

DISTRIBUCION DE POTENCIAL EN p-n DIODO TUNEL

Melquiades de Dios L.
Dpto. de Física Teórica Facultad Física-Matemática
Universidad de la Habana

S. D. Beneslaski
Catedra de Bajas Temperaturas
Facultad de Física. Universidad Estatal de Moscú.

ABSTRACT

The generalized equation of Thomas-Fermi and its first integral are obtained in order to describe the potential distribution in p-n tunnel diodes using the simplified two-band Kane model. The exact potential distribution when the energy band-gap, E_g , tends to zero and the potential asymptotic behavior when $E_g \neq 0$ are found. In both cases, the non-linear screening length as a function of E_g and impurity concentration are obtained. Criteria of applicability of the Thomas-Fermi approximation are established.

RESUMEN

Utilizando el modelo simplificado de dos bandas de Kane se obtiene, para describir la distribución de potencial en p-n-diodo-túnel, la ecuación generalizada de Thomas-Fermi y su primera integral. Cuando el ancho de la banda prohibida $E_g \rightarrow 0$ se obtiene la distribución exacta de potencial. Para $E_g \neq 0$ se obtiene el comportamiento asintótico. En ambos casos se obtiene la longitud no lineal de apantallamiento en función de E_g y de la concentración de impurezas. Se determinan, además, criterios de aplicabilidad de la aproximación de Thomas-Fermi.

INTRODUCCION

La distribución de potencial en junturas p-n se determina aproximadamente por medio de la ecuación de Poisson. Las dificultades que sufren resolver esta ecuación conducen a la utilización de la aproximación de Shockley [1], en la cual la distribución de carga en la juntura se determina solamente por la distribución de impurezas. Aunque esta aproximación es simple y es ampliamente utilizada, conduce, en principio, a una distribución incorrecta de carga. Además, como fue demostrado en [2], no es correcta ni en calidad de aproximación de orden cero.

Esto significa que para la correcta determinación de potencial en junturas, es necesario tener en cuenta la contribución de los portadores móviles de carga. En particular, mientras más degenerado sea el gas de portadores de carga más importante será su contribución a la distribución de potencial. Tal contribución ha sido considerada

en la aproximación clásica de Thomas-Fermi [3-5].

No obstante esto, hasta ahora (en cuanto nos es conocido) no se ha tomado en cuenta en los cálculos la interacción entre bandas, cuestión importante en los semiconductores de banda estrecha.

Así, el objetivo del presente trabajo consiste en estudiar la distribución de potencial en p-n-diodos-túneles formados en semiconductores de banda estrecha.

Utilizaremos el modelo de dos bandas de Kane [6] y supondremos lo siguiente: (a) el diodo-túnel se forma en un mismo semiconductor (fuertemente dopado); (b) en la región n ($Z > 0$) se tienen solamente impurezas donoras uniformemente distribuidas con concentración $N_d = N_0$ y, en la región p solamente impurezasceptoras con la misma distribución $N_a = N_0$; (c) la temperatura será tal, que los electrones en la zona de conductividad y los huecos en la zona de valencia surgirán, en lo fundamental, como consecuencia de la ionización de las impurezas, (d) el diodo se encuentra siempre en estado de equilibrio termodinámico.

Estas suposiciones implican, en primer lugar, que cada región de la juntura forma un semiconductor degenerado y no compensado. En el mismo la concentración de impureza N_0 , el radio de Bohr a_B de los portadores de carga, el radio de apantallamiento de las impurezas r_0 y la concentración n (p) de electrones (huecos) satisfacen las condiciones.

$$N_0^{-\frac{1}{3}} \ll a_B; \eta^{-\frac{1}{3}} \ll a_B; r_0 \ll a_B \quad (1)$$

Esto significa que para cualquier temperatura la inmensa mayoría de átomos de impureza está ionizada y, el gas de electrones (huecos) se puede considerar completamente degenerado [7]. En los semiconductores de banda estrecha, como consecuencia de los valores tan grandes de la constante dieléctrica de la red y, debido a la masa efectiva tan pequeña de los portadores, estas condiciones no son difíciles de satisfacer [8].

En segundo lugar, ya que las concentraciones de impurezas son homogéneas, los efectos que surgen como consecuencia de sus fluctuaciones pueden despreciarse. Además, como el sistema está siempre en equilibrio termodinámico la región de impureza del espectro energético no juega ningún papel en los fenómenos que aquí consideramos.

