

Estructura metal-semiconductor-metal en equilibrio

F. Urbano Altamirano^a, O. Yu. Titov^b, y Yu. G. Gurevich^a

^aDepartamento de Física, CINVESTAV del I.P.N.,
Apartado Postal 14-740, 07000, Ciudad de México, México.

^bInstituto Mexicano del Petróleo,
Eje Central Lázaro Cárdenas 152, 07730, Ciudad de México, México.

Received 12 February 2020; accepted 5 May 2020

En este artículo se analiza el comportamiento de los portadores de carga eléctrica (electrones y huecos) en un material semiconductor con contactos metálicos bajo la condición de equilibrio termodinámico. Se obtuvieron expresiones para las concentraciones de los electrones y huecos, así como para el Radio de Debye (r_D) tanto en el caso general bipolar, como para los casos particulares de materiales tipo n , p e intrínseco. Con base a las expresiones anteriores se analiza el caso cuando aparece el fenómeno de cuasineutralidad en un material semiconductor.

Descriptor: Portadores de carga; contacto metal-semiconductor; cuasineutralidad.

This article analyzes the behavior of electric charge carriers (electrons and holes) in a semiconductor material with metal contacts under the thermodynamic equilibrium condition. Expressions were obtained for the concentrations of the electrons and holes, as well as for the Debye Radius (r_D) both in the general bipolar case, and in the particular cases of n , p and intrinsic type materials. Based on the previous expressions, the case is analyzed when the quasi-neutrality phenomenon appears in a semiconductor material.

Keywords: Charge doolie; metal-semiconductor contact; quasi neutrality.

PACS: 72.20. Jv; 73.40. Vz

DOI: <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.66.559>

1. Introducción

Los dispositivos semiconductores son la base de la electrónica actual, por lo que es de suma importancia comprender todos los fenómenos que ocurren en dichos dispositivos. Para comprender los fenómenos físicos asociados con el flujo de corriente eléctrica y térmica en una estructura semiconductor, es muy importante comprender el establecimiento del equilibrio termodinámico en ella [1-7], en especial en las estructuras metal-semiconductor pues son el tipo de contactos que aparecen en los dispositivos referidos [1,2]. Sin embargo, en la literatura actual no hay una descripción detallada de dicho fenómeno en dichas estructuras siendo esa la motivación principal del presente artículo. En equilibrio termodinámico, en los materiales semiconductores, la relación entre la carga y campo eléctrico está dada por la ecuación de Poisson, y asociada a la solución de dicha ecuación aparece el radio de Debye (r_D) para dichos materiales [5-7]. A su vez, el radio de Debye nos permite establecer si un material presenta el fenómeno de cuasineutralidad cuando se cumple la relación $r_D^2 \ll L^2$ donde L es la longitud del material [8-11]. En el fenómeno de cuasineutralidad, después del contacto entre semiconductor y metal, la redistribución de cargas eléctricas dentro del semiconductor sólo se da en las primeras capas del material, que son del orden de r_D , y la diferencia de la nueva concentración de cargas volumétricas es tan pequeña respecto a la distribución de cargas original y en equilibrio que ya no es necesario resolver la ecuación de Poisson con condiciones de frontera, puesto que la densidad de carga volumétrica ρ se aproxima a cero ($\rho \approx 0$), y con ello dicha ecuación pasa de ser una ecuación diferencial a una ecuación algebraica [11].

La cuasineutralidad no es una técnica analítica de simplificación para obtener una solución analítica bien comportada. Es más bien un mecanismo fundamental físico con su propia manifestación. La cuasineutralidad es, p. ej., la causa por la que se forma una región cuasineutral en la inyección de portadores minoritarios en el equilibrio de las corrientes de difusión-arrastre [12,13], entre otros numerosos ejemplos posibles [13,14]. Enfatizamos que los portadores en corrientes fuera de equilibrio pueden moverse únicamente si dichos portadores forman un paquete cuasineutral [13]. En este caso, se manifestarán la difusión y arrastre ambipolar [13,5]. Desafortunadamente, muchos autores ([13]) reducen la aproximación de cuasineutralidad a la igualdad de concentración fuera de equilibrio de electrones y huecos, visión que es, en general, incorrecta y se mostrara más adelante. Los materiales semiconductores se clasifican en 3 tipos: material intrínseco en el que en todos los puntos del material la concentración n de electrones de conducción es igual a la concentración p de huecos de valencia ($n = p$); los materiales tipo n en los que el número de impurezas donadoras N_d es muy grande y el de impurezas aceptoras N_a es igual a cero ($N_a = 0$) por lo que, a temperaturas ambiente, en el material la concentración $n \gg p$; por último, están los materiales tipo p en los que el número de impurezas aceptoras N_a es muy grande y el de impurezas donadoras N_d es igual a cero ($N_d = 0$) por lo que a temperaturas ambiente en el material la concentración $p \gg n$.

Un muy importante parámetro en la estructura metal-semiconductor es la función de trabajo χ de un material, la cual se define como la distancia entre el nivel de Fermi μ del

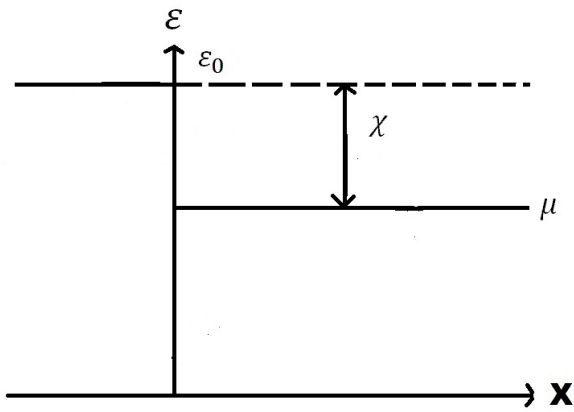


FIGURA 1. Función de trabajo χ en la frontera entre un material metálico y el vacío.

