

Campo y potencial eléctrico

El campo eléctrico viene dado por la siguiente ecuación:

$$\mathcal{E}(x) = \begin{cases} -\frac{qN_A}{K_S\epsilon_0} (x_p - x) & -x_p \leq x \leq 0 \\ -\frac{qN_D}{K_S\epsilon_0} (x_n - x) & 0 \leq x \leq x_n \end{cases}$$

siendo 0 en las regiones masivas. El potencial eléctrico viene dado por:

$$V_J = V_{bi} - V_A$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq -x_p \\ \frac{qN_A}{2K_S\epsilon_0} (x_p + x)^2 & -x_p \leq x \leq 0 \\ -\frac{qN_D}{2K_S\epsilon_0} (x_n - x)^2 + V_J & 0 \leq x \leq x_n \\ V_J & x_n \leq 0 \end{cases}$$

Bandas de energía

En cálculo de las bandas de energía se realiza de la siguiente manera. Primero calculamos los valores para la zona P:

$$E_i|_P = kT \ln \left(\frac{N_A}{n_i} \right) \quad E_c|_P = E_i|_P + \frac{3kT}{4} \ln \left(\frac{m_p^*}{m_n^*} \right) \quad E_v|_P = E_c|_P - E_g$$

donde $|_P$ indica que se ha calculado en la región masiva P. Dado que las bandas deben verificar:

$$\frac{dE_i}{dx} = \frac{dE_c}{dx} = \frac{dE_v}{dx} = -q \frac{dV}{dx} \quad (1)$$

Entonces simplemente, para cualquier otra región:

$$E_i(x) = E_i|_P - V(x) \quad E_c(x) = E_c|_P - V(x) \quad E_v(x) = E_v|_P - V(x) \quad (2)$$

Para el calculo de los valores simulados hemos obtado por coger los valores de las bandas en las posiciones x_{1n} y x_{1p} , respecto E_{fn} en la zona N.

Pseudoniveles de Fermi bajo polarización

En la región de vaciamiento, cuando estamos bajo polarización no nula, los pseudoniveles de Fermi se desdoblan, tal que E_{Fp} (psudonivel de fermi de huecos) y E_{Fn} (psudonivel de fermi de electrones) están a una distancia igual que V_A :

$$E_{Fn} - E_{Fp} = V_A$$

Dado que estamos en un diodo PN polarizado el nivel E_{Fn} está fijado a cero, mientras que en el equilibrio como $E_{Fn} = E_{Fp} = E_F$ están ambos fijados a cero.

Portadores minoritarios y relacion I-V

Los portadores minoritarios en las regiones masivas en el equilibrio vienen dados por

$$n_{p0} = \frac{n_i^2}{N_A} \quad p_{n0} = \frac{n_i^2}{N_D}$$

Y su valor en el caso de polarizaciones viene dado por

$$n_p = n_{p0} + \Delta n_p \quad p_n = p_{n0} + \Delta p_n$$

$$\Delta n_p = n_{p0} \left(e^{qV_A/kT} - 1 \right) e^{(x+x_p)/L_N} \quad \Delta p_n = p_{n0} \left(e^{qV_A/kT} - 1 \right) e^{(x-x_n)/L_P}$$

Dado que Δn_p y Δp_n dependen de la posición, nosotros representaremos sus valores en $x = -x_p$ y $x = x_n$ respectivamente. En el caso simulado la manera de calcularlo es sencilla: ver cual es el valor mas cercano a estos x_p y x_n . En el modelo teórico la relación IV viene dada por:

$$I = I_0 \left(e^{qV_A/kT} - 1 \right) \quad I_0 = qA \left(\frac{D_N}{L_N} \frac{n_i^2}{N_A} + \frac{D_P}{L_P} \frac{n_i^2}{N_D} \right) \quad (3)$$

Valores teóricos de interés

Dado que la mayor parte de las ecuaciones implican valores numéricos comunes, aquí recogemos en una tabla los más importantes:

	D_P [cm ² /s]	D_N [cm ² /s]	L_P [μm]	L_N [μm]	n_i [cm ⁻³]	K_S
Diodo 1	35.2	1.19	0.593	0.345	10^{10}	11.7
Diodo 2	11.9	1.19	0.593	0.345	10^{10}	11.7

	V_{bi}	x_n^{eq} [μm]	x_p^{eq} [μm]	x_n^{pol} [μm]	x_p^{pol} [μm]
Diodo 1	0.779	0.1200	0.1200	0.0989	0.0989
Diodo 2	0.839	0.1678	0.01678	0.1868	0.01868

Tabla: Tablas con valores teóricos relevantes para los cálculos.