Más adelante demostraremos que la mayor contribución a la concentración de portadores de carga la dan aquellos estados para los cuales la energía E de los mismos es del orden del potencial electroquímico F. Esto permite suponer que el concepto de ley de dispersión conserva su sentido para todos los valores posibles de la energía [7].

En la Fig. 1 se representa el diagrama de energía del p-n diodo túnel, donde los bordes de las bandas se describen por las ecuaciones: $E_c(z) = 1/2 E_g + V(z)$ y $E_v(z) = -1/2 E_g + V(z)$. En ellas E_g es el ancho de la banda prohibida y $V(z)$ el potencial autoconsistente, el cual supondremos que satisface las condiciones de contorno $V(-\infty) = 0$ y $V(\infty) = V_0 < 0$

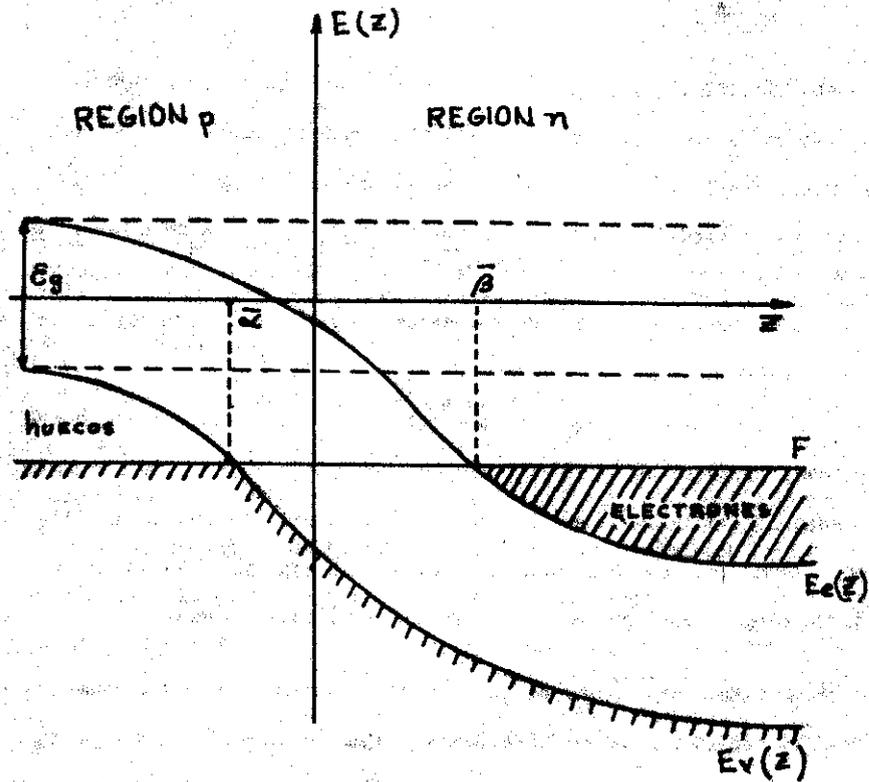


Fig. 1

2. DEDUCCION DE LA ECUACION GENERALIZADA DE THOMAS - FERMI

En la aproximación de masa efectiva y, en los marcos del modelo de Kane, la ecuación de movimiento del electrón en presencia del campo $V(z)$ puede ser tomado de la forma

$$\left[\hat{H}_0(\vec{r}) + V(z) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (2)$$

Donde la función de onda ψ tiene cuatro componentes, E es la energía, I la matriz unidad y

$$\hat{H}_0 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}E_g & 0 & P\hat{K}_- & iP\hat{K}_z \\ 0 & \frac{1}{2}E_g & iP\hat{K}_z & P\hat{K}_+ \\ P\hat{K}_+ & -iP\hat{K}_z & -\frac{1}{2}E_g & 0 \\ -iP\hat{K}_z & P\hat{K}_- & 0 & -\frac{1}{2}E_g \end{bmatrix} \quad (3)$$

donde $\vec{K} = -i \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$, $\hat{K}_\pm = \hat{K}_x \pm i\hat{K}_y$ y P es un parámetro real.