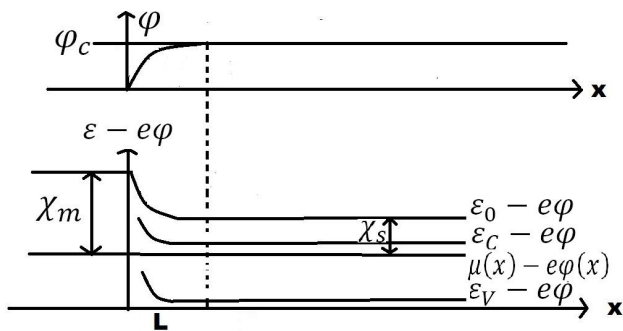


FIGURA 2. Diagrama de bandas para el caso del contacto metal-semiconductor tipo n , $\chi_m > \chi_s$. L es la longitud de la capa de agotamiento.

material y el nivel de energía de los electrones en reposo en el vacío y se denota por ϵ_0 (ver Fig. 1).

La función de trabajo representa la cantidad de energía que es necesaria para extraer un electrón de una estructura [6,11]. Al momento de producirse un contacto metal-semiconductor, se produce un potencial de contacto φ_C (build-in electric field) proporcional a la diferencia de las funciones de trabajo de ambos materiales y se pueden dar dos escenarios: 1) si la función de trabajo del metal χ_m es mayor al del semiconductor χ_s ($\chi_m > \chi_s$) pueden pasar dos situaciones, si el semiconductor es un material tipo n entonces del lado del semiconductor la concentración n de electrones de conducción en la interfaz será menor a la concentración n_0 de electrones lejos de la unión, formándose en el semiconductor la capa de agotamiento (ver Fig. 2), mientras que si el semiconductor es un material tipo p la concentración de huecos p cerca de la unión es mayor a la concentración de huecos p_0 lejos de la unión y se forma una capa enriquecida; 2) si la función de trabajo del metal χ_m es menor al del semiconductor χ_s ($\chi_m < \chi_s$) y el semiconductor es tipo n entonces del lado del semiconductor la concentración n de electrones de conducción en la interfaz será mayor a la concentración n_0 de electrones lejos de la unión, y se forma la capa enriquecida, pero si el semiconductor es tipo p se forma una capa de agotamiento pues la concentración p de la unión es menor a la

concentración p_0 en el resto del material. En todo este proceso juega un papel importante el efecto termoiónico, en el cual los electrones obtienen una energía mayor a la barrera de energía alrededor del material y pueden salir del cristal [11]. Una descripción más amplia y detallada de lo anteriormente expuesto se puede encontrar en [1,11].

La estructura del presente artículo es el siguiente: en la Sec. 2 se hizo un análisis de un material semiconductor bipolar sin contactos, se presentan los conceptos de niveles de Fermi para electrones de conducción y huecos de valencia (μ_n y μ_p , respectivamente), las expresiones matemáticas que las definen, así como su relación con la concentración de dichas cuasipartículas. En la Sec. 3 se realizó el análisis del material semiconductor bipolar con contactos metálicos en sus extremos que corresponde al caso de un circuito cerrado. Se soluciona la ecuación de Poisson para dicho caso general y se obtiene una expresión general para r_D , para posteriormente hacer análisis particulares de los materiales tipo n , p e intrínseco. En la Sec. 4 se estudió el fenómeno de cuasineutralidad en los sistemas anteriormente analizados. En la Sec. 5 se presentan las conclusiones.

2. Semiconductor Bipolar sin contactos metálicos

El electrón de conducción es la cuasipartícula que representa a los electrones que han ocupado estados en la banda de conducción, teniendo un comportamiento similar al de una partícula libre y con una masa efectiva m_n positiva pero diferente a la del electrón libre [11]. La función de distribución de dicha cuasipartícula obedece la distribución Fermi-Dirac, y está dada en términos de la energía E por la expresión

$$f_0(E) = \left[\exp\left(\frac{E - \mu_n}{T}\right) + 1 \right]^{-1}, \tag{1}$$

en donde μ_n es el potencial químico (nivel de Fermi) y T la temperatura en unidades de energía. La concentración de dichas cuasipartículas por unidad de volumen está dada por la expresión

$$n = v_n \exp(\mu_n^*), \tag{2}$$

donde v_n es la concentración de estados por unidad de volumen en la base de la banda de conducción y es igual a $v_n = (1/4)(2m_n T/\pi\hbar^2)^{3/2}$, y $\mu_n^* = \mu_n/T$. En el modelo de bandas a la parte inferior de la banda de conducción se le asigna el nivel de energía cero del sistema por lo que $\mu_n < 0$ (Fig. 3).

Los huecos de valencia son las cuasipartículas que representan a los estados cuánticos libres que aparecen debido al movimiento de electrones en la banda de valencia. La función de distribución para dicha cuasipartícula también obedece a la distribución Fermi-Dirac y es igual a

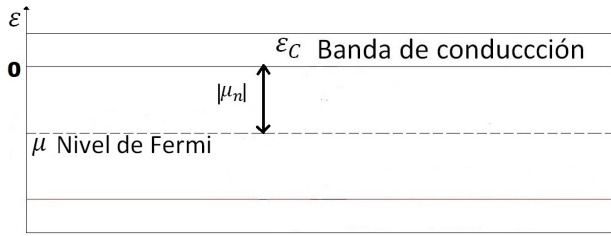


FIGURA 3. Niveles de energía para electrones de conducción.

$$f'_0(E) = \left[\exp\left(\frac{\mu - E}{T}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad (3)$$

y la relación entre $f_0(E)$ y $f'_0(E)$ es $f'_0(E) = 1 - f_0(E)$. Una forma alternativa a la Ec. (3) se obtiene al introducir la energía de hueco $E' = -E - E_g$ donde E_g (banda prohibida del material) es la distancia entre las bandas de valencia y conducción del material, y el potencial de hueco μ_p que es igual a $\mu_p = -\mu_n - E_g$. La Ec. (3) toma la forma

$$f'_0(E') = \left[\exp\left(\frac{E' - \mu_p}{T}\right) + 1 \right]^{-1}. \quad (4)$$

En el nuevo sistema de referencia de E' la energía se mide desde la banda de valencia y en dirección hacia abajo por lo que $\mu_p < 0$. La concentración de huecos por unidad de volumen es igual a

$$p = v_p \exp(\mu_p^*), \quad (5)$$

donde v_p es la concentración de estados por unidad de volumen en la banda de valencia y es igual a $v_p = (1/4)(2m_p T / \pi \hbar^2)^{3/2}$ y $\mu_p^* = \mu_p / T$.