Polarización Directa Diodo Simétrico: bandas de energía

Bandas de Energía Teóricas $V_A = 0.25$

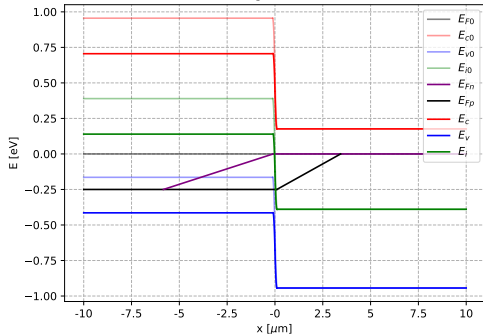


Tabla: bandas en el equilibrio.

	E_C (P N) [eV]	E_i (P N) [eV]	E_v (P N) [eV]
Teo.	0.955 0.176	0.391 -0.391	-0.162 -0.944
Sim.	0.956 0.176	0.390 -0.390	-0.165 -0.944

Bandas de Energía Simétrica Simulación

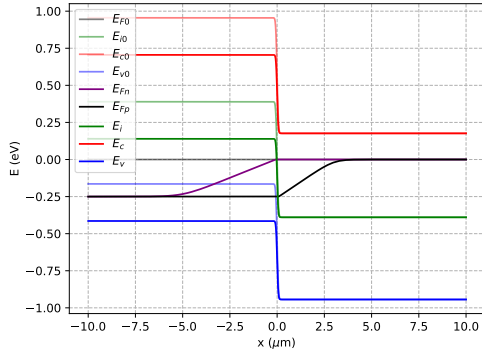


Tabla: bandas en polarización directa.

	E_C (P N) [eV]	E_i (P N) [eV]	E_v (P N) [eV]	E_{fp} [eV] (P)	E_{fn} [eV] (N)
Teo.	0.705 0.176	0.140 -0.390	-0.412 -0.944	-0.25	0.0
Sim.	0.706 0.176	0.140 -0.390	-0.414 -0.944	-0.25	0.0

Polarización Inversa Diodo No Simétrico: bandas de energía

Bandas de Energía Teóricas $V_A = -0.20$

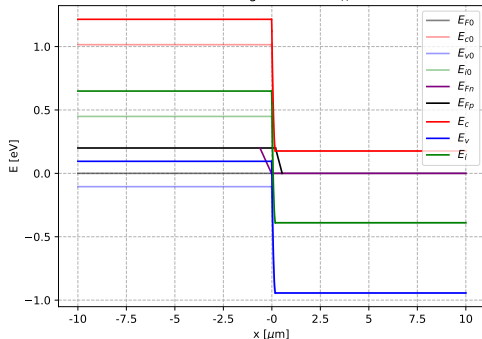


Tabla: bandas en el equilibrio.

	E_C (P N) [eV]	E_i (P N) [eV]	E_V (P N) [eV]
Teo.	1.015 0.176	0.449 -0.390	-0.105 -0.944
Sim.	1.015 0.176	0.449 -0.390	-0.105 -0.944

Bandas de Energía no Simétrica Simulación

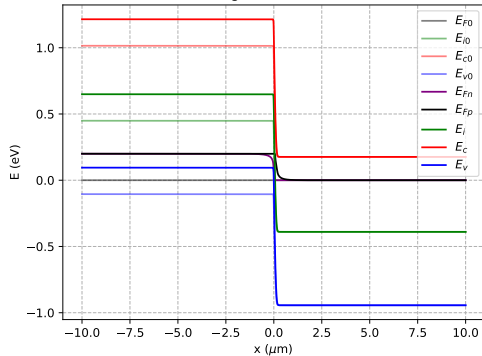


Tabla: bandas en polarización inversa.

