

# Práctica de Electronica con ABACUS-Nanohub

Union PN

Daniel Vázquez Lago

18 de marzo de 2025

1. Objetivos
2. Modelo teórico: región de vaciamiento
3. Modelo teórico: diodo ideal
4. Modelo teórico versus simulación: polarización directa
5. 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:

	$m_p^*/m_e$	$m_n^*/m_e$	$\mu_p$ [cm <sup>2</sup> /(V·s)]	$\mu_n$ [cm <sup>2</sup> /(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

	$\tau_n$ [s]	$\tau_p$ [s]	$x_{1n}$ [μm]	$x_{1p}$ [μm]	$N_D$ [cm <sup>-3</sup> ]	$N_A$ [cm <sup>-3</sup> ]
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,  $\mu_p$  la movilidad del hueco,  $\mu_n$  la movilidad del electrón,  $T$  la temperatura,  $E_g$  la energía del gap,  $\tau_n$  la vida media del electrón,  $\tau_p$  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

La aproximación de la zona de vaciamiento consiste en considerar que alrededor de la unión de los dopados  $P$  y  $N$  (denotada por  $x = 0$ ) existe una región delimitada por dos puntos ( $-x_p$  y  $x_n$ ) en los cuales tanto  $n$  como  $p$  son mucho más pequeños que los valores  $N_D^+$  y  $N_A^-$ . Así en esta región existirá una densidad de carga no nula  $\rho$  lo que generará un campo eléctrico y potencial eléctrico no nulo (en virtud de las ecuaciones de Maxwell).

Las condiciones para poder realizar esta aproximación son:

- En las regiones  $x < -x_p$  y  $x_n < x$  llamadas regiones masivas  $P$  y  $N$  respectivamente, se verifica que *todas las impurezas están ionizadas* y que *la densidad de carga neta es cero*.
- En la región  $-x_p < x < 0$  tenemos que  $n_p, p_p \ll N_A$  tal que  $\rho = -qN_A^-$ .
- En la región  $0 < x < x_n$  tenemos que  $n_n, p_n \ll N_D$  tal que  $\rho = qN_D^-$ .

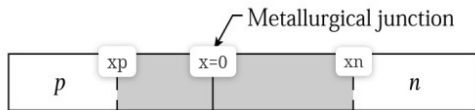
## Marco teórico: zona de vaciamiento

Llamamos al diodo 1 diodo simétrico y al diodo 2 diodo no simétrico. Los valores de  $x_n$  y  $x_p$  vienen dados por

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

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

siendo  $V_{bi}$  el voltaje entre la región  $P$  y  $N$  en el equilibrio (no se le aplica voltaje al diodo). En la siguiente imagen representamos en gris la región de vaciamiento, separadas de las zonas masivas por  $x_p$  y  $x_n$ :



# Marco teórico: diodo ideal

El modelo del diodo ideal nos permite obtener de manera analítica valores para las corrientes  $J_N$  y  $J_P$  a lo largo del dispositivo cuando aplicamos un voltaje  $V_A$  externo entre el diodo  $P$  y  $N$ , a través de las siguientes ecuaciones:

- 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 vaciamiento están dopadas uniformemente.
- Los cuasi-niveles de Fermi son constantes en la zona de transición.

La densidad de carga  $\rho$  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  $\Delta n_p$  y  $\Delta p_n$  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 <sup>2</sup> /s]	$D_N$ [cm <sup>2</sup> /s]	$L_P$ [μm]	$L_N$ [μm]	$n_i$ [cm <sup>-3</sup> ]	$K_S$
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  $V_A = 0.25$

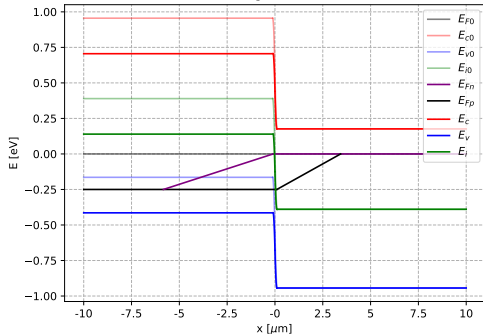


Tabla: bandas en el equilibrio.

