

Simulación del dopaje de nanopartículas y comportamiento de flujo eléctrico.

LAGUNES RIVERA R.

Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica.

Maestría en Ciencias de la Ingeniería con Orientación en Nanotecnología.

Contacto: raul.lagunesr@uanl.edu.mx

Github: [RaulIr28](#)

Compiled May 27, 2022

Aquí colocar el resumen

1. INTRODUCCIÓN

El dopaje de materiales con nanopartículas en semiconductores es muy común en el campo de ciencia de materiales en donde un dopaje refiere al proceso en el que se agregan impurezas en un semiconductor puro con la finalidad de cambiar propiedades eléctricas o térmicas, para un dopaje ligero es cuando se agregan una pequeña cantidad de impurezas (1 cada 100 millones de átomos) y un alto dopaje denominado pesado es cuando la impureza ocurre 1 cada 10 mil átomos.

Esta técnica es utilizada para la variación del número de huecos y electrones en un semiconductor lo cual beneficia o impide el flujo eléctrico en el mismo. Un dopaje de material tipo N es el que posee átomos de impureza que admite la aparición de más electrones que huecos. Caso contrario el tipo P que se presenta al tener átomos que permiten mayor formación de huecos sin dejar electrones de sobra lo cual beneficia el flujo de electrones a ocupar dichos huecos de sobra [1].

El dopar semiconductores a nivel nanométrico muestra propiedades mejoradas en comparación a escala a granel, ya que en el material nanocristalino las propiedades físicas están controladas predominantemente por los límites de grano que por los granos [2]. También se puede alterar las propiedades de nanoestructuras, tanto químicas en su estructura molecular, como físicas en aspectos tales como su conductividad eléctrica, su comportamiento magnético, su resistencia mecánica, entre otras [3], aunado a esto los elementos dopantes pueden generar diferentes tipos de alteración en las características del semiconductor, como variación en la longitud de onda a la que se absorbe radiación [4].

En el presente trabajo se plantea la implementación de una simulación del dopaje de nanopartículas a un material semiconductor, estudiando el flujo eléctrico como varía respecto al porcentaje de impureza agregado y que tanto tamaño o área de cristal se forma de cada material. Primeramente se mencionan antecedentes que hablan de trabajos ya realizados similares a la simulación de dopaje con lo que se validará el proceso

simulado, continuando con trabajos relacionados en los que se baso el modelo de este trabajo, después el modelo propuesto e implementación son discutidos para después revisar la experimentación donde son observados los resultados obtenidos y gráficos junto a pruebas estadísticas. Por ultimo se mencionan las conclusiones a las que se llego en el actual trabajo.

2. ANTECEDENTES

Trabajos ya han sido reportados tal como en la simulación que se discute en el siguiente modelo Born de un solido en el que los iones están representados por cargas puntuales interactúan tanto electrostáticamente como a través de potenciales de corto alcance. Estos últimos tienen su origen físico en la repulsión de Pauli asociada con la superposición de las distribuciones de densidad de electrones en los iones vecinos. Se obtiene una gráfica de la trayectoria del flujo eléctrico, dopado con mg alúmina a 300 K.

También se observo que entre más grande el área y la mayor duración de la simulación, ninguna de las distribuciones dopantes mostró un comportamiento distinto al de cuando se emplearon los potenciales utilizados en este trabajo. Finalmente, en comparación con los datos experimentales, las conductividades simuladas a bajas temperaturas resultaron más altas. Además de la distribución de dopantes, pueden existir otras causas para la disminución observada en la conductividad a bajas temperaturas, como la presencia de humedad [5].

