



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA

MODELAMIENTO HIDRODINÁMICO DE FLUJO DE TRANSPORTADORES EN CELDAS
FOTOVOLTAICAS BASADAS EN SEMICONDUCTORES

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE
MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA MENCIÓN MECÁNICA
MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MECÁNICO

JUAN IGNACIO OSSES MÁRQUEZ

PROFESOR GUÍA:
WILLIAMS CALDERÓN MUÑOZ
PROFESOR CO-GUÍA:
ALEJANDRO ORTIZ BERNARDIN

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
JUAN C. ZAGAL MONTEALEGRE
AMADOR GUZMÁN CUEVAS

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por proyecto
FONDECYT 11110235

SANTIAGO DE CHILE
2014

MODELAMIENTO HIDRODINÁMICO DE FLUJO DE TRANSPORTADORES EN CELDAS FOTOVOLTAICAS BASADAS EN SEMICONDUCTORES

Resumen

Hoy en día existe una necesidad creciente por mejorar las aplicaciones de la energía solar, en particular a través del uso de dispositivos a base de semiconductores. La base de la tecnología usada en las celdas fotovoltaicas es el dispositivo llamado junta PN. Por ende, una mejor comprensión y caracterización de los procesos físicos involucrados en dicho dispositivo ayudará a encauzar de mejor manera los esfuerzos para mejorar las prestaciones de las celdas fotovoltaicas.

En los materiales a base de semiconductores los transportadores de carga eléctrica son los electrones en la banda de conducción y también los electrones de la banda de valencia. Cuando electrones dejan la banda de valencia (subiendo energéticamente a la banda de conducción) estados desocupados (hoyos) quedan en dicha banda. Desde el punto de vista de la modelación es más fácil describir el movimiento de hoyos que el de electrones en la banda de valencia.

En esta tesis se estudió el flujo de transportadores de carga en una junta PN a través de un modelo hidrodinámico [2, 7, 16, 17, 30]. El cual incluyó la ecuación de Poisson, y leyes de conservación de masa y momentum para electrones y hoyos.

Usualmente en el diseño de dispositivos a base de semiconductores se utiliza el modelo 'Drift-Diffusion' (DD). Dicho modelo aplicado a la junta PN asume: (i) una zona vacía de transportadores cerca de la junta, (ii) equilibrio térmico, y (iii) que los efectos de las colisiones de los transporte son despreciable para el cálculo del transporte de carga. Dichas simplificaciones dejan de ser válidas para juntas pequeñas (del orden del micrón) [23]. El modelo usado en esta tesis supera estos supuestos y además entrega información acerca de la distribución espacial de las densidades y velocidades de electrones y hoyos en todo el dispositivo. Estas distribuciones no son entregadas por el modelo DD.

El modelo propuesto fue resuelto con la ayuda del método de perturbaciones y algoritmos numéricos. Para su resolución las ecuaciones fueron adimensionalizadas. Se redefinió el número de Reynolds y la viscosidad cinemática para el flujo de electrones.

Se estudiaron las distribuciones espaciales de la densidad de transportadores, campo eléctrico, potencial electrostático, y velocidades de electrones y hoyos para distintas configuraciones de operación y diseño. Se obtuvieron también las curvas de corriente versus el voltaje aplicado con y sin radiación incidente.

Se concluyó que, las Juntas PN que en equilibrio (oscuridad y sin voltaje aplicado) tienen campos eléctricos más intensos son más eficaces para generar potencia útil cuando existe radiación. En este sentido, aumentos del dopaje, disminuciones de la temperatura del cristal, y una temperatura adecuada de electrones y hoyos favorecen la generación de potencia útil por parte de la junta PN. Se espera que esta nueva caracterización sirva como punto de partida de posteriores estudios térmicos de estos dispositivos.

DEDICADO A DIOS Y A MI FAMILIA...

Agradecimientos

Quiero agradecer a todos aquellos que han sido parte de mi formación como persona e ingeniero. En especial, a Dios, a mis padres Olga Márquez y Juan Carlos Osses, mi hermana Carla Osses M., y a todos mis amigos. Gracias por ayudarme a ser lo que soy.

Agradezco también el conocimiento y el tiempo entregado a todos los profesores que forman parte del DIMEC. Quisiera destacar al profesor Williams Calderón por el apoyo y la motivación en la construcción de esta tesis. Así como la dedicación y responsabilidad en los cursos que me impartió.

Finalmente agradecer al proyecto FONDECYT N°11110235 por los recursos entregados.

Tabla de contenido

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Objetivos	2
1.2.1. Objetivo General	2
1.2.2. Objetivos Específicos	2
1.3. Alcance	2
1.4. Estructura de la memoria	2
2. Antecedentes	4
2.1. Fundamentos de la Física de Estado Sólido	4
2.1.1. Consecuencias de la Materia Condensada	5
2.1.2. Dualidad Onda Partícula y Ecuación de <i>Schrödinger</i>	5
2.1.3. Electrones en Potenciales no Periódicos	7
2.1.4. Electrones en Potenciales Periódicos	10
2.1.5. La Aproximación Semi-Clásica	15
2.1.6. El Transporte de Carga en la Banda de Valencia y el Concepto de Hoyo	15
2.1.7. La Función Distribución y la Ecuación de Boltzman	16
2.1.8. Variables Macroscópicas	17
2.1.9. Equilibrio Termodinámico	18
2.2. Propiedades de Semiconductores en Equilibrio Térmico	19
2.2.1. Función Distribución para Electrones (f_e) en Equilibrio Térmico	19
2.2.2. Densidad de Estados para Electrones (D_e)	21
2.2.3. Densidad de Concentración de Electrones en Equilibrio Térmico y Eléctrico (n)	22
2.2.4. Densidad de Concentración de Hoyos en Equilibrio Térmico y Eléctrico (p)	22

2.2.5.	Densidad de Transportadores Intrínseca	23
2.2.6.	Dopaje de Semiconductores	23
2.2.7.	Densidad de Transportadores Extrínseca	25
2.2.8.	Distribuciones Quasi-Fermi	25
2.3.	Energía de Fermi y Potencial Electroquímico	26
2.4.	Generación de Electrones y Hoyos	28
2.5.	Recombinación de Electrones y Hoyos	29
2.6.	Modelos para el Transporte de Carga en Semiconductores	31
2.6.1.	El Modelo Drift Diffusion	32
2.6.2.	El Modelo Hidrodinámico	33
2.7.	Celdas Solares	34
2.7.1.	Radiación Solar	34
2.7.2.	Mecanismos Básicos en Celdas Solares	35
2.7.3.	Sentido de la Corriente en una Junta PN	37
3.	Descripción del Problema	38
4.	Modelo	40
4.1.	Descripción General	40
4.2.	Términos de Colisión	41
4.2.1.	Generación y Recombinación	41
4.2.2.	Cambios de Velocidad	42
4.3.	Modelo con Términos de Colisión	43
4.4.	Supuestos del Modelo	43
4.5.	Adimensionalización	44
4.6.	Constantes Físicas del Modelo	47
4.7.	Rango de Validez de las Condiciones de Borde	48
4.8.	Interpretación de los Parámetros Adimensionales del Modelo	48
5.	Metodología de Resolución	50
5.1.	Método de Perturbaciones	50
5.1.1.	Fundamentos del Método de Perturbaciones	50

5.1.2. Método de Perturbaciones Aplicado al Modelo	53
5.2. Algoritmo de Resolución y Esquema de Discretización Usado	58
6. Resultados	60
6.1. Tamaño de la Malla usada y test de Independencia	60
6.2. Dependencia de los Parámetros Adimensionales con las Condiciones de Borde	60
6.3. Resultados en Oscuridad sin Voltaje Aplicado	63
6.3.1. Obtención del ‘built-In voltage’	63
6.3.2. Distribución Espacial de las Variables, en Oscuridad y sin Voltaje	64
6.4. Resultados en Oscuridad con Voltaje Aplicado	70
6.4.1. Distribución Espacial de las Variables, en Oscuridad y con Voltaje	70
6.4.2. Curvas Corriente v/s Voltaje en Oscuridad	81
6.5. Resultados Junta Iluminada sin Voltaje Aplicado	85
6.5.1. Interpretación de la Generación Adimensional	85
6.5.2. Distribución Espacial de las Variables, Junta Iluminada y sin Voltaje	86
6.6. Resultados Junta Iluminada con Voltaje Aplicado	94
6.6.1. Equilibrios Internos y Generación de Corriente en la Junta PN	94
6.6.2. Distribución Espacial de las Variables, Junta Iluminada con Voltaje	95
6.6.3. Curvas Corriente v/s Voltaje para Junta Iluminada	98
6.7. Potencia Lineal Dimensional	103
6.8. Validación del Modelo	103
6.9. Trabajos Futuros	104
7. Conclusiones	105
Bibliografía	108
A. Derivación de las Ecuaciones Hidrodinámicas a partir de los Momentos de la Ecuación de Boltzman	I
A.1. Ecuación de Continuidad	I
A.2. Ecuación de Momentum	II
B. Derivación del modelo ‘Drift Diffusion’ a partir del Modelo Hidrodinámico	V

Índice de tablas

2.1. Parámetros para el cálculo de R_{SRH}	30
4.1. Constantes Físicas.	47
4.2. Rangos considerados para los grupos adimensionales.	48

Índice de figuras

2.1. Función de peso.	8
2.2. Ejemplos de potenciales no periodicos: (a) energía potencial igual a cero, (b) pozo de energía potencial, (c) escalón de energía potencial, y (d) Curva de energía potencial variando suavemente. Figura tomada de [21].	9
2.3. Ilustración de la función de onda en potenciales periodicos: (a) $U_c(z)$, energía potencial del cristal, (b) ψ_k , función propia, (c) u_k , función de Bloch, y (d) e^{ikz} , plano de onda. Figura tomada de [21].	11
2.4. Estructura de Banda: energía del electrón versus la función de onda, $E(k)$. Figura tomada de [21].	12
2.5. Estructura de Banda 3D. Figura tomada de [21].	13
2.6. Gap entre bandas versus distancia interatómica. Figura tomada de [21].	14
2.7. Bandas de energía para distintos tipos de materiales.	14
2.8. Gap de banda en función de la temperatura para Ge, Si, y GaAs. Figura tomada de [29].	20
2.9. Ejemplos de la función distribución de Fermi–Dirac para distintas temperaturas de equilibrio.	21
2.10. Densidad de concentración intrínseca para Si en función de la temperatura. Tomada de [11]	23
2.11. Esquema de proceso de dopaje.	24
2.12. Esquema de las formas de energía en electrones y hoyos. Tomada de [23]	28
2.13. Alcance de los modelos usados actualmente para la descripción del transporte de carga en dispositivos a base de semiconductores. Tabla tomada de [17].	32
2.14. Espectro solar para AM0 (línea negra, irradiación extraterrestre), y AM1.5 para irradiación normal directa (línea azul) e irradiación total global (línea roja). Figura tomada de [11].	35
2.15. Esquema del recorrido de la luz en la atmósfera terrestre y definición del concepto de masa de aire AMx. Figura tomada de [11].	35
2.16. Esquema de las bandas de valencia para una celda ideal. Tomada de [23].	36
2.17. Esquema de las celdas basadas en juntas PN.	36
2.18. Esquema de corriente hacia adelante (forward direction). Tomada de [23].	37
2.19. Esquema de corriente hacia atrás (reverse direction). Tomada de [23].	37

3.1. Esquema de junta PN.	38
6.1. Test de independencia de malla.	61
6.2. Error relativo de las distintas mallas analizadas.	61
6.3. Esquema de relaciones entre condiciones de borde (en rojo), parámetros físicos (en blanco), y grupos adimensionales (en azul).	62
6.4. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = 0.026$, $\beta_p = 0.026$ y $\gamma_2 = 1$. Las soluciones mostradas consideran N_0 variable.	65
6.5. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = 0.026$, $\beta_p = 0.026$ y $\gamma_2 = 1$. Las soluciones mostradas consideran N_0 fijo.	66
6.6. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 10$ y $\gamma_2 = 1$	68
6.7. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado y en oscuridad con $R_e = 0.0005$, $\alpha = 1$ y $\gamma_2 = 0.3$. Con β desacoplado de las condiciones de borde.	69
6.8. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con voltaje aplicado positivo (forward) y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = 0.12$, $\beta_p = 0.12$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$	70
6.9. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con voltaje aplicado (reverse) y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = 0.12$, $\beta_p = 0.12$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$	72
6.10. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = 0.2$ y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$	73
6.11. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = 0.2$ y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$	74
6.12. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = 0.2$ y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta = 0.06$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$	75
6.13. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = -0.2$ y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$	77
6.14. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = -0.2$ y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = 0.06$, $\beta_p = 0.06$ y $T_L = 340$	78
6.15. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = -0.2$ y en oscuridad con $\alpha = 3$, $\beta_n = 0.06$, $\beta_p = 0.06$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$. Las soluciones mostradas consideran N_0 variable.	79
6.16. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = -0.2$ y en oscuridad con $\alpha = 3$, $\beta_n = 0.06$, $\beta_p = 0.06$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$. Las soluciones mostradas consideran N_0 fijo.	80
6.17. Curva corriente v/s voltaje para $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$. Las curvas mostradas consideran N_0 variable.	81
6.18. Curva corriente v/s voltaje para $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$. Las curvas mostradas consideran N_0 fijo.	82
6.19. Curva corriente v/s voltaje para $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$	82

6.20. Curva corriente v/s voltaje para $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$	83
6.21. Curva corriente v/s voltaje para $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.12$ y $T_L = 340$	83
6.22. Curva corriente v/s voltaje para $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$	84
6.23. Curva corriente v/s voltaje para $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$	84
6.24. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas consideran N_0 fijo. . . .	86
6.25. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas consideran N_0 variable.	87
6.26. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas consideran N_0 fijo.	88
6.27. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$, con el cambio de β no se ve afectado $G_{adim} = U * N_o/L$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$	89
6.28. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$ y $T_L = 340$	90
6.29. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.0128 ($G = 0.0128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$ y $T_L = 340$	91
6.30. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas consideran N_0 variable.	92
6.31. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas consideran N_0 fijo.	93
6.32. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con voltaje aplicado (forward), generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$	95
6.33. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con voltaje aplicado (reverse), generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$	96
6.34. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = 0.15[V]$ y para una junta con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$	97
6.35. Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = -0.5[V]$ y para una junta con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$	98

6.36. Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas considera a N_0 variable.	99
6.37. Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas considera a N_0 fijo.	99
6.38. Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.288 ($G = 0.288$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3.0$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$	100
6.39. Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.288 ($G = 0.288$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3.0$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$	100
6.40. Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.288 ($G = 0.288$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3.0$, $\beta = 0.06$ y $\gamma_2 = 1.0$	101
6.41. Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.12$ y $T_L = 330$	101
6.42. Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 330$ y $\gamma_2 = 0.15$	102
6.43. Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 330$ y $\gamma_2 = 0.15$	102

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

Los semiconductores juegan un importante rol en la tecnología moderna. Este tipo de dispositivos son extensivamente usados en ciencias e industria. Aplicaciones en computadores, sistemas de control, comunicaciones, sensores, generación y conversión de la energía son algunos de los muchos usos de los dispositivos a base de semiconductores. Esta gran variedad de funciones se sustentan en las particulares propiedades eléctricas y ópticas de los materiales semiconductores, que son la base de muchos dispositivos electrónicos dentro de los cuales destacan: el diodo, el transistor y las celdas fotovoltaicas. En la actualidad la gran mayoría de las investigaciones acerca de estos dispositivos están enfocadas a satisfacer los requerimientos de tamaño, durabilidad y eficiencia.

Hoy en día existe una necesidad creciente por mejorar las aplicaciones de la energía solar, en particular a través del uso de dispositivos a base de semiconductores. Esto se explica por el gran interés en fuentes de energías alternativas, debido al calentamiento global y al aumento del costo de los combustibles fósiles. Un factor clave a mejorar para la masificación de esta tecnología es su eficiencia. La base de la tecnología usada en las celdas fotovoltaicas es el dispositivo llamado junta PN. Por ende, una mejor comprensión y caracterización de los procesos físicos involucrados en dicho dispositivo ayudará a encauzar de mejor manera los esfuerzos para mejorar las prestaciones de las celdas fotovoltaicas.

En los últimos años, la tecnología para concentrar la radiación solar ha logrado un desarrollo pleno. Sin embargo, la exposición de las celdas fotovoltaicas a altas concentraciones de radiación solar genera el calentamiento de éstas. Lo anterior constituye una limitación, pues el aumento de la temperatura reduce la eficiencia y reduce su vida útil. Como consecuencia, la descripción de las velocidades y densidades de electrones y hoyos a través de la junta, que pueden dar información de la temperatura, son de gran importancia para mejorar el rendimiento y determinar las condiciones óptimas de operación de las celdas solares.

Es por lo anterior que en el ámbito de la modelación matemática de dispositivos semiconductores, modelos hidrodinámicos capaces de describir densidades, velocidades y pérdidas energéticas de los transportadores de carga han cobrando importancia en los últimos años [2, 7, 16, 17, 30].

El presente trabajo propone un modelo hidrodinámico unidimensional para estudiar el flujo de electrones a

través de la junta PN. La distribución del voltaje, las densidades de electrones y hoyos, y las distribuciones de velocidad de grupo de electrones y hoyos a través de la junta son variables a obtener bajo algunos supuestos. Las ecuaciones gobernantes incluyen la ley de Gauss, así como ecuaciones de continuidad y momentum para electrones y hoyos.

1.2. Objetivos

1.2.1. Objetivo General

Describir el flujo de transportadores en una junta PN usando un modelo hidrodinámico.

1.2.2. Objetivos Específicos

- Determinar la distribución de densidad de carga de electrones y hoyos en la junta PN para distintas condiciones de operación.
- Determinar la distribución de velocidad de electrones y hoyos en la junta PN para distintas condiciones de operación.

1.3. Alcance

Se espera que esta nueva caracterización contribuya al mejor entendimiento de los procesos físicos que ocurren en las celdas fotovoltaicas a base de Juntas PN, y que sirva como punto de partida de posteriores estudios térmicos de estos dispositivos.

1.4. Estructura de la memoria

Esta tesis se divide en 6 capítulos: antecedentes, descripción del problema, modelo, metodología de resolución, resultados y conclusiones. En el primero se revisan los principales antecedentes de la física de semiconductores para poder entender mejor el funcionamiento de la junta PN, así como las ventajas, supuestos y limitaciones del modelo hidrodinámico propuesto.

Luego, se presenta el problema a resolver en ‘Descripción del Problema’. Se define la junta a utilizar, así como las condiciones de borde utilizadas con y sin voltaje aplicado.

En el capítulo ‘Modelo’ se presenta en detalle las ecuaciones, supuestos, constantes físicas y adimensionalización del modelo hidrodinámico usado en esta tesis. La forma de resolver las ecuaciones, el método de perturbaciones y el método numérico seguido se describen en el capítulo ‘Metodología de Resolución’.

Los resultados obtenidos con el modelo son discutidos en el capítulo ‘Resultados’. Se muestran las distribuciones espaciales de las variables estudiadas: densidad de electrones y hoyos, potencial electrostático

y campo eléctrico, y velocidades de los transportadores. Además se construyeron las curvas de corriente versus voltaje que caracterizan a la junta PN que dan interesante información acerca de su operación y diseño.

Finalmente se incluyen las conclusiones que resumen los principales resultados del trabajo. En apoyo al cuerpo principal se ha incluido dos apéndices: el primero dice relación con la derivación del modelo hidrodinámico a partir de los momentos de la ecuación de Boltzman, y el segundo presenta la derivación del modelo 'Drift-Diffusion' a partir del modelo hidrodinámico propuesto.

Capítulo 2

Antecedentes

2.1. Fundamentos de la Física de Estado Sólido

La física de estado sólido describe las propiedades y procesos que ocurren en un material sólido. En este afán enfrenta tres grandes desafíos. El primero es que las propiedades que percibimos de los materiales, por ejemplo la conductividad térmica y eléctrica, densidad, color, etc. dependen de la interacción de una gran cantidad de partículas (átomos) con sus mismas y con el ambiente y por tanto, una descripción analítica de cada una de las partículas y sus interacciones a través de la mecánica clásica por ejemplo, es impracticable. El segundo desafío es que los experimentos observan y miden valores promedios de las propiedades, por lo que una descripción directa de los procesos que ocurren a nivel atómico (o molecular) vía experimentación es imposible. Y el tercer desafío es que a pequeñas escalas (del orden de los nanómetros) incertidumbres en la descripción y cuantificación de los procesos físicos son inevitables.

La naturaleza de las propiedades de los materiales de estado sólido funciona de tal forma que pequeños cambios en la interacción a nivel atómico o molecular se traducen en grandes cambios a nivel de propiedades macroscópicas. Esto se debe en parte a que los materiales condensados están organizados generalmente en estructuras ordenadas, por ejemplo cristales, que amplifican por repetición las pequeñas diferencias a nivel atómico.

Es claro entonces que tanto la descripción de los fenómenos a pequeña escala, como la adecuada descripción de la interacción de muchas partículas son la llave para el entendimiento de los materiales de estado sólido. La mecánica cuántica se ocupa de las incertidumbres de la física de las partículas atómicas y la mecánica estadística describe la física de gran cantidad de partículas.

El objetivo de esta sección es describir aspectos básicos de mecánica cuántica y física estadística para lograr entender el transporte de carga eléctrica en sólidos. En particular, dar los fundamentos para entender el transporte de carga en semiconductores.

2.1.1. Consecuencias de la Materia Condensada

Las características eléctricas de la materia sólida están determinadas por el movimiento de muchos electrones. En el vacío, la dinámica de dos cuerpos o partículas separadas ha sido descrita exitosamente por la ley de Newton. Diversos postulados y reglas que relacionan la fuerza con alguna propiedad fueron experimentalmente establecidas como leyes. Ejemplos de lo anterior son: la fuerza de gravedad, la ley de Coulomb y ley de Ampère. Estas leyes clásicas del movimiento de partículas en el vacío deben ser extendidas para describir la interacción de muchas partículas. En $1\text{[cm}^3\text{]}$ hay cerca de 10^{23} electrones, en contraste en un tubo de vacío solo hay del orden de 10^{10} electrones.

Tres principales consecuencias se derivan de la alta densidad electrónica en un material sólido:

1. La distancia interespacial en un sólido es muy pequeña (alrededor de $(10^{23})^{-1/3}$ que aproximadamente es igual a $2 \times 10^{-8}\text{ [cm]}$).
2. La fuerza que actúa sobre una partícula se debe a las otras $(10^{23} - 1)$ partículas.
3. Las colisiones entre partículas son muchas (al rededor de 10^{13} por segundo).

Estas consecuencias plantean un desafío en la modelación del movimiento de partículas en materiales de estado sólido.

Otro aspecto importante es que es imposible conocer con exactitud la posición instantánea de una partícula atómica, pues dicha partícula no puede ser vista sin perturbar su posición (la luz que choca con ella cambia su estado energético). Similarmente, tampoco puede conocerse con exactitud la velocidad de la partícula. Lo anterior sumado a la consecuencia número (1) de la alta densidad electrónica en un sólido imposibilita la descripción del movimiento de una forma determinística usando las leyes de Newton. En vez de ésto, debe ser usada una descripción probabilística del movimiento. La extensión de la mecánica clásica usando probabilidad es conocida como mecánica cuántica. Y la ecuación que describe la ‘probable’ posición de una partícula es llamada ecuación de *Schrödinger*.

Las consecuencias (2) y (3) de la materia condensada hacen impracticable algebráicamente resolver la ecuación de movimiento de la j -ésima partícula usando mecánica clásica, o incluso la ecuación de onda de *Schrödinger*. Sin embargo, existe otra razón más importante para no hacerlo y es que desde el punto de vista experimental sólo es posible medir ‘promedios’ de las variables de interés. Entonces para contrastar los datos experimentales con la teoría, o predecir con la teoría los resultados experimentales se está más interesado en conocer valores promedios del movimiento, promedio de muchas partículas y colisiones, más que describir en detalle el movimiento de una sola partícula. La extensión de la mecánica clásica con modelos estadísticos es conocida como mecánica estadística.

2.1.2. Dualidad Onda Partícula y Ecuación de *Schrödinger*

La física experimental hasta antes de 1900 demostraba que la mayoría de los fenómenos físicos podían ser explicados por las ecuaciones de movimiento aplicadas a partículas o cuerpos, y las ecuaciones de Maxwell aplicadas a las ondas electromagnéticas (por ejemplo la luz). Sin embargo, una serie de experimentos en los primeros 30 años del siglo XX mostraron que la luz podía comportarse como partícula (ej: efecto fotoeléctrico),

y partículas (electrones) podían comportarse como ondas (ej: difracción de electrones en cristal) [26]. Esta característica ‘dual’ no podía ser explicada por las ecuaciones de la física clásica tales como la ecuación de Newton y de Maxwell, por lo que nuevos conceptos y ecuaciones fueron necesarios.

En base a la necesidad existente, la ecuación de *Schrödinger* fue la solución. Dicha ecuación resumió en una sola expresión el principio de conservación de energía, la ley de Newton, la condición de Planck y la hipótesis de Broglie. La hipótesis de Planck expresa que los procesos de absorción y emisión de radiación electromagnética están discretizados en ‘quántos’ llamados fotones, pero esta discretización no es única, depende de la frecuencia de la onda electromagnética según:

$$E_f = h \cdot \nu_f, \quad (2.1)$$

donde E_f es la energía de la onda electromagnética (en otras palabras la energía del fotón), h la constante de Planck ($\approx 4,135667 \cdot 10^{-15} [eV \cdot s]$) y ν_f la frecuencia de la onda electromagnética emitida o absorbida.

Por otro lado, la hipótesis de Broglie expresa que una partícula material (en movimiento) se comporta como una onda, cuya longitud viene dada por:

$$\lambda = \frac{h}{m_0 \cdot v}, \quad (2.2)$$

donde m_0 es la masa de la partícula y v su velocidad.

La ecuación de *Schrödinger* para una partícula de masa m_0 es [26]:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \psi(\vec{x}, t) + U(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t), \quad (2.3)$$

donde $\psi(\vec{x}, t)$ es llamada función de onda, $\hbar = h/2\pi$, y $U(\vec{x}, t)$ es la energía potencial de la partícula. La relación $\psi^* \psi$ es la función **densidad de probabilidad** de encontrar una partícula en (\vec{x}, t) (ψ^* es el complejo conjugado de ψ). De lo anterior se puede deducir que:

$$\int_{\forall \text{Espacio}} \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) dx dy dz = 1 \quad (2.4)$$

De las ecuaciones anteriores se desprende que la probabilidad de encontrar una partícula en una región dada dependen de su masa y energía potencial. La energía potencial en un material sólido $U(\vec{x}, t)$ esta compuesta por [21]: (a) la energía potencial construida por el transporte de cargas dentro del cristal (‘built-in’, U_{in}) y/o el aplicado al material (U_{ap}), (b) la energía potencial del cristal (U_c) (debido al potencial electrostático de los átomos y, dado que (2.3) es la ecuación de onda para un electrón solo, al promedio de la energía potencial de los otros electrones), y (c) la energía potencial de ‘scattering’ causado por las desviaciones aleatorias del potencial debido a la ionización de impurezas o vibraciones del cristal (U_{sc}).

En las secciones que siguen se muestran algunas soluciones de la ecuación de *Schrödinger* que revelan características del movimiento de electrones en diferentes tipos de potenciales.