En la Figs. 3 y 4 se muestra un esquema de las bandas de conducción y valencia de un material semiconductor, así como su banda prohibida asociada. De dicha gráfica se observa que $\mu_n + \mu_p = -E_g$. Además la gráfica muestra un material intrínseco en el que no hay impurezas $N_d = N_a = 0$ y en donde la concentración de electrones n y huecos p es la misma en todos los puntos del material ($n = p = n_i$) donde n_i se conoce como concentración intrínseca. En la Ref. 11 se demuestra que $n_i^2 = v_n v_p \exp(E_g / T)$.

Sea un material semiconductor bipolar, esto quiere decir que esta dopado dicho material tanto con impurezas aceptoras N_a , como con impurezas donadoras N_d . Para el siguiente análisis se considera al material sin contactos metálicos

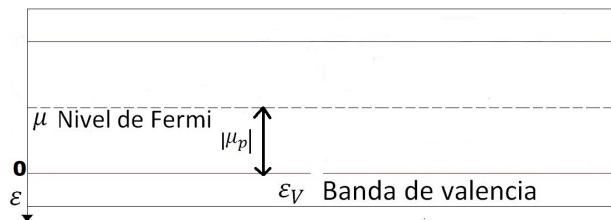


FIGURA 4. Niveles de energía para huecos de valencia.

(circuito abierto). Si el material se encuentra en equilibrio termodinámico, se cumple la condición de neutralidad electrónica la cual puede expresarse como

$$n + N_a - p_a = p + N_d - n_d, \quad (6)$$

en donde n_d es la concentración de electrones a nivel donador y p_a es la concentración de huecos en el nivel aceptor. En [11] se expresan las expresiones para dichas concentraciones son iguales a

$$n_d = \frac{N_d}{1 + \frac{1}{2} \exp(-\mu_n^* - E_d^*)}, \quad (7)$$

$$p_a = \frac{N_a}{1 + 2 \exp(\mu_n^* + E_a^*)}, \quad (8)$$

donde $E_d^* = E_d / T$, $E_a^* = E_a / T$. A su vez E_d , E_a , son los niveles de energía donador y aceptor respectivamente y si cumplen con la condición $E_d \ll E_g$, $|E_v + E_g| \ll E_g$ (esto es, dichos niveles están dentro de la banda prohibida) se les conoce como niveles rasantes. En la Fig. 5 se muestra esquemáticamente dicha situación.

La Ec. (6) es una ecuación que está completamente en términos de μ_n^* pero su solución analítica es imposible de encontrar, por lo que se toman los casos límites más interesantes.

Ahora se analiza el caso de los materiales tipo intrínseco, n , y p a bajas y altas temperaturas.

En el caso del material intrínseco las concentraciones $n = p$ (las cuales se pueden denotar como n_i , p_i) y al no existir impurezas en dicho material ($N_a = 0$, $N_d = 0$) también $p_a = 0$, $n_d = 0$. En la Ref. 11 se demuestra que para cualquier temperatura T el valor de μ_n^* esta dado por la expresión $\mu_n^* = -(\varepsilon_g / 2T) + (3/4) \ln(m_p / m_n)$ donde m_p , m_n son las masas efectivas de los huecos de valencia y electrones de conducción respectivamente. A cualquier temperatura es válida la doble igualdad $n_p = n_i^2 = v_n v_p \exp(E_g / T)$ donde n , p son las concentraciones de electrones y huecos para cualquier semiconductor dopado.

En un material tipo n se tiene $N_a = 0$, $N_d \neq 0$ y la ecuación de neutralidad electrónica toma la forma

$$n = p + N_d - n_d. \quad (9)$$

A una temperatura no muy alta, no hay transición de electrones de la banda de valencia a la banda de conducción, los

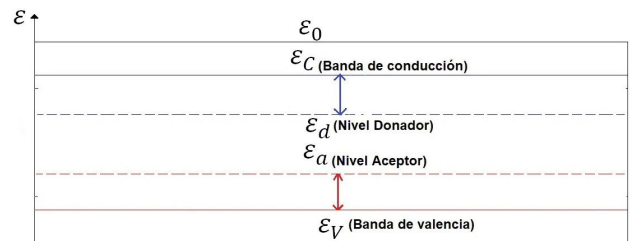


FIGURA 5. Niveles de energía para semiconductor dopado con niveles rasantes de energía.

únicos electrones que pasan a banda de conducción provienen del nivel donador por lo que $n \gg p$ y sustituyendo las Ecs. (2) y (7) en Ec. (9) se obtiene la expresión

$$v_n \exp(\mu_n^*) = \frac{N_d}{1 + 2 \exp(\mu_n^* + E_d^*)}. \quad (10)$$

Calcular μ_n^* a partir de dicha expresión es complicado pues se tiene que resolver una ecuación algebraica en términos de $\exp(\mu_n^*)$ por lo que se consideraran casos límites de la temperatura que nos ayudaran a simplificar los cálculos. Primero se considera el caso de muy bajas temperaturas donde hay un mínimo de transiciones de electrones entre el nivel donador hacia la banda de conducción. En dicho régimen de temperatura se cumple la desigualdad

$$2 \exp(\mu_n^* + E_d^*) \gg 1, \quad (11)$$

y aplicando la desigualdad de la Ec. (11) en Ec. (10) se obtiene la siguiente expresión para μ_n a muy bajas temperaturas

$$\mu_n = -\frac{E_d}{2} + \frac{T}{2} \ln \left(\frac{N_d}{v_n} \right). \quad (12)$$

Sustituyendo el valor de μ_n obtenido en la Ec. (12) en la Ec. (2), se obtiene la concentración n para electrones de conducción en el material a muy bajas temperaturas

$$n = \left[\frac{N_d v_n}{2} \right]^{1/2} \exp \left(-\frac{E_d}{2T} \right). \quad (13)$$

Ahora se analiza el caso a una temperatura T más alta, tal que sólo haya transiciones de electrones del nivel donador a la banda de conducción pero no haya transiciones de la banda de valencia a la de conducción. En dicho caso se cumple la desigualdad

$$2 \exp(\mu_n^* + E_d^*) \ll 1, \quad (14)$$

y a partir de dicha desigualdad se puede obtener de la Ec. (10) la siguiente expresión para μ

$$\mu_n = T \ln \left(\frac{N_d}{v_n} \right), \quad (15)$$

y sustituyendo la Ec. (15) en la Ec. (2) se obtiene el siguiente resultado para la concentración de electrones a temperaturas intermedias donde solo hay transiciones del nivel donador a la banda de conducción:

$$n = N_d, \quad (16)$$

donde cabe notar que en la Ec. (16) n no depende de la temperatura.