	$E_C$ (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

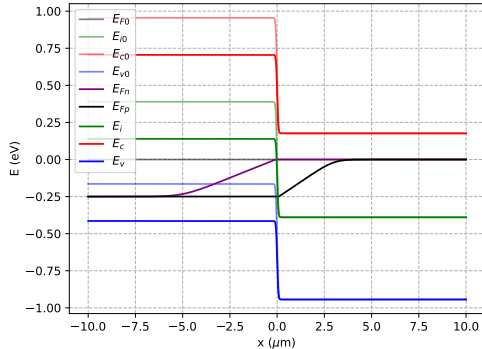


Tabla: bandas en polarización directa.

	$E_C$ (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  $V_A = -0.20$

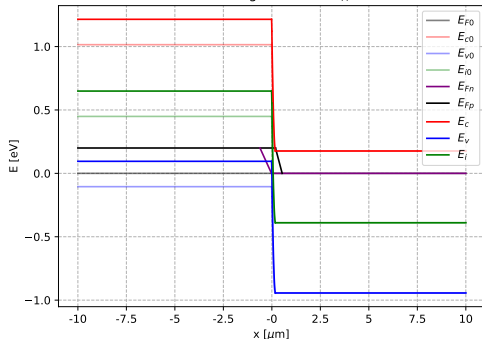


Tabla: bandas en el equilibrio.

	$E_C$ (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

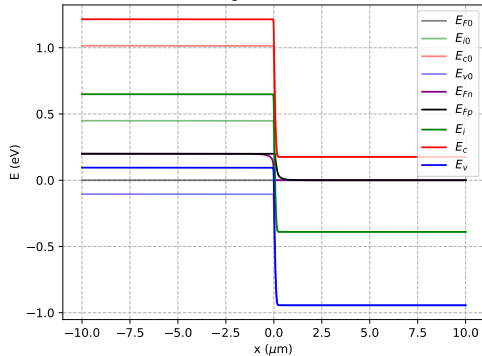


Tabla: bandas en polarización inversa.

	$E_C$ (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

## ¿Degeneración en las bandas?

Como podemos observar *ninguna de las bandas está degenerada*, ya que

$$3kT = 0.078 \text{ eV} \quad (4)$$

y tanto  $E_c$  como  $E_v$  están a una distancia mayor de  $E_F$ . El valor más cercano se da en la polarización inversa, tanto para  $E_v$  en la zona masiva P con una distancia de 0.105 eV respecto  $E_F$  y para  $E_c$  en la zona masiva N con una distancia de 0.176 eV respecto  $E_F$ .

# Polarización directa: campo eléctrico

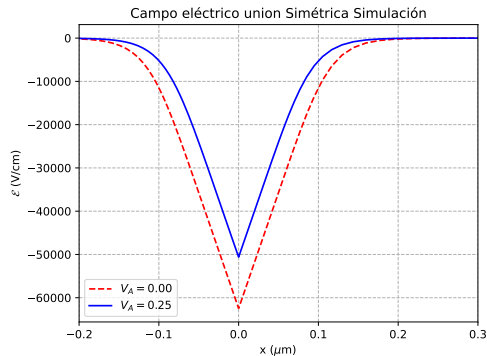
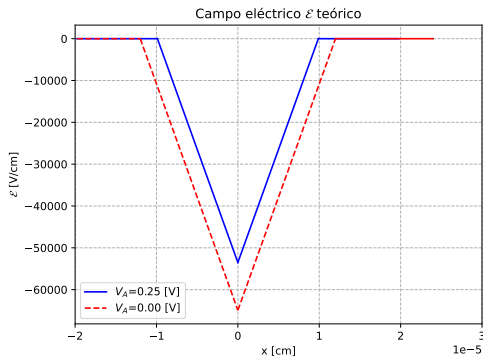