2.1.3. Electrones en Potenciales no Periódicos

Para simplificar el problema, se reduce la ecuación a una dimensión espacial. Aplicando la técnica de separación de variables a la ecuación de onda se obtiene que las soluciones son de la forma:

$$\psi(z,t) = \psi(z)\exp^{-iEt/\hbar} = \psi(z)\exp^{-i\omega t}, \quad (2.5)$$

donde E es la energía total de la partícula y $\omega = E/\hbar$. Cuando la ecuación (2.5) es insertada en (2.3) se obtiene la ecuación de onda independiente del tiempo:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + k^2\psi = 0, \quad (2.6)$$

donde:

$$k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - U(z)] \quad (2.7)$$

La naturaleza de la solución está determinada por el signo de k^2 . Por ejemplo si $U(z)$ es constante e igual a cero y k^2 es positivo, entonces las soluciones de la ecuación (2.6) son de la forma:

$$\psi(z) = a_k e^{\pm ikz}, \quad (2.8)$$

donde:

$$\hbar k = \sqrt{2m_0 E} \quad (2.9)$$

y a_k es una constante arbitraria. De (2.9) se deduce que:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.10)$$

Se puede mostrar que $\hbar k$ es el momentum de la partícula [3]. Luego para un electrón libre, es decir $U(z) = 0$ (lo supuesto para encontrar la solución), la energía y el momentum están relacionadas exactamente como en física clásica. La solución dependiente del tiempo de la ecuación de onda para un electrón libre es:

$$\psi(z,t) = a_k e^{i(\pm kz - \omega t)}, \quad (2.11)$$

que representa una onda viajando en la dirección 'z' (positiva o negativa). Notar que en esta condición de partícula libre la probabilidad de encontrar a un electrón en un z dado es simplemente $|a_k|^2$, es decir existe igual probabilidad de encontrar un electrón en cualquier parte.

Para describir una partícula que esté cerca de z_0 que tiene un momentum al rededor de $\hbar k_0$ se usa una combinación lineal de la solución obtenida, que será solución de la ecuación de onda para $U(z)$ igual a cero:

$$\psi(z,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(k - k_0) e^{ik(z-z_0)} e^{-i\omega(k)t} dk \quad (2.12)$$

La función de peso, $f(k - k_0)$, es grande solo cerca de k_0 como muestra la Figura 2.1. Además en $t = 0$ y $z = z_0$ se obtiene una solución de gran amplitud. Pero para $z \gg z_0$ la exponencial, $e^{ik(z-z_0)}$, oscila rápidamente con k y las contribuciones con diferentes k son destructivas ya que no están en fase. El resultado de (2.12) describe a un electrón con alta probabilidad de estar en z_0 , pero con un momentum indeterminado. En contraste (2.11) describe

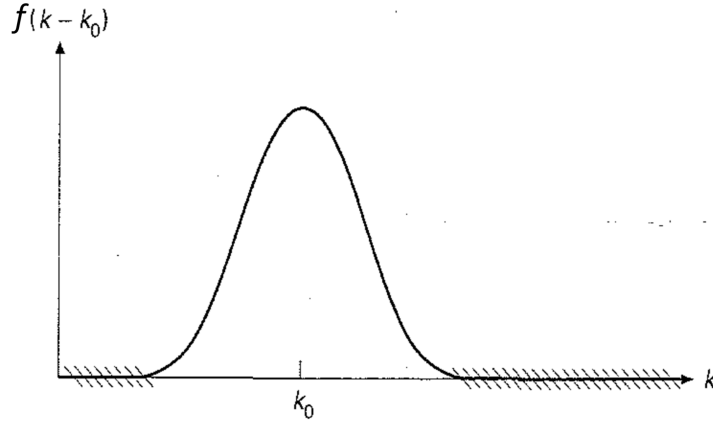


Figura 2.1: Función de peso.

un electrón con momentum único, $\hbar k$, pero cuya posición es totalmente indefinida. Lo anterior refleja el principio de incertidumbre que se resume en [21]:

$$\Delta z \Delta k \approx 1 \quad (2.13)$$

$$\Delta w \Delta t \approx 1 \quad (2.14)$$

Si en las ecuaciones anteriores se hace un cambio de variable y se usa el momentum y la energía, se obtienen las relaciones de incertidumbre:

$$\Delta z \Delta p \geq \hbar, \quad (2.15)$$

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (2.16)$$

Las expresiones anteriores reflejan que no se puede conocer exactamente, la posición, el momentum, ni la energía de una partícula en un tiempo dado.

Las soluciones mostradas en (2.11) y (2.12), son válidas para un electrón libre. Para electrones confinados en un pozo potencial la solución es diferente (ver parte (b) de Fig. 2.2). Si se considera que $U(z) = 0$ dentro de un rango, digamos entre $z = 0$ y $z = W$, y fuera de ese rango $U(z) \rightarrow \infty$ entonces las soluciones siguen siendo de la forma (2.8). Sin embargo, la partícula se ve confinada en el espacio por lo que $\psi(z) = 0$ en $z = 0$. Entonces más precisamente la solución que se obtiene es:

$$\psi(z) = a_k \text{sen}(k_n z), \quad (2.17)$$

donde como $\psi(z) = 0$ también en $z = W$:

$$k_n = \frac{n\pi}{W} \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.18)$$

Por la relación anterior, se obtiene que un electrón confinado tiene sólo algunas energías permitidas, es decir, la energía está cuantizada según:

$$E(k_n) = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_0 W^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.19)$$

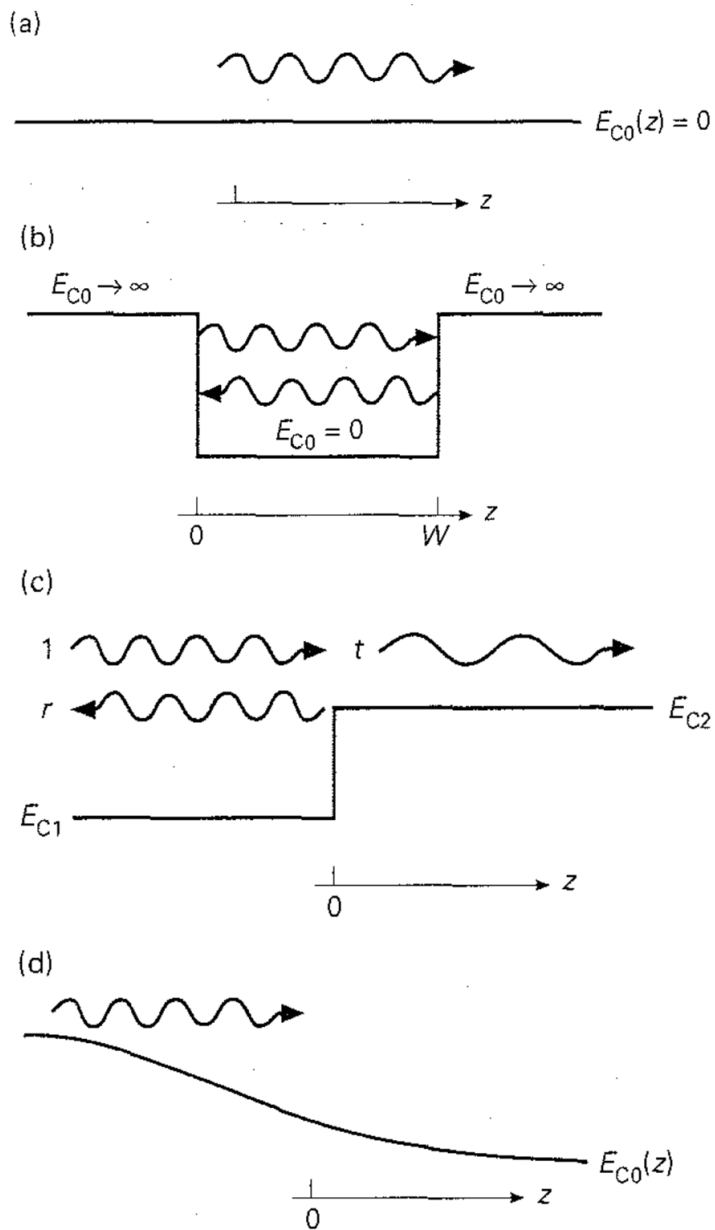


Figura 2.2: Ejemplos de potenciales no periodicos: (a) energía potencial igual a cero, (b) pozo de energía potencial, (c) escalón de energía potencial, y (d) Curva de energía potencial variando suavemente. Figura tomada de [21].

Un tercer ejemplo importante es cuando los electrones se ven enfrentados a un escalón de potencial (ver parte (c) de Fig. 2.2). Si $E > U(z)$ en todo el espacio, entonces las soluciones son ondas que viajan, y son de la forma:

$$\psi(z) = e^{ik_1z} + re^{-ik_1z} \quad z < 0, \quad (2.20)$$

$$\psi(z) = te^{ik_2z} \quad z > 0, \quad (2.21)$$

donde:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m_0(E - U_1)}}{\hbar}, \quad (2.22)$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m_0(E - U_2)}}{\hbar}, \quad (2.23)$$

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad (2.24)$$

$$t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (2.25)$$

Desde la perspectiva clásica, se espera que cuando la energía del electrón es más grande que el escalón, simplemente la partícula pase a través de él. La probabilidad finita de que el electrón se refleje es un efecto cuántico, debido a la naturaleza ondulatoria de los transportadores de carga. Estas reflexiones ocurren, como en el caso analizado, cuando el potencial cambia rápidamente, es decir, que el potencial varía significativamente en una distancia comparable con el largo de onda del electrón [21].

Finalmente, se considera el ejemplo de un potencial variando suavemente, según muestra la Fig.2.2 parte (d), donde la energía del electrón es asumida más grande que la energía potencial. En tales potenciales no ocurre reflexión y la solución puede ser obtenida usando la aproximación de Wentzel-Kramers-Brillouin como en [3]:

$$\psi(z) = \frac{1}{\sqrt{k}} e^{i \int^z k(\eta) d\eta}, \quad (2.26)$$

donde $k(\eta)$ esta dado por la ecuación (2.7). De esta forma el movimiento de electrones en un potencial que varía lentamente puede ser descrito clasicamente porque procesos de reflexión de las partículas no ocurren [21].

2.1.4. Electrones en Potenciales Periódicos

Los electrones en un semiconductor se mueven cuando existen campos externos aplicados, pero la energía potencial debido a otros electrones y a los átomos del cristal está siempre presente. La estructura periódica del cristal provoca un potencial periódico en el material. Para resolver el comportamiento de un electrón en dicho potencial se debe resolver la siguiente ecuación:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dz^2} + U_c(z) \right] \psi(z) = E \psi(z) \quad (2.27)$$

La Fig. 2.3 bosqueja el tipo de soluciones obtenidas. La soluciones de (2.27) también poseen estructura periódica. La solución para un período es llamada 'Bloch waves' y consiste en una función con la periodicidad del cristal multiplicada por un plano de onda:

$$\psi_k = u_k e^{ikz}, \quad (2.28)$$

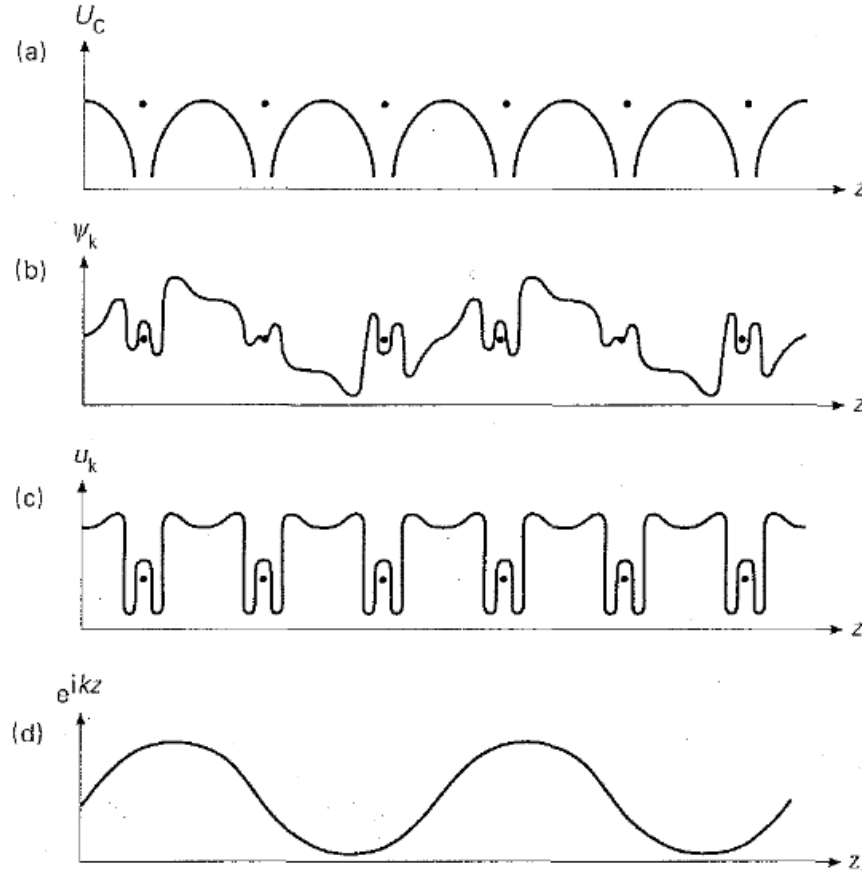


Figura 2.3: Ilustración de la función de onda en potenciales periódicos: (a) $U_C(z)$, energía potencial del cristal, (b) ψ_k , función propia, (c) u_k , función de Bloch, y (d) e^{ikz} , plano de onda. Figura tomada de [21].

donde $u_k(z+a) = u_k(z)$. Las dos componentes de las ‘Bloch waves’ están presentes en la Fig. 2.3. Para encontrar $u_k(z)$ se reemplaza (2.28) en (2.27), obteniéndose:

$$\left[\frac{1}{2m_0} \left(\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + U_C(z) \right] u_k = E(k) u_k \quad (2.29)$$

La ecuación (2.29) debe ser resuelta con las condiciones de periodicidad. Para cada k existe un conjunto infinito numerable de funciones $E_n(k)$, donde $n = 1, 2, 3, \dots$, que cumplen con la ecuación (2.29). Si se grafican las soluciones para distintos k se obtienen curvas como las mostradas en la Figura 2.4, llamadas estructuras de bandas. Es importante hacer notar dos características de las estructuras de bandas: la primera es que también son curvas periódicas, y la segunda es que existen ciertas regiones prohibidas de energía, es decir, energías que no son cubiertas por ningún k , ni ninguna curva de banda.

La periodicidad de $E(k)$ es consecuencia de la periodicidad espacial del potencial del cristal. En general,

$$E_n(k) = E_n(k + K_j), \quad K_j = j \frac{2\pi}{a} \quad j = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.30)$$

donde a es una constante del cristal.

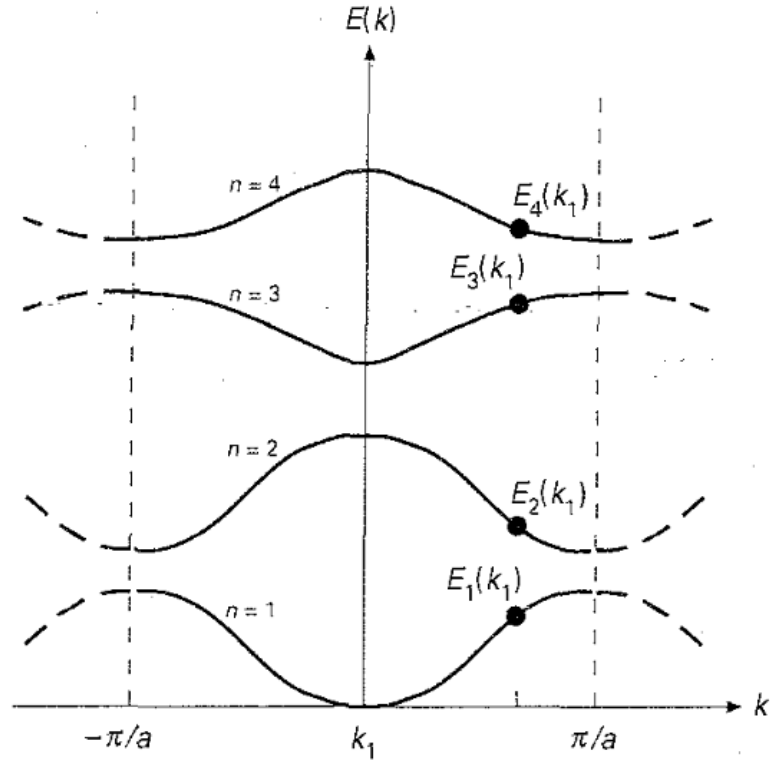


Figura 2.4: Estructura de Banda: energía del electrón versus la función de onda, $E(k)$. Figura tomada de [21].

Las estructuras de banda de semiconductores comunes es bien conocida de varios experimentos y soluciones numéricas [21]. Para semiconductores, soluciones aproximadas de la ecuación (2.29) cerca del mínimo de la curva de estructura de banda, son a menudo adecuadas. Los llamados $k \cdot p$ métodos para obtener tales aproximaciones son discutidos en los textos escritos por Datta [25], para tratar transportadores muy energéticos, sin embargo, una resolución total es necesaria.

Si la estructura de banda es conocida, $E(k)$ puede siempre ser expandido usando la serie de Taylor:

$$E(k) = E(0) + k \left(\frac{\partial E(k)}{\partial k} \right)_{k=0} + k^2 \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \right)_{k=0} + \dots \quad (2.31)$$

Cuando el mínimo ocurre en $k = 0$ y el gradiente de $E(k)$ es cero en $k=0$, entonces la siguiente aproximación puede ser usada cerca de $k = 0$:

$$E(k) = E(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2.32)$$

donde m^* es la masa efectiva:

$$\frac{1}{m^*} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \quad (2.33)$$

Una comparación de la ecuación (2.32) con (2.10) muestra que para electrones cerca de un mínimo de banda, la relación $E(k)$ en un cristal es igual que para electrones libres, excepto por el cambio en la masa efectiva. Es decir la energía y el momentum están relacionados exactamente igual que en física clásica pero con una masa definida según (2.33). La masa efectiva es algunas veces la única información de $E(k)$ requerida para describir el transporte de carga en semiconductores como se verá en la sección 2.1.5.

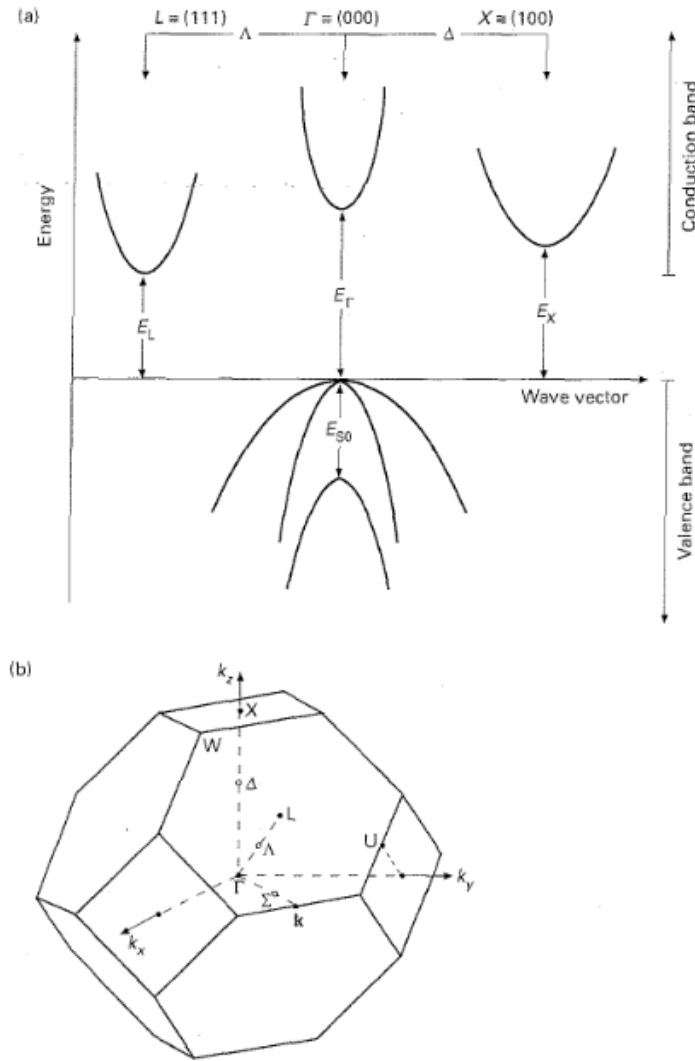


Figura 2.5: Estructura de Banda 3D. Figura tomada de [21].

Hasta el momento, el análisis ha sido sólo en una dimensión espacial, pero en la realidad física (las 3 dimensiones espaciales) las curvas de energía versus el vector de onda \vec{k} (llamadas estructuras de banda) depende de la dirección de éste. La Figura 2.5 muestra la estructura de banda simplificada para semiconductores del tipo Si y GaAs en tres direcciones del cristal.

A las bandas cuya energía es mayor que la energía potencial del cristal se les llama banda de conducción. A las bandas con energía igual o inferior se les llama banda de valencia. Entre las bandas de conducción y valencia existe cierto 'gap' de energía (ver Figura 2.6). Por la energía que poseen los electrones de la banda de conducción pueden moverse libremente y son influenciados más fácilmente por campos externos, en cambio los electrones que pertenecen a la banda de valencia ven restringido su movimiento a zonas cercanas a los núcleos atómicos. Los aislantes tienen grandes 'gap' entre conducción y valencia, en contraste los conductores como los metales no poseen 'gap' entre las dos bandas. Los semiconductores tienen 'gap' moderados y cambiando su composición, o aplicando campos eléctricos suficientes pueden pasar de ser aislantes a conductores. La Figura 2.7 esquematiza lo explicado.

Cuando en un gráfico de energía (E) versus el vector de onda (\vec{k}) el mínimo de las bandas de conducción

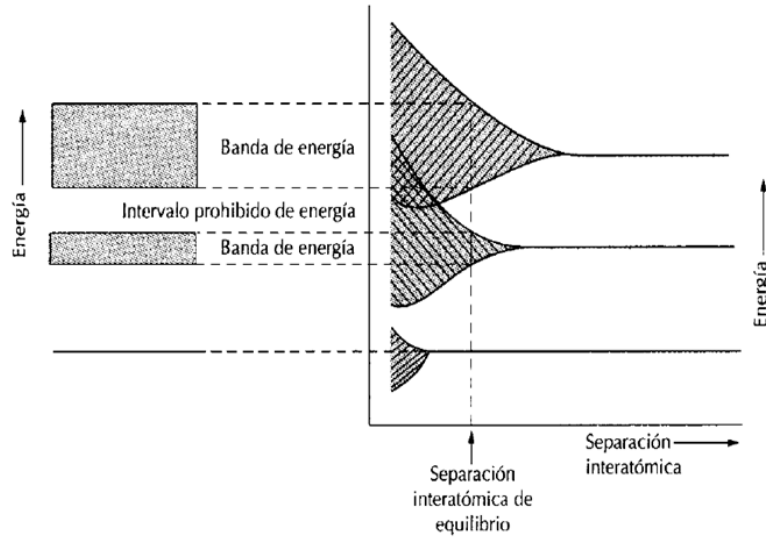


Figura 2.6: Gap entre bandas versus distancia interatómica. Figura tomada de [21].

coincide con el máximo de las bandas de valencia los semiconductores se llaman 'directos', por ejemplo *GaAs* es 'directo'. De lo contrario reciben el nombre de 'indirectos', por ejemplo *Si* es 'indirecto'. La gran mayoría de los electrones que pasa de la banda de valencia a la de conducción y viceversa (en la ausencia o bajo la aplicación de un campo eléctrico pequeño) lo hace desde el máximo de la banda de valencia al mínimo de la banda de conducción. Por lo que en un semiconductor directo el paso entre bandas se produce sin cambio de momentum, en cambio en uno indirecto si hay cambio de momentum ya que cambia el vector de onda.

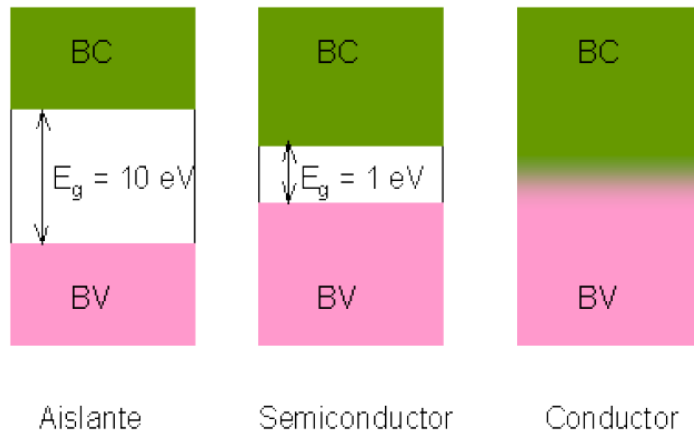


Figura 2.7: Bandas de energía para distintos tipos de materiales.

Si el mínimo de la banda de conducción o el máximo de la banda de valencia cae en $k = 0$, entonces $E(k)$ puede ser aproximado con (2.32) para describir la energía de esos electrones. Sin embargo para grandes campos eléctricos aplicados (superiores a 3.1[eV] según [21]) términos de mayor orden de la serie de Taylor no pueden ser ignorados (otras aproximaciones que pueden ser usadas en estos casos aparecen en [21]).

2.1.5. La Aproximación Semi-Clásica

Para dispositivos eléctricos convencionales, como la junta PN, el voltaje aplicado o generado (*built-in potential*) varía lentamente en comparación con el potencial del cristal, por lo que fenómenos ondulatorios del electrón tales como reflexión y ‘tunneling’ están ausentes y el movimiento de electrones puede ser descrito por física clásica (sección 2.1.3) [21].

Desde el punto de vista semi-clásico el paquete de ondas de electrones es tratado como una partícula. Las incertidumbres en la determinación del momentum y la posición son despreciadas en esta aproximación, esto supone una restricción en el tamaño de los dispositivos que se pueden analizar con este enfoque¹. La dinámica del centro de este paquete de ondas electrónico, visto ahora como una partícula, es descrito por las siguientes ecuaciones:

$$\frac{d(\hbar k_0)}{dt} = F_e, \quad (2.34)$$

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m^*}, \quad (2.35)$$

donde k_0 es el vector de onda en el centro del paquete de onda, F_e es una fuerza externa, y v_g es la velocidad de grupo del paquete de ondas. La Ec. (2.34) tiene la misma estructura que la clásica relación entre fuerza y momentum. La velocidad del centro del paquete de onda del electrón queda definida bajo la aproximación de una estructura de banda parabólica, Ec. (2.35).

La aproximación semi-clásica es uno de los supuestos del modelo hidrodinámico considerado en esta Tesis. Notar que las Ec. (2.34) y (2.35) son para el movimiento de **un electrón**.

2.1.6. El Transporte de Carga en la Banda de Valencia y el Concepto de Hoyo

Como se ha visto en las secciones anteriores existen electrones en la banda de valencia y en la banda de conducción. A cero grados kelvin, la banda de valencia está llena y la banda de conducción vacía. A temperaturas finitas algunos electrones dejan la banda de valencia y ocupan la banda de conducción. Cuando electrones dejan la banda de valencia estados desocupados (hoyos) quedan en dicha banda.