Desde el punto de vista matemático la ecuación (2) tiene la forma de la ecuación de Dirac en el campo de simetría axial $V(z)$. Esto permite utilizar los trabajos dedicados al estudio de tal ecuación. Por ejemplo, para simplificar (2) utilizaremos el método desarrollado en [7] para el caso de simetría esférica.

Con la ayuda de la transformación unitaria

$$\psi = U \Psi = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix} \Psi,$$

donde $\bar{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

La ecuación (2) toma la forma

$$\hat{H}\psi = \left[i p \alpha_z \beta \hat{K} + p \alpha_z \hat{K}_z + \frac{1}{2} \epsilon_g \beta + V(z) \right] \psi = E \psi \quad (4)$$

donde

$$\alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & iI \\ -iI & 0 \end{pmatrix}; \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \hat{K} = \begin{pmatrix} \bar{\sigma}_x & 0 \\ 0 & \bar{\sigma}_x \end{pmatrix} \hat{K}_x + \\ + \begin{pmatrix} \bar{\sigma}_y & 0 \\ 0 & \bar{\sigma}_y \end{pmatrix} \hat{K}_y; \bar{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Ya que \hat{H} y \hat{K} conmutan, las autofunciones de (4) se pueden escoger comunes a estos operadores. Esto permite sustituir en (4) a \hat{K} por sus autovalores $K = \pm K_{\perp}$, donde $K_{\perp} = \sqrt{K_x^2 + K_y^2}$. Tal simplificación corresponde al hecho que K_x, K_y se conservan, y las autofunciones tienen la forma $\psi(\vec{r}) = \phi(z) \exp i(xK_x + yK_y)$

Teniendo en cuenta estas consideraciones e introduciendo la función

$\psi = \begin{pmatrix} G(z) \\ F(z) \end{pmatrix}$, la ecuación (4) se lleva al siguiente sistema de dos ecuaciones

$$\left(\frac{1}{2} \epsilon_g + V - E \right) G + (PK + iP\hat{K}_z) F = 0$$

$$(PK - iP\hat{K}_z) G + \left(-\frac{1}{2} \epsilon_g + V - E \right) F = 0$$

(6)

En lo adelante sólo nos interesan las soluciones cuasiclásicas de (6), las condiciones bajo las cuales es aplicable tal aproximación. Como estas soluciones fueron obtenidas en [10], aquí sólo aclararemos lo siguiente: en estado de equilibrio termodinámico se puede suponer que los electrones no pueden pasar de la banda de conducción a la banda de valencia (ver fig. 1), es decir, se puede considerar que los estados ocupados por electrones en la banda de valencia crean una barrera de potencial impenetrante para los electrones de conducción. Además, en la región del espacio $\bar{\alpha} < z < \bar{\beta}$ el nivel de Fermi se encuentra por debajo del borde de la zona de conductividad. Esto significa que en esta región el gas de electrones es no-degenerado y, su concentración es pequeña en comparación con la concentración de impureza. Por esta razón en la región $\bar{\alpha} < z < \bar{\beta}$ despreciamos la contribución de los portadores de cargas móviles al potencial. Por tanto, para calcular la concentración de electrones en la región n es sólo necesario resolver la ecuación (6) para $z > \bar{\beta}$,

Análogamente se obtiene la concentración de huecos

$$p(z) = \frac{1}{3\pi^2 p^3} \left[(V - V_n)^2 + \epsilon_g (V - V_n) \right]^{3/2} \quad (12)$$

donde V_p y V_n satisfacen las relaciones $F = \frac{1}{2}\epsilon_g + V_p = -\frac{1}{2}\epsilon_g + V_n$.
Estos parámetros se determinan por las condiciones de electroneutralidad en las profundidades del semiconductor: $N_D = n(\infty) = p(-\infty)$, las cuales conducen a que la altura de la barrera V_0 es igual a $V_p + V_n$.

Es interesante notar que $n(z) = 0$ para $V(z) > V_p$ y $p(z) = 0$ para $V(z) < V_n$.