Tabla: Valores del campo eléctrico

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



# Polarización inversa: campo eléctrico

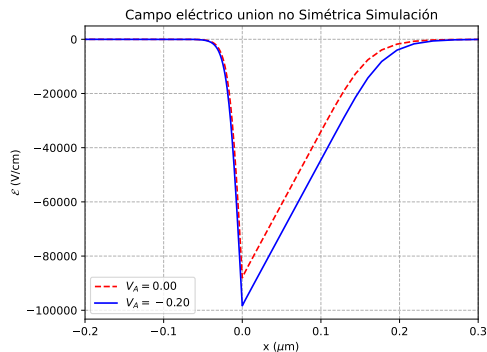
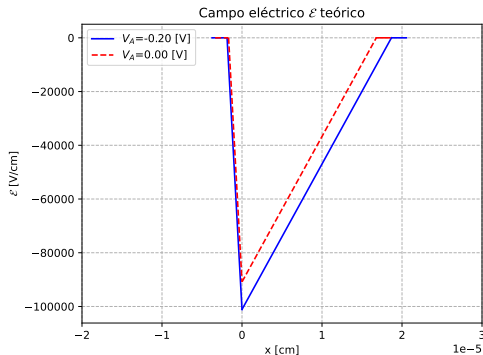


Tabla: Valores del campo eléctrico

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

# Polarización directa: potencial eléctrico

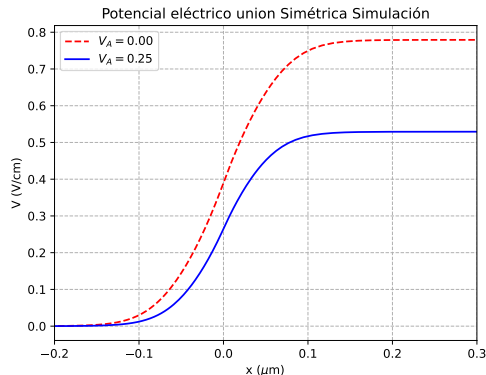
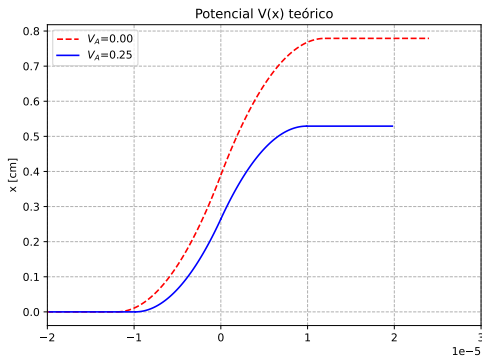


Tabla: Valores del potencial eléctrico

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

# Polarización inversa: potencial eléctrico

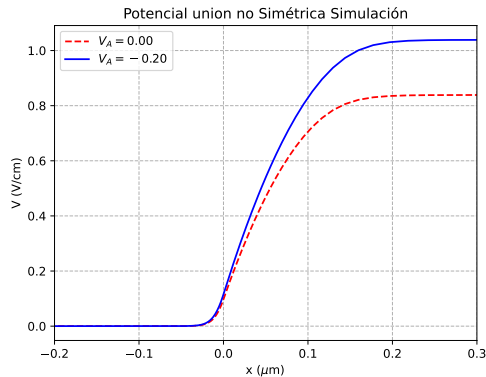
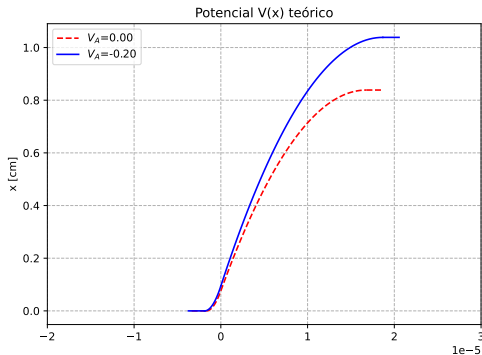