	E_C (P N) [eV]	E_i (P N) [eV]	E_V (P N) [eV]	E_{fp} [eV] (P)	E_{fn} [eV] (N)
Teo.	1.215 0.176	0.649 -0.390	0.095 -0.944	0.2	0.0
Sim.	1.215 0.176	0.649 -0.390	0.095 -0.944	0.2	0.0

Polarización directa: campo eléctrico

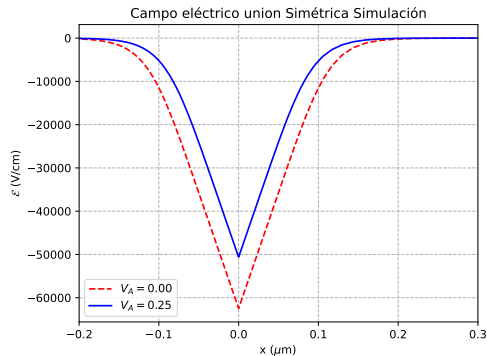
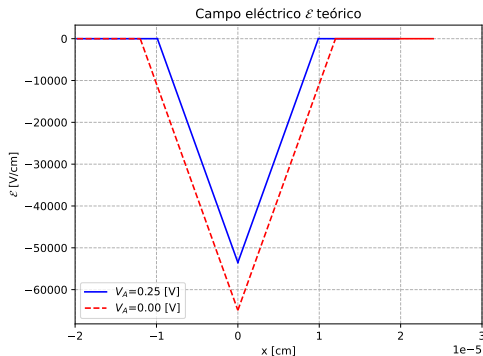


Tabla: Valores del campo eléctrico

	$\mathcal{E}_{\text{mín}}(V_A = 0) \text{ [V/cm]}$	$\mathcal{E}_{\text{mín}}(V_A = 0.25) \text{ [V/cm]}$
Teórico	-64940	-53516
Simulado	-62474	-50609

Polarización inversa: campo eléctrico

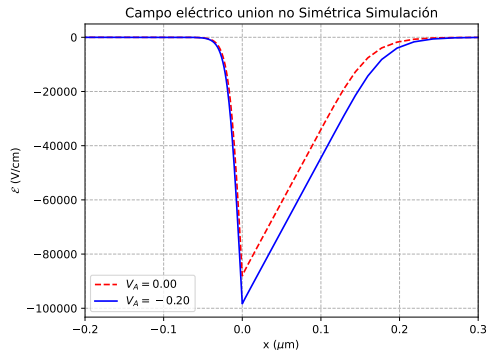
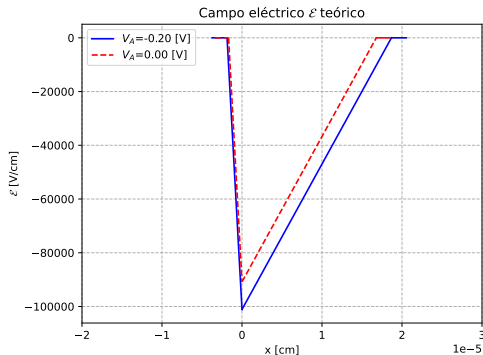


Tabla: Valores del campo eléctrico

	$\mathcal{E}_{\text{mín}}(V_A = 0)$ [V/cm]	$\mathcal{E}_{\text{mín}}(V_A = -0.2)$ [V/cm]
Teórico	-90849	-101103
Simulado	-90463	-98343