Así, la ecuación generalizada de Thomas - Fermi será

$$\frac{d^2 V}{dz^2} = -\frac{4\pi l^2}{\epsilon} \left[\eta(z) - p(z) - N(z) \right] \quad (13)$$

donde ϵ es la constante dieléctrica, $N(z)$ es la concentración de impureza ionizada y $\eta(z)$ y $p(z)$ vienen dada por las relaciones (11) y (12). Además, $V(z)$ satisface las condiciones de contorno

$$V(-\infty) = \left(\frac{dV}{dz} \right)_{z=-\infty} = \left(\frac{dV}{dz} \right)_{z=\infty} = 0; \quad V(\infty) = V_0 < 0 \quad (14)$$

3 SOLUCIONES DE LA ECUACION DE THOMAS - FERMI. VALIDEZ DE LA APROXIMACION.

En los marcos de la aproximación escogida, es evidente que para $\bar{\alpha} < z < \bar{\beta}$ se tiene una "capa de aislante". En ella no hay ni electrones ni huecos y, $V(z)$ solamente se determina por la concentración de impureza. Para $z > \bar{\beta}$, $V(z)$ se determina por las concentraciones de electrones y donores, y para $z < \bar{\alpha}$ por las concentraciones de huecos y aceptores. En este trabajo sólo nos interesará considerar la solución de (13) para $z > \bar{\beta}$. En tal caso $N(z) = N_0$.

Así, teniendo en cuenta que la parte derecha de (13) sólo depende de V , que $V(z)$ debe satisfacer (14) y que $\frac{dV}{dz} < 0$, se obtiene la siguiente relación

$$-(z - \bar{z}) = \int_{V(\bar{z})}^{V(z)} \frac{dV}{\sqrt{\frac{8\pi l^2}{\epsilon} \left\{ \frac{\epsilon_g^4}{3\pi^2 p^3} [I(\bar{z}) - I(\bar{z}_0)] + N_0 (V - V_0) \right\}}} \quad (15)$$

donde $\bar{z} \geq \bar{\beta}$ y arbitraria. $\bar{z} = (V_p - V)/\epsilon_g$, $\bar{z}_0 = (V_p - V_0)/\epsilon_g$

ple que $V(0) = V_p = V_n = V_0/2$

En virtud que para $N_n = N_d = N_0$ ($V(z) - V_0/2$) es una función par de Z , consideremos solamente la solución de (15) para $Z \geq 0$.

Si en (15) $E_g \rightarrow 0$, ξ y ξ_0 tienden a infinito, $E_g^{1/4} I(\xi) \rightarrow \frac{1}{4} \left(\frac{V_0}{2} - V\right)^4$; $E_g^{1/4} I(\xi_0) \rightarrow \frac{1}{4} \left(\frac{V_0}{2} - V_0\right)^4$ Con esto la integral (15) se calcula fácilmente y, se obtiene

$$Z = \sqrt{\frac{\epsilon \mu_n}{12 \pi l^2 N_0}} \ln \left\{ \frac{\sqrt{6}}{4+3\sqrt{2}} \left[\frac{\sqrt{X_0^2 + 2X_0 + 3 + \sqrt{6}}}{1-X_0} - \frac{Z}{\sqrt{6}} \right] \right\} \quad (18)$$

donde $\mu_n = -V_0/2$ es el nivel de Fermi de los electrones y

$$X_0 = \left(\frac{V_0}{2} - V\right) / \mu_n$$

Esta fórmula determina la energía potencial exacta para $E_g = 0$. A partir de ella es fácil demostrar que

$$V(Z) = V_0 \left[1 - \frac{6}{4+3\sqrt{2}} e^{-Z/L_D} \right] \text{ si } Z \rightarrow \infty \quad (19)$$

$$V(Z) = \frac{V_0}{2} \left[1 + \left(\frac{4+3\sqrt{2}}{6+4\sqrt{2}} \right) \frac{Z}{L_D} \right] \text{ si } Z \rightarrow 0 \quad (20)$$

donde la longitud no lineal de apantallamiento viene dada por

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon \mu_n}{12 \pi l^2 N_0}} = \sqrt{\frac{\epsilon (3\pi^2 p^3)^{1/3}}{12 \pi l^2 N_0^{2/3}}}$$