Si se considera la banda de valencia completamente llena y es retirado un electrón, entonces un cambio de momentum es producido en el sistema. Además desde el punto de vista de la carga el sistema queda con carga positiva. Alternativamente, el proceso anterior puede ser descrito a través de la inclusión de un hoyo de carga positiva. Considerando la teoría semiclásica la masa efectiva del hoyo queda definida como:

$$m_h = -m_e, \quad (2.36)$$

donde m_e es la masa efectiva del electrón. Debe notarse que la masa efectiva del electrón en la banda de valencia es negativa, por lo que la masa del hoyo queda positiva (la masa efectiva del electrón en la banda de conducción es positiva).

De esta forma para efectos de la modelación del transporte de carga se tiene que electrones transportan la carga en la banda de conducción y hoyos transportan la carga en la banda de valencia.

¹Ver Capítulo (4.4) para una derivación del tamaño mínimo posible bajo la aproximación semi-clásica.

2.1.7. La Función Distribución y la Ecuación de Boltzman

La ecuación de Boltzmann es el modelo que gobierna la evolución de los gases perfectos en teoría cinética. Mientras en fluidodinámica se describe el estado de un fluido con variables escalares y campos vectoriales como la temperatura y la velocidad, en teoría cinética se describe el estado de un gas con la ‘función distribución’ $f \equiv f(t, \vec{x}, \vec{v})$, que es la densidad de partículas del gas (moléculas) las cuales en $t \geq 0$, están localizadas en la posición \vec{x} y con la velocidad \vec{v} . En otras palabras en el volumen infinitesimal $d\vec{x}d\vec{v}$ centrado en el punto (\vec{x}, \vec{v}) se puede encontrar aproximadamente $f(t, \vec{x}, \vec{v})d\vec{x}d\vec{v}$ partículas en el tiempo t dado².

En la aproximación semi-clásica (ver 2.1.5) es posible redefinir la función distribución en base al vector de onda \vec{k} , es decir, $f \equiv f(t, \vec{x}, \vec{k})$. En este nuevo enfoque la función distribución es más precisamente el número de estados cuánticos ocupados en la banda de valencia o conducción sobre el total de estados posibles en la banda de valencia o conducción en el volumen infinitesimal $d\vec{x}d\vec{k}$. Notar que existe una función distribución para hoyos y electrones. En sistemas donde no existen colisiones entre partículas, ni generación y recombinación de transportadores la función distribución es conservada con respecto al tiempo (para una prueba rigurosa de lo anterior ver [12]):

$$\frac{df(t, \vec{x}, \vec{k})}{dt} = 0 \quad (2.37)$$

A los fenómenos que quiebran la conservación de la función distribución, como son los procesos de generación, recombinación y las colisiones, se les denomina ‘scattering events’ (sc). Luego:

$$\frac{df(t, \vec{x}, \vec{k})}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{sc} \quad (2.38)$$

Expandiendo la derivada total, la ecuación de transporte de Boltzmann para la función distribución queda [21]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}_g \cdot \nabla_{\vec{x}} f + \frac{\vec{F}_e}{\hbar} \cdot \nabla_{\vec{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{sc}, \quad (2.39)$$

donde \vec{v}_g es la velocidad de grupo definida según la Ec. (2.35) y \vec{F}_e es la fuerza externa actuando en el sistema. La ecuación de Boltzmann es válida para materiales inhomogéneos con estructura de banda arbitraria [1].

La ecuación de Boltzmann (tal como se ha presentado) tiene los siguientes supuestos:

- La aproximación semi-clásica es válida.
- Las colisiones son consideradas procesos instantáneos.
- Las colisiones son consideradas sólo binarias.
- Las partículas son todas idénticas.
- Fuerzas de interacción interatómica son despreciadas.

En apéndice A se muestra una derivación de las ecuaciones hidrodinámicas a partir de la ecuación de Boltzman, dichas ecuaciones son la base para el modelo usado en esta Tesis.

²En la teoría clásica de gases el radio de las partículas es despreciado, excepto la sección transversal que es considerada para la deducción de los términos de colisión [12]

2.1.8. Variables Macroscópicas

Desde la función distribución se pueden derivar cantidades macroscópicas, como la densidad de partículas, velocidad, y energía (para electrones u hoyos), que pueden ser medidas experimentalmente. Si se define el operador ' $\langle \rangle$ ' como:

$$\langle g \rangle = \frac{1}{4\pi^3} \int_K g(\vec{x}, \vec{k}, t) d\vec{k} \quad (2.40)$$

Entonces, la densidad de electrones, densidad de hoyos, velocidad promedio (*velocity drift*) del electrón, y velocidad promedio del hoyo son definidas como:

$$n = \langle f_e(\vec{x}, \vec{k}, t) \rangle \quad (2.41)$$

$$p = \langle f_h(\vec{x}, \vec{k}, t) \rangle \quad (2.42)$$

$$u_e = \frac{1}{n} \langle v_{eg} f_e(\vec{x}, \vec{k}, t) \rangle \quad (2.43)$$

$$u_h = \frac{1}{p} \langle v_{hg} f_h(\vec{x}, \vec{k}, t) \rangle \quad (2.44)$$

Además, si se define una velocidad termal (v^{th}), se puede relacionar la energía termal de las partículas con la temperatura de ellas (electron T_e , y hoyo T_h):

$$v^{th} = v_g - u \quad (2.45)$$

$$T_e = \frac{m_e}{3k_B} \left(\langle v_i^{th} v_i^{th} \rangle_e + \langle v_j^{th} v_j^{th} \rangle_e + \langle v_k^{th} v_k^{th} \rangle_e \right) \quad (2.46)$$

$$T_h = \frac{m_h}{3k_B} \left(\langle v_i^{th} v_i^{th} \rangle_h + \langle v_j^{th} v_j^{th} \rangle_h + \langle v_k^{th} v_k^{th} \rangle_h \right) \quad (2.47)$$

Por otro lado, con estas variables macroscópicas es posible definir la densidad de corriente total (J_T), la densidad de corriente de electrones (J_e), y la densidad de corriente de hoyos (J_h):

$$J_e = -en \cdot u_e \quad (2.48)$$

$$J_h = +ep \cdot u_h \quad (2.49)$$

$$J_T = J_e + J_h \quad (2.50)$$

2.1.9. Equilibrio Termodinámico

Equilibrio entre dos o más cuerpos o dos o más sistemas significa que las propiedades bajo observación no cambian con el tiempo entre los dos o más cuerpos o los dos o más sistemas. Como la materia está compuesta por átomos y partículas atómicas en continua interacción o colisión debido a las fuerzas electromagnéticas que experimentan, no puede haber **equilibrio** a un nivel atómico y a escalas de tiempo comparables con los tiempos entre colisión. Sólo es posible hablar de equilibrios macroscópicos, que se refieren a promedios de una variable en estudio en el tiempo y en el espacio. Son por tanto equilibrios dinámicos.

Fenomenológicamente es posible identificar dos tipos de equilibrios en los materiales de estado sólido: equilibrio electrónico (de hoyos y electrones) y equilibrios atómicos (térmico, químico, electroquímico y mecánico). Todos estos tipos de equilibrio tienen una propiedad común: la condición de equilibrio macroscópico se da cuando la energía neta transferida por la variable es cero [26]. La condición anterior es mantenida por las continuas colisiones entre partículas. Estas colisiones causan cambios de velocidad en las partículas y homogenizan cualquier cambio espacial y variación en el tiempo del promedio de la energía cinética.

El **equilibrio electrónico** es la condición de cero corriente electrónica y voltaje aplicado entre dos contactos. Es decir, no existe energía fluyendo dentro o fuera del sistema debido al movimiento de electrones. En este equilibrio no sólo la energía neta es cero, sino que también la de cada especie (electrón y hoyo). Un ejemplo de lo anterior es el circuito abierto de una celda solar, la corriente es cero debido a que el circuito está abierto, pero las corrientes de electrones y hoyos son individualmente distintas de cero aunque se cancelen exactamente. Esta celda iluminada en circuito abierto está en un estado estacionario electrónico, pero no en **equilibrio electrónico**. El equilibrio electrónico requiere simultáneamente que la corriente y el voltaje aplicado sea cero.

El **equilibrio químico** se refiere a la condición espacial y temporal de que la concentración de una especie sea constante. Es decir, no existe difusión de las especies y la generación-recombinación neta es igual a cero. Por ejemplo, en una junta PN los transportadores de carga (electrones y hoyo) nunca están en equilibrio químico cerca de la junta, pero si es una junta homogénea su matriz de átomos sí está en equilibrio químico.

El **equilibrio electroquímico** es idéntico al equilibrio electrónico pero aplicado a iones de la matriz cristalina, es decir, la corriente eléctrica para cada especie de ión debe ser cero.

El **equilibrio térmico** denota la condición de transferencia de calor nula. El calor se propaga vía ondas producidas por la vibración de átomos en el material sólido y a las colisiones entre los transportadores de carga. Luego, la condición de equilibrio térmico se da cuando el promedio de la energía cinética debida a vibraciones aleatorias (de átomos y transportadores de carga) permanece constante en el espacio y el tiempo. La energía de las vibraciones aleatorias, vale decir la energía térmica, se mide a través de la temperatura. Cuando un transportador de carga está en equilibrio térmico consigo mismo, entonces su energía térmica puede ser representada con una sola temperatura.

El **equilibrio térmico** entre más de dos especies de partículas se da cuando el intercambio neto de energía térmica es igual a cero. Por ejemplo, los electrones de la banda de conducción están en equilibrio térmico con la red cristalina cuando la energía cinética debida a las vibraciones aleatorias de los átomos del cristal es igual a la energía cinética de las vibraciones aleatorias del gas de electrones, es decir, cuando tienen la misma temperatura. Si un **campo eléctrico de alta frecuencia** es aplicado, los átomos del cristal no se desvían significativamente de la temperatura ambiente, pues la energía oscilatoria adicional dada por el campo es bastante pequeña en comparación con el campo eléctrico interno producido por los núcleos atómicos. Sin embargo, electrones, hoyos e iones intersticiales que experimentan un campo eléctrico interno bastante más reducido pueden ser acelerados y desacelerados fácilmente, por lo que su temperatura puede subir rápidamente y ser bastante mayor que la del cristal (*hot electrons, hot holes*). Lo anterior es un ejemplo de un sistema que no está en equilibrio térmico (sus componentes no tienen la misma temperatura).

Cuando se hable de que **los electrones (hoyos) están en equilibrio térmico** se hará referencia a que los electrones (hoyos) y el cristal tienen la misma temperatura. Cuando se diga que el semiconductor está en equilibrio térmico entonces significará que electrones, hoyos y cristal tienen la misma temperatura.

2.2. Propiedades de Semiconductores en Equilibrio Térmico

Los semiconductores son materiales en los cuales entre la banda de valencia y la banda de conducción existe un gap (E_g) ‘moderado’. La banda de valencia está casi totalmente llena de electrones, en cambio la banda de conducción está casi vacía. En semiconductores para llevar a un electrón desde la banda de valencia a la banda de conducción por medio de la absorción de un fotón, el fotón debe tener al menos una energía $\hbar k = E_g$. Fotones con energías menores no pueden cambiar de banda a un electrón, ellos son transmitidos o reflejados por el semiconductor (sin considerar otro tipo de absorciones, por ejemplo por impurezas del cristal).

Cuando un electrón llega a la banda de conducción, después de haber absorbido la energía de un fotón, éste pierde rápidamente energía por medio de vibraciones térmicas (fonones, ver [3, 25]), hasta llegar al mínimo de la energía de la banda de conducción. Desde este punto, para poder seguir disminuyendo la energía, el electrón necesita perder de forma continua E_g , pues cualquier otro estado entre el mínimo de conducción y el máximo de valencia no es permitido. Estos procesos son bastante improbables, y como consecuencia un electrón puede permanecer en la banda de conducción al rededor de 10^{-3} [s]. Este tiempo, es comparativamente un ‘largo’ tiempo y hace posible el proceso de conversión de la energía del electrón en energía eléctrica.

A temperatura ambiente y bajo condiciones normales de presión (1[atm]) los valores del ‘gap’ para materiales de alta pureza (E_g) son: 0,66[eV] para el *Ge*, 1,12[eV] para *Si*, y 1,42[eV] para el *GaAs*. Para semiconductores con alta concentración de impurezas el valor del ‘gap’ disminuye; lo mismo ocurre al aumentar la temperatura (ver Figura 2.8)

Los semiconductores bajo la condición de equilibrio térmico³ cumplen que el número de electrones en el rango de energía E a $E + dE$ en la banda de conducción y valencia (hoyos) es constante, independiente del tiempo. Bajo esta condición es posible deducir expresiones para la densidad de transportadores (estáticos, sin corriente) en función de la temperatura y de impurezas incluidas en el semiconductor. En esta sección se describen dichas expresiones.

2.2.1. Función Distribución para Electrones (f_e) en Equilibrio Térmico

El diferencial densidad electrones (dn) es igual a:

$$dn(E_e) = D_e(E_e)f_e(E_e)dE_e, \quad (2.51)$$

donde E_e es la energía del electrón, $D_e(E_e)$ la densidad de estados a la energía E_e , $f_e(E_e)$ la función distribución de probabilidad de ocupación de los estados a la energía E_e , y dE_e el diferencial de energía del electrón.

La función distribución de electrones (f_e) debe satisfacer las siguientes condiciones [26, 32]:

³Luego nada que altere el equilibrio es permitido: ni voltaje aplicado, ni luz aplicada, ni inyección de electrones.

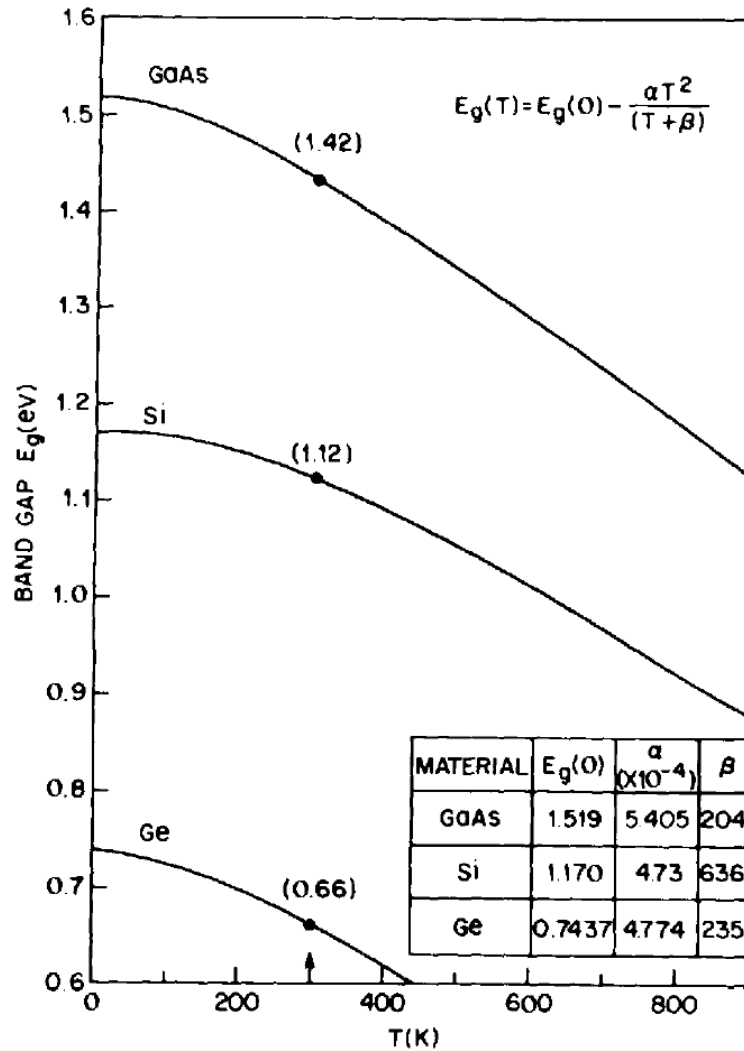


Figura 2.8: Gap de banda en función de la temperatura para Ge, Si, y GaAs. Figura tomada de [29].

- No debe haber dos o más electrones con el mismo estado cuántico (principio de exclusión de Pauli).
- La ocupación de los estados debe depender sólo de la energía, y no por ejemplo del momentum.
- La ocupación de los estados debe ser tal que minimice la energía libre: $E_e - T_e S_e$ (T_e es la temperatura del electrón y S_e es la entropía del electrón).

La función distribución que satisface todas estas condiciones es la distribución de Fermi-Dirac:

$$f_e(E_e) = \frac{1}{\exp[(E_e - E_F)/k_B T] + 1}, \quad (2.52)$$

donde E_F es la energía de Fermi, que es la energía en la cual la probabilidad de ocupación es igual a 1/2, y T es la temperatura de equilibrio. La Figura 2.9 muestra la función de distribución de Fermi-Dirac para distintas temperaturas.

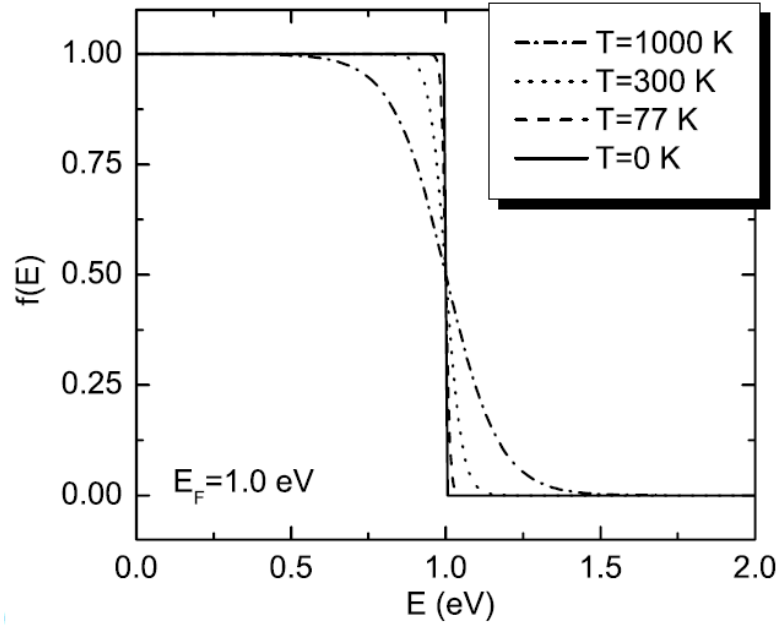


Figura 2.9: Ejemplos de la función distribución de Fermi–Dirac para distintas temperaturas de equilibrio.

2.2.2. Densidad de Estados para Electrones (D_e)

En átomos aislados los electrones tienen valores de energía discretos separados por grandes 'gap' de energía. En la materia condensada según lo expuesto al comienzo de este capítulo, la distancia entre átomos sólo se limita a unos pocos [Å]. Lo anterior provoca que en vez de tener energías bien definidas para los electrones se tienen 'bandas' de energía. La Figura 2.6 esquematiza lo dicho anteriormente.

Una forma de calcular aproximadamente el número de estados disponibles para una energía de electrón dada es la siguiente. Por el principio de incertidumbre se tiene que:

$$(\Delta x)^3 (\Delta p)^3 = h^3 \quad (2.53)$$

Entonces si consideramos $(\Delta x)^3 = V$, donde V es el volumen del todo el cristal, el volumen en el espacio de momentum de un *estado* es igual a:

$$(\Delta p)^3 = \frac{h^3}{V} \quad (2.54)$$

Por otro lado, todos *los estados con momentum* $|p'| \leq |p|$ llenan una esfera de volumen $(4/3)\pi |p|^3$ en el espacio de momentum. El *número de estados de momentum* es entonces igual a:

$$N(|p|) = \frac{4\pi |p|^3 V}{3h^3} \quad (2.55)$$

Considerando que por cada estado de momentum se encuentran dos electrones con spin opuesto, el número de estados disponibles para electrones con $|p'| \leq |p|$ es:

$$N_e(|p|) = \frac{8\pi |p|^3 V}{3h^3} \quad (2.56)$$

Para determinar el número de estados en función de la energía del electrón, se necesita encontrar una relación entre el momentum y la energía. En las secciones anteriores se ha visto que esta relación para cristales no es igual que para electrones libres. Sin embargo, en el mínimo de la banda de conducción es posible aproximar esta relación con la ecuación (2.32) obteniéndose para el número de estados en la banda de conducción la siguiente expresión:

$$N_e(E_e) = \frac{8\pi(2m_e^*)^{3/2}V}{3h^3}(E_e - E_C)^{3/2}, \quad (2.57)$$

donde E_C es la energía mínima de la banda de conducción. Para obtener la densidad de estados simplemente se debe derivar con respecto a la energía del electron (E_e) la expresión (2.57), obteniéndose:

$$D_e(E_e) = 4\pi \left(\frac{2m_e^*}{h^2} \right)^{3/2} (E_e - E_C)^{1/2} \quad (2.58)$$

2.2.3. Densidad de Concentración de Electrones en Equilibrio Térmico y Eléctrico (n)

La densidad de concentración de electrones puede ser calculada como:

$$n = \int_{E_C}^{\infty} D_e(E_e) f_e(E_e) dE_e \quad (2.59)$$

Para la integración se puede hacer uso de la densidad de estados de la ecuación (2.58), que en principio es válida sólo cerca del mínimo de la banda de conducción, pero que puede ser aplicada a todo el rango energético, pues a grandes valores de E_e la densidad $f_e(E_e)$ toma valores muy pequeños. Además, para $E_F < E_C - 3k_B T$ se puede ignorar el '+1' en el denominador de la expresión para la distribución de Fermi en la ecuación (2.52), obteniéndose la siguiente aproximación de la integral⁴:

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) \quad (2.60)$$

Con:

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2}, \quad (2.61)$$

donde N_C es la densidad efectiva de estados de la banda de conducción. La aproximación obtenida al despreciar '+1' en el denominador de la función de Fermi es valida para $n \ll N_C$.

2.2.4. Densidad de Concentración de Hoyos en Equilibrio Térmico y Eléctrico (p)

Similarmente que para electrones, es posible obtener la densidad de concentración de hoyos en la banda de valencia

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} D_e(E_e) [1 - f_e(E_e)] dE_e = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right), \quad (2.62)$$

⁴Aquí se ha supuesto que la energía del electron es principalmente térmica, luego $E_e \approx 3k_B T$.

donde E_V es la energía máxima en la banda de valencia, y N_V es la densidad efectiva de estados de hoyos igual a:

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (2.63)$$

2.2.5. Densidad de Transportadores Intrínseca

Si se multiplica las densidades de electrones y hoyos en equilibrio térmico se llega a la siguiente expresión:

$$np = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{k_B T}\right) = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \quad (2.64)$$

Esta expresión no depende del valor de la energía de Fermi, ni de las densidades individuales de electrones u hoyos. En un semiconductor puro, llamado semiconductor intrínseco, los electrones en la banda de conducción provienen de la banda de valencia vía procesos de generación. La densidad de electrones es por tanto igual a la de hoyos. Estas densidades de concentración en semiconductores puros son conocidas como 'densidades intrínsecas' (n_i), así:

$$np = n_i^2 \quad (2.65)$$

La Figura 2.10 muestra la densidad intrínseca en función de la temperatura para algunos semiconductores.

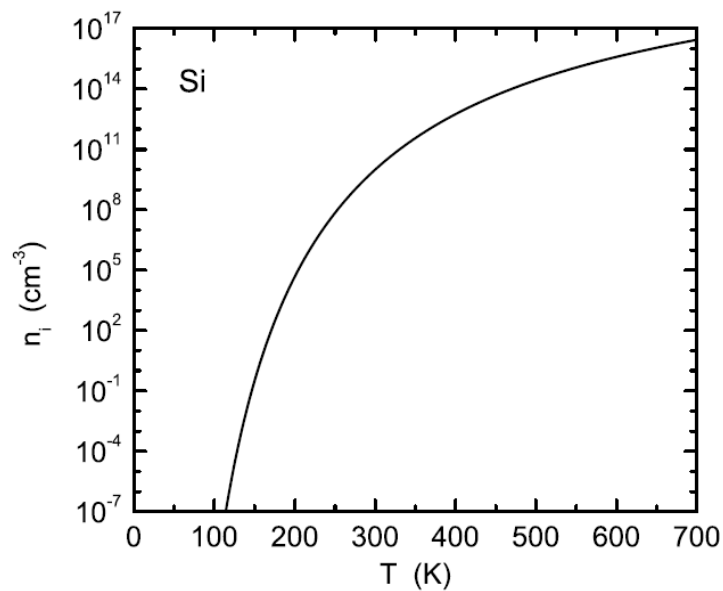


Figura 2.10: Densidad de concentración intrínseca para Si en función de la temperatura. Tomada de [11]

2.2.6. Dopaje de Semiconductores

Dopar a un semiconductor significa introducir impurezas (átomos) al semiconductor. En el caso más simple estos átomos remplazan a los átomos del semiconductor en la mismas posiciones que ellos ocupaban en el

crystal. La Figura 2.11 esquematiza el proceso de dopaje. Existen dopantes que proporcionan electrones al cristal llamados donadores, y dopantes que proporcionan hoyos al cristal llamados aceptores. Donadores son impurezas que tienen más electrones de valencia que los átomos del cristal. Aceptores son impurezas con menos electrones de valencia que los átomos del cristal, y por ende crean espacios (hoyos) en la banda de valencia.

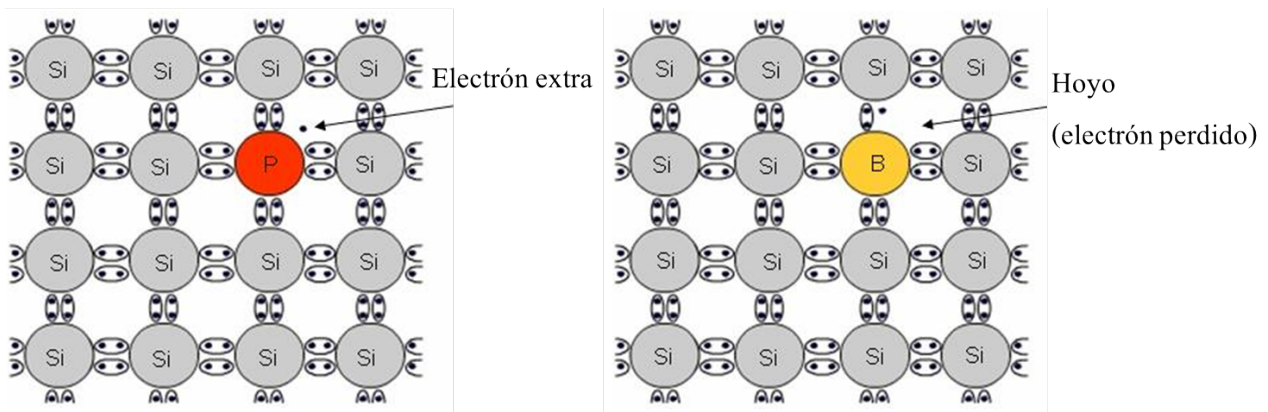


Figura 2.11: Esquema de proceso de dopaje.

A los semiconductores dopados con donadores se les denomina semiconductores tipo ‘n’; por el contrario si han sido dopados con aceptores se les llama semiconductores tipo ‘p’.

Para cristales de Ge y Si, con valencia cuatro, átomos de P (fósforo) o de As(arsenico) (ambos con valencia cinco) son los más comunes donadores. Y átomos de B (boro) o In (indio) (ambos con valencia tres) son los más comunes aceptores.