Tabla: Valores del potencial eléctrico

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

# Polarización directa: densidad de carga

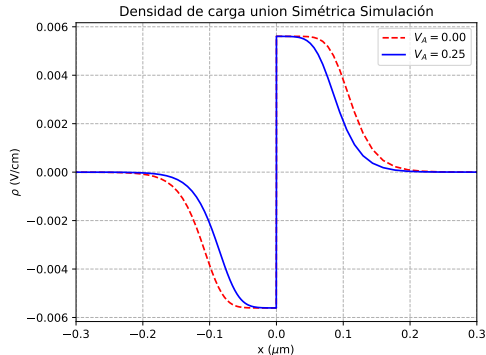
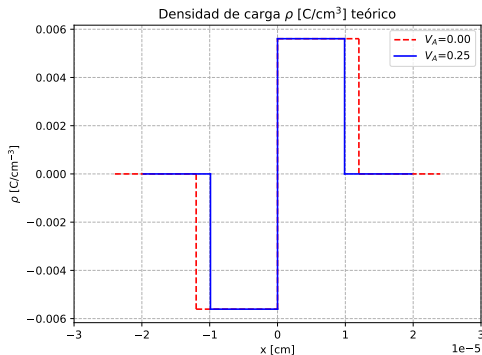


Tabla: Valores de la densidad de carga. El interior indica  $V_A$ , i.e.  $\rho(V_A = 0.0) \equiv \rho(0)$ . El superíndice máx indica que es el valor máximo de  $\rho$ .

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

# Polarización inversa: densidad de carga

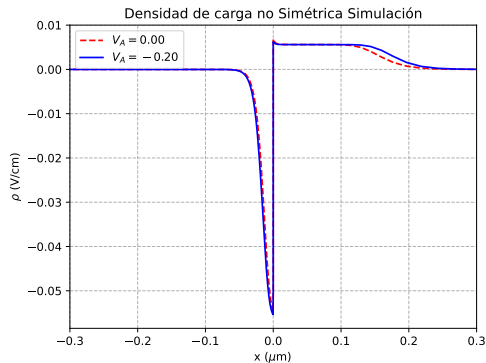
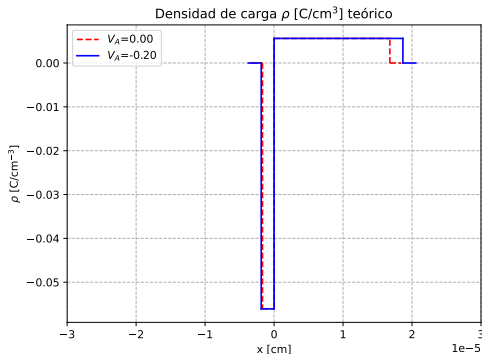


Tabla: Valores de la densidad de carga. El interior indica  $V_A$ , i.e.  $\rho(V_A = 0.0) \equiv \rho(0)$ . El superíndice máx indica que es el valor máximo de  $\rho$ .