Ahora se analiza un material tipo p; en dicho material $N_a \neq 0$, $N_d = 0$ y la ecuación de neutralidad electrónica toma la forma

$$p = n + N_a - p_a. \quad (17)$$

A bajas temperaturas no hay transición de electrones de la banda de valencia a la banda de conducción, los únicos electrones que pasan a banda de valencia provienen del nivel aceptor por lo que $p \gg n$ y sustituyendo las Ecs. (5) y (8) en (17) se obtiene la expresión

$$v_p \exp(\mu_p^*) = \frac{2N_a}{2 + 2 \exp(\mu_p^* + E_g^* - E_a^*)}. \quad (18)$$

Al igual que para el análisis del material tipo n, se tomaran casos límite de temperatura para simplificar los cálculos de μ_p . Para el caso de muy bajas temperaturas hay un mínimo de transiciones de electrones de la banda de valencia hacia el nivel aceptor. En ese rango de temperaturas se cumple la desigualdad

$$\frac{1}{2} \exp(\mu_p^* + E_g^* - E_a^*) \gg 1. \quad (19)$$

A partir de dicha desigualdad se puede obtener de la Ec. (18) la siguiente expresión para μ_p :

$$\mu_p = -\left[\frac{E_g + E_a}{2} - \frac{T}{2} \ln \left(\frac{2N_a}{v_p} \right) \right] + E_g, \quad (20)$$

y sustituyendo en la Ec. (5) se obtiene la siguiente expresión para la concentración de huecos de valencia:

$$p = [2N_a v_p]^{1/2} \exp \left(\frac{E_a - E_g}{2T} \right). \quad (21)$$

Ahora se analiza el caso donde las temperaturas son lo suficientemente altas para que haya transiciones electrónicas de la banda de valencia a los niveles aceptores de energía pero no tan altas como para que haya transiciones de la banda de valencia a la banda de conducción. En dicho régimen se cumple la desigualdad

$$\frac{1}{2} \exp(\mu_p^* + E_g^* - E_a^*) \ll 1, \quad (22)$$

y de la Ec. (18) se obtiene la siguiente fórmula para μ_p ;

$$\mu_p = T \ln \left(\frac{N_a}{v_p} \right), \quad (23)$$

y sustituyendo en la Ec. (5) se obtiene la expresión para la concentración de huecos de valencia en este régimen de temperaturas

$$p = N_a, \quad (24)$$

que al igual que la Ec. (16) tampoco depende de la temperatura.

Finalmente dos comentarios: a) para el caso de muy altas temperaturas tanto el semiconductor tipo n, como el tipo p, presentan un comportamiento similar al del semiconductor intrínseco [11]; b) Por otra parte, en la Ref. [16] se muestra que una clase bastante grande de materiales semiconductores con estructuras cristalinas sueltas (tipo $\ln_2 Te_3$), tienen específicamente una alta estabilidad a la radiación. En la misma investigación se muestra que las impurezas en esos materiales semiconductores se deben a latitudes vacíos en estados atómicos no ionizados y consecuentemente es imposible crear conductividades de tipo p o n en dichos semiconductores.

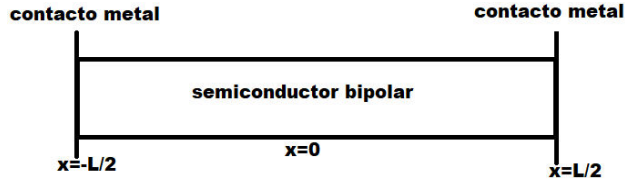


FIGURA 6. Semiconductor bipolar de tamaño L con contactos metálicos en sus extremos.

3. Semiconductor Bipolar con contactos metálicos

Ahora se analiza a un semiconductor bipolar con contactos metálicos en sus extremos, lo que corresponde al caso de un circuito cerrado. En la Fig. 6 se muestra el diagrama de dicho sistema, el cual tiene un tamaño L .

Los términos de concentración de portadores debido al intercambio de electrones entre el metal y el semiconductor toman la forma

$$\begin{aligned} p &= p(x) = p_0 + \delta p_0(x), \\ n &= n(x) = n_0 + \delta n_0(x), \\ n_d &= n_d(x) = n_d^0 + \delta n_d^0(x), \\ p_a &= p_a(x) = p_a^0 + \delta p_a^0(x), \end{aligned} \quad (25)$$

donde p_0, n_0, n_d^0, p_a^0 son las concentraciones de portadores en equilibrio antes del contacto metal- semiconductor y cuyas expresiones son iguales a las vistas en la sección pasada (Ecs. (2), (5), (7) y (8) respectivamente). Dichas concentraciones cumplen con la condición de neutralidad eléctrica dada en la Ec. (6) y $\delta p_0(x), \delta n_0(x), \delta n_d^0(x), \delta p_a^0(x)$ son las variaciones en las concentraciones de los portadores después de la unión metal-semiconductor. Notar que en el nuevo sistema las concentraciones dependen de la posición x . La ecuación de Poisson es igual a

$$-\frac{d^2\varphi}{dx^2} = 4\pi e(p + N_d - n_d - n - N_a + P_a), \quad (26)$$

donde $\varphi = \varphi(x) = \varphi_0 + \delta\varphi_0(x)$ siendo φ_0 el potencial de contacto que aparece entre metal y semiconductor y $e = -1.6 \times 10^{-19}$ C (carga eléctrica del electrón). Después de establecida la unión entre metal y semiconductor la condición de equilibrio termodinámico es igual a la igualdad del nivel de Fermi a ambos lados del contacto. El nuevo nivel de potencial químico $\mu_n(x) = \mu_n^0 + \delta\mu_n^0(x)$ también depende de la posición. Por la condición de igualdad del potencial electroquímico (nivel de Fermi, $\tilde{\mu} = \mu - e\varphi$) en [11,14] se demuestra que el potencial de contacto φ_0 es igual a

$$\varphi_0 = \frac{1}{e}(\mu_n^0 - \mu_m - \Delta E_C), \quad (27)$$

donde φ_0 no depende de x , μ_m es el nivel de Fermi del metal y ΔE_C es la diferencia entre la base de la banda de conducción del metal y la base de la banda de conducción del semiconductor. En la Fig. 7 se muestra la situación de equilibrio termodinámico en el contacto metal semiconductor.