Polarización directa: potencial eléctrico

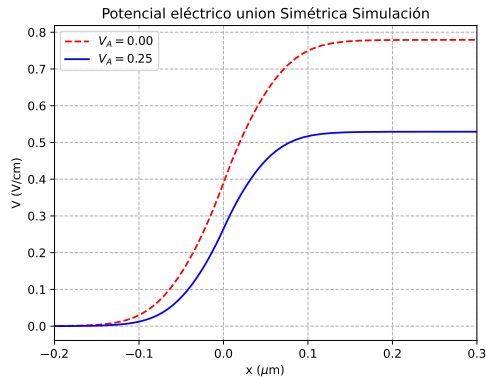
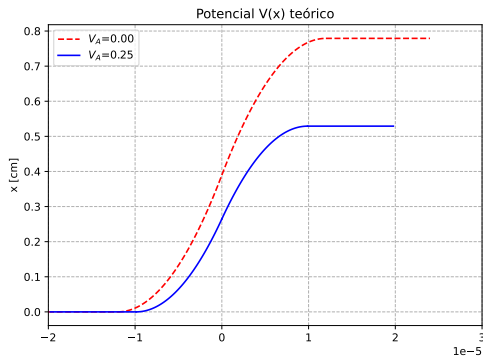


Tabla: Valores del potencial eléctrico

	$V_J(V_A = 0)$ [V]	$V_J(V_A = 0.20)$ [V]
Teórico	0.779	0.529
Simulado	0.779	0.530

Polarización inversa: potencial eléctrico

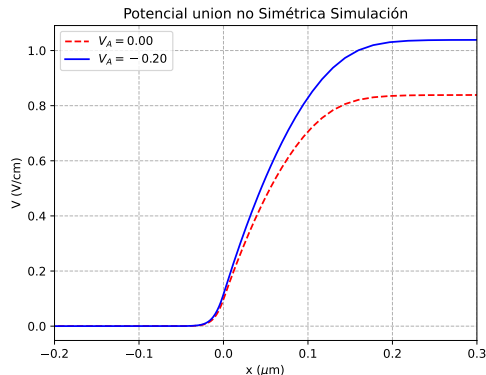
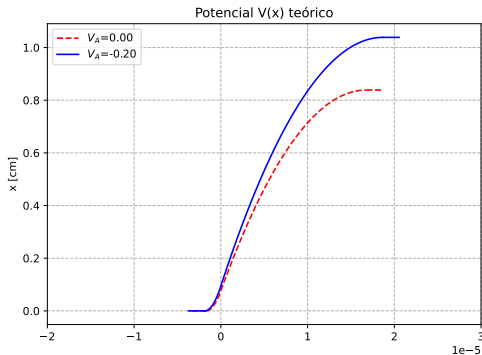


Tabla: Valores del potencial eléctrico

	$V_J(V_A = 0)$ [V]	$V_J(V_A = -0.25)$ [V]
Teórico	0.839	1.039
Simulado	0.839	1.038

Polarización directa: densidad de carga

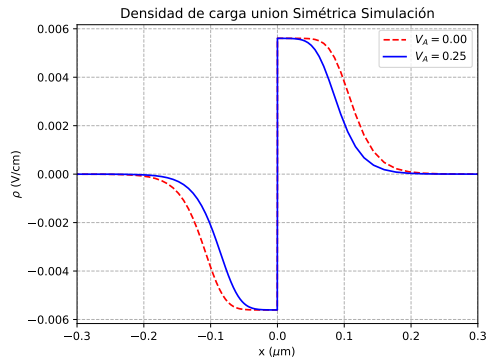
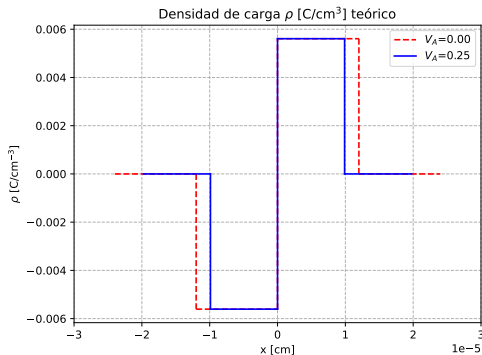


Tabla: Valores de la densidad de carga. El interior indica V_A , i.e. $\rho(V_A = 0.0) \equiv \rho(0)$. El superíndice máx indica que es el valor máximo de ρ .