Si N_D es la densidad de concentración de donadores, entonces en un semiconductor tipo ‘n’ a temperatura ambiente $n \approx N_D$ y por la relación (2.65) la densidad de concentración de hoyos es igual a n_i^2/N_D . De la misma forma para un semiconductor tipo ‘p’ con densidad de aceptores igual a N_A se tiene que $p \approx N_A$ y $n \approx n_i^2/N_A$. Estas expresiones se deducen directamente al considerar que a temperatura ambiente casi todas las impurezas se encuentran ionizadas.

Además si se consideran las relaciones del párrafo anterior y las ecuaciones (2.60) y (2.62) se obtiene que la energía de Fermi cambia de la siguiente manera con el dopaje:

$$E_F = E_C - k_B T \ln \left(\frac{N_C}{N_D} \right) \quad (2.66)$$

Para el caso de un semiconductor tipo ‘n’, y:

$$E_F = E_V + k_B T \ln \left(\frac{N_V}{N_A} \right) \quad (2.67)$$

Para un semiconductor tipo ‘p’.

2.2.7. Densidad de Transportadores Extrínseca

En un semiconductor con densidad de impurezas espacialmente constante, dadas las propiedades de un material (gap de banda y masas efectivas), la densidad de transportadores depende de: la temperatura del semiconductor⁵, la densidad de aceptores y la densidad de donadores. Se puede calcular la densidad de transportadores de un semiconductor extrínseco en equilibrio basados en: la ley de acción de masas y la condición de neutralidad de carga. Una descripción completa de como se deducen las expresiones a continuación mostradas puede encontrarse en [26].

Para un semiconductor tipo N:

$$n = \frac{1}{2}[N_D - N_A + \sqrt{(N_D - N_A)^2 + 4n_i^2}], \quad (2.68)$$

$$p = n_i^2/n \quad (2.69)$$

Para un semiconductor tipo P:

$$p = \frac{1}{2}[N_A - N_D + \sqrt{(N_A - N_D)^2 + 4n_i^2}], \quad (2.70)$$

$$n = n_i^2/p \quad (2.71)$$

Notar que a temperatura ambiente ($T \approx 300[K]$) para semiconductores dopados se cumple que $n_i \ll (N_A - N_D)$ o $n_i \ll (N_D - N_A)$ recuperándose las expresiones presentadas en la sección anterior.

2.2.8. Distribuciones Quasi-Fermi

Por irradiación, electrones que se encuentran en la banda valencia son llevados a la banda de conducción, generándose un hoyo en la banda de valencia. Entonces en presencia de radiación la densidad de concentración de electrones y hoyos aumenta, por lo que la probabilidad de ocupación de un estado a una misma energía aumenta en comparación al estado sin radiación (aumenta para electrones y aumenta para hoyos). En otras palabras, la energía de Fermi debería estar más cerca de la banda de conducción, y al mismo tiempo más cerca de la banda de valencia.

La solución del dilema se resuelve de la siguiente manera: hay siempre dos distribuciones de Fermi, la distribución $f_C(E_e)$ con la energía de Fermi E_{FC} que aplica para la ocupación de estados en la banda de conducción, y otra distribución de Fermi $f_V(E_e)$ con energía de Fermi E_{FV} que aplica para la ocupación de estados en la banda de valencia. Entonces, las densidades se redefinen como:

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_{FC}}{k_B T}\right), \quad (2.72)$$

$$p = N_V \exp\left(-\frac{E_{FV} - E_V}{k_B T}\right), \quad (2.73)$$

⁵Recordar que estas son propiedades en equilibrio por lo que una temperatura describe el estado térmico del material y los transportadores, es decir la temperatura del cristal es igual a la de los transportadores.

De lo anterior se sigue que:

$$np = n_i^2 \exp\left(\frac{E_{FC} - E_{FV}}{k_B T}\right) \quad (2.74)$$

Sin radiación $E_{FC} = E_{FV} = E_F$ recuperándose las relaciones descritas en las secciones anteriores. Cabe destacar que las expresiones obtenidas: (2.72), (2.73) y (2.74) son válidas sólo en equilibrio térmico (pero con radiación).

2.3. Energía de Fermi y Potencial Electroquímico

La energía del electrón E_e se divide en una energía potencial (por ejemplo E_C para la banda de conducción) y una energía cinética. A su vez, la energía potencial esta compuesta de una energía potencial química (μ_e) y un potencial eléctrico ($-eV$).

Consideremos el cambio de energía dE a presión y temperatura constante:

$$dE(S, V, M_i, q, \dots) = TdS - PdV + \sum_i \mu_i dM_i + Vdq + \dots \quad (2.75)$$

Donde T es la temperatura de equilibrio, S es la entropía, P es la presión, μ_i es el potencial químico, M_i el número de partículas de la especie ' i ', $\mu_i dM_i$ es la energía química de la especie i , q es la carga, y Vdq es la energía eléctrica. Existen otras formas de energía, pero estas son las más importantes en la mayoría de los dispositivos a base de semiconductores.

Ahora bien ¿Cuánta energía eléctrica el semiconductor libera cuando un par electrón-hoyo es removido? Para responder esta pregunta calculemos el cambio de energía libre de Gibbs:

$$dF_e(T, V, M_e, q) = dE_e - d(TS_e) = -S_e dT - P_e dV + \mu_e dM_e + Vdq \quad (2.76)$$

$$dF_h(T, V, M_h, q) = -S_h dT - P_h dV + \mu_h dM_h + Vdq \quad (2.77)$$

El cambio de energía libre total es entonces $dF = dF_e + dF_h$. El cambio de la carga total es:

$$dq = z_i e dM_i \quad (2.78)$$

Donde $z_i = +1$ para hoyos y $z_i = -1$ para electrones. De (2.78) se sigue que:

$$\mu_i dM_i + Vdq = (\mu_i + z_i eV) dM_i = \eta_i dM_i \quad (2.79)$$

donde η_i es llamado potencial electro químico.

En operación la mayoría de los dispositivos a base de semiconductores, en particular las celdas solares, funcionan a temperatura y volumen constante. Además, cuando corriente pasa a través de ellos igual cantidad de electrones son removidos y adheridos, es decir $dM = dM_e = dM_h$ (corriente constante en los contactos), entonces

el cambio en energía libre es:

$$dF = dF_e + dF_h = (\eta_e + \eta_h) dM \quad (2.80)$$

La pregunta ahora se reduce a calcular la diferencia de potenciales electroquímicos entre electrones y hoyos. Si se considera la energía media por electrón:

$$\frac{E_e}{M_e} = \langle E_e \rangle = T \frac{S_e}{M_e} - \frac{P_e V_e}{M_e} + \eta_e \quad (2.81)$$

$$\frac{E_h}{M_h} = \langle E_h \rangle = T \frac{S_h}{M_h} - \frac{P_h V_h}{M_h} + \eta_h \quad (2.82)$$

Bajo la aproximación de que electrones y hoyos son gases ideales es posible usar la siguiente relación descubierta por Sackur y Tetrode para gases ideales, después de adaptados para partículas con spin 1/2 [32]:

$$\frac{S_e}{M_e} = k_B \left(\frac{5}{2} + \ln \left(\frac{N_C}{n} \right) \right) \quad (2.83)$$

$$\frac{S_h}{M_h} = k_B \left(\frac{5}{2} + \ln \left(\frac{N_V}{p} \right) \right) \quad (2.84)$$

Además para gases ideales también se cumple que:

$$PV = Mk_B T \quad (2.85)$$

Usando (2.83) y (2.85) en (2.81) se obtiene:

$$\langle E_e \rangle = k_B T \left[\frac{5}{2} + \ln \left(\frac{N_C}{n} \right) \right] - k_B T + \eta_e \quad (2.86)$$

Recordando que $\langle E_e \rangle = E_C + \frac{3}{2} k_B T$, entonces:

$$E_C - \eta_e = k_B T \ln \left(\frac{N_C}{n} \right) \quad (2.87)$$

Que es lo mismo que:

$$n = N_C \exp \left[\frac{-(E_C - \eta_e)}{k_B T} \right] \quad (2.88)$$

Comparando (2.72) con (2.88) se puede concluir que en equilibrio térmico:

$$\eta_e = E_{FC} \quad (2.89)$$

Del mismo modo para hoyos se puede llegar a que:

$$\eta_h = -E_{FV} \quad (2.90)$$

Por lo que el cambio en energía libre al remover dM electrones y hoyos es:

$$dF = dF_e + dF_h = (\eta_e + \eta_h) dM = (E_{FC} - E_{FV}) dM \quad (2.91)$$

Es claro entonces que cuando $E_{FC} = E_{FV}$, que es cuando no se aplica radiación, el dispositivo semiconductor no puede entregar trabajo en la producción de energía eléctrica. La Figura 2.12 esquematiza las formas de energía en electrones y hoyos.

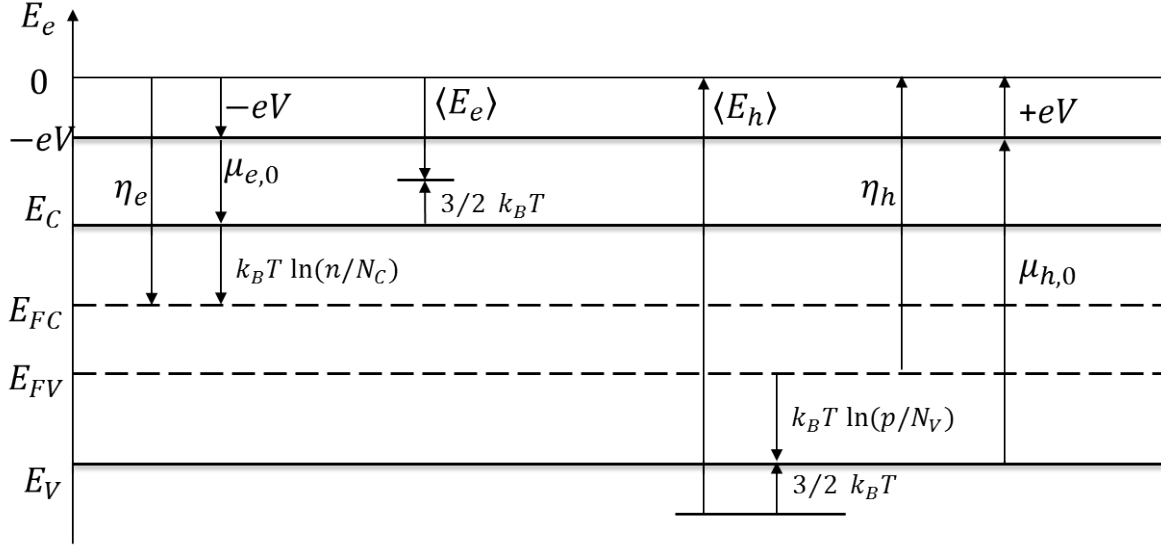


Figura 2.12: Esquema de las formas de energía en electrones y hoyos. Tomada de [23]

Cabe mencionar que la energía química de los transportadores puede ser descompuesta en una parte que sea independiente de la concentración de éstos y otra que dependa de la concentración según [26, 32]:

$$\mu_e = \mu_{e,0} + k_B T \ln\left(\frac{n}{N_C}\right) \quad (2.92)$$

$$\mu_h = \mu_{h,0} + k_B T \ln\left(\frac{p}{N_V}\right) \quad (2.93)$$

2.4. Generación de Electrones y Hoyos

Electrones y hoyos son producidos por procesos que deben cambiar la energía de los transportadores al menos en E_g para producir un par electrón-hoyo. En dicho proceso, un electrón que pertenece a la banda de valencia aumenta su energía para pasar a la banda de conducción, produciendo así un electrón y un hoyo. La generación se produce básicamente por dos procesos: generación por ionización de impacto y generación por absorción de fotones o vibraciones de la lattice (fonones).

En la generación por impacto electrones (o hoyos) con la suficiente energía (por ejemplo electrones de la banda de conducción) impactan los campos electromagnéticos de los electrones (o hoyos) de la banda de valencia

promoviéndolos a la banda de conducción. En la generación por absorción, en cambio, la energía es dada por fotones suficientemente excitados o por vibraciones del mismo cristal (fonones) con la suficiente energía.

La generación por absorción de fotones es el proceso más importante en celdas solares [26, 32]. Debido a que la radiación incide por una de las caras del semiconductor y va generando pares electrón-hoyo (y por ende el semiconductor va absorbiendo fotones), la intensidad va disminuyendo conforme se penetra en el semiconductor. Además, no toda la radiación incidente penetra al semiconductor, un porcentaje es reflejado. Considerando lo dicho es posible deducir, dada una radiación incidente, la función generación en función del espacio es [29, 32]:

$$G(\lambda, x) = \alpha_{In}(\lambda) \cdot (1 - F(\lambda)) \frac{I_f}{hc/\lambda} \cdot \exp[-\alpha_{In}x] \quad (2.94)$$

Donde $\alpha_{In}(\lambda)$ es el coeficiente de absorción, $F(\lambda)$ coeficiente de reflexión, I_f la luz incidente sobre la cara del semiconductor, c la velocidad de la luz, y λ en este caso la longitud de la onda de luz.

Cabe hacer notar que si el semiconductor es indirecto, entonces para que se produzca la generación electrón-hoyo además de absorberse un fotón debe absorberse un fonón (pseudo partícula que transporta la energía de vibración del cristal), dado que el electrón en la banda de valencia debe además de superar el gap de energía, aumentar su momentum, y el fotón tiene un momentum muy pequeño. Por lo anterior, el coeficiente de absorción de los semiconductores indirectos es menor que para semiconductores directos que no necesitan aumentar su momentum para subir a la banda de conducción.

2.5. Recombinación de Electrones y Hoyos

El proceso inverso a la producción de transportadores también existe, y es llamado recombinación. Físicamente en la recombinación un electrón de la banda de conducción vuelve a la banda de valencia, por ende, la energía perdida debe ser liberada, y es liberada en forma de luz (fotones) o de vibración del cristal (energía termal, fonones). En equilibrio térmico y químico en un ambiente con radiación la generación de transportadores es igual a la recombinación, es decir, son perfectamente balanceados.

Los procesos de recombinación en los cuales se liberan fotones se llaman ‘radiativos’ (R_r). En cambio, los procesos de recombinación donde no existe emisión de fotones son conocidos como ‘recombinación no radiativa’. En estos últimos, la energía liberada es absorbida por otros transportadores (recombinación Auger, R_{Au}) o por el cristal (recombinación vía impurezas, R_{SRH}) [21, 23].

En celdas solares el proceso de recombinación dominante es la recombinación vía impurezas (conocida también como *Shockley-Read-Hall recombination*) [29, 32]. La siguiente expresión fue deducida por Shockley, Read y Hall asumiendo equilibrio térmico y flujo de corriente nulo:

$$R_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n') + \tau_n(p + p')} \quad (2.95)$$

Con:

$$n' = N_C(T) \cdot \exp\left[\frac{-E_C + E_T}{k_B T}\right] \quad (2.96)$$

$$p' = N_V(T) \cdot \exp\left[\frac{E_V - E_T}{k_B T}\right] \quad (2.97)$$

Donde E_T es la energía donde los transportadores son atrapados para la recombinación (midgap traps). Para el GaAs E_T tiene un valor alrededor de $0,3[eV]$. Para estimar los tiempos de vida τ_p y τ_n es posible deducir las siguientes expresiones [29, 32]:

$$\tau_n(T) = \left(\frac{300[K]}{T}\right)^{3/2} \cdot \frac{\tau_{n,300}}{1 + \Gamma_n} \quad (2.98)$$

$$\tau_p(T) = \left(\frac{300[K]}{T}\right)^{3/2} \cdot \frac{\tau_{p,300}}{1 + \Gamma_p} \quad (2.99)$$

$$\tau_{n,300} = \frac{1}{\sigma_{T,n} \cdot N_T \cdot v_{n,300[K]}^{th}} \quad (2.100)$$

$$\tau_{p,300} = \frac{1}{\sigma_{T,p} \cdot N_T \cdot v_{p,300[K]}^{th}} \quad (2.101)$$

$$v_n^{th} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m_e}} \quad (2.102)$$

$$v_p^{th} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m_p}} \quad (2.103)$$

Los factores Γ_n y Γ_p son sólo relevantes para semiconductores indirectos, $\sigma_{T,n}$ es la sección transversal de captura de electrones, $\sigma_{T,p}$ es la sección transversal de captura de hoyos, N_T es la densidad de impurezas. Valores para el cálculo de R_{SRH} son presentados en la Tabla 2.1.

Material	N_T	E_T	$\sigma_{T,n}$	$\sigma_{T,p}$
	$[cm^{-3}]$	$[eV]$	$[cm^2]$	$[cm^2]$
GaAs	1e14	0,2 – 0,8	$1e-16$	-
Inp	1e13	0,1 – 0,5	$< 1e-17$	-
Si	1e13	0	$1e-15$	$1e-15$

Tabla 2.1: Parámetros para el cálculo de R_{SRH}

La ecuación (2.95) puede ser expresada en términos de la energía de Fermi [32]:

$$R_{SRH} = \frac{n_i \cdot \left(\exp\left[\frac{E_{FC} - E_{FV}}{k_B T}\right] - 1 \right)}{\tau_p \left(\exp\left[\frac{E_{FC} - E_i}{k_B T}\right] + \exp\left[\frac{E_T - E_i}{k_B T}\right] \right) + \tau_n \left(\exp\left[\frac{E_i - E_{FV}}{k_B T}\right] + \exp\left[\frac{E_i - E_T}{k_B T}\right] \right)} \quad (2.104)$$

Donde E_i es la energía de fermi de un semiconductor intrínseco en la oscuridad. La ecuación (2.104) puede ser fácilmente relacionada con el voltaje aplicado (V_{ap}) suponiendo que electrones y hoyos poseen la misma velocidad termal (v^{th}), que tienen la misma sección de 'trap' (σ), $E_{FC} - E_i = E_i - E_{FV} = eV_{ap}/2$, y $E_i = E_T$ [32]:

$$R_{SRH} = N_T \cdot \sigma \cdot v^{th} \cdot n_i \frac{\exp\left[\frac{eV_{ap}}{k_B T}\right] - 1}{2 \left[\exp\left(\frac{eV_{ap}}{2k_B T}\right) + 1 \right]} \quad (2.105)$$

Esta última relación es bastante útil pues relaciona el proceso de recombinación más importante en celdas solares con el voltaje aplicado.

2.6. Modelos para el Transporte de Carga en Semiconductores

En el comienzo del desarrollo de la tecnología de semiconductores, las características eléctricas de los dispositivos podían ser estimadas usando relaciones analíticas simples derivadas del modelo ‘Drift-Diffusion’ (DD). Varias simplificaciones fueron hechas para obtener tales soluciones y sin embargo, dichas soluciones capturaban las características básicas de los dispositivos. Con el avance de la tecnología, los dispositivos se hicieron más pequeños y estas aproximaciones perdieron su validez, por lo que fue requerida una descripción más precisa. Este objetivo fue logrado resolviendo las ecuaciones de DD numéricamente.

Simulaciones numéricas del transporte de carga en semiconductores datan de Scharfetter y Gummel [27], quienes propusieron una robusta discretización de las ecuaciones de DD. Sin embargo, los dispositivos se hicieron aún más pequeños, del orden de unos pocos micrones o menos, entonces los supuestos de DD perdieron validez [30]. Desde entonces, modelos de transporte semiclásicos (por ejemplo los modelos hidrodinámicos), cuánticos, y modelos de ‘Montecarlo’ [9, 20] han estado continuamente refinándose y extendiéndose para lograr con mayor precisión capturar los fenómenos que están ocurriendo en estos dispositivos tan pequeños.

En el transporte 2D de carga (two-dimensional electron gas, 2DEG) existen tres regímenes: balístico, quasis-difusivo y difusivo [17]. La distinción entre estos regímenes esta definida por la magnitud relativa del ‘camino libre’ antes del choque electrón-electrón (l_{e-e}), el ‘camino libre’ antes del choque electrón-fonón (l_{e-ph}), el largo de onda del electrón (λ), y el largo característico del dispositivo (L). La Figura 2.13 resume, de acuerdo a las dimensiones mencionadas anteriormente, el alcance de los modelos usados actualmente en la descripción del transporte de carga en dispositivos a base de semiconductores.

En el nivel más básico ‘modelar la interacción partícula a partícula’, es usado el método de Monte Carlo. En el método de Monte Carlo la trayectoria de un número estadísticamente significativo de partículas es simulada [8, 13, 17]. Esta aproximación es útil para escalas de tiempo del orden de los femtosegundos ($10^{-15}[s]$) y largos de escala bajo los nanómetros ($10^{-9}[m]$). En la mayoría de los casos de dispositivos a base de semiconductores una simulación tan detallada como ésta es computacionalmente imposible.

Otra aproximación es estudiar la evolución de la función distribución de probabilidad de ocupación de los estados de los transportadores (ej: en equilibrio térmico y eléctrico la función de Fermi). Dicha función de probabilidad es gobernada por la ecuación de transporte de Boltzmann (ETB) que esencialmente es una ecuación de balance del número de partículas. Resolver directamente ETB requiere calcular completamente la función distribución de probabilidad. Sin embargo, una aproximación más práctica es resolver los momentos de ETB (ver apéndice A). Resolver los momentos de ETB es encontrar resultados de las ecuaciones de conservación de masa, energía y momentum sin requerir un conocimiento detallado de la función distribución de probabilidad. Los modelos que hacen esto son llamados modelos hidrodinámicos [2] que aparte de ser menos costosos

	$L \ll l_{e-ph}$			$L \approx l_{e-ph}$	$L \gg l_{e-ph}$
	$L < \lambda$	$L < l_{e-e}$	$L \gg l_{e-e}$		
Régimen de Transporte	Quántico	Balístico	Fluido	Fluido	Difusivo
Scattering	Raro	Raro	e-e dominante, e-ph minoritario		Mucho
Modelo de Transporte Posible					Drift/diffusion
	Hidrodinámico Quántico		Hidrodinámico		
		Monte Carlo			
	Schrödinger, Funciones de Green				
Aplicaciones	Pozos quánticos, supercristales	Transistores Balísticos	No muy explorado	No muy explorado	Curvas corriente/voltage

Figura 2.13: Alcance de los modelos usados actualmente para la descripción del transporte de carga en dispositivos a base de semiconductores. Tabla tomada de [17].

computacionalmente en comparación con el método de Monte Carlo [7], sus similitudes con el flujo de fluidos compresibles da una base para el entendimiento teórico y para el uso de técnicas numéricas.

Finalmente, para grandes tiempos y grandes dimensiones (relativamente hablando), el flujo de partículas puede ser descrito por las ecuaciones del modelo DD, las cuales actualmente son usadas para el diseño de transistores, lasers y circuitos integrados. Este modelo es el más usado en dispositivos semiconductores. El modelo DD puede ser derivado de ETB tomando los dos primeros momentos y haciendo algunas simplificaciones (ver apéndice B). La principal ventaja de DD es que sus ecuaciones son las más simples y sus soluciones numéricas son rápidas. Sin embargo, las ecuaciones de DD desprecian fenómenos de transporte que son importantes para pequeños dispositivos, altos voltajes, y/o altas tasas de generación (procesos de colisión entre transportadores y el cristal) [30].

A continuación se describen en mayor detalle los modelos DD y ETB.

2.6.1. El Modelo Drift Diffusion

En el modelo ‘Drift-Diffusion’ la densidad de corriente de los transportadores es fenomenológicamente expresada como la suma de dos componentes, la componente ‘Drift’, que es la ‘fuerza’ que aporta el campo eléctrico para la creación de corriente, y la componente ‘Diffusion’ que es la ‘fuerza’ que aporta la diferencia de la densidad de concentración de transportadores para la generación de corriente.

Las ecuaciones para la densidad de corriente de electrones y hoyos queda:

$$J_e = q(n\kappa_e \mathbf{E} + D_e \nabla n), \quad (2.106)$$

$$J_h = q(p\kappa_h \mathbf{E} - D_h \nabla p) \quad (2.107)$$

donde κ_e y κ_h son las movilidades para electrón y hoyo, D_e y D_h son las difusividades de electrón y hoyos respectivamente. La movilidad y la difusividad están relacionadas por medio de la expresión de Einstein:

$$D_e = \frac{k_B T}{q} \kappa_e, \quad (2.108)$$

$$D_h = \frac{k_B T}{q} \kappa_h \quad (2.109)$$

Las ecuaciones (2.106) y (2.107) son insertadas en la ecuación de continuidad, obteniéndose:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - R_n + \frac{1}{q} \nabla \cdot J_e, \quad (2.110)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - R_p - \frac{1}{q} \nabla \cdot J_h \quad (2.111)$$

En la aproximación DD se usa el supuesto de que los transportadores están en equilibrio térmico con el cristal ($T_e = T_h = T_L = T$). Además, en la resolución de las juntas PN los modelos DD asumen una zona vacía (sin transportadores) cerca de la junta y una zona neutra (zona de equilibrio de cargas) de corrientes de electrones y hoyos constantes lejos de la junta para poder resolver las densidades de los transportadores [29].

2.6.2. El Modelo Hidrodinámico

En este modelo se resuelven las ecuaciones de conservación de masa, momentum y energía, además de la ley de Gauss. Su derivación no es fenomenológica, pues se deduce de los momentos de ETB en el caso de las ecuaciones de masa, momentum y energía, y se agrega la ecuación de Poisson para completar el sistema.

La deducción de la ecuación de masa y momentum es presentada en el apéndice A. El modelo propuesto en esta tesis es un modelo hidrodinámico, y se presenta en detalle en el Capítulo 4.

El modelo hidrodinámico no es válido cuando fenómenos cuánticos del transporte de carga empiezan a ser importantes. Esto ocurre aproximadamente cuando el largo de los dispositivos (L) es menor que tres veces el largo del camino medio libre de los electrones (u hoyos) (l_{e-e} o l_{h-h}) [30], es decir $L < 3 \cdot l_{i-j}$. El camino medio libre depende de la temperatura y la composición del dispositivo [30]:

$$l_i = \tau_i \cdot v_i^{th}, \quad (2.112)$$

donde 'i' indica el tipo de transportador (electrón u hoyo).

De la ecuación (2.112), y tomando en cuenta que $\tau = \tau_e = \tau_h = 0,3[ps]$ para Si, se deduce que dispositivos menores a aproximadamente $200[nm]$ no podrán ser correctamente modelados con las ecuaciones hidrodinámicas para dispositivos basados en Si (a $300[K]$).

Las ventajas con respecto al DD son:

- Estos modelos pueden ser usados fuera del equilibrio térmico.
- Las juntas PN pueden ser resueltas sin la aproximación de zona neutra (o vacía).
- Son capaces de capturar inestabilidades [4–6].

2.7. Celdas Solares

Una celda solar es cualquier dispositivo que convierte de forma directa la energía de la luz en energía eléctrica (efecto fotoeléctrico). El desarrollo de las celdas solares comenzó en 1839 con el físico francés Antoine—César Becquerel. Becquerel observó el efecto fotoeléctrico mientras experimentaba con un electrodo sólido en una solución electrolítica, él vió que se desarrollaba un voltaje cuando la luz incidía sobre el electrodo. La primera celda solar fue construida en 1883 por Charles Fritts, quien usó juntas formadas por selenium con una extremadamente delgada capa de oro. En 1954, tres investigadores americanos, Gerald Pearson, Calvin Fuller y Daryl Chapin, diseñaron una celda solar capaz de convertir la luz solar en energía eléctrica con una eficiencia de 6%.