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

# Polarización directa: portadores minoritarios

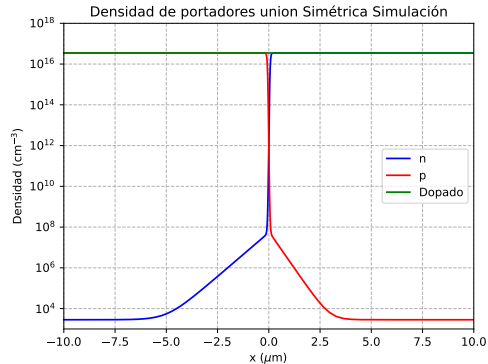
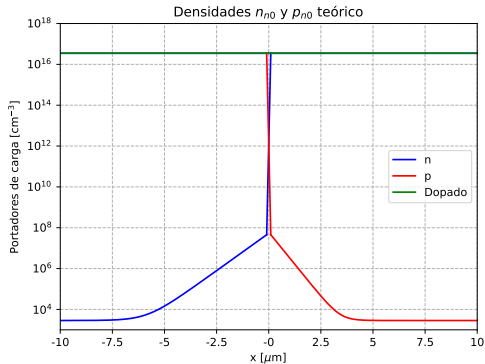
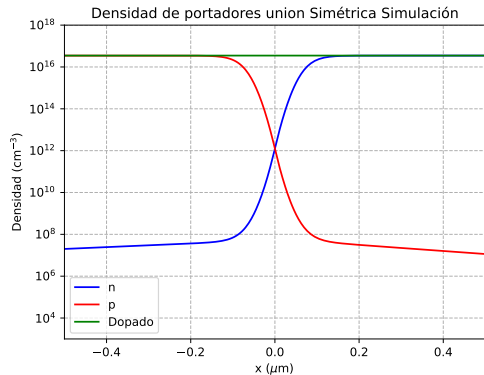
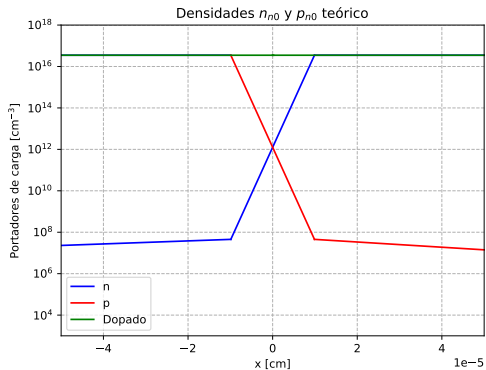


Tabla: Valores de los portadores minoritarios. Los  $\Delta n_p$  y  $\Delta p_n$  los evaluamos en  $x_n$  y  $x_p$  obtenidos usando las bandas de energías (simuladas).

	$n_{p0}$ [cm <sup>-3</sup> ]	$\Delta n_p$ [cm <sup>-3</sup> ]	$p_{n0}$ [cm <sup>-3</sup> ]	$\Delta p_n$ [cm <sup>-3</sup> ]
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

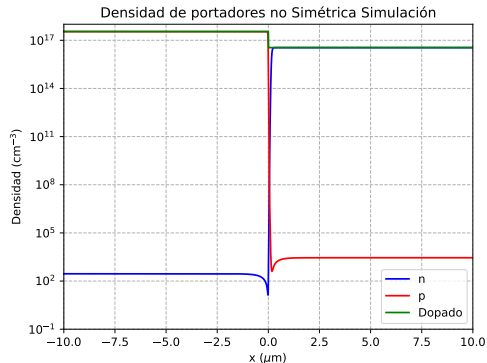
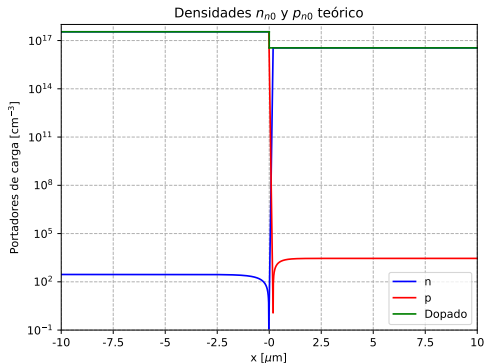
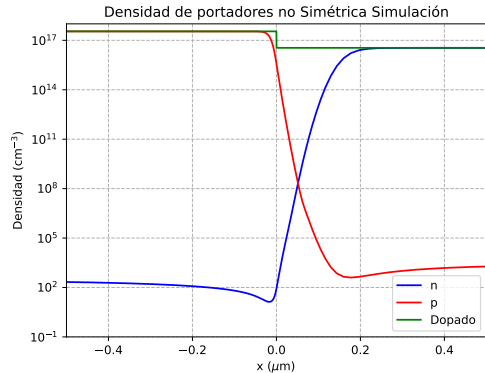
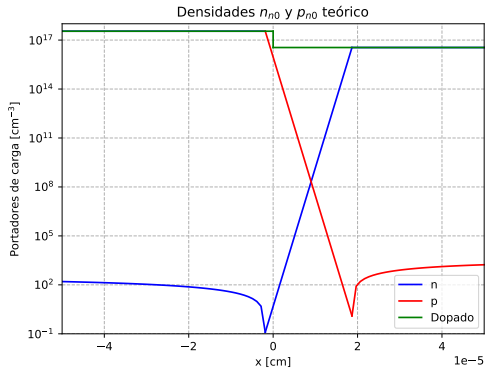


Tabla: Valores de los portadores minoritarios. Los  $\Delta n_p$  y  $\Delta p_n$  los evaluamos en  $x_n$  y  $x_p$  obtenidos usando las bandas de energías (simuladas).