	$\rho_p^{\text{máx}}(0)$ [C/cm ³]	$\rho_p^{\text{máx}}(0.2)$ [C/cm ³]	$\rho_n^{\text{máx}}(0)$ [C/cm ³]	$\rho_n^{\text{máx}}(0.2)$ [C/cm ³]
Teórico	-0.00561	- 0.00561	0.00561	0.00561
Simulado	-0.00561	-0.00561	0.0561	0.0561

Polarización inversa: densidad de carga

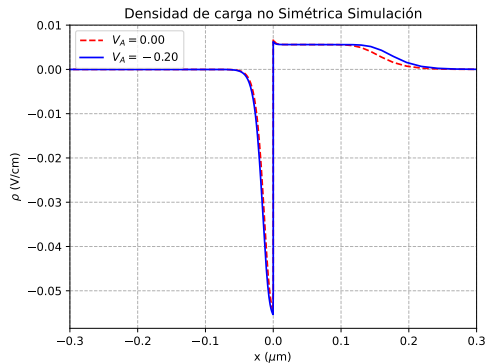
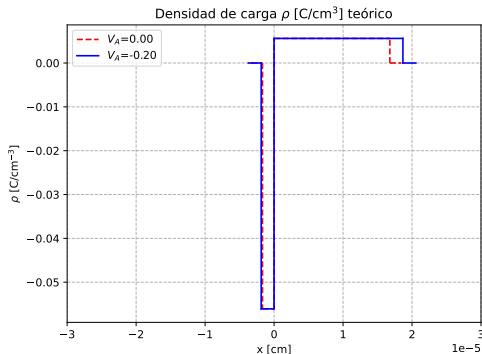


Tabla: Valores de la densidad de carga. El interior indica V_A , i.e. $\rho(V_A = 0.0) \equiv \rho(0)$. El superíndice máx indica que es el valor máximo de ρ .

	$\rho_p^{\text{máx}}(0)$ [C/cm ³]	$\rho_p^{\text{máx}}(0.2)$ [C/cm ³]	$\rho_n^{\text{máx}}(0)$ [C/cm ³]	$\rho_n^{\text{máx}}(0.2)$ [C/cm ³]
Teórico	-0.0561	-0.0561	0.00561	0.00561
Simulado	-0.05466	-0.05537	0.00690	0.00630

Polarización directa: portadores minoritarios

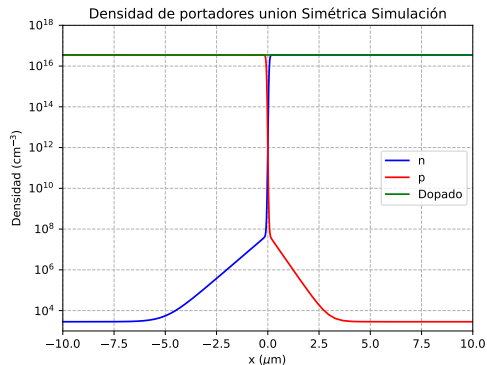
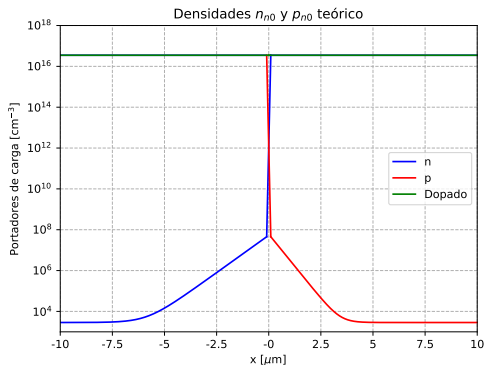
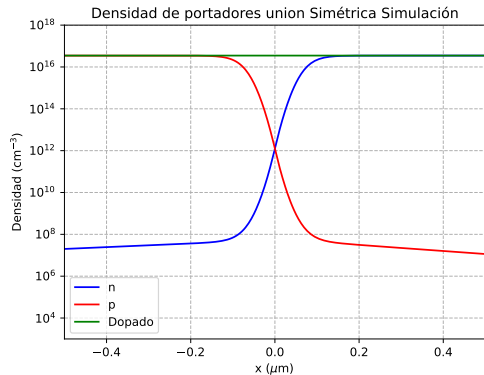
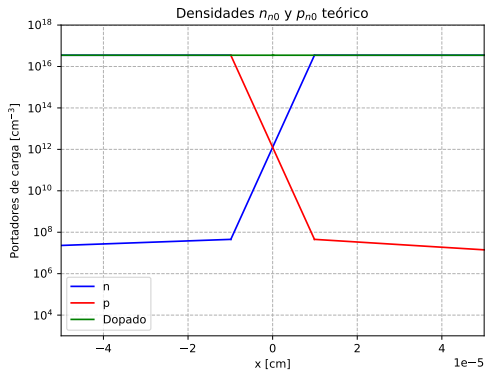