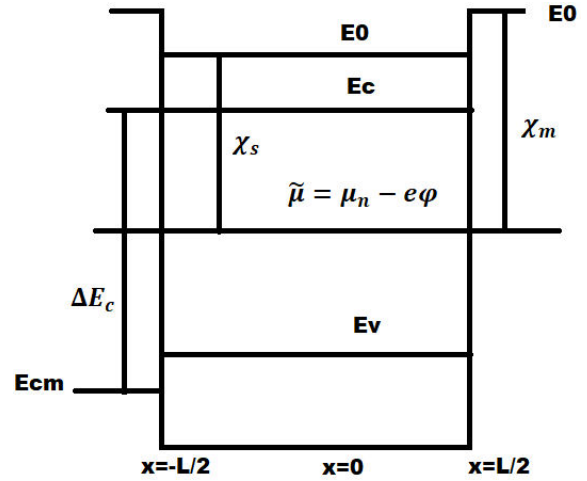


FIGURA 7. Diagrama de energía del estado de equilibrio termodinámico en un contacto metal- semiconductor en condición de cuasineutralidad. E_{cm} es la energía de la base de conducción del metal.

Para el resto del análisis se considera la aproximación lineal en la que $\chi_s \approx \chi_m$, y dado que $\chi_s - \chi_m = \mu_m - \mu_n$ (ver Ref. 11) se puede considerar que la variación del nivel de Fermi respecto al equilibrio es muy pequeña por lo que $\delta\mu_n(x)/T \ll 1$. Si se sustituye $\mu_n(x) = \mu_n^0 + \delta\mu_n(x)$ en la Ec. (2) y se toma la primera aproximación se obtiene

$$n(x) = n_0 \left[1 + \frac{\delta\mu_n(x)}{T} \right], \quad (28)$$

y de manera similar si se sustituye $\mu_p(x) = \mu_p^0 + \delta\mu_p^0(x)$ en la Ec. (5) y se toma la primera aproximación para $p(x)$ se obtiene

$$p(x) = p_0 \left[1 + \frac{\delta\mu_p(x)}{T} \right]. \quad (29)$$

De la condición $\mu_n + \mu_p = -E_g$, la cual siempre se cumple (tanto antes como después de establecido el contacto entre materiales), se obtiene $\delta\mu_n(x) = -\delta\mu_p(x)$. Por tanto el valor de $\delta p_0(x), \delta n_0(x)$ será igual a

$$\delta p_0(x) = -\frac{p_0}{T} \delta\mu_n(x), \quad (30)$$

$$\delta n_0(x) = \frac{n_0}{T} \delta\mu_n(x). \quad (31)$$

De manera similar, si se sustituye $\mu_n(x) = \mu_n^0 + \delta\mu_n(x)$ en las Ecs. (7) y (8), se toman las primeras aproximaciones y después se hacen algunas manipulaciones algebraicas se obtienen las siguientes expresiones para $\delta p_a^0(x), \delta n_d^0(x)$

$$\delta p_a^0(x) = \frac{p_a^0}{T} \left[\frac{-2 \exp\left(\frac{\mu_n^0 + E_a}{T}\right)}{1 + 2 \exp\left(\frac{\mu_n^0 + E_a}{T}\right)} \right] \delta\mu_n(x), \quad (32)$$

$$\delta n_d^0(x) = \frac{n_d^0}{T} \left[\frac{\exp\left(\frac{-\mu_n^0 - E_d}{T}\right)}{2 + \exp\left(\frac{-\mu_n^0 - E_d}{T}\right)} \right] \delta\mu_n(x). \quad (33)$$

Tomando en cuenta que $(d^2\varphi/dx^2) = (d^2\delta\varphi/dx^2)$ puesto que φ_0 no depende de x , sustituyendo en la ecuación de Poisson de la Ec. (26) las Ecs. (30)-(33) y tomando en cuenta la condición de neutralidad dada por la Ec. (6) se obtiene

$$\frac{d^2\delta\varphi}{dx^2} = ek^2\delta\mu_n(x) \tag{34}$$

donde k^2 es igual a

$$k^2 = \frac{4\pi}{T} \left[n_0 + p_0 + p_a^0 \left[\frac{2 \exp\left(\frac{\mu_n^0 + E_a}{T}\right)}{1 + 2 \exp\left(\frac{\mu_n^0 + E_a}{T}\right)} \right] + n_d^0 \left[\frac{\exp\left(\frac{-\mu_n^0 - E_d}{T}\right)}{2 + \exp\left(\frac{-\mu_n^0 - E_d}{T}\right)} \right] \right] \tag{35}$$

Al estar en equilibrio termodinámico, el sistema no presenta corriente eléctrica por lo que se cumple la condición $\delta\mu_n(x) - e\delta\varphi = c$, donde c es una constante [11]; derivando dos veces ambos lados de dicha ecuación se obtiene la igualdad

$$\frac{d^2\delta\mu_n(x)}{dx^2} = e \frac{d^2\delta\varphi}{dx^2}$$

y sustituyendo la anterior condición en la Ec. (34) se obtiene

$$\frac{d^2\delta\mu_n(x)}{dx^2} = (ek)^2\delta\mu_n(x). \tag{36}$$

La Ec. (36) es una ecuación diferencial lineal de segundo orden con coeficientes constantes cuya solución se puede encontrar asociando una ecuación algebraica con los mismos coeficientes de la ecuación diferencial original [17]. La solución $\delta\mu_n(x)$ de la Ec. (36) está dada por la expresión

$$\delta\mu_n(x) = C_1 \exp(ekx) + C_2 \exp(-ekx)$$

y sustituyendo en la condición $\delta\mu_n(x) - e\delta\varphi = c$ se obtiene

$$\delta\varphi(x) = \frac{1}{e} [C_1 \exp(ekx) + C_2 \exp(-ekx)] + C.$$

Para el cálculo de C , C_1 y C_2 se ocupan las siguientes condiciones de frontera que representan la continuidad de los potenciales eléctricos φ y electroquímicos $\tilde{\varphi}$ en los contactos $x = \pm(L/2)$:

$$\begin{aligned} \pm\delta\varphi\left(\pm\frac{L}{2}\right) \mp \frac{1}{e} \left[\delta\mu_n\left(\pm\frac{L}{2}\right) \right] \\ = \pm\varphi_0\delta\varphi\left(\pm\frac{L}{2}\right) = 0. \end{aligned}$$