	$n_{p0}$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]	$\Delta n_p$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]	$p_{n0}$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]	$\Delta p_n$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]
Teórico	2857	-285.59	2857	2855.9
Simulado	283.58	-270.17	2835	-2393



# Polarización inversa: portadores minoritarios



# Curva I-V: directa

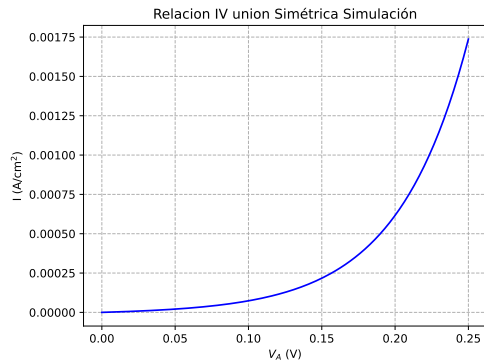
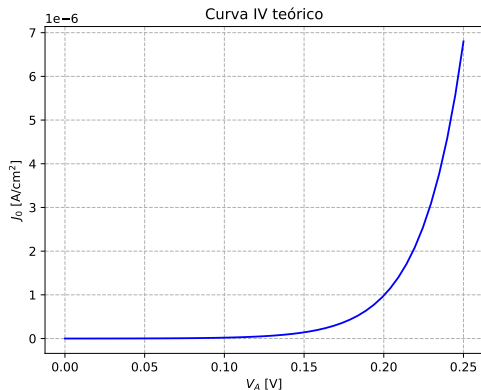


Tabla: Valores de las intensidades

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

# Curva I-V: inversa

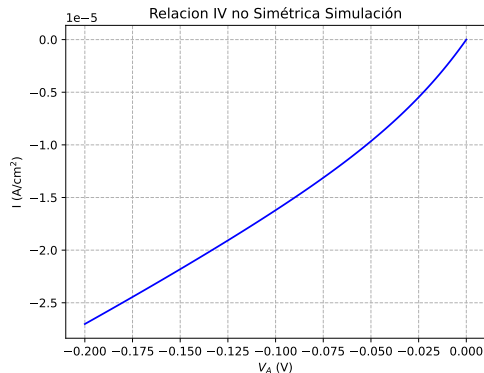
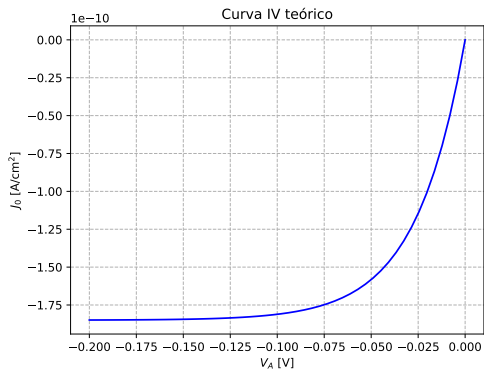


Tabla: Valores de las intensidades

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

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:

- El diodo ideal predice el orden de todos los resultados (con una diferencia relativa de entre el 10 % y menos del 1 %), salvo la relación  $IV$  en el que falla varios órdenes de magnitud.
- En casos particulares como bandas de energías y voltaje máximo la diferencia es mínima.
- Las funciones analíticas que se observan del diodo ideal devuelven valores similares a los que da la simulación.
- Las principales diferencias entre modelo y simulación se da en los bordes de la región de vaciamiento.

Con todo, hemos podido observar que para los voltajes de polarización y dopantes dados, el diodo ideal es una buena aproximación (con un margen de error del 10 %) del diodo PN, excepto para la relación  $IV$ .

**Fin**