Tabla: Valores de los portadores minoritarios. Los Δn_p y Δp_n los evaluamos en x_n y x_p obtenidos usando las bandas de energías (simuladas).

	n_{p0} [cm^{-3}]	Δn_p [cm^{-3}]	p_{n0} [cm^{-3}]	Δp_n [cm^{-3}]
Teórico	2857	$4.53 \cdot 10^7$	2857	$4.53 \cdot 10^7$
Simulado	2835	$4.72 \cdot 10^7$	2835	$4.44 \cdot 10^7$

Polarización directa: portadores minoritarios



Cabe destacar que para el cálculo de las

Polarización inversa: portadores minoritarios

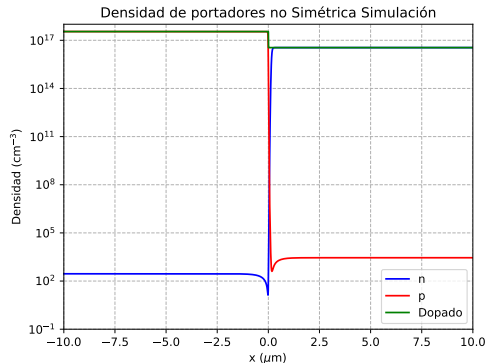
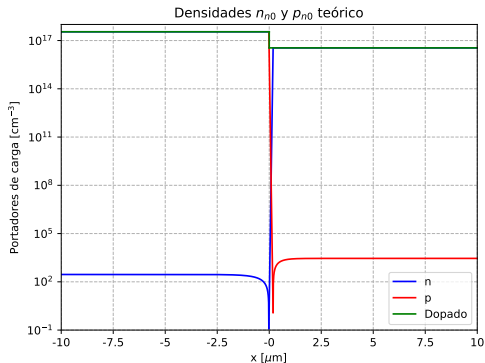
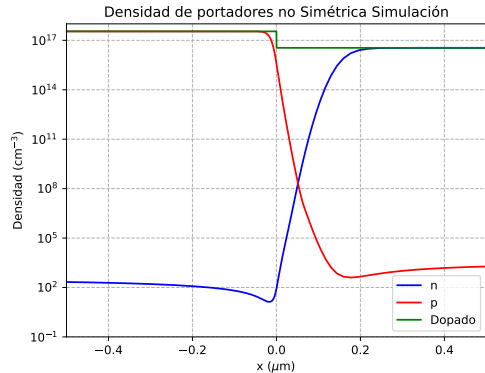
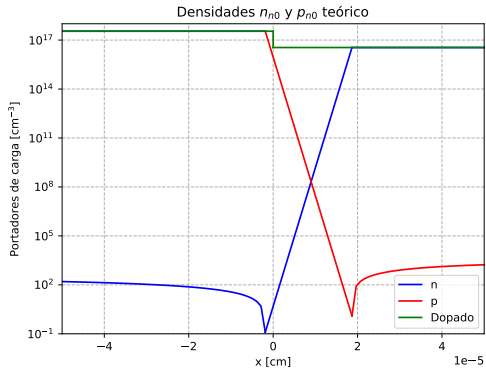


Tabla: Valores de los portadores minoritarios. Los Δn_p y Δp_n los evaluamos en x_n y x_p obtenidos usando las bandas de energías (simuladas).