Básicamente en una celda solar, electrones y hoyos son ‘generados’ vía iluminación con el objeto de generar una corriente. Desde ese punto de vista, dos factores son importantes para que una celda solar tenga éxito: la radiación solar disponible para generación y la configuración de la celda (material y disposición del mismo) para crear corriente de manera energéticamente eficiente. Es decir, debe existir la capacidad de generar pares electrón—hoyo y la capacidad de generar un flujo de transportadores, de modo tal de llevar sin mayor pérdida la energía suministrada por la luz fuera de la celda hacia otras zonas de ‘trabajo’.

2.7.1. Radiación Solar

El Sol, desde su centro al exterior, tiene tres zonas principales:

- El núcleo, con una temperatura de $1,56 \cdot 10^7 [K]$ y una densidad de $100 [g/cm^3]$, posee el 40% de la masa y concentra el 90% de la energía generada.
- La zona convectiva, con una temperatura de $1,3 \cdot 10^5 [K]$ y una densidad de $0,07 [g/cm^3]$.
- La fotosfera con temperaturas de $5800 [K]$ y una densidad baja ($\approx 10^{-8} [g/cm^3]$).

La densidad de energía que llega a la Tierra (espacio exterior, cero masa de aire *AM0*) es de $1367 [W/m^2]$. Esta energía al año es 10^4 veces más que las necesidades energéticas actuales de la humanidad. La Figura 2.14 muestra espectros típicos de la radiación solar.

La radiación en masa de aire cero (es decir sin atmósfera, *AM0*) es importante para celdas solares en satélites. Cuando la luz pasa a través de la atmósfera terrestre parte de su energía es absorbida por ella (ozono, agua, CO_2 , etc.). Esta absorción es proporcional al largo que atraviesa el haz de luz en la atmósfera. De esta forma, dependiendo del meridiano del sol (γ , AM_x con $x = 1/\sin(\gamma)$), además del clima y la humedad, se puede calcular la radiación que finalmente llega a la corteza terrestre (ver Figura 2.15). Para *AM1.5*, la densidad de potencia incidente es $844 [W/m^2]$.

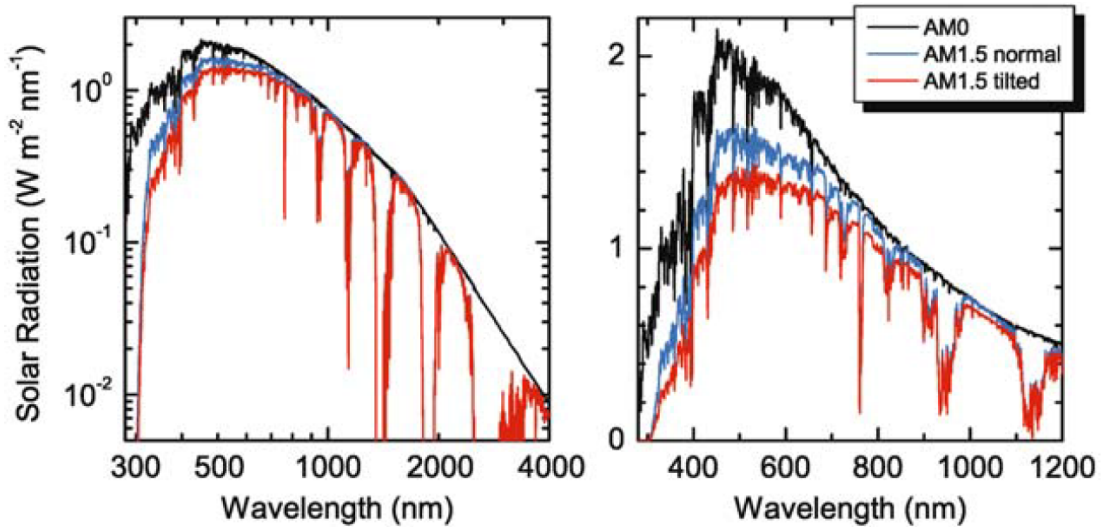


Figura 2.14: Espectro solar para AM0 (línea negra, irradiación extraterrestre), y AM1.5 para irradiación normal directa (línea azul) e irradiación total global (línea roja). Figura tomada de [11].

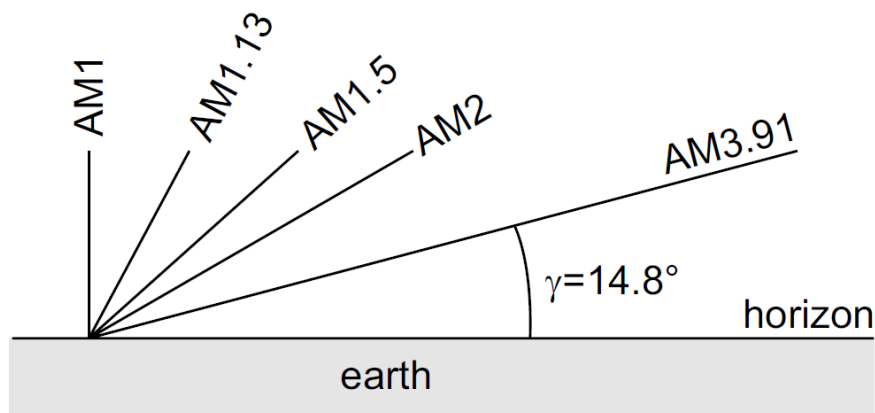


Figura 2.15: Esquema del recorrido de la luz en la atmósfera terrestre y definición del concepto de masa de aire AMx. Figura tomada de [11].

2.7.2. Mecanismos Básicos en Celdas Solares

El objetivo principal después de generado el par electrón–hoyo es forzar un flujo de transportadores para sacar la energía dada a los transportadores por la luz. En este sentido, lo ideal es tener paredes semi–permeables en los contactos, es decir, paredes que tengan una dirección preferencial de flujo. Por ejemplo, que en un contacto sólo puedan fluir hacia fuera electrones, y en el otro solo puedan fluir hacia fuera hoyos, para evitar una excesiva recombinación que significaría que la energía llevada por los transportadores de carga se transformara nuevamente en luz, ahora emitida por el mismo cuerpo, y en energía térmica absorbida por el cristal y disipada hacia el ambiente.

Una membrana que es permeable para electrones pero que bloquea el transporte de hoyos son los semiconductores tipo ‘n’, pues la concentración de hoyos es pequeña, por lo que el flujo de hoyos también lo es. Al contrario, el flujo de electrones es grande pues la concentración de electrones es grande en dichos semiconductores. De modo similar un semiconductor tipo ‘p’ es una membrana que es permeable a hoyos pero que bloquea el paso de electrones. Ahora bien, para que funcionen correctamente como membranas semi–permeables debe evitarse la inyección, ya sea en el semiconductor tipo ‘n’ o ‘p’ del transportador de

menor concentración, pues ésto aumentaría la permeabilidad del transportador minoritario.

La Figura 2.16 muestra una estructura de celda solar con los requerimientos planteados en el párrafo anterior. En ella la inyección de hoyos es prevenida en el lado izquierdo por un gran salto en la banda de valencia que actúa como barrera energética, de modo similar se ha incorporado en el lado derecho una barrera de energía para la inyección de electrones. En el centro es donde se produce la mayor tasa de generación, pues es donde la banda de conducción y de valencia están más cercanas. Contactos metálicos han sido supuestos, y es por esta razón que las energías de Fermi se juntan en dichos lados. Nótese que aunque existen grandes gradientes de E_{FV} en el lado 'n' (y grandes gradientes de E_{FC} en el lado 'p'), esto no significará una gran corriente, pues la concentración de los transportadores minoritarios es muy baja.

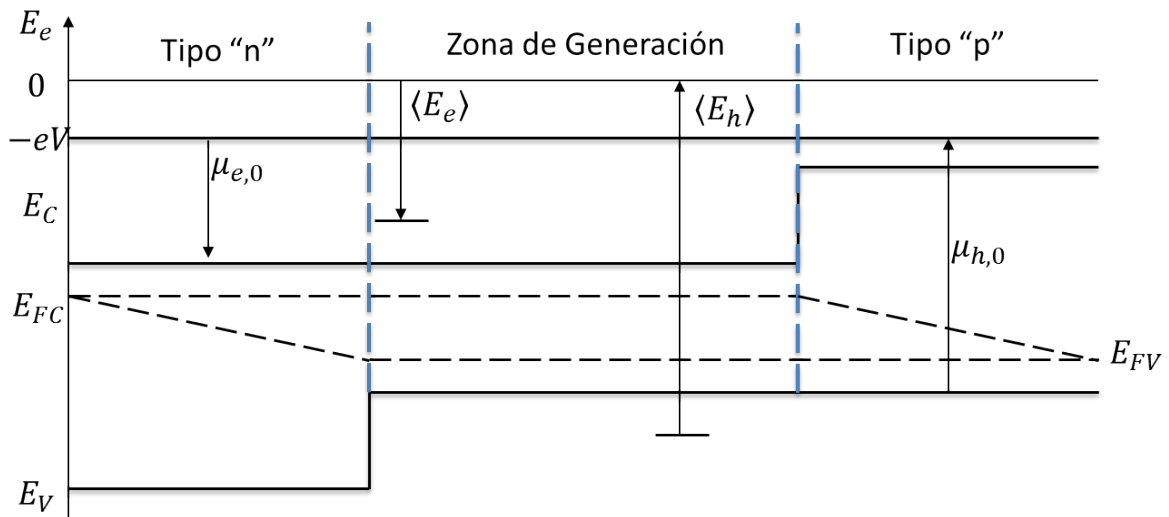


Figura 2.16: Esquema de las bandas de valencia para una celda ideal. Tomada de [23].

Una buena, aunque no ideal realización de la estructura de una celda solar según lo descrito en los párrafos anteriores puede ser encontrada en celdas solares comerciales hechas de Si (ver Figura 2.17). Dichas celdas se componen de una región central de alrededor de $300[\mu m]$ tipo 'p', dopada moderadamente con una concentración de aceptores de $N_A \approx 5 \cdot 10^{15}[cm^{-3}]$, una región tipo 'n' altamente dopada de un tamaño menor a $1[\mu m]$, y de una región tipo 'p' altamente dopada; las tres partes compuestas de Si.

La junta PN formada por la zona tipo 'n' y la región central tipo 'p', donde la mayoría de los pares electrón-hoyo son generados es especialmente importante para las celdas solares, así como para otros dispositivos [32]. El estudio de la Junta PN usando un modelo hidrodinámico es el objeto de esta tesis. Una descripción de la junta PN a través del modelo DD puede ser encontrada en [16, 19, 23, 26, 28, 29, 32].



Figura 2.17: Esquema de las celdas basadas en juntas PN.

2.7.3. Sentido de la Corriente en una Junta PN

Dependiendo del sentido de la corriente se distingue entre corriente hacia adelante (forward direction), y corriente hacia atrás (reverse direction). En la dirección hacia adelante los electrones de la zona tipo 'n' y los hoyos de la zona tipo 'p' fluyen hacia la junta PN (ver Figura 2.18). En la dirección hacia atrás los electrones y hoyos fluyen lejos de la junta PN (ver Figura 2.19).

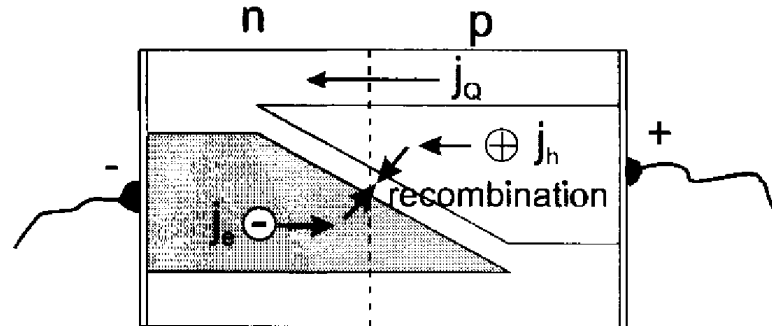


Figura 2.18: Esquema de corriente hacia adelante (forward direction). Tomada de [23].

En la dirección hacia adelante ambos (electrones y hoyos) procedentes de la zona tipo 'n' y tipo 'p' respectivamente, se mueven hacia la región opuestamente dopada. En esa zona mayoritariamente se recombinan. En la dirección hacia atrás, electrones provenientes de la zona tipo 'p' y hoyos provenientes de la región tipo 'n' se generan en las proximidades de la junta PN, y solo aquellos que no son recombinados pasan a la otra zona.

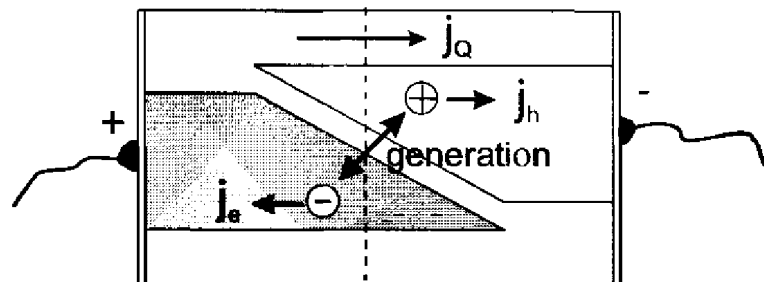


Figura 2.19: Esquema de corriente hacia atrás (reverse direction). Tomada de [23].

Capítulo 3

Descripción del Problema

El problema fundamental a resolver es el transporte de carga en una junta PN. Esto involucra primero plantear un modelo matemático que describa adecuadamente los principales procesos físicos presentes en el transporte de carga en semiconductores. Luego, resolverlo numéricamente o analíticamente de ser posible, y analizar sus resultados.

Una junta PN, según se ha descrito en los antecedentes de esta tesis, es básicamente la unión de un semiconductor tipo ‘p’ y otro semiconductor tipo ‘n’. La densidad de transportadores (p^* y n^*), la velocidad promedio (drift velocity) de los mismos (u_e^* y u_h^*), y el potencial eléctrico (V^*) son variables que se desean obtener a través de la junta. Además, el cambio de las variables con la densidad de dopantes (N_A y N_D), con el largo de la junta PN (L), el voltaje aplicado (V_{ap}^*), la generación y recombinación de transportadores (G_e^* , G_h^* , R_e^* y R_h^*), y las temperaturas de electrones y hoyos (T_e^* y T_h^*) son también resultados buscados¹.

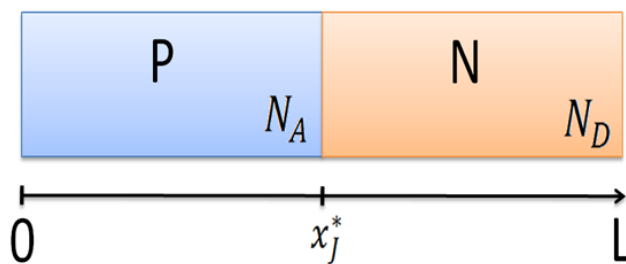


Figura 3.1: Esquema de junta PN.

La Figura 3.1 esquematiza el problema a resolver. Los parámetros físicos esenciales que describen a la junta son: el largo de la junta ‘ L ’, la posición de la junta ‘ x_J^* ’ (que define también el largo de la zona tipo ‘p’ y tipo ‘n’), la concentración de aceptores ‘ N_A ’ en el lado ‘p’, y la concentración de donadores ‘ N_D ’ en el lado ‘n’.

Se estudiará la junta PN unidimensional bajo régimen estacionario y en cuatro casos de operación:

- Sin voltaje aplicado y con tasa neta de recombinación-generación igual a cero (en la oscuridad).
- Con voltaje aplicado y con tasa neta de recombinación-generación igual a cero (en la oscuridad).

¹Se ha hecho énfasis en que las variables son dimensionales colocando un ‘*’ como super-índice, esto se hará en todo el capítulo

- Sin voltaje aplicado y con tasa neta de recombinación-generación distinta de cero (bajo luz).
- Con voltaje aplicado y con tasa neta de recombinación-generación distinta de cero (bajo luz).

Para el potencial eléctrico las condiciones de borde dependen del caso en el que se encuentre la junta. Sin voltaje aplicado, la condición viene dada por el campo eléctrico constante:

$$\frac{\partial V^*(0, t^*)}{\partial x^*} = 0, \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial V^*(L, t^*)}{\partial x^*} = 0 \quad (3.1b)$$

Con voltaje aplicado, la condición viene dada por la interacción del voltaje aplicado y el potencial eléctrico interno, resumida en $\Delta V^* = V_{ap}^* - |V_{bi}^*|^2$:

$$V^*(0, t^*) = V_{ap}^* - |V_{bi}^*|, \quad (3.2a)$$

$$V^*(L, t^*) = 0 \quad (3.2b)$$

Las condiciones de frontera impuestas en las Ecs. (3.2) suponen que los contactos son de Ohm (contactos metal-semiconducotr que siguen la ley de Ohm). Para lograr este tipo de contactos se debe dopar fuertemente las regiones cercanas a los bordes. Estas condiciones estan de acuerdo con el trabajo realizado en [15].

Las condiciones de borde para la densidad de transportadores son constantes si son ubicadas lo suficientemente lejos de la junta que es donde se encuentran los mayores gradientes de la densidad de transportadores. Las condiciones a los extremos para electrones y hoyos utilizadas en esta tesis corresponden a las densidades en equilibrio (ver Sec. 2.2.7):

$$n^*(0, t^*) = n_i^2 / p^*(0, t^*), \quad (3.3a)$$

$$n^*(L, t^*) = \frac{1}{2} [N_D + \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2}], \quad (3.3b)$$

$$p^*(0, t^*) = \frac{1}{2} [N_A + \sqrt{N_A^2 + 4n_i^2}], \quad (3.3c)$$

$$p^*(L, t^*) = n_i^2 / n^*(L, t^*) \quad (3.3d)$$

Específicamente las condiciones de borde utilizadas para la densidad de transportadores son válidas en zonas de la junta donde la carga electro-estática es despreciable y se asume equilibrio térmico entre los transportadores (quasi-neutral condition [29]). Se volverá sobre esto en el Capítulo 4 para establecer claramente el rango de validez de estas condiciones.

Una de las ventajas del modelo usado en esta tesis con respecto a los modelos convencionales de Drift-Diffusion, es que las temperaturas de electrones y hoyos pueden ser diferentes a la del cristal, y además diferentes entre si. La dependencia con la temperatura de la distribución de densidad de transportadores, así como la variación en la curva corriente–voltaje para distintos valores de temperatura es estudiada en esta tesis.

² V_{bi} es el ‘built-in voltage’.

Capítulo 4

Modelo

4.1. Descripción General

Un modelo hidrodinámico para la descripción del transporte de carga en la junta PN es usado en esta tesis. Las ecuaciones de transporte para electrones y hoyos del modelo pueden ser deducidas de la ecuación de Boltzmann y la teoría semi-clásica (ver apéndice A). Si no se hace ninguna suposición sobre los términos de colisión y se considera sólo el campo eléctrico como fuerza externa, las ecuaciones de continuidad y momentum para electrones y hoyos en una dimensión son:

$$\frac{\partial n^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(u_e^* n^*)}{\partial x^*} = \left(\frac{\partial n^*}{\partial t^*}\right)_c, \quad (4.1a)$$

$$\frac{\partial p^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(u_h^* p^*)}{\partial x^*} = \left(\frac{\partial p^*}{\partial t^*}\right)_c, \quad (4.1b)$$

$$m_e \frac{\partial(n^* u_e^*)}{\partial t^*} + m_e \frac{\partial(n^* u_e^{*2})}{\partial x^*} = e \cdot n^* \frac{\partial V^*}{\partial x^*} - \frac{\partial(n^* k_B T_e^*)}{\partial x^*} + m_e \left(\frac{\partial(n^* u_e^*)}{\partial t^*}\right)_c, \quad (4.1c)$$

$$m_h \frac{\partial(p^* u_h^*)}{\partial t^*} + m_h \frac{\partial(p^* u_h^{*2})}{\partial x^*} = -e \cdot p^* \frac{\partial V^*}{\partial x^*} - \frac{\partial(p^* k_B T_h^*)}{\partial x^*} + m_h \left(\frac{\partial(p^* u_h^*)}{\partial t^*}\right)_c, \quad (4.1d)$$

donde n^* y p^* , u_e^* y u_h^* , T_e^* y T_h^* , y m_e y m_h son las densidades de carga, velocidad promedio (drift velocity), temperaturas, y masas efectiva de electrones y hoyos respectivamente. V^* es el potencial a través de la junta, e la carga del electrón y k_B la constante de boltzmann. Notar que en 4.1 se ha hecho énfasis en que las variables son dimensionales colocando un ‘*’ como super-índice, ésto se hará en todo el capítulo para diferenciar las variables dimensionales a las adimensionales claramente.

Usando la regla de la cadena en 4.1c y 4.1d y las ecuaciones (4.1a) y (4.1b) se obtienen las siguientes expresiones para la velocidad de los transportadores:

$$\frac{\partial u_e^*}{\partial t^*} + u_e^* \frac{\partial(u_e^*)}{\partial x^*} = \frac{e}{m_e} \frac{\partial V^*}{\partial x^*} - \frac{1}{m_e n^*} \frac{\partial(n^* k_B T_e^*)}{\partial x^*} + \left(\frac{\partial u_e^*}{\partial t^*}\right)_c, \quad (4.2a)$$

$$\frac{\partial u_h^*}{\partial t^*} + u_h^* \frac{\partial(u_h^*)}{\partial x^*} = -\frac{e}{m_h} \frac{\partial V^*}{\partial x^*} - \frac{1}{m_h p^*} \frac{\partial(p^* k_B T_h^*)}{\partial x^*} + \left(\frac{\partial u_h^*}{\partial t^*}\right)_c, \quad (4.2b)$$

donde:

$$\left(\frac{\partial u_e^*}{\partial t^*}\right)_c = \frac{1}{n^*} \left(\frac{\partial(n^* u_e^*)}{\partial t^*}\right)_c - \frac{u_e^*}{n^*} \left(\frac{\partial n^*}{\partial t^*}\right)_c, \quad (4.3a)$$

$$\left(\frac{\partial u_h^*}{\partial t^*}\right)_c = \frac{1}{p^*} \left(\frac{\partial(p^* u_h^*)}{\partial t^*}\right)_c - \frac{u_h^*}{p^*} \left(\frac{\partial p^*}{\partial t^*}\right)_c \quad (4.3b)$$

La ley de Gauss electrostática completa el modelo. De esta forma, el modelo planteado sin hacer suposiciones sobre los términos de colisión y considerando que k_B , T_e^* y T_h^* son constantes es:

$$\frac{\partial^2 V^*}{\partial x^{*2}} = -\frac{e}{\epsilon_s} (p^* - n^* - N_A), \quad x^* < x_J^* \quad (4.4a)$$

$$\frac{\partial^2 V^*}{\partial x^{*2}} = -\frac{e}{\epsilon_s} (p^* + N_D - n^*), \quad x^* > x_J^* \quad (4.4b)$$

$$\frac{\partial n^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(u_e^* n^*)}{\partial x^*} = \left(\frac{\partial n^*}{\partial t^*}\right)_c, \quad (4.4c)$$

$$\frac{\partial p^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(u_h^* p^*)}{\partial x^*} = \left(\frac{\partial p^*}{\partial t^*}\right)_c, \quad (4.4d)$$

$$\frac{\partial u_e^*}{\partial t^*} + u_e^* \frac{\partial(u_e^*)}{\partial x^*} = \frac{e}{m_e} \frac{\partial V^*}{\partial x^*} - \frac{k_B T_e^*}{m_e n^*} \frac{\partial n^*}{\partial x^*} + \left(\frac{\partial u_e^*}{\partial t^*}\right)_c, \quad (4.4e)$$

$$\frac{\partial u_h^*}{\partial t^*} + u_h^* \frac{\partial(u_h^*)}{\partial x^*} = -\frac{e}{m_h} \frac{\partial V^*}{\partial x^*} - \frac{k_B T_h^*}{m_h p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \left(\frac{\partial u_h^*}{\partial t^*}\right)_c, \quad (4.4f)$$

donde ϵ_s es la permitividad eléctrica del medio, N_A la densidad de dopantes en lado p y N_D la densidad de dopantes en el lado n .

4.2. Términos de Colisión

4.2.1. Generación y Recombinación

En la física de estado sólido los procesos de generación y recombinación “crean” y “destruyen” transportadores. Luego, en el modelo:

$$\left(\frac{\partial n^*}{\partial t^*}\right)_c = G_n^* - R_n^*, \quad (4.5a)$$

$$\left(\frac{\partial p^*}{\partial t^*}\right)_c = G_p^* - R_p^*, \quad (4.5b)$$

$$(4.5c)$$

donde G_n^* y G_p^* , y R_n^* y R_p^* son las tasas de generación y recombinación de electrón y hoyo respectivamente. Cabe hacer notar que cada vez que un electrón pasa de la banda de valencia a la banda de conducción un hoyo es generado en la banda de valencia. Por lo que si no existe inyección neta de electrones:

$$G_n^* = G_p^* \quad (4.6)$$

Y por razones similares, si no existe extracción neta de transportadores:

$$R_n^* = R_p^* \quad (4.7)$$

En la ausencia de radiación incidente (junta en la oscuridad) procesos de generación y recombinación también están presentes (según se ha visto en la sección 2.4 y 2.5), sin embargo la tasa neta de generación es cero [23].

Las expresiones utilizadas para modelar tasas de recombinación-generación son aquellas que dan cuenta de los procesos dominantes de generación-recombinación en celdas fotovoltaicas. Dichas expresiones se han presentado en las secciones 2.4 y 2.5, y son las usadas en el modelo (generación por absorción de fotones, y recombinación SRH). Los otros mecanismos de recombinación, auger y radiativa, no son importantes para las condiciones de diseño y operación estudiadas. La recombinación auger es dominante para altas concentraciones de dopantes (tres a cuatro ordenes de magnitud superiores a los considerados en esta tesis.).

4.2.2. Cambios de Velocidad

Cada vez que un transportador colisiona con otro ó con el cristal ocurren cambios de velocidad. Las colisiones de un transportador pueden ocurrir con: el cristal, si mismo ó el transportador de carga opuesta. Usando tiempos de relajación y considerando que en los choques electrón-electrón (hoyo-hoyo) el cambio de momentum en el sistema de electrones (hoyos) es despreciable, se obtiene:

$$\left(\frac{\partial(m_e n_e^* u_e^*)}{\partial t^*} \right)_c = \frac{n_e^*}{\tau_{el}} \Delta P n_{e-l} + \frac{n_e^*}{\tau_{eh}} \Delta P n_{e-h}, \quad (4.8a)$$

$$\left(\frac{\partial(m_h p_h^* u_h^*)}{\partial t^*} \right)_c = \frac{p_h^*}{\tau_{hl}} \Delta P p_{h-l} - \frac{p_h^*}{\tau_{eh}} \Delta P p_{e-h}, \quad (4.8b)$$

donde τ_{eh} es el tiempo medio entre colisiones electrón-hoyo, τ_{el} el tiempo medio entre colisiones electrón-cristal y τ_{hl} el tiempo medio entre colisiones hoyo-cristal¹. Los términos $\Delta P n_{i-j}$ y $\Delta P p_{i-j}$ representan los cambios de momentum del electrón ó hoyo en el choque binario correspondiente. Suponiendo colisiones perfectamente inelásticas, esto último basado en el hecho de que los sistemas pierden energía por medio de la generación de fonones [31], se obtiene que:

$$\Delta P n_{e-l} = -m_e u_e^*, \quad (4.9a)$$

$$\Delta P p_{h-l} = -m_h u_h^*, \quad (4.9b)$$

$$\Delta P n_{e-h} = -\mu_{eh}(u_e^* - u_h^*), \quad (4.9c)$$

con $\mu_{eh} = (m_e m_h)/(m_e + m_h)$ la masa reducida electrón-hoyo. Luego juntando (4.3), (4.5), (4.8) y (4.9):

$$\left(\frac{\partial u_e^*}{\partial t^*} \right)_c = -\frac{u_e^*}{\tau_{el}} - \frac{\mu_{eh}}{m_e} \frac{(u_e^* - u_h^*)}{\tau_{eh}} - \frac{u_e^*}{n_e^*} (G_n^* - R_n^*), \quad (4.10a)$$

$$\left(\frac{\partial u_h^*}{\partial t^*} \right)_c = -\frac{u_h^*}{\tau_{hl}} - \frac{\mu_{eh}}{m_h} \frac{(u_h^* - u_e^*)}{\tau_{eh}} - \frac{u_h^*}{p_h^*} (G_p^* - R_p^*) \quad (4.10b)$$

¹Tiempo medido desde un transportador en particular (electrón u hoyo); no el tiempo medio entre colisiones del total de electrones u hoyos en el material.