Otro trabajo parecido se presenta en el cálculo de conductividad del régimen de Hz para silicio ligeramente dopado utilizando una herramienta de simulación desarrollada en Python, donde en dicha simulación se observa un electrón moviéndose con velocidad constante en la cuadrícula 2D, a través de una línea de campos eléctricos desde un punto de rejilla de referencia hasta un punto de rejilla de interés ubicado a lo largo de la trayectoria del electrón. A medida que el electrón se aleja de su punto de origen, quedan atrás los campos electrostáticos de un hueco artificial. Por el contrario, como la fuerza dominante que actúa

sobre los portadores y el flujo de corriente están en la dirección, las condiciones de contorno deben permitir el movimiento del portador sin restricciones y mantener el impulso del conjunto en esta dirección [6].

3. TRABAJOS RELACIONADOS

El trabajo se basa en trabajos relacionados tal como lo es Diagramas de Voronoi que se puede consultar en la pagina de simulación de Schaeffer [7] en el que se simula la cristalización mediante semillas colocadas para formar un material cristalino, lo que se busca es dividir esa zona en regiones llamadas celdas de Voronoi y apartir de estas celdas trabajar distintos fenómenos. Por otra parte los múltiples resultados se basan en la mejor decisión tal como se ve en la simulación de Frentes de Pareto [8] en el que una optimización multicriterio, a un mismo conjunto de variables ocupa asignarse valores de tal forma que se optimicen dos o más funciones objetivo, dando la mejor solución respecto a distintas variables. Estas dos simulaciones pueden ser consultadas en el repositorio de Schaeffer [9].

*. Diagramas de Voronoi

El diagrama de Voronoi es una estructura famosa de la geometría computacional, uniendo las regiones de proximidad por un conjunto de sitios en el plano donde la distancia de los puntos se define por su distancia euclidiana. Se describe con un número n de semillas o puntos en un plano y cada uno abarca una región que estará delimitada por la distancia euclidiana hacia otra semilla, simulando las fronteras de cada zona [10].

*. Frentes de Pareto

4. MODELO PROPUESTO

5. IMPLEMENTACIÓN

6. EXPERIMENTACIÓN

*. Resultados

*. Discusión

7. CONCLUSIONES

*. Trabajo a futuro

8. REFERENCES

REFERENCES

1. D. K. Schroder, Semiconductor material and device characterization, John Wiley & Sons, 2015.
2. R. Nongjai, S. Khan, K. Asokan, H. Ahmed, I. Khan, Magnetic and electrical properties of in doped cobalt ferrite nanoparticles, Journal of applied physics 112 (8) (2012) 084321. doi:10.1063/1.4759436.
3. A. N.-M. Ballesteros, Síntesis, caracterización y aplicaciones catalíticas de nanoestructuras de carbono y de carbono dopado con nitrógeno., Ph.D. thesis, Universidad de Castilla-La Mancha (2010).
4. D. M. de los Santos Martinez, Dopado de nanopartículas semiconductoras de banda ancha: caracterización estructural y evaluación fotoelectroquímica, Ph.D. thesis, Universidad de Cádiz (2014).
5. B. Wang, A. N. Cormack, Molecular dynamics simulations of mg-doped beta -alumina with potential models fitted for accurate structural response to thermal vibrations, Solid State Ionics 263 (2014) 9–14. doi:10.1016/j.ssi.2014.04.018.
6. K. Willis, S. Hagness, I. Knezevic, Terahertz conductivity of doped silicon calculated using the ensemble monte carlo/finite-difference time-domain simulation technique, Applied Physics Letters 96 (6) (2010) 062106. doi:10.1063/1.3308491.
7. Diagramas de voronoi, <https://satuelisa.github.io/simulation/p4.html>, accessed: 2022-05-26.
8. Diagramas de voronoi, <https://satuelisa.github.io/simulation/p11.html>, accessed: 2022-05-26.
9. Repositorio github: satuelisa, <https://github.com/satuelisa/Simulation>, accessed: 2022-05-26.
10. M. Erwig, The graph voronoi diagram with applications, Networks: An International Journal 36 (3) (2000) 156–163. doi:10.1002/1097-0037(200010)36:3<156::AID-NET2>3.0.CO;2-L.