A partir de dichas condiciones de frontera, se obtienen las siguientes expresiones para $\delta\mu_n(x)$, $\delta\varphi(x)$

$$\delta\mu_n(x) = -\varphi_0 e \frac{\cos h(ekx)}{\cos h\left(\frac{ekL}{2}\right)}, \tag{37}$$

$$\delta\varphi(x) = \varphi_0 \left[1 - \frac{\cos h(ekx)}{\cos h\left(\frac{ekL}{2}\right)} \right]. \tag{38}$$

Una vez obtenidas dichas expresiones y recordando la relación entre el radio de Debye r_D y el potencial eléctrico φ que aparece en [5,6] se puede escribir la ecuación

$$\frac{d^2\delta\varphi(x)}{dx^2} = \frac{\delta\varphi(x)}{r_D^2}, \tag{39}$$

y al sustituir la Ec. (38) en la Ec. (39), se encuentra que el valor de r_D es igual a

$$r_D = \frac{1}{ek}. \tag{40}$$

Sustituyendo la Ec. (35) en la Ec. (40) se obtiene

$$r_D = \frac{T^{1/2}}{\sqrt{4\pi e^2 \left[n_0 + p_0 + p_a^0 \left[\frac{2 \exp\left(\frac{\mu_n^0 + E_a}{T}\right)}{1 + 2 \exp\left(\frac{\mu_n^0 + E_a}{T}\right)} \right] + n_d^0 \left[\frac{\exp\left(\frac{-\mu_n^0 - E_d}{T}\right)}{2 + \exp\left(\frac{-\mu_n^0 - E_d}{T}\right)} \right] \right]}}, \tag{41}$$

y las soluciones $\delta\mu_n(x)$, $\delta\varphi(x)$ toman la forma

$$\delta\mu_n(x) = -\varphi_0 e \frac{\cos h\left(\frac{x}{r_D}\right)}{\cos h\left(\frac{L}{2r_D}\right)}, \tag{42}$$

$$\delta\varphi(x) = \varphi_0 \left[1 - \frac{\cos h\left(\frac{x}{r_D}\right)}{\cos h\left(\frac{L}{2r_D}\right)} \right]. \tag{43}$$

3.1. Semiconductor tipo n

Ahora se considerará el caso del material tipo n, en el cual $N_a = 0$, $N_d \neq 0$ y de las Ecs. (7) y (8) se tiene que $p_a = 0$, $n_d \neq 0$ por lo que la Ec. (41) toma la forma

$$r_D = \frac{T^{1/2}}{\sqrt{4\pi e^2 \left[n_0 + n_d^0 \left[\frac{\exp\left(\frac{-\mu_n^0 - E_d}{T}\right)}{2 + \exp\left(\frac{-\mu_n^0 - E_d}{T}\right)} \right] \right]}}, \tag{44}$$

Ahora considérese los casos de muy baja temperatura donde casi no hay transiciones electrónicas y temperatura donde sólo se dan las transiciones electrónicas de nivel donador a banda de conducción.

Muy bajas temperaturas

De la Sec. 2 se tiene que, a muy bajas temperaturas, para el material tipo n se cumple la desigualdad de la Ec. (11), si se aplica dicha desigualdad a la concentración n_d^0 dada por la Ec. (7) se obtiene la expresión

$$n_d^0 = N_d. \tag{45}$$

Por otra parte, si se sustituye el valor de μ_n^0 dada por la Ec. (12) en la desigualdad de la Ec. (11) se puede demostrar que dicha desigualdad toma la forma

$$(N_d)^{1/2} \gg \exp\left[\frac{-E_d}{2T}\right] \left(\frac{v_n}{2}\right)^{1/2}. \tag{46}$$

Notar que la parte derecha de la desigualdad en la Ec. (46) es igual a $n_0/(N_d)^{1/2}$ (ver Ec. (13)) y, tomando en cuenta la Ec. (45), se puede establecer la siguiente desigualdad:

$$n_0 \ll n_d^0. \tag{47}$$

Sustituyendo las expresiones de n_0 , n_d^0 y aplicando las desigualdades dada por las Ecs. (11) y (46) sobre los términos de la Ec. (44) obtenemos la siguiente ecuación para r_D :

$$r_D = \frac{T^{1/2}}{\sqrt{8\pi e^2 (N_d)^{1/2} \left(\frac{v_n}{2}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{-E_d}{2T}\right]}}. \tag{48}$$

Temperaturas intermedias

Por temperaturas intermedias entiéndase aquellas en las que sólo se da la transición electrónica entre el nivel donador y la banda de conducción. A dichas temperaturas se cumple la desigualdad de la Ec. (14). Sustituyendo la Ec. (15) en ésta última se obtiene

$$N_d \ll \frac{v_n}{2} \exp\left[\frac{-E_d}{T}\right]. \tag{49}$$

Aplicando la desigualdad de la Ec. (14) a la Ec. (7) para la concentración n_d^0 se obtiene la desigualdad $n_d^0 \ll N_d$ y como de la Ec. (16) se tiene que $n_0 = N_d$ para este rango de temperaturas, se cumple la siguiente desigualdad

$$N_d \ll n_0. \tag{50}$$

Sustituyendo las expresiones de n_0 , n_d^0 y aplicando las desigualdades en las Ecs. (14), (49) y (50) sobre los términos de la Ec. (44) obtenemos la siguiente ecuación para r_D :

$$r_D = \frac{T^{1/2}}{\sqrt{4\pi e^2 N_d}}. \tag{51}$$

3.2. Semiconductor tipo p

Ahora se considerará el caso del material tipo p, en el cual $N_a \neq 0$, $N_d = 0$ y de las Ecs. (7) y (8) se tiene que $p_a \neq 0$, $n_d = 0$ por lo que la Ec. (41) toma la forma

$$r_D = \frac{T^{1/2}}{\sqrt{4\pi e^2 \left[p_0 + p_a^0 \left[\frac{2 \exp\left(\frac{\mu_n^0 + E_a}{T}\right)}{1 + 2 \exp\left(\frac{\mu_n^0 + E_a}{T}\right)} \right] \right]}}. \tag{52}$$

Ahora considérese los casos de muy baja temperatura donde casi no hay transiciones electrónicas y temperaturas donde solo se dan las transiciones electrónicas de banda de valencia a nivel aceptor.