4.3. Modelo con Términos de Colisión

Explicitando los términos de colisión, el modelo usado es:

$$\frac{\partial^2 V^*}{\partial x^{*2}} = -\frac{e}{\epsilon_s} (p^* - n^* - N_A), \quad x^* < x_J^* \quad (4.11a)$$

$$\frac{\partial^2 V^*}{\partial x^{*2}} = -\frac{e}{\epsilon_s} (p^* + N_D - n^*), \quad x^* > x_J^* \quad (4.11b)$$

$$\frac{\partial n^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(u_e^* n^*)}{\partial x^*} = G_n^* - R_n^*, \quad (4.11c)$$

$$\frac{\partial p^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(u_h^* p^*)}{\partial x^*} = G_p^* - R_p^*, \quad (4.11d)$$

$$\frac{\partial u_e^*}{\partial t^*} + u_e^* \frac{\partial(u_e^*)}{\partial x^*} = \frac{e}{m_e} \frac{\partial V^*}{\partial x^*} - \frac{k_B T_e^*}{m_e n^*} \frac{\partial n^*}{\partial x^*} - \frac{u_e^*}{\tau_{el}} - \frac{\mu_{eh}}{m_e} \frac{(u_e^* - u_h^*)}{\tau_{eh}} - \frac{u_e^*}{n^*} (G_n^* - R_n^*), \quad (4.11e)$$

$$\frac{\partial u_h^*}{\partial t^*} + u_h^* \frac{\partial(u_h^*)}{\partial x^*} = -\frac{e}{m_h} \frac{\partial V^*}{\partial x^*} - \frac{k_B T_h^*}{m_h p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x^*} - \frac{u_h^*}{\tau_{hl}} - \frac{\mu_{eh}}{m_h} \frac{(u_h^* - u_e^*)}{\tau_{eh}} - \frac{u_h^*}{p^*} (G_p^* - R_p^*), \quad (4.11f)$$

4.4. Supuestos del Modelo

El modelo usado se obtiene de los momentos de la ecuación de Boltzmann y la teoría semi-clásica, por tanto la primera y fundamental suposición es que la teoría semi-clásica describe adecuadamente el transporte de carga. Es decir, la descripción es válida para dispositivos donde fenómenos cuánticos atribuidos al comportamiento ondulatorio de la materia son despreciables, y donde la incertidumbre en la descripción del momentum de los transportadores es baja.

Según se vió en la sección 2.1.3, donde la solución de la ecuación de onda estaba dada por la expresión (2.26), procesos de reflexión no ocurrían. Debido a lo anterior, dado que el potencial dentro de la junta PN varía suavemente, el modelo utilizado es aplicable pues fenómenos ondulatorios del movimiento de electrones son despreciables [2, 17, 22, 26].

Una forma de estimar la incertidumbre es usar la ecuación (2.15), suponer un momentum característico, suponer un error al calcular el momentum y obtener un tamaño mínimo. Para tamaños menores al obtenido, el error será mayor al supuesto, para tamaños mayores el error será menor. Para un error del 1% suponiendo una temperatura de 300[K] (con esto es posible calcular la velocidad termal y obtener el momentum termal) se obtiene un tamaño de 1[μm]. Luego el tamaño mínimo donde se puede usar el modelo es alrededor del micrón.

El modelo desprecia las fuerzas magnéticas y supone un campo eléctrico estático. La masa efectiva del electrón según la definición semiclásica (Ec. (2.33)) ha sido supuesta constante. El dopaje y la disposición de los átomos han sido considerados homogéneos. Además, se han supuesto colisiones binarias y perfectamente inelásticas, despreciando también las pérdidas energéticas por choques entre transportadores del mismo tipo.

En resumen, el modelo supone que:

- La aproximación semi-clásica es válida.

- La influencia del campo magnético es despreciable.
- El campo eléctrico sólo depende de la posición (no varía en el tiempo).
- El material es homogéneo.
- La estructura de banda es isotrópica y parabólica (masa efectiva isotrópica y escalar).
- Sólo existen choques entre electrón-cristal, hoyo-cristal y electrón-hoyo.
- Los choques considerados son binarios y perfectamente inelásticos.
- Existe equilibrio térmico entre electrones y hoyos.
- Las temperaturas de hoyos y electrones son constantes.
- Solo se ha tomado en cuenta el proceso de recombinación vía impurezas (R_{SRH}).

4.5. Adimensionalización

Por conveniencia, una forma adimensional del modelo será usada. Considerando una diferencia de potencial de referencia, V_0 , una densidad de dopantes de referencia, N_0 , el largo del dispositivo, L , un tiempo característico, τ_t , y una velocidad caracterísitca, U , la adimensionalización de las variables dependientes e independientes es obtenida:

$$V = V^*/V_0 \quad (4.12a)$$

$$n = n^*/N_0 \quad (4.12b)$$

$$p = p^*/N_0 \quad (4.12c)$$

$$x = x^*/L \quad (4.12d)$$

$$u_e = u_e^*/U \quad (4.12e)$$

$$u_h = u_h^*/U \quad (4.12f)$$

$$t = t^*/\tau_t \quad (4.12g)$$

La versión adimensional **general** de las Ecs. (4.4) queda:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\alpha \left(p - n - \frac{N_A}{N_0} \right), \quad x < x_J \quad (4.13a)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\alpha \left(p - n + \frac{N_D}{N_0} \right), \quad x > x_J \quad (4.13b)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \left(\frac{\tau_t U}{L} \right) \frac{\partial (u_e n)}{\partial x} = \left(\frac{\tau_t}{N_0} \right) (G_n^* - R_n^*), \quad (4.13c)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \left(\frac{\tau_t U}{L} \right) \frac{\partial (u_h p)}{\partial x} = \left(\frac{\tau_t}{N_0} \right) (G_p^* - R_p^*), \quad (4.13d)$$

$$\frac{\partial u_e}{\partial t} + \left(\frac{\tau_t U}{L} \right) u_e \frac{\partial u_e}{\partial x} = \left(\frac{\tau_t e V_0}{m_e L U} \right) \frac{\partial V}{\partial x} - \left(\frac{k_B T_e^* \tau_t}{m_e L U} \right) \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} + \left(\frac{\tau_t}{U} \right) \left(\frac{\partial u_e}{\partial t} \right)_c, \quad (4.13e)$$

$$\frac{\partial u_h}{\partial t} + \left(\frac{\tau_t U}{L} \right) u_h \frac{\partial u_h}{\partial x} = - \left(\frac{\tau_t e V_0}{m_h L U} \right) \frac{\partial V}{\partial x} - \left(\frac{k_B T_h^* \tau_t}{m_h L U} \right) \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x} + \left(\frac{\tau_t}{U} \right) \left(\frac{\partial u_h}{\partial t} \right)_c, \quad (4.13f)$$

$$(4.13g)$$

Si $\tau_t = L/U$, el sistema (4.13) llega a ser:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\alpha \left(p - n - \frac{N_A}{N_0} \right), \quad x < x_J \quad (4.14a)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\alpha \left(p - n + \frac{N_D}{N_0} \right), \quad x > x_J \quad (4.14b)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(u_e n)}{\partial x} = \left(\frac{L}{UN_0} \right) (G_n^* - R_n^*), \quad (4.14c)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(u_h p)}{\partial x} = \left(\frac{L}{UN_0} \right) (G_p^* - R_p^*), \quad (4.14d)$$

$$Re \left[\frac{\partial u_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial u_e}{\partial x} \right] = \frac{\partial V}{\partial x} - \left(\frac{k_B T_e^*}{eV_0} \right) \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} + \left(\frac{m_e L}{eV_0} \right) \left(\frac{\partial u_e}{\partial t} \right)_c, \quad (4.14e)$$

$$Re \left[\frac{\partial u_h}{\partial t} + u_h \frac{\partial u_h}{\partial x} \right] = m_r \left[-\frac{\partial V}{\partial x} - \left(\frac{k_B T_h^*}{eV_0} \right) \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x} \right] + \left(\frac{m_e L}{eV_0} \right) \left(\frac{\partial u_h}{\partial t} \right)_c, \quad (4.14f)$$

$$(4.14g)$$

donde:

$$\alpha = eL^2 N_0 / (V_0 \epsilon_s), \quad (4.15)$$

$$Re = U^2 m_e / (eV_0), \quad (4.16)$$

$$m_r = m_e / m_h \quad (4.17)$$

Además, si para la velocidad se toma como parámetro de adimensionalización la velocidad máxima promedio de los electrones antes de chocar:

$$U = \frac{eV_0 \tau_{el}}{m_e L}, \quad (4.18)$$

y para adimensionalizar los términos de generación y recombinación se escoge G igual a:

$$G = \frac{UN_0}{L}, \quad (4.19)$$

el Sistema (4.14) llega a ser:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\alpha \left(p - n - \frac{N_A}{N_0} \right), \quad x < x_J \quad (4.20a)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\alpha \left(p - n + \frac{N_D}{N_0} \right), \quad x > x_J \quad (4.20b)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(u_e n)}{\partial x} = \left(\frac{L}{UN_0} \right) G(G_n - R_n), \quad (4.20c)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(u_h p)}{\partial x} = \left(\frac{L}{UN_0} \right) G(G_p - R_p), \quad (4.20d)$$

$$Re \left[\frac{\partial u_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial u_e}{\partial x} \right] = \frac{\partial V}{\partial x} - \left(\frac{k_B T_e^*}{eV_0} \right) \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} + \left(\frac{m_e L}{eV_0} \right) \left(\frac{\partial u_e^*}{\partial t^*} \right)_c, \quad (4.20e)$$

$$Re \left[\frac{\partial u_h}{\partial t} + u_h \frac{\partial u_h}{\partial x} \right] = m_r \left[-\frac{\partial V}{\partial x} - \left(\frac{k_B T_h^*}{eV_0} \right) \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x} \right] + \left(\frac{m_e L}{eV_0} \right) \left(\frac{\partial u_h^*}{\partial t^*} \right)_c, \quad (4.20f)$$

Finalmente, al agregar los términos de colisión para el cambio de velocidad (Ec. 4.10) el modelo adimensionalizado queda:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\alpha \left(p - n - \frac{N_A}{N_0} \right), \quad x < x_J \quad (4.21a)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\alpha \left(p - n + \frac{N_D}{N_0} \right), \quad x > x_J \quad (4.21b)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(u_e n)}{\partial x} = G_n - R_n, \quad (4.21c)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(u_h p)}{\partial x} = G_p - R_p, \quad (4.21d)$$

$$Re \left[\frac{\partial u_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial u_e}{\partial x} \right] = \frac{\partial V}{\partial x} - \beta_n \cdot \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} - \gamma_1 \cdot (u_e - u_h) - u_e \left(1 + Re \cdot \frac{(G_n - R_n)}{n} \right), \quad (4.21e)$$

$$Re \left[\frac{\partial u_h}{\partial t} + u_h \frac{\partial u_h}{\partial x} \right] = m_r \left[-\frac{\partial V}{\partial x} - \beta_p \cdot \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x} - \gamma_1 \cdot (u_h - u_e) \right] - u_h \left(\gamma_2 + Re \cdot \frac{(G_p - R_p)}{p} \right), \quad (4.21f)$$

donde:

$$\beta_n = (k_B T_e^*) / (eV_0), \quad (4.22a)$$

$$\beta_p = (k_B T_h^*) / (eV_0), \quad (4.22b)$$

$$\gamma_1 = \frac{\mu_{eh} \tau_{el}}{m_e \tau_{eh}}, \quad (4.22c)$$

$$\gamma_2 = \frac{\tau_{el}}{\tau_{hl}} \quad (4.22d)$$

$$(4.22e)$$

Para la obtención de las condiciones de borde adimensionalizadas basta con aplicar las constantes de adimensionalización (4.12) a las condiciones dimensionales presentadas en el Capítulo 3, quedando para la densidad de transportadores:

$$n(0, t) = n_i^2 / (p(0, t) \cdot N_0^2), \quad (4.23a)$$

$$n(1, t) = \frac{1}{2N_0} [N_D + \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2}], \quad (4.23b)$$

$$p(0, t) = \frac{1}{2N_0} [N_A + \sqrt{N_A^2 + 4n_i^2}], \quad (4.23c)$$

$$p(1, t) = n_i^2 / (n(1, t) \cdot N_0^2), \quad (4.23d)$$

para la condición de operación sin voltaje aplicado:

$$\frac{\partial V(0, t)}{\partial x} = 0, \quad (4.24a)$$

$$\frac{\partial V(1, t)}{\partial x} = 0, \quad (4.24b)$$

y para la condición de voltaje aplicado:

$$V(0, t) = (V_{ap}^* - |V_{bi}^*|) / V_0, \quad (4.25a)$$

$$V(1, t) = 0 \quad (4.25b)$$

Las condiciones de frontera impuestas en las Ecs. (4.25) suponen que los contactos son de Ohm (contactos metal-semiconductor que siguen la ley de Ohm). Para lograr este tipo de contactos se debe dopar fuertemente las regiones cercanas a los bordes. Estas condiciones estan de acuerdo con el trabajo realizado en [15].

4.6. Constantes Físicas del Modelo

En el modelo existen diversas constantes que determinan, por los valores que toman, la solución que se obtiene. Las constantes físicas del modelo son: e ($1,602 \cdot 10^{-19}[C]$) que es la carga eléctrica del electrón, N_A y N_D las densidades de dopantes en el lado p y n respectivamente, ϵ_S que es la permitividad eléctrica del medio, m_e y m_h las masas efectivas del electrón y hoyo respectivamente, la constante de Boltzman k_B ($1,381 \cdot 10^{-23}[J/K]$), la masa reducida electrón-hoyo μ_{eh} , el tiempo medio entre colisiones electrón-hoyo τ_{eh} , el tiempo medio entre colisiones electrón-cristal τ_{el} , y el tiempo medio entre colisiones hoyo-cristal τ_{hl} .

Existen otras constantes físicas que no aparecen explícitamente en las ecuaciones, sino que son usadas para definir los términos de generación radiativa (Ec. 2.94) y recombinación SRH (Ec. 2.105). Estas constantes son la constante de Planck ($6,62606896 \cdot 10^{-34}[J \cdot s]$), la velocidad de la luz ($3 \cdot 10^8[m/s]$), el coeficiente de absorción α_{In} , el coeficiente de reflexión $F(\lambda)$ y la densidad intrínseca de transportadores n_i (que depende de la temperatura del cristal, T_l). La mayoría de las constantes anteriormente mencionadas dependen del tipo de material semiconductor, la Tabla 4.1 muestra los valores para las constantes físicas para GaAs y Si. En esta tesis, para la obtención de resultados se usan los parámetros asociados al GaAs.

Constante	GaAs	Si
$N_A[cm^{-3}]$	$10^{14} - 10^{20}$	$10^{14} - 10^{20}$
$N_D[cm^{-3}]$	$10^{14} - 10^{20}$	$10^{14} - 10^{20}$
$\epsilon_0[F/m]$	$8,85418 \cdot 10^{-12}$	$8,85418 \cdot 10^{-12}$
ϵ_S/ϵ_0	13,18	11,9
$m_0[kg]$	$9,109 \cdot 10^{-31}$	$9,109 \cdot 10^{-31}$
m_e/m_0	0,067	1,08
m_h/m_0	0,47	0,55
μ_{eh}/m_0	0,3644	0,05864
$\tau_{el}[s]$	$10^{-14} - 10^{-12}$	$10^{-14} - 10^{-12}$
$\tau_{hl}[s]$	$10^{-14} - 10^{-12}$	$10^{-14} - 10^{-12}$
$\tau_{eh}[s]$	$10^{-7} - 10^{-5}$	$10^{-7} - 10^{-5}$
$\alpha_{In}[m^{-1}]$	$6 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$
$F(\lambda)$	0,3	0,3
$n_i[cm^{-3}]$	$(N_C N_V)^{1/2} \cdot \text{Exp}[-E_g/(2 \cdot k_B \cdot T_l)]$	$(N_C N_V)^{1/2} \cdot \text{Exp}[-E_g/(2 \cdot k_B \cdot T_l)]$
$N_C[cm^{-3}]$	$2 \cdot M_C \cdot (2\pi m_e k_B T_e/h^2)^{3/2}$	$2 \cdot M_C \cdot (2\pi m_e k_B T_e/h^2)^{3/2}$
$N_V[cm^{-3}]$	$2 \cdot (2\pi m_h k_B T_h/h^2)^{3/2}$	$2 \cdot (2\pi m_e k_B T_h/h^2)^{3/2}$
M_C	1	6
$E_g[eV]$	$E_{g,0} - (\theta \cdot T_l^2) / (\vartheta + T_l)$	$E_{g,0} - (\theta \cdot T_l^2) / (\vartheta + T_l)$
$E_{g,0}[eV]$	1,521	1,1695
$\theta[eV/K]$	$5,58 \cdot 10^{-4}$	$4,73 \cdot 10^{-4}$
$\vartheta[K]$	220	636

Tabla 4.1: Constantes Físicas.

Se sabe que para altas concentraciones de dopantes (mayores a $10^{18}[\text{cm}^{-3}]$) la recombinación vía impurezas (R_{SRH}) deja de ser dominante, pasando a ser la recombinación tipo Auger el proceso principal (R_{Au}). Es por lo anterior que esta tesis se restringe a concentraciones de dopantes menores a $10^{18}[\text{cm}^{-3}]$, pues sólo considera en los cálculos R_{SRH} [29, 32].

La Tabla 4.1 es referencia para calcular los valores máximos y mínimos para las variables adimensionales². La Tabla 4.2 da los rangos considerados en esta tesis para los grupos adimensionales.

Grupo Adimensional	Mínimo	Máximo
α	2.0	15
β	0.009	0.26
γ_1	6.0 e-09	6.0 e-06
γ_2	0.1	1
R_e	3 e-06	0.0015

Tabla 4.2: Rangos considerados para los grupos adimensionales.

4.7. Rango de Validez de las Condiciones de Borde

Las condiciones de borde para el voltaje son siempre válidas dado que pueden ser impuestas. En cambio, la validez de las condiciones para la concentración de transportadores de carga dependen de cuan lejos de la zona de grandes gradientes son impuestas, si son posicionadas en la zona de cambio claramente no serán correctas.

La región donde pueden ser utilizadas las expresiones (4.23) es llamada ‘zona neutra’ en la ‘Shockley approximation’ o ‘Depletion approximation’ (quasi-neutral region) [29]. Ésta región esta fuera de la ‘zona vacía’ (depletion region), de hecho casi a continuación de ella³. De esta forma, si las condiciones para los transportadores son impuestas fuera de la zona vacía serán validas. Luego, con ayuda de la ‘Depletion approximation’ es posible estimar el largo de la zona vacía [19, 29, 32]; para los valores considerados en esta tesis (ver sección 4.6) basta considerar $\alpha > 2.0$ para asegurar la validez de las condiciones de borde utilizadas para los transportadores de carga.

4.8. Interpretación de los Parámetros Adimensionales del Modelo

Los parámetros que aparecen en el sistema de ecuaciones (4.21) determinarán el tipo de solución obtenida. Los parámetros son siete: α , R_e , m_r , β_n , β_p , γ_1 y γ_2 . Ellos resumen, en los valores que toman, aspectos físicos, geométricos y de operación de la junta PN que se reflejan en la solución.

El valor de α da cuenta de la carga disponible en la junta y de la capacidad para mover dicha carga. Pues es la razón entre la carga por unidad de área (transversal a la junta) $Q/A = eN_0L$, y el desplazamiento eléctrico o excitación eléctrica $D = \epsilon_s V_0/L$ provocado por un potencial V_0 . Los valores que toma α dependen del largo de la junta (L), el dopaje aplicado (N_0) y la permitividad eléctrica del medio (ϵ_s). De la ley de Gauss (Ec. 4.21a y 4.21b) es claro que a mayores valores de α cambios en el campo eléctrico influyen menos en cambios en la densidad de transportadores, a mayores valores de α la distribución espacial de la carga eléctrica provoca mayores cambios

²No siempre se consideró los valores mínimos y máximos para construir los rangos presentados en la Tabla 4.2

³Entre la zona vacía y la zona neutra existe una zona conocida como zona de difusión de un tamaño muy pequeño; más información de esto puede ser encontrada en [29].

en el campo eléctrico. Para aumentar α se puede disminuir la permitividad del medio, aumentar el dopaje, o aumentar el largo de la junta. Finalmente, se debe notar que para un condensador ideal la relación entre la carga almacenada (Q) y la excitación eléctrica (D) es $D = Q/A$, de esta forma si $\alpha = 2$ el comportamiento eléctrico de la junta sería similar al de un condensador.

Por similitud a las ecuaciones de transporte adimensionalizadas de la fluidodinámica se ha encontrado para el caso del transporte de electrones el número de Reynolds, Re . En el caso del transporte de carga, Re da cuenta de la razón entre la energía cinética que contiene el flujo de electrones y la energía disponible debido a un potencial externo V_0 . Ahora bien, si U toma el valor de (4.18), entonces:

$$Re = \frac{eV_0\tau_{el}^2}{m_e L^2} = \frac{U\tau_{el}}{L} \quad (4.26)$$

Comparando la expresión anterior con la definición de Reynolds de la fluidodinámica es posible definir la viscosidad cinemática para el flujo de electrones:

$$\nu = \frac{L^2}{\tau_{el}} \quad (4.27)$$

La definición anterior tiene sentido, pues a menor tiempo entre colisiones electrón-cristal (que son los choques dominantes) mayor es la dificultad para aumentar la velocidad de grupo; dicho de otra forma, mayor es la disipación vía energía termal de la energía entregada por un campo eléctrico externo.

Otra forma de ver el Re definido según (4.26) es considerar que $U\tau_{el}$ es igual al camino libre medio l_e (length free path). Luego el Re da cuenta de cuan grande es el dispositivo en comparación de l_e , es decir, da cuenta del grado de desorden relativo del sistema, pues es la razón entre l_e y L . Esta razón es conocida también como el número de Knudsen.

La masa relativa m_r es la razón entre las masas del electrón y del hoyo (que es igual a la del electrón en la banda de valencia según se ha visto en la sección 2.1.6). Es decir, da la inercia relativa del electrón de la banda de conducción con respecto al electrón de la banda de valencia.

Los parámetros β_p y β_n dan cuenta de la cantidad de energía térmica que poseen los transportadores versus la energía potencial disponible cuando se aplica una diferencia de potencial V_0 a través de la junta PN. A mayores 'betas' los fenómenos difusivos en el transporte de carga se hacen más importantes, pues la energía termal es mayor y cambios en el gradiente de densidades pueden transmitirse más rápido.

Finalmente γ_1 y γ_2 dan información acerca de los procesos de colisión. Se espera que $\gamma_1 \ll 1$, pues el proceso de colisión electrón-cristal es el dominante en un semiconductor por sobre el electrón-hoyo [2], debido a que el área probable de interacción electrón-cristal es mucho mayor. Además para GaAs $\gamma_2 < 1$, pues los hoyos son más pesados que los electrones (según se vió en 4.6) y por ende los tiempos entre colisión son mayores ya que alcanzan velocidades menores a los electrones a iguales temperaturas.

Capítulo 5

Metodología de Resolución

En esta tesis se está interesado en conocer la solución estacionaria del modelo propuesto (Ec. 4.21) para diferentes condiciones de operación y/o diseño. Ahora bien, dada la alta no-linealidad de las ecuaciones estacionarias la resolución directa, incluso aplicando métodos numéricos, es muy difícil. Una forma de relajar esta no-linealidad es aplicar el método de perturbaciones con una serie asintótica adecuada. Otra forma es resolver las ecuaciones de forma transiente hasta que la solución llegue a régimen estacionario. La última forma no es viable si se tiene un tiempo de adimensionalización pequeño y un tiempo para llegar a régimen estacionario grande (relativamente), pues limita considerablemente la cantidad de soluciones que se pueden obtener en un tiempo restringido con recursos computacionales limitados¹. Es por lo anterior, que en esta tesis se utiliza el método de perturbaciones en conjunto con métodos numéricos para obtener soluciones aproximadas del modelo.

Básicamente la metodología de resolución es la siguiente: a través del método de perturbaciones se obtienen sistemas de ecuaciones diferenciales más simples, llamados de orden cero y uno. Estos sistemas son resueltos a través de métodos numéricos, pues todavía tienen ciertas no-linealidades que hacen imposible una resolución analítica. Finalmente, las soluciones de orden cero y uno son combinadas en la serie asintótica para obtener la solución aproximada del modelo².

El presente capítulo se divide en dos grandes secciones. La primera, describe el método de perturbaciones y su aplicación al problema particular de esta tesis. Y la segunda describe el algoritmo y discretización numérica usada en la resolución de los sistemas de ecuaciones de orden cero y uno obtenidos del método de perturbaciones.

5.1. Método de Perturbaciones

5.1.1. Fundamentos del Método de Perturbaciones

La teoría de perturbaciones es una colección de métodos para obtener soluciones analíticas aproximadas de ecuaciones en las que se involucra un parámetro pequeño. Las ecuaciones pueden ser, por ejemplo, algebraicas, diferenciales, integrales, integro-diferenciales, etc. La teoría de perturbaciones se aplica en diferentes áreas del conocimiento. La mayoría de los métodos de la física moderna contienen aplicaciones de métodos de perturbación [14].

¹En el desarrollo de esta tesis también se intentó esta forma de aproximación a la solución estacionaria; códigos de este estilo se dejaron corriendo por semanas sin llegar a régimen estacionario.

²La serie asintótica se cortó en orden uno, pues como se verá en el capítulo 6 términos de orden mayor son despreciables al considerar que el término de orden uno es pequeño en relación al orden cero.

Es frecuente que en los sistemas físicos se tengan ecuaciones del tipo:

$$F(\vec{X}, \varepsilon) = 0 \quad (5.1)$$

Donde ε es un parámetro pequeño que varía en un intervalo definido, y \vec{X} es un vector. Entonces, si se conoce la solución no perturbada, es decir:

$$F(\vec{X}, \varepsilon_0) = 0 \quad (5.2)$$

Es posible construir una solución analítica aproximada en torno a ε_0 a partir de una *expansión asintótica*. Para entender el concepto de expansión asintótica primero se debe comprender el concepto de *orden*, o símbolos de Bachmann-Landau.