Consideremos ahora la aplicabilidad de la aproximación cuasiclásica. Como es conocido [12] tal aproximación no es aplicable en la cercanía de los puntos de retorno Z_n y Z_p , donde $V_n = V(Z_n)$ y $V_p = V(Z_p)$. De la fórmula (10) sigue que la mayor contribución a $n(Z)$ para $Z \rightarrow Z_p$ la dan los estados con $E \approx F$ y $k_1 \approx 0$, así que la condición de aplicabilidad de la aproximación de Thomas - Fermi toma la forma

$$\left| \frac{dk(Z)}{dz} \right| \ll 1, \quad k(Z) = \frac{1}{p} \sqrt{(V_p - V)^2 + \epsilon g (V_p - V)} \quad (21)$$

Las relaciones (20) y (21) conducen a la siguiente condición para la aplicabilidad de la aproximación de Thomas - Fermi generalizada

$$|Z| \gg \sqrt{\frac{L_D}{3 N_0^{1/3}}} \quad (22)$$

Para $E_g \neq 0$ sólo conocemos el comportamiento asintótico de $V(Z)$, por lo tanto esto, se puede estimar la región de aplicabilidad de la aproximación de Thomas-Fermi desarrollando $V(Z)$ alrededor de Z_p :

$$V(z) \approx V_p + \left(\frac{dV}{dz} \right)_{z=z_p} (z-z_p) \approx V_p - \frac{V_p - V_0}{L_D} (z-z_p) \quad (23)$$

donde por orden de magnitud $\left(\frac{dV}{dz} \right)_{z=z_p} \approx -\frac{V_p - V_0}{L_D} = -\frac{\mu n}{L_D}$

Además, para $z \rightarrow z_p$, $V \rightarrow V_p$ y, por tanto $R(z) \approx \frac{1}{p} \sqrt{\epsilon_0 (V_p - V)}$

Utilizando (21) y las relaciones anteriores se obtiene

$$|z - z_p| \gg \sqrt{\frac{p^2 L_D}{4 \mu \epsilon_0}} = \sqrt{\frac{\hbar^2 L_D}{8 \mu m^*}}, \text{ donde } m^* \text{ es}$$

la masa efectiva de los portadores de carga.

4. RESUMEN Y CONCLUSIONES

En el trabajo se ha obtenido, en los marcos del modelo de Kane de dos bandas, la ecuación generalizada de Thomas-Fermi y su primera integral. Esta ecuación fue obtenida en [13] en relación con el cálculo de la distribución de carga en las cercanías de un núcleo supercargado. En este trabajo el campo V tenía simetría esférica y se utilizó la ecuación de Dirac con $E_g = 2 m_0 c^2$.

En el presente trabajo se resolvió exactamente la ecuación de Thomas-Fermi para $E_g = 0$ y, para $E_g \neq 0$ se obtuvo una expresión para

el comportamiento asintótico de $V(z)$. Además de esto, se obtuvieron las longitudes de apantallamiento no lineal en función de la concentración de impurezas y de E_g .

En cuanto nos es conocido los resultados son nuevos, en especial la dependencia de L_D con E_g y la distribución de potencial para $E_g = 0$.

BIBLIOGRAFIA

1. W. Shockley, Bell Syst. Tech. J. 28-29, 435 (1949-1950)
2. T. W. Parsianov, H. I. Rekalova, A. A. Shajov, Izv. Leningr. Elektrotecn. Instituto, Tom 141, 80 (1947)
3. I. I. Ivanchik, Fiz Tverd. Tela 3, 103 (1961)
4. Oldwig von Ross, Phys. Rev. 16, 5405 (1977)
5. P. E. Zilberman, Fiz Tverd. Tela 5, 386 (1963)
6. E. O. Kane, Phys and chem. solids 1, 249 (1957)
7. V. L. Bonch - Bruevich, S. H. Kalashnikov, "Fizika peluprovodnikov", Nauka, Mosca, 1977.
8. Koetial, Tesis de Candidatura, Universidad Estatal de Moscú, 1974
9. A. S. Davydov, "Quantum Mechanics", Ed by D. Ter Haar, 1965.
10. Melquiades de Dios L. Tesis de Candidatura, Universidad Estatal de Moscú, 1979.
11. E. L. Helmont, W. I. Ivanov - Omski, J. M. Tsidilkovski, Usp. Fiz. Nauk, 120, 337 (1976)
12. L. D. Landau E. M. Lifshitz "Quantum Mechanics", Pergamon Press, 1962.
13. A. B. Migdal W. S. Popov, D. N. Voskresenski, Zh Eksp. Teor. Fis. 72, 824 (1977)