Muy bajas temperaturas

De la Sec. 2 se tiene que, a muy bajas temperaturas, para el material tipo p se cumple la desigualdad dada por la Ec. (19), aplicando dicha desigualdad a la Ec. (8) para la concentración p_a^0 se obtiene la ecuación

$$p_a^0 = N_a. \tag{53}$$

Por otra parte, sustituyendo la Ec. (20) en la desigualdad (19) es posible llegar a la siguiente desigualdad:

$$N_a^{1/2} \gg (2v_p)^{1/2} \exp\left[\frac{E_a - E_g}{2T}\right]. \tag{54}$$

Notar que la parte derecha de la ecuación anterior es igual a $p_0/(N_a)^{1/2}$ (revisar Ec. (21)), y tomando en cuenta la Ec. (53) se obtiene la desigualdad

$$p_0 \ll p_a^0. \tag{55}$$

Sustituyendo las expresiones de p_0 , p_a^0 y aplicando las condiciones en las Ecs. (19) y (54) sobre los términos de la Ec. (52) se obtiene la ecuación

$$r_D = \frac{T^{1/2}}{\sqrt{8\pi e^2 (2N_a v_p)^{1/2} \exp\left[\frac{E_a - E_g}{2T}\right]}}. \tag{56}$$

Temperaturas intermedias

Por temperaturas intermedias entiéndase por aquellas en las que sólo se da la transición electrónica entre la banda de valencia y el nivel aceptor. En dicho régimen de temperaturas se cumple la desigualdad de la Ec. (22). Sustituyendo la Ec. (23) en esta última, se obtiene la siguiente expresión

$$2v_p \exp\left[\frac{E_a - E_g}{T}\right] \gg N_a. \tag{57}$$

De la desigualdad en la Ec. (57) y de la Ec. (8) se tiene que $p_a^0 \ll N_a$, y de la Ec. (24) que establece que $p_0 = N_a$ se obtiene la siguiente desigualdad

$$p_a^0 \ll p_0. \tag{58}$$

Aplicando las desigualdades de las Ecs. (22), (57) y (58) a cada término de la Ec. (52) se obtiene la expresión para r_D

$$r_D = \frac{T^{1/2}}{\sqrt{4\pi e^2 N_a}}. \quad (59)$$

3.3. Semiconductor intrínseco

Por último se considera el caso de un material intrínseco el cual en todos los puntos $n = p$ y $N_a = 0$, $N_d = 0$ por tanto $p_a = 0$, $n_d = 0$. La Ec. (41) toma la siguiente forma para el caso intrínseco:

$$r_D = \frac{T^{1/2}}{\sqrt{8\pi e^2 n_0}}. \quad (60)$$

4. Fenómeno de cuasineutralidad en estructuras metal-semiconductor-metal

La cuasineutralidad es la condición en la cual la redistribución de cargas debido a alguna alteración del equilibrio es tan pequeña la nueva distribución de carga es prácticamente similar a la que se tenía originalmente. De acuerdo a [11], dicha condición se cumple si

$$r_D^2 \ll L^2. \quad (61)$$

Mientras que si $L^2 \gg r_D^2$, entonces se presenta una redistribución de los portadores de carga bastante significativa. Para el caso que nos ocupa, se evalúan las expresiones para $\delta\mu_n(x)$, $\delta\varphi(x)$ dadas en las Ecs. (42) y (43) con la desigualdad de la Ec. (61) y se obtienen los límites $\delta\varphi(x) \rightarrow \varphi_0$, $\delta\mu_n(x) \rightarrow 0$ y por tanto las variaciones en la concentración de todos los portadores $\delta p_0(x)$, $\delta n_0(x)$, $\delta n_d^0(x)$, $\delta p_a^0(x)$ también tienden a cero pues en la Sec. 3 se demostró que todas son proporcionales a $\delta\mu_n(x)$. Lo anterior implica que en cuasineutralidad se tiene una carga volumétrica total $\rho \approx 0$ y un potencial φ_0 que es constante en todo el material excepto en la unión metal semiconductor donde se presenta una discontinuidad debido a que $\varphi = 0$ en el metal. Diferentes perfiles de $\delta\varphi(x)$ para distintos casos de la relación L/r_D , incluyendo el caso de cuasineutralidad antes discutido, se presentan en la Fig. 8.

La condición de cuasineutralidad para un material tipo n a muy bajas temperaturas se obtiene al sustituir la ecuación

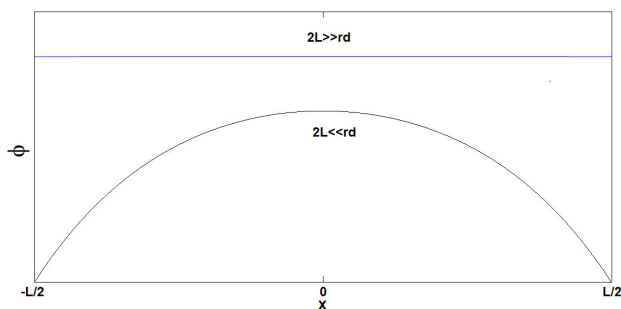


FIGURA 8. Dos distribuciones de $\varphi(x)$. La primera corresponde al caso de cuasineutralidad ($2L \gg r_D$) donde $\varphi(x) = \varphi_0$ y segundo caso sin cuasineutralidad ($2L \ll r_D$).