	n_{p0} [cm^{-3}]	Δn_p [cm^{-3}]	p_{n0} [cm^{-3}]	Δp_n [cm^{-3}]
Teórico	2857	-285.59	2857	2855.9
Simulado	283.58	-270.17	2835	-2393

Polarización inversa: portadores minoritarios



Curva I-V: directa

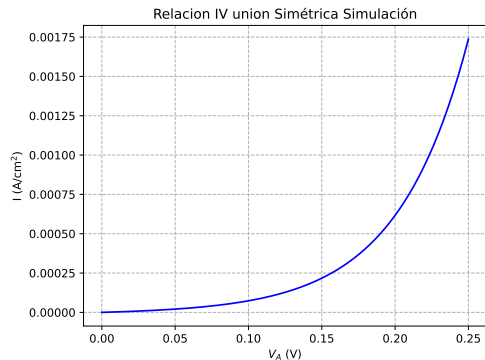
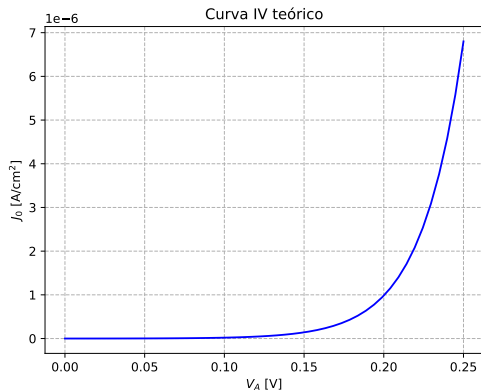


Tabla: Valores de las intensidades

	$I(V_A = 0.25)$ [A/cm ²]
Teórico	$6.80 \cdot 10^{-6}$
Simulado	$1.74 \cdot 10^{-3}$

Curva I-V: inversa

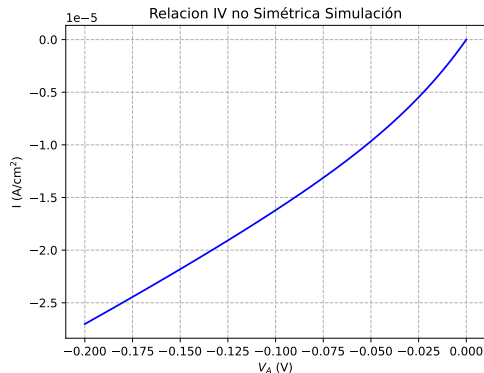
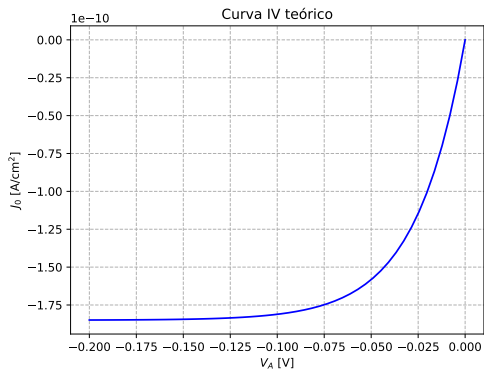


Tabla: Valores de las intensidades

	$I(V_A = -0.25)$ [A/cm ²]
Teórico	$-1.85 \cdot 10^{-10}$
Simulado	-2.7010^{-5}

Otros valores obtenibles

Otros valores que podríamos calcular/obtener con los valores de la simulación podrían ser: x_n, x_p, l_0, L_N, L_P . Para obtenerlos bastaría con hacer algún tipo de regresión.

- Por ejemplo, x_n y x_p podríamos obtenerlo realizando regresiones lineales en las regiones lineales de $\mathcal{E}(x)$ y viendo en que punto se corta, o por ejemplo ver en que punto comienza a crecer $V(x)$ o $\rho(x)$.
- Otros como l_0 serían un poco más difícil de calcular, ya que el comportamiento ideal de IV no es tan preciso, mientras que L_N y L_P sí (a partir de $n_{p0}(x)$ y pn_0).

Sin embargo esto excede los objetivos de esta presentación.

Conclusiones

Las conclusiones son:

Fin