Definición de orden:

1. $f = O(\phi)$ cuando ε tiende a ε_0 significa que existen constantes k_0 y ε_1 (independiente de ε) tal que:

$$|f(\varepsilon)| \leq k_0 |\phi(\varepsilon)|; \varepsilon_0 < \varepsilon < \varepsilon_1. \quad (5.3)$$

Entonces se dice que ' f es de orden mayor que ϕ ' cuando ε tiende a ε_0 .

2. $f = o(\phi)$ cuando ε tiende a ε_0 significa que para cada positivo δ existe un ε_2 (independiente de ε) tal que:

$$|f(\varepsilon)| \leq \delta |\phi(\varepsilon)|; \varepsilon_0 < \varepsilon < \varepsilon_2. \quad (5.4)$$

Entonces se dice que ' f es de orden menor que ϕ ' cuando ε tiende a ε_0 . Cuando ϕ es distinto de cero cerca de ε_0 , entonces es posible demostrar directamente de la definición de límite que:

1. Si

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0} \frac{f(\varepsilon)}{\phi(\varepsilon)} = L, \quad (5.5)$$

con L constante y real, entonces $f = O(\phi)$ cuando ε tiende a ε_0 .

2. Si

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0} \frac{f(\varepsilon)}{\phi(\varepsilon)} = 0, \quad (5.6)$$

entonces $f = o(\phi)$ cuando ε tiende a ε_0 .

Habiendo comprendido las relaciones de orden, es posible entender los conceptos de sucesión, aproximación y expansión asintótica.

Definición de sucesión asintótica

Sea $\{\phi_n\}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ una sucesión de funciones continuas, definidas en algún dominio \mathbf{D} , y sea ε_0 un punto límite de \mathbf{D} . Se dice que $\{\phi_n\}$ es una sucesión asintótica si $\phi_{n+1}(\varepsilon) = o(\phi_n(\varepsilon))$ cuando ε tiende a ε_0 para todo n .

Existe un gran número de sucesiones asintóticas, pero las más usuales para el caso en que ε tiende a ε_0 son:

1. $\phi_n(\varepsilon) = e^{-n/(\varepsilon-\varepsilon_0)}, n = 0, 1, 2, \dots$, cuando ε tiende a ε_0 .
2. $\phi_n(\varepsilon) = (\varepsilon - \varepsilon_0)^{\zeta_n}, n = 0, 1, 2, \dots$, donde ζ_n son constantes para las cuales $(\varepsilon - \varepsilon_0)^{\zeta_{n+1}} = o((\varepsilon - \varepsilon_0)^{\zeta_n})$ cuando ε tiende a ε_0 .

Definición de aproximación asintótica

Dada las funciones $f(\varepsilon)$ y $\phi(\varepsilon)$, se dice que $\phi(\varepsilon)$ es una aproximación asintótica para $f(\varepsilon)$ cuando ε tiende a ε_0 si $f = \phi + o(\phi)$ cuando $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$. En este caso se escribe $f \sim \phi$ cuando $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$.

En el caso de que $\phi(\varepsilon)$ no sea cero cerca de ε_0 , entonces por la ecuación (5.6):

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0} \frac{f(\varepsilon)}{\phi(\varepsilon)} = 1 \quad (5.7)$$

Definición de expansión asintótica

Sea $f(\varepsilon)$ una función definida en \mathbf{D} . Entonces $f(\varepsilon)$ tiene una expansión asintótica de n términos, con respecto a la sucesión asintótica $\{\phi_n(\varepsilon)\}$, si y sólo si:

$$f = \sum_{k=1}^m a_k \phi_k + o(\phi_m); m = 1, 2, 3, \dots, n; \varepsilon \rightarrow \varepsilon_0 \quad (5.8)$$

donde los a_k son independientes de ε . En dicho caso se escribe que:

$$f \sim a_1 \phi_1(\varepsilon) + a_2 \phi_2(\varepsilon) + \dots + a_n \phi_n(\varepsilon); \varepsilon \rightarrow \varepsilon_0 \quad (5.9)$$

En palabras simples es una serie donde cada truncación de la misma es una aproximación asintótica.

Una pregunta importante de responder, cuya respuesta se usará posteriormente en la resolución del modelo vía el método de perturbaciones es la siguiente: sea $\{\phi_n\}$ una sucesión asintótica con las cuales se genera una expansión asintótica para $f(x, \varepsilon)$ y $\frac{df(x, \varepsilon)}{dx}$:

$$f \sim a_1(x) \phi_1(\varepsilon) + a_2(x) \phi_2(\varepsilon) + \dots + a_n(x) \phi_n(\varepsilon); \varepsilon \rightarrow \varepsilon_0 \quad (5.10)$$

$$\frac{df}{dx} \sim b_1(x) \phi_1(\varepsilon) + b_2(x) \phi_2(\varepsilon) + \dots + b_n(x) \phi_n(\varepsilon); \varepsilon \rightarrow \varepsilon_0 \quad (5.11)$$

¿Cuál es la relación entre a_n y b_n ? La respuesta es $b_n(x) = \frac{da_n(x)}{dx}$ [14].

Perturbaciones regulares

Considérese el problema de encontrar una solución a la ecuación:

$$\psi(\vec{X}, \varepsilon) = 0 \quad (5.12)$$

que contiene el parámetro ε .

Si $\varepsilon - \varepsilon_0 \ll 1$, el problema (5.12) se puede interpretar como una perturbación del problema:

$$\psi(\vec{X}, \varepsilon_0) = 0 \quad (5.13)$$

Si $\vec{X}(\varepsilon)$ denota la solución al problema (5.12), y \vec{X}_0 la solución del problema no perturbado (5.13). Entonces, si $\vec{X}(\varepsilon) \rightarrow \vec{X}_0$ cuando $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$, decimos que el problema (5.12) es de *perturbación regular*.

El siguiente teorema es la base del método para obtener la solución de un problema de perturbación regular (que es el caso de esta tesis como se demostrará en la siguiente sección).

Teorema Fundamental de la Teoría de Perturbaciones

Sea $\{\phi_n(\varepsilon)\}_{n=0}^{\infty}$ una sucesión asintótica en términos de la variable ε . Supongamos que:

$$a_0\phi_0(\varepsilon) + a_1\phi_1(\varepsilon) + \dots + a_n\phi_n(\varepsilon) + O(\phi_{n+1}(\varepsilon)) = 0, \quad (5.14)$$

para $(\varepsilon - \varepsilon_0)$ suficientemente pequeño, y que $\phi_n(\varepsilon)$ no se anula en una vecindad de $\varepsilon = \varepsilon_0$ para todo $n = 0, 1, 2, \dots$. Si los coeficientes a_0, a_1, \dots, a_n son independientes de ε , entonces $a_0 = a_1 = \dots = a_n = 0$.

La demostración es simple. Si se define:

$$P(\varepsilon) = a_0\phi_0(\varepsilon) + a_1\phi_1(\varepsilon) + \dots + a_n\phi_n(\varepsilon) + O(\phi_{n+1}(\varepsilon)) = 0 \quad (5.15)$$

Dividiendo ambos lados de (5.15) por $\phi_0(\varepsilon)$ y tomando el límite cuando $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$ se deduce que $a_0 = 0$. Si ahora se divide (5.15) por $\phi_1(\varepsilon)$ y se toma el límite cuando $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$, considerando que ya se dedujo que $a_0 = 0$, entonces $a_1 = 0$. Continuando de esta manera se obtiene que $a_0 = a_1 = \dots = a_n = 0^3$.

5.1.2. Método de Perturbaciones Aplicado al Modelo

Si el número de colisiones en el dispositivo es alto, entonces $\tau_{el} < 10^{-13}$. Si además se considera un largo de dispositivo mínimo de $0,6[\mu m]$, entonces el máximo Re alcanzado es de 0.0729. Este supuesto implica que el número de Reynolds es pequeño y puede ser usado como un parámetro de perturbación en expansiones asintóticas de las variables dependientes de la ecuación (4.21).

Considerando las distribuciones de temperaturas del electrón y hoyo como constantes y conocidas, la expansión asintótica usada es:

$$V(x, t) = V_0(x, t) + \varepsilon V_1(x, t) + \varepsilon^2 V_2(x, t) \dots \quad (5.16a)$$

$$n(x, t) = n_0(x, t) + \varepsilon n_1(x, t) + \varepsilon^2 n_2(x, t) \dots \quad (5.16b)$$

$$p(x, t) = p_0(x, t) + \varepsilon p_1(x, t) + \varepsilon^2 p_2(x, t) \dots \quad (5.16c)$$

$$u_e(x, t) = u_{e0}(x, t) + \varepsilon u_{e1}(x, t) + \varepsilon^2 u_{e2}(x, t) \dots \quad (5.16d)$$

$$u_h(x, t) = u_{h0}(x, t) + \varepsilon u_{h1}(x, t) + \varepsilon^2 u_{h2}(x, t) \dots \quad (5.16e)$$

donde $\varepsilon = Re$.

Notar que la sucesión asintótica usada es $\phi_n(\varepsilon) = \varepsilon^n, n = 0, 1, 2, \dots$ con $\varepsilon \rightarrow 0$. El hecho de que se pueda construir una expansión asintótica de la forma de (5.16) se debe a que se supone que las variables físicas V, n, p, u_e, u_h son lo suficientemente continuas y diferenciables. Por lo anterior, son también variables que pueden ser perturbables regularmente, es decir, se puede aplicar sobre ellas el ‘Teorema Fundamental de la Teoría de Perturbaciones’.

En esta tesis sólo se considera hasta términos de primer orden en (5.16), pues para los casos estudiados el aporte de los otros términos es despreciable. Basta entonces calcular los coeficientes de orden cero y uno para obtener la solución aproximada del modelo, para ello se expresa la ecuación (4.21) en forma vectorial:

³En la aplicación del límite a ambos lados se usa que la sucesión de (5.14) es una perturbación regular.

$$\bar{A}(\vec{y}) \frac{\partial \vec{y}}{\partial x} + \bar{B}(x) \frac{\partial \vec{y}}{\partial t} = \bar{C}(x, \vec{y}) \cdot \vec{y} + \vec{d}(x) \quad (5.17)$$

Donde:

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} V \\ E \\ n \\ p \\ u_e \\ u_h \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_e & 0 & n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_h & 0 & p \\ 0 & 0 & \beta_n & 0 & nReu_e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_r \beta_p & 0 & pReu_h \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

$$\bar{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & nRe & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & pRe \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

$$\bar{C} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -n & 0 & 0 & -n - n\gamma_1 - Re(G_n(x) - R_n(x)) & n\gamma_1 \\ 0 & m_r p & 0 & 0 & m_r p \gamma_1 & -m_r p \gamma_1 - p \gamma_2 - Re(G_p(x) - R_p(x)) \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

$$\vec{d} = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha N(x) \\ G_n(x) - R_n(x) \\ G_p(x) - R_p(x) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

Donde $E = -\frac{\partial V}{\partial x}$ es el campo eléctrico, y $N(x)$ es la función de dopantes adimensional ($-N_A/N_0$ y N_D/N_0 para el lado P y N correspondiente). De esta forma la perturbación de las variables expresada en forma vectorial es:

$$\vec{y} = \vec{y}_0 + \varepsilon \cdot \vec{y}_1 + \vec{O}(\varepsilon^2), \quad (5.23)$$

reemplazando (5.23) en Ec. (5.17), y despreciando términos de orden superior queda:

$$(\bar{A}_0 + \varepsilon \bar{A}_1) \cdot \left(\frac{\partial \vec{y}_0}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial \vec{y}_1}{\partial x} \right) + (\bar{B}_0 + \varepsilon \bar{B}_1) \cdot \left(\frac{\partial \vec{y}_0}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial \vec{y}_1}{\partial t} \right) = (\bar{C}_0 + \varepsilon \bar{C}_1) \cdot (\vec{y}_0 + \varepsilon \vec{y}_1) + \vec{d}(x) \quad (5.24)$$

Agrupando de acuerdo al orden en ε , y aplicando el 'Teorema Fundamental de la Teoría de Perturbaciones' se obtienen las ecuaciones de orden cero y uno respectivamente:

$$\bar{A}_0(\vec{y}_0) \frac{\partial \vec{y}_0}{\partial x} + \bar{B}_0(x) \frac{\partial \vec{y}_0}{\partial t} = \bar{C}_0(x, \vec{y}_0) \cdot \vec{y}_0 + \vec{d}(x) \quad (5.25)$$

$$\bar{A}_0(\vec{y}_0) \frac{\partial \vec{y}_1}{\partial x} + \bar{A}_1(\vec{y}_1) \frac{\partial \vec{y}_0}{\partial x} + \bar{B}_0(x) \frac{\partial \vec{y}_1}{\partial t} + \bar{B}_1(x) \frac{\partial \vec{y}_0}{\partial t} = \bar{C}_0(x, \vec{y}_0) \cdot \vec{y}_1 + \bar{C}_1(x, \vec{y}_1) \cdot \vec{y}_0 \quad (5.26)$$

Donde:

$$\bar{A}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_{e0} & 0 & n_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_{h0} & 0 & p_0 \\ 0 & 0 & \beta_n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_r \beta_p & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

$$\bar{B}_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

$$\bar{C}_0 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -n_0 & 0 & 0 & -n_0 - n_0 \gamma_1 & n_0 \gamma_1 \\ 0 & m_r p_0 & 0 & 0 & m_r p_0 \gamma_1 & -m_r p_0 \gamma_1 - p_0 \gamma_2 \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

$$\bar{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_{e1} & 0 & n_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_{h1} & 0 & p_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & n_0 u_{e0} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_0 u_{h0} \end{pmatrix} \quad (5.30)$$

$$\bar{B}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & n_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_0 \end{pmatrix} \quad (5.31)$$

$$\bar{C}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -n_1 & 0 & 0 & -n_1 - n_1 \gamma_1 - (G_n(x) - R_n(x)) & n_1 \gamma_1 \\ 0 & m_r p_1 & 0 & 0 & m_r p_1 \gamma_1 & -m_r p_1 \gamma_1 - p_1 \gamma_2 - (G_p(x) - R_p(x)) \end{pmatrix} \quad (5.32)$$

Sistema de Orden Cero

Desarrollando la expresión vectorial (5.25) se obtiene el sistema de ecuaciones de orden cero.

$$\frac{\partial^2 V_0}{\partial x^2} = -\alpha \left(p_0 - n_0 - \frac{N_A}{N_0} \right), \quad x < x_J, \quad (5.33a)$$

$$\frac{\partial^2 V_0}{\partial x^2} = -\alpha \left(p_0 - n_0 + \frac{N_D}{N_0} \right), \quad x > x_J, \quad (5.33b)$$

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} + \frac{\partial(u_{e0} n_0)}{\partial x} = (G_n - R_n), \quad (5.33c)$$

$$\frac{\partial p_0}{\partial t} + \frac{\partial(u_{h0} p_0)}{\partial x} = (G_p - R_p), \quad (5.33d)$$

$$\frac{\partial V_0}{\partial x} - \frac{\beta_n}{n_0} \frac{\partial n_0}{\partial x} - \gamma_1 (u_{e0} - u_{h0}) - u_{e0} = 0, \quad (5.33e)$$

$$-m_r \left[\frac{\partial V_0}{\partial x} + \frac{\beta_p}{p_0} \frac{\partial p_0}{\partial x} + \gamma_1 (u_{h0} - u_{e0}) \right] - \gamma_2 u_{h0} = 0. \quad (5.33f)$$

El sistema de Ec. (5.33) puede ser escrito en términos de las densidades de corriente de electrones y hoyos. Dos ecuaciones diferenciales de segundo orden, una para electrones y otra para hoyos, son obtenidas al combinar las ecuaciones de continuidad y conservación de momentum:

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} - \frac{1}{\gamma_1 + 1} \left[\beta_n \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2} - \gamma_1 \frac{\partial(u_{h0} n_0)}{\partial x} - \frac{\partial n_0}{\partial x} \frac{\partial V_0}{\partial x} - n_0 \frac{\partial^2 V_0}{\partial x^2} \right] - (G_n - R_n) = 0, \quad (5.34a)$$

$$\frac{\partial p_0}{\partial t} - \frac{m_r}{m_r \gamma_1 + \gamma_2} \left[\beta_p \frac{\partial^2 p_0}{\partial x^2} - \gamma_1 \frac{\partial(u_{e0} p_0)}{\partial x} + \frac{\partial p_0}{\partial x} \frac{\partial V_0}{\partial x} + p_0 \frac{\partial^2 V_0}{\partial x^2} \right] - (G_p - R_p) = 0. \quad (5.34b)$$

Asumiendo que la interacción electrón-cristal es dominante sobre el proceso de interacción electrón-hoyo: $\tau_{el} \ll \tau_{eh}$, esto implica que $\gamma_1 \rightarrow 0$. Entonces, el sistema de Ec. (5.34) puede ser escrito como:

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} - \left[\beta_n \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2} - \frac{\partial n_0}{\partial x} \frac{\partial V_0}{\partial x} - n_0 \frac{\partial^2 V_0}{\partial x^2} \right] - (G_n - R_n) = 0, \quad (5.35a)$$

$$\frac{\partial p_0}{\partial t} - \frac{m_r}{\gamma_2} \left[\beta_p \frac{\partial^2 p_0}{\partial x^2} + \frac{\partial p_0}{\partial x} \frac{\partial V_0}{\partial x} + p_0 \frac{\partial^2 V_0}{\partial x^2} \right] - (G_p - R_p) = 0. \quad (5.35b)$$

Sistema de Orden Uno

Asumiendo que $\gamma_1 \rightarrow 0$, el sistema de orden uno desarrollando la expresión vectorial (5.26) es:

$$\frac{\partial^2 V_1}{\partial x^2} = -\alpha(p_1 - n_1), \quad (5.36a)$$

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + \frac{\partial(u_{e1}n_0)}{\partial x} + \frac{\partial(u_{e0}n_1)}{\partial x} = 0, \quad (5.36b)$$

$$\frac{\partial p_1}{\partial t} + \frac{\partial(u_{h1}p_0)}{\partial x} + \frac{\partial(u_{h0}p_1)}{\partial x} = 0, \quad (5.36c)$$

$$n_1 u_{e0} + n_0 u_{e1} + \beta_n \frac{\partial n_1}{\partial x} + n_0 u_{e0} \frac{\partial u_{e0}}{\partial x} - n_1 \frac{\partial V_0}{\partial x} - n_0 \frac{\partial V_1}{\partial x} + n_0 \frac{\partial u_{e0}}{\partial t} + u_{e0}(G_n - R_n) = 0, \quad (5.36d)$$

$$\begin{aligned} \gamma_2(p_1 u_{h0} + p_0 u_{h1}) + m_r \beta_p \frac{\partial p_1}{\partial x} + p_0 u_{h0} \frac{\partial u_{h0}}{\partial x} + m_r p_1 \frac{\partial V_0}{\partial x} + m_r p_0 \frac{\partial V_1}{\partial x} \\ + p_0 \frac{\partial u_{h0}}{\partial t} + u_{h0}(G_p - R_p) = 0. \end{aligned} \quad (5.36e)$$

Dos ecuaciones diferenciales de segundo orden, una para electrones y otra para hoyos, son obtenidas al combinar las ecuaciones de continuidad y conservación de momentum:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_1}{\partial t} - \left[\beta_n \frac{\partial^2 n_1}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(n_0 u_{e0} \frac{\partial u_{e0}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(n_1 \frac{\partial V_0}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(n_0 \frac{\partial V_1}{\partial x} \right) \right] \\ - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(n_0 \frac{\partial u_{e0}}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (u_{e0}(G_n - R_n)) \right] = 0, \end{aligned} \quad (5.37a)$$

$$\begin{aligned} \gamma_2 \frac{\partial p_1}{\partial t} - \left[m_r \beta_p \frac{\partial^2 p_1}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(p_0 u_{h0} \frac{\partial u_{h0}}{\partial x} \right) + m_r \frac{\partial}{\partial x} \left(p_1 \frac{\partial V_0}{\partial x} \right) + m_r \frac{\partial}{\partial x} \left(p_0 \frac{\partial V_1}{\partial x} \right) \right] \\ - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(p_0 \frac{\partial u_{h0}}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (u_{h0}(G_p - R_p)) \right] = 0. \end{aligned} \quad (5.37b)$$

Condiciones de Borde en el Método de Perturbaciones

Las condiciones de borde para cada uno de los sistemas, de orden cero y uno, deben cumplir las condiciones de borde generales (Ec. (4.23), (4.24) y (4.25)), es decir:

$$n(0, t) = n_0(0, t) + \varepsilon \cdot n_1(0, t), \quad (5.38)$$

$$n(L, t) = n_0(L, t) + \varepsilon \cdot n_1(L, t), \quad (5.39)$$

$$p(0, t) = p_0(0, t) + \varepsilon \cdot p_1(0, t), \quad (5.40)$$

$$p(L, t) = p_0(L, t) + \varepsilon \cdot p_1(L, t), \quad (5.41)$$

$$V(0, t) = V_0(0, t) + \varepsilon \cdot V_1(0, t), \quad (5.42)$$

$$V(L, t) = V_0(L, t) + \varepsilon \cdot V_1(L, t) \quad (5.43)$$

Para hacer que la solución de orden cero contenga mayor información de la solución total las condiciones de orden cero corresponderán exactamente a las expresiones (4.23), (4.24) y (4.25). De esta forma, las condiciones de orden uno serán igual a cero, $n_1(0,t) = n_1(L,t) = p_1(0,t) = p_1(L,t) = V_1(0,t) = V_1(L,t) = 0$.

5.2. Algoritmo de Resolución y Esquema de Discretización Usado

Para la obtención de los resultados de orden cero se resuelven las ecuaciones (5.33a), (5.33b) junto con (5.35), ambas en estado estacionario. Para la obtención de los resultados de orden uno se resuelven las formas estacionarias de las ecuaciones (5.36a) combinada con (5.37). Para resolver el sistema de orden uno se debe primero haber obtenido las variables de orden cero, éstas son coeficientes (variables) para el sistema de orden uno. Las distribuciones de velocidades para cada sistema son calculadas de las expresiones (5.33e), (5.33f), (5.36d), y (5.36e).

Para la discretización de las ecuaciones resueltas se usaron esquemas de diferencias finitas de segundo orden [18, 24]:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2 \cdot \Delta x}, \quad (5.44)$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i = \frac{f_{i+1} - 2 \cdot f_i + f_{i-1}}{(x_{i+1} - x_i)^2} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2}, \quad (5.45)$$

donde el subíndice ‘ i ’ representa un punto en la malla de discretización. Por ejemplo, la discretización de (5.36a) queda:

$$\frac{V_{1i+1} - 2V_{1i} + V_{1i-1}}{\Delta x^2} = -\alpha(p_{1i} - n_{1i}) \quad (5.46)$$

Un esquema directo fue utilizado para resolver cada una de las ecuaciones [24]. El acople de las ecuaciones fue resuelto de manera iterativa [18].

A modo de ejemplo si ‘ N ’ es el número total de puntos, la ecuación discretizada (5.46) para todos los puntos puede ser escrita como:

$$\bar{D} \cdot \vec{V}_1 = -\Delta x^2 \alpha \cdot (\vec{p}_1 - \vec{n}_1) \quad (5.47)$$

con:

$$\bar{D} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & -2 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & -2 & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (5.48)$$

$$\vec{V}_1 = \begin{pmatrix} V_{11} \\ V_{12} \\ \vdots \\ \vdots \\ V_{1N} \end{pmatrix}, \quad (5.49)$$

$$(\vec{p}_1 - \vec{n}_1) = \begin{pmatrix} (p_1 - n_1)_1 \\ (p_1 - n_1)_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ (p_1 - n_1)_N \end{pmatrix} \quad (5.50)$$

De esta forma,

$$\vec{V}_1 = -\Delta x^2 \alpha \cdot \bar{D}^{-1} \cdot (\vec{p}_1 - \vec{n}_1), \quad (5.51)$$

dada una distribución de transportadores de orden uno. En el caso presentado la matriz \bar{D} es de coeficientes constantes, sin embargo en otras ecuaciones los componentes cambian en cada iteración dado que son variables que se obtienen de otras ecuaciones.

Siguiendo con el ejemplo, p_1 y n_1 se obtienen de las ecuaciones discretizadas (5.37), dada una distribución V_1 . De esta manera, si se llama p_{1V_1} y n_{1V_1} a las variables que son usadas para la obtención del voltaje de orden uno en (5.36a), y a la densidad de transportadores obtenidas en (5.37) como p_{1p_1} y n_{1n_1} , entonces la iteración de las variables es como sigue:

$$p_{1V_1}^{t+1} = p_{1V_1}^t + \kappa \cdot (p_{1p_1}^t - p_{1V_1}^t), \quad (5.52)$$

$$n_{1V_1}^{t+1} = n_{1V_1}^t + \kappa \cdot (n_{1p_1}^t - n_{1V_1}^t), \quad (5.53)$$

con ' κ ' un factor de relajación que ayuda a la estabilización y convergencia del algoritmo; ' κ ' va entre cero y uno, $(0, 1]$.

De manera similar a lo ejemplificado opera el algoritmo y la discretización para las otras variables de orden uno y para el sistema de orden cero.

Capítulo 6

Resultados

En este capítulo se presentan los resultados del modelo usado para diferentes condiciones de operación de la junta PN. Se analizan los resultados con y sin generación neta, además de estudiar la influencia del voltaje en la distribución de las variables calculadas. Se presentan también curvas de voltaje versus corriente que caracterizan la operación de la junta PN.

Al final de este capítulo se presentan las futuras líneas de investigación que esta tesis abre.

6.1. Tamaño de la Malla usada y test de Independencia

Como en todo método numérico en el cual se usa una malla (discretización del espacio) el tamaño de la discretización usada es un parámetro que debe ser escogido de tal forma, que para tamaños de malla inferiores a la escogida el cambio en la solución sea despreciable. Es decir, en el caso de esta tesis (discretización unidimensional uniforme, elementos del mismo tamaño) se debe encontrar el número de divisiones del dominio desde el cual la solución es independiente de la malla usada.

Para encontrar el número de divisiones adecuado se evaluaron distintas mallas. Se encontró que a partir de 400 divisiones el error relativo (a una malla de 5000 divisiones) estaba bajo el 0.2%, por lo que considerando la gran cantidad de simulaciones que se debía realizar se trabajó con dicha malla (400 divisiones). El parámetro que se usó para hacer el análisis de independencia de malla fue el valor de la densidad de electrones a los $3/5$ del dominio ($n_{3/5}$). La Fig. 6.1 muestra los valores de $n_{3/5}$ para las mallas estudiadas, la Fig. 6.2 muestra el error relativo a una malla de 2500 divisiones de los demás tamaños considerados para el parámetro analizado.