para r_D^2 de la Ec. (48) en la desigualdad de la Ec. (61) con lo que se obtiene

$$\frac{T}{8\pi e^2 (N_d)^{1/2} \left(\frac{v_n}{2}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{-E_d}{2T}\right]} \ll L^2, \quad (62)$$

y para un material tipo n a temperaturas intermedias la condición de cuasineutralidad se obtiene al sustituir la ecuación para r_D^2 de la Ec. (51) en la desigualdad de la Ec. (61)

$$\frac{T}{4\pi e^2 N_d} \ll L^2. \quad (63)$$

Para el material tipo p a muy bajas temperaturas y a temperaturas intermedias, la condición de cuasineutralidad se obtendrá al sustituir las Ecs. (56) y (59) para r_D^2 , respectivamente, en la desigualdad de la Ec. (61) obteniéndose para un material tipo p a muy bajas temperaturas la desigualdad

$$\frac{T}{8\pi e^2 (2N_a v_p)^{1/2} \exp\left[\frac{E_a - E_g}{2T}\right]} \ll L^2, \quad (64)$$

y a temperaturas intermedias la desigualdad

$$\frac{T}{4\pi e^2 N_a} \ll L^2. \quad (65)$$

Por último la condición de cuasineutralidad para un material intrínseco se obtiene al sustituir la Ec. (60) en la Ec. (61),

$$\frac{T}{8\pi e^2 n_0} \ll L^2. \quad (66)$$

5. Conclusiones

Se obtuvieron expresiones generales para la concentración de portadores en un material semiconductor bipolar con contactos metálicos y se obtuvo también una expresión general para el radio de Debye r_D , la cual es inversamente proporcional a las concentraciones de portadores en equilibrio p_0 , n_0 , n_d^0 , p_a^0 . Se realizó el análisis de concentración de portadores del material para el régimen de muy bajas temperaturas y temperaturas intermedias donde sólo hay transiciones entre los niveles rasantes de impurezas y las bandas de energía del material. Se obtuvieron condiciones de cuasineutralidad para los materiales tipo n , p e intrínseco en términos de la concentración de átomos dopantes y de portadores de carga. En todos los casos se encuentra que el fenómeno de cuasineutralidad se presenta en una relación inversamente proporcional entre la concentración de átomos dopantes y de portadores de carga y la longitud L del material semiconductor.

Se examinó la pérdida lineal correspondiente a cuando se presenta una diferencia pequeña entre las funciones de trabajo del metal y el semiconductor; en caso de no presentarse dicha diferencia pequeña, es necesario resolver la ecuación de Poisson no lineal [11]. Todas las conclusiones cualitativas obtenidas siguen siendo válidas con respecto a [18,19].

1. S. M. Sze y K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, 3rd ed. (Wiley, Hoboken, 2006), pp. 56, 62, 134, <https://doi.org/10.1002/0470068329>.
2. D. Neamen, *Semiconductor Physics and Devices: Basic Principles*, 3rd ed. (McGraw Hill, Nueva York, 1997), pp. 103, 154, 326.
3. K. F. Brennan, *Introduction to Semiconductor Devices for Computing and Telecommunications Applications*, 1st ed. (Cambridge University Press, Nueva York, 2005), pp. 7-16, <https://doi.org/10.1017/CBO9781139171373>.
4. J.-P. Colinge y C. A. Colinge, *Physics of Semiconductor Devices*, 1st ed. (Springer, Nueva York, 2006), pp. 29-31, <https://doi.org/10.1007/b117561>.
5. M. Rudan, *Physics of Semiconductor Devices*, 1st ed. (Springer, Nueva York, 2015), pp. 369-402, 480, <https://doi.org/10.1007/978-1-4939-1151-6>.
6. R. Enderlein and N. J. M. Horing, *Fundamentals of Semiconductor Physics and Devices*, 1st ed. (World Scientific Publishing, Singapur, 1997), pp. 457-498, 547, 557.
7. I. C. Ballardo Rodríguez, B. El Filali, O. Yu. Titov y Yu. G. Gurevich, Influence of Thermal Nonequilibrium on Recombination, Space Charge, and Transport Phenomena in Bipolar Semiconductors, *Int. J. Thermophys.* **41** (2020) 65, <https://doi.org/10.1007/s10765-020-02647-2>.
8. J. N. Chazalviel, *Coulomb Screening by Mobile Charges* (Birkhäuser, Boston, 1999), pp. 4-5, <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-1762-6>.
9. Yu. G. Gurevich, J. E. Velazquez-Perez, G. Espejo-López, I. N. Volovich y O. Yu. Titov, Transport of nonequilibrium carriers in bipolar semiconductors, *J. Appl. Phys.* **101** (2007) 023705, <https://doi.org/10.1063/1.2424502>.
10. Yu. G. Gurevich y M. Melendez, *Fenómenos de contacto y sus aplicaciones en celdas solares* (FCE, Ciudad de México, 2010), pp. 78-79, 89-102, 111-114.
11. W. van Roosbroeck, The Transport of Added Current Carriers in a Homogeneous Conductor, *Phys. Rev.* **91** (1953) 282, <https://doi.org/10.1103/PhysRev.91.282>.
12. V. L. Bonch-Bruевич y S. G. Kalashnikov, *Physics of the Semiconductors* (VEB, Berlín, 1982).
13. Yu. G. Gurevich *et al.*, The Role of Non-Equilibrium Carriers in the Formation of Thermo-E.M.F. in Bipolar Semiconductors, *Phys. Status Solidi B* **231** (2002) 278, [https://doi.org/10.1002/1521-3951\(200205\)231:1<278::AID-PSSB278>3.0.CO;2-5](https://doi.org/10.1002/1521-3951(200205)231:1<278::AID-PSSB278>3.0.CO;2-5).
14. M. Kizilyalli, J. Corish y R. Metselaar, Definitions of Terms for Diffusion in the Solid State, *Pure Appl. Chem.* **71** (1999) 1307, <https://doi.org/10.1351/pac199971071307>.
15. V. M. Koshkin y Yu. N. Dmitriev, *Chemistry and Physics of Compounds with Loose Crystal Structure* (Harwood, Suiza, 1994), pp. 112-114.
16. E. L. Ince, *Integration of ordinary differential equations*, 7th ed. (Oliver and Boyd, Edinburgo, 1956), pp. 82-90.
17. W. Shockley y W. T. Read Jr., Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons, *Phys. Rev.* **153** (1952) 835, <https://doi.org/10.1103/PhysRev.87.835>.
18. N. F. Mott, Proc. The electrical conductivity of transition metals, *Roy. Soc. London A* **153** (1936) 699, <https://doi.org/10.1098/rspa.1936.0031>.