6.2. Dependencia de los Parámetros Adimensionales con las Condiciones de Borde

Los resultados obtenidos dependen del valor que toman los grupos adimensionales y de las condiciones de frontera impuestas. Los valores que toman las condiciones de borde en el modelo dependen indirectamente de los valores que toman las constantes adimensionales, dado que parámetros físicos que definen las constantes adimensionales están relacionadas directamente con las condiciones de frontera. A saber, en los bordes se imponen las densidades de los transportadores de carga adimensional según las Ecs. (4.23), en dichas ecuaciones aparece N_0 y n_i . La densidad de dopantes N_0 es parte de la definición de α , y n_i depende indirectamente de β pues la densidad intrínseca depende de las temperaturas del cristal, de la de electrones y de la de hoyos. Por otro

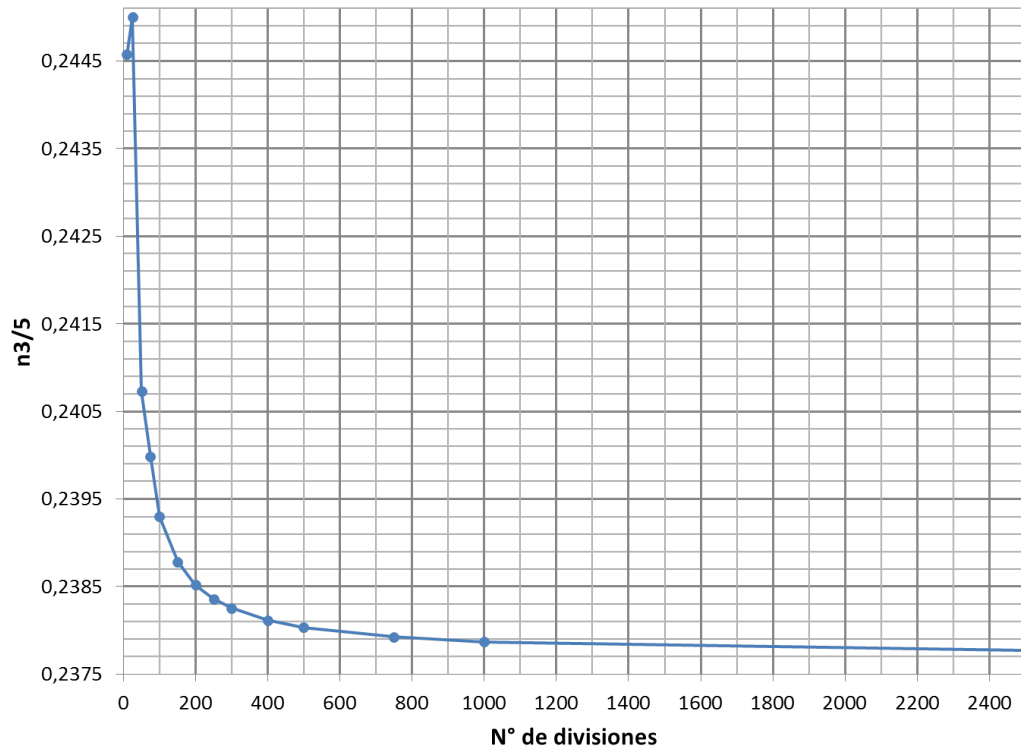


Figura 6.1: Test de independencia de malla.

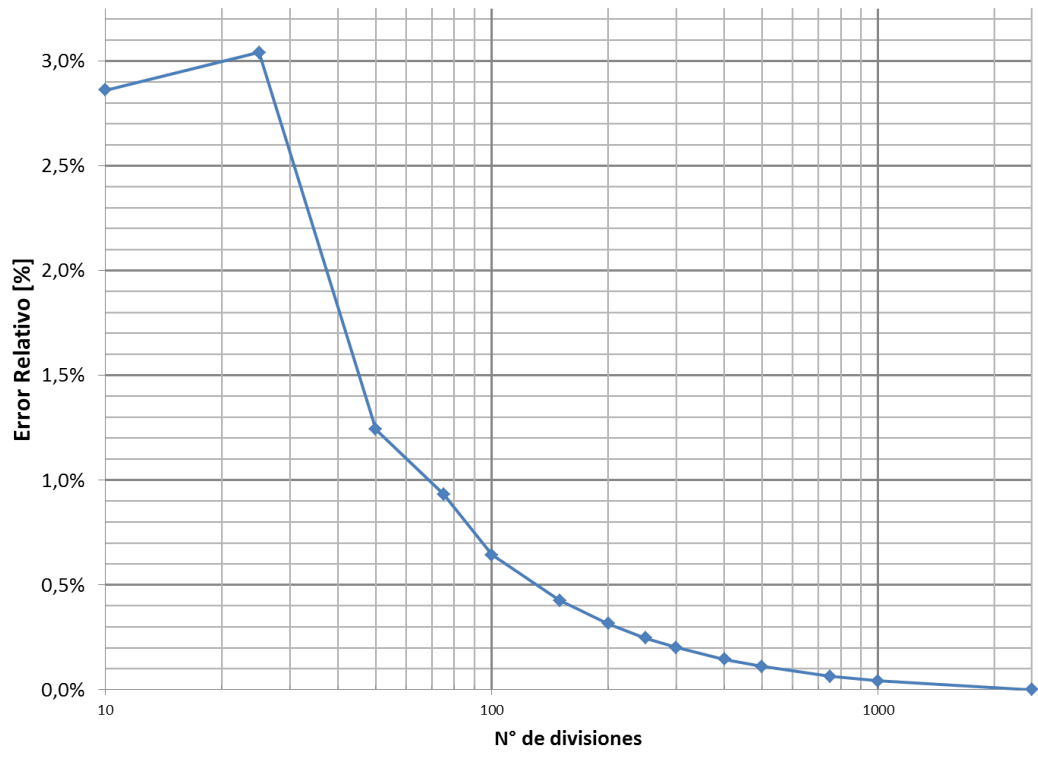


Figura 6.2: Error relativo de las distintas mallas analizadas.

lado, las condiciones de borde presentadas en la Ec. (4.25) dependen directamente de V_{bi} el cual es función de la temperatura del cristal, de la temperatura de los transportadores, de la densidad de dopantes y de la densidad intrínseca.

Por todo lo dicho en el párrafo anterior es que no da igual como se cambian los grupos adimensionales, dicho de otra forma no solo importa que valores toman las constantes adimensionales si no que también importa que parámetros físicos se variaron, pues cambiar algunos parámetros físicos podría llevar a cambiar las condiciones en la frontera.

Si se considera cambios solo en parámetros de operación y diseño, es decir, no cambiando constantes físicas que dependan del material (en este caso GaAS), entonces, los parámetros dimensionales que están relacionados con los grupos adimensionales y pueden variar son: N_0 , L , τ_{el} , τ_{hl} , T_e y T_h . De ellos N_0 y L están ligados a α , L y τ_{el} están ligados al R_e , τ_{el} y τ_{hl} están relacionados a γ_2 , T_e relacionado a β_n , y T_h a ligado a β_p .

En esta tesis se considera equilibrio térmico entre electrones y hoyos. Además se supone temperaturas constantes ($T_e = T_h = T$), por ende $\beta_n = \beta_p = \beta$. El parámetro β es independiente de los demás grupos adimensionales. Y siempre un cambio de β estará ligado a cambios del V_{bi} (como se verá en Sec. 6.3.1) y a cambios en la densidad intrínseca (n_i) que harán que las condiciones de borde cambien.

Los grupos adimensionales α , R_e y γ_2 son dependientes entre si. Cuatro parámetros dimensionales (N_0 , L , τ_{el} y τ_{hl}) dependen de tres grupos adimensionales (tres ecuaciones, una para cada grupo adimensional). Es decir, para una triada definida de α , R_e y γ_2 existen desde el punto de vista matemático infinitas combinaciones de los cuatro parámetros dimensionales que cumplen con los valores de la triada. Sin embargo para una temperatura de cristal definida (T_l), existe sólo un subconjunto de soluciones que hace independiente a la triada adimensional de las condiciones de borde y es dejar fijo N_0 . Las demás formas de mover los valores de α , R_e y γ_2 necesariamente implicarán cambios en las condiciones de borde, pues implicarán cambios en N_0 que hará cambiar V_{bi} y n_i ¹. La Fig. 6.3 esquematiza las relaciones entre condiciones de borde, parámetros y grupos adimensionales.

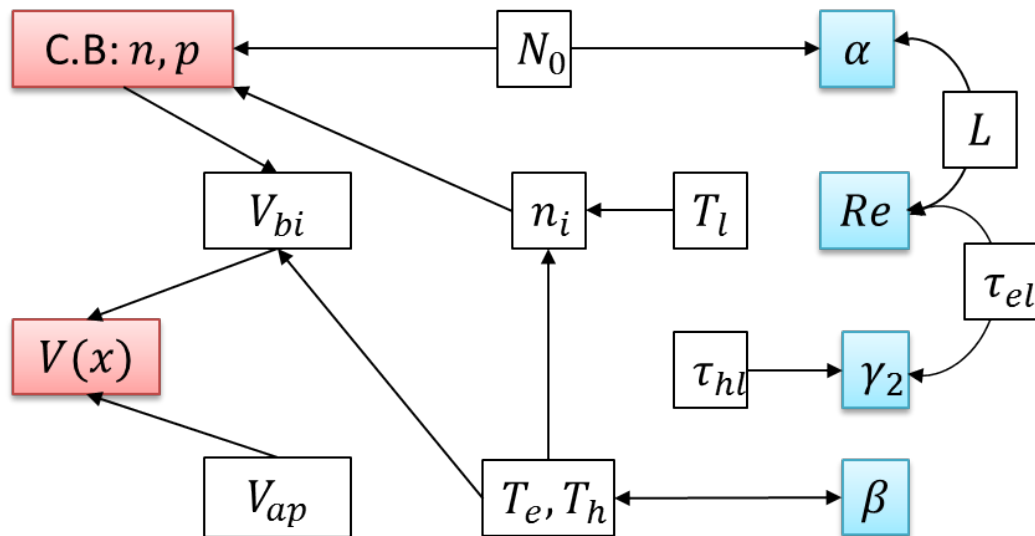


Figura 6.3: Esquema de relaciones entre condiciones de borde (en rojo), parámetros físicos (en blanco), y grupos adimensionales (en azul).

¹Si en trabajos futuros se incluye la interdependencia de los tiempos medios de colisión con otros parámetros, por ejemplo las temperaturas o la densidad de dopantes, entonces, cambios en los tiempo medios de colisión también significarán cambios en las condiciones de borde. En esta tesis se ha despreciado dicha interdependencia

Por todo lo dicho anteriormente para estudiar el comportamiento de la junta se ha optado analizar la influencia en los resultados de la variación de los grupos adimensionales desacoplado del cambio de N_0 , es decir estudiar el efecto de cambiar los valores adimensionales dejando constante N_0 . Y estudiar la influencia del cambio de N_0 en los resultados con alguna otra forma de variar los grupos adimensionales que incluya variaciones de α .

Para cumplir con lo establecido en el párrafo anterior se escogieron dos formas de variar los grupos adimensionales α , R_e y γ : (i) dejando fijo N_0 y (ii) dejando fijo τ_{ej} . En la discusión de las figuras se indicará adecuadamente a que forma de cambiar las constantes adimensionales corresponde. De todas formas, se indica aquí cuales corresponden a la forma (i): Figs. 6.5, 6.16, 6.18, 6.23, 6.26, 6.31, 6.37 y 6.43. Y cuales corresponden a la forma (ii): Figs. 6.4, 6.6, 6.7, 6.8, 6.9, 6.10, 6.11, 6.13, 6.14, 6.15, 6.17, 6.19, 6.20, 6.21, 6.22, 6.24, 6.25, 6.27, 6.28, 6.29, 6.30, 6.32, 6.33, 6.34, 6.35, 6.36, 6.38, 6.39, 6.41 y 6.42. Notar que para variaciones de β solo cambian las temperaturas de electrones y hoyos, es decir variar β es independiente de variar α , R_e y γ .

6.3. Resultados en Oscuridad sin Voltaje Aplicado

6.3.1. Obtención del ‘built-In voltage’

En este caso la junta tiene generación neta igual a cero, es decir, los procesos de generación-recombinación no existen o existen pero están balanceados exactamente. En esta condición y sin voltaje aplicado no existe corriente pasando a través de la junta, ni de electrones, ni de hoyos por lo que se deduce que la velocidad de transportadores en toda la junta es igual a cero. De esta forma, es posible simplificar las ecuaciones del modelo, Ec. (4.21), quedando:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\alpha \left(p - n - \frac{N_A}{N_0} \right), \quad x < x_J \quad (6.1a)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\alpha \left(p - n + \frac{N_D}{N_0} \right), \quad x > x_J \quad (6.1b)$$

$$\frac{\partial V}{\partial x} = \beta_n \cdot \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \quad (6.1c)$$

$$\frac{\partial V}{\partial x} = -\beta_p \cdot \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (6.1d)$$

Por lo tanto, en oscuridad y sin voltaje aplicado las ‘fuerzas electrostáticas’ ($-\partial V/\partial x$) para la generación de corriente se igualan a las ‘fuerzas’ difusivas ($\beta_n/n \cdot \partial n/\partial x$). Como la temperatura de los transportadores es distinta de cero y existe una distribución de electrones y hoyos que no es constante, entonces existe un potencial electrostático distinto de cero, que en base a las Ecs. (6.1c) y (6.1d) puede ser calculado por integración como:

$$V_{bi} = \beta_n [(ln(n))|_{x=1} - (ln(n))|_{x=0}] = -\beta_p [(ln(p))|_{x=1} - (ln(p))|_{x=0}] \quad (6.2)$$

Este voltaje es conocido como ‘built-in voltage’, y como queda demostrado en la Ec. (6.2) depende solamente de la temperatura (β) y el valor de las densidades de transportadores en los extremos. Es más, si

las condiciones de borde de las Ecs. (4.23) son validas se deduce que:

$$V_{bi} = \beta_n \left[\ln\left(\frac{1}{4}\right) + \ln(N_D + \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2}) + \ln(N_A + \sqrt{N_A^2 + 4n_i^2}) - 2 \cdot \ln(ni) \right], \quad (6.3a)$$

$$V_{bi} = -\beta_p \left[-\ln\left(\frac{1}{4}\right) - \ln(N_D + \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2}) - \ln(N_A + \sqrt{N_A^2 + 4n_i^2}) + 2 \cdot \ln(ni) \right] \quad (6.3b)$$

Por lo que en oscuridad y sin voltaje aplicado la solución estacionaria corresponde al equilibrio térmico como era de esperar ($\beta_n = \beta_p$)², no importando que $N_A \neq N_D$.

Siguiendo con el análisis, de las expresiones teóricas para la densidad intrínseca de transportadores, n_i , presentadas en la Tabla (4.1) se concluye que V_{bi} depende de: la temperatura del cristal (T_i), la temperatura de los transportadores (T_e^* y T_h^*), las masas efectivas (m_e y m_h), y de la densidad de dopantes (N_A y N_D) de la junta. Cabe destacar que en equilibrio térmico $T_i = T_e^* = T_h^*$.

La expresión para V_{bi} deducida directamente de la ecuación de momentum del modelo propuesto calza exactamente con la deducida en la literatura desde la relación de Einstein asumiendo un semiconductor no degenerado (es decir que n_i^2 sea independiente de la energía de fermi) [26].

Finalmente mencionar que si bien se ha obtenido que en oscuridad y sin voltaje aplicado la solución en estado estacionario indica que un equilibrio térmico debe ser producido, el valor de esa temperatura de equilibrio dependerá de la transferencia de energía entre los transportadores de carga con el cristal y el ambiente; ecuaciones que no fueron incluidas en este modelo pero que en trabajos futuros serán incluidas.

6.3.2. Distribución Espacial de las Variables, en Oscuridad y sin Voltaje

Las Figuras 6.4 y 6.5 muestran la distribución de la densidad de transportadores, el campo eléctrico y el potencial electrostático en la junta para diferentes valores de α . La Fig. 6.6 muestra los resultados para variaciones de $\beta = \beta_n = \beta_p$. Las distribuciones mostradas corresponden a los valores en equilibrio según lo expuesto en la sección anterior (Sec. 6.3.1).

En este caso particular, sin voltaje aplicado y en oscuridad, el R_e y el parámetro γ_2 no aparecen en las Ecs. (6.1) por lo que variaciones en estos parámetros no afectan el tipo de solución obtenida, así en equilibrio térmico un cambio en α manteniendo los demás grupos adimensionales constantes puede representar una modificación de L o N_0 . La Fig. 6.4 fue construida considerando N_0 variable, es decir permitiendo cambios en las condiciones de borde. La Fig. 6.5 consideró N_0 constante, vale decir cambios de α desacoplados de las condiciones de frontera.

En las Figs. 6.4 y 6.5 se observa que al aumentar α dejando constante los demás parámetros adimensionales aumentan el número de transportadores en la junta, y los cambios en la densidad de electrones y hoyos, el campo eléctrico y el potencial electrostático se hacen más abruptos. Además, para mayores valores de α el campo eléctrico se hace más puntiagudo. En el caso de variaciones de α que permiten cambios de N_0 , Fig. 6.4, la diferencia de potencial electrostático construido internamente sube conforme se incrementa α , pues a mayores α en este caso mayor es el dopajes y mayor es entonces el V_{bi} , por lo que $V_{ap}^* - |V_{bi}^*|$ es mayor (recordar que en el

²Lo anterior considerando que el material a ambos lados de la junta es igual, de lo contrario las densidades intrínsecas de transportadores cambian (n_i cambia) por lo que para satisfacer ahora la igualdad de la Ec. (6.3) β_n debería ser distinto de β_p .

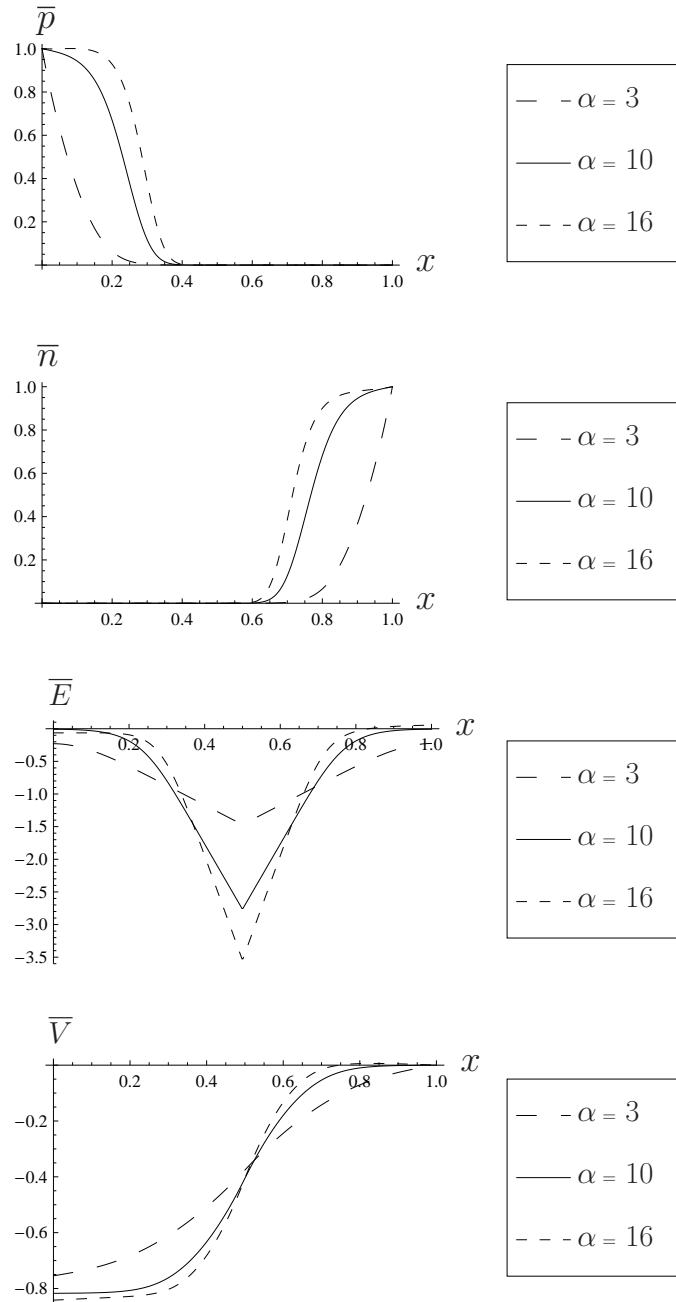


Figura 6.4: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = 0.026$, $\beta_p = 0.026$ y $\gamma_2 = 1$. Las soluciones mostradas consideran N_0 variable.

caso que esta siendo analizado ($V_{ap}^* = 0$).

En oscuridad y sin voltaje aplicado el campo eléctrico que experimenta la junta es generado internamente debido a la carga eléctrica ($p - n \pm N_i/N_0$). Cerca de la junta fuerzas difusivas debido a la diferencia de concentraciones de uno y de otro lado generan desplazamiento de transportadores que provocan carga eléctrica. En régimen estacionario las fuerzas difusivas y electroestáticas se equilibran. El punto de equilibrio dependerá de

la magnitud de dichas ‘fuerzas’, en este sentido valores menores de α favorecen la difusión, en cambio valores mayores potencian las fuerzas electrostáticas.

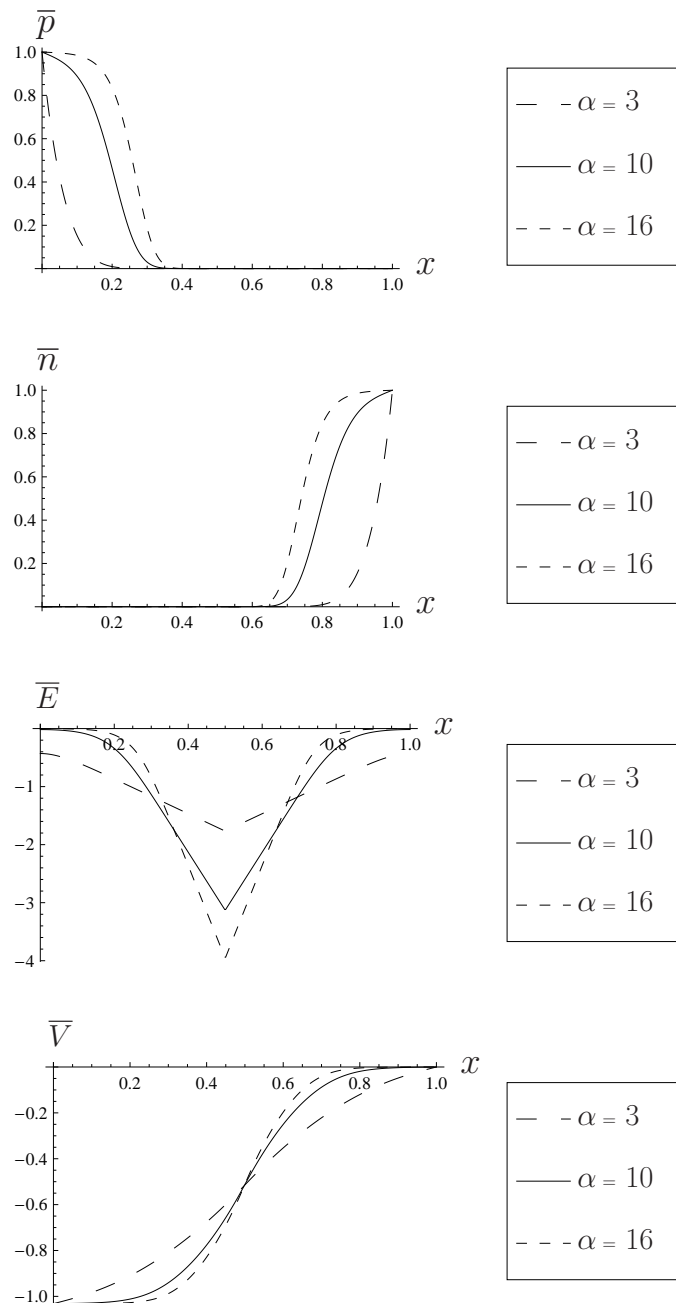


Figura 6.5: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = 0.026$, $\beta_p = 0.026$ y $\gamma_2 = 1$. Las soluciones mostradas consideran N_0 fijo.

De acuerdo al párrafo anterior, se explica que en las Figs. 6.4 y 6.5 a mayores valores de α la distribución de transportadores cambian menos con respecto a la configuración inicial de la junta (todos los electrones en el lado N y todos los hoyos en el lado P) pues pequeños cambios en la distribución de transportadores genera un campo eléctrico suficiente para contrarrestar las fuerzas difusivas.

El cambio drástico en el gradiente del campo eléctrico de uno a otro lado de la junta se debe al cambio del transportador mayoritario (hoyos en el lado P y electrones en el lado N), por lo mismo la densidad de carga eléctrica cambia fuertemente al pasar por la junta (ver ley de Gauss en Ec. 4.21). Que el campo eléctrico se haga más puntiagudo cerca de la junta se explica en este caso observando que de las Ecs. (6.1c) y (6.1d) se obtiene:

$$E = -\frac{\partial V}{\partial x} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\beta_n}{n} \frac{\partial n}{\partial x} - \frac{\beta_p}{p} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \quad (6.4)$$

por lo que como las fuerzas difusivas son máximas en la junta, entonces el campo eléctrico debe ser máximo en dicha zona.

Cabe hacer notar que las variables graficadas están adimensionalizadas por factores constantes, por lo que si bien el valor que toman las variables reales cambia, no lo hace la forma de la distribución espacial de dichas variables. De las Figs. 6.4 y 6.6, se aprecia claramente que cambios en α producen cambios en la forma de la distribución espacial de las variables. Ahora bien, el efecto que estos cambios de forma producen en las características de corriente de la junta no es posible deducirlos directamente, al respecto sólo es posible decir que a menores α y a mayores β la intensidad del campo eléctrico aumenta, y que a mayores α las distribuciones de transportadores (p y n) en el dispositivo se hacen más insensibles a campos externos. Figuras presentadas más adelante darán mayores antecedentes para responder a esta pregunta.

La Figura 6.6 muestra las distribuciones de las variables para distintos valores de $\beta = \beta_n = \beta_p$, en ella se puede apreciar que a mayores valores de β las curvas de densidad de electrones y hoyos se acercan a la junta (aumenta la concentración de transportadores), el campo eléctrico se hace menos puntiagudo, y el 'built-in voltage' se hace de menor valor.

Cuando aumenta la temperatura (en equilibrio $T_e = T_h = T_L$) dos cambios suceden: (i) el valor de β aumenta y (ii) la densidad intrínseca (n_i) aumenta (ver Fig. 2.10). El 'built-in voltage' (V_{bi}) debería aumentar al aumentar β , sin embargo en el caso de la Fig. 6.6 disminuye. Lo anterior se debe a que al aumentar β también aumenta n_i provocando un aumento considerable, pero imperceptible en la Fig. 6.6, de los transportadores minoritarios (electrones en el lado P y hoyos en el lado N). El aumento en la densidad de los transportadores es considerable porque aumentan en varios órdenes de magnitud su valor, pero es imperceptible porque siguen siendo valores muy bajos para que se noten en la gráfica.

Es el aumento de la densidad de transportadores intrínseca la que produce la disminución de V_{bi} en la Fig. 6.6 y no el aumento de β directamente (ver Ec. 4.21). El aumento de n_i con la temperatura es conocido como termalización [26] y es perjudicial para la eficiencia de las celdas solares, pues va en desmedro de la capacidad de la junta para generar corriente dada una generación neta (un análisis más detallado se hará en las secciones 6.5 y 6.6.).

Para aumentar β se debe aumentar la temperatura de los transportadores, notar que β_n y β_p son grupos adimensionales independientes de los demás. Un valor de $\beta = 0.03$ equivale a $T = 75[^\circ C]$ y un $\beta = 0.009$ es igual a $T = -169[^\circ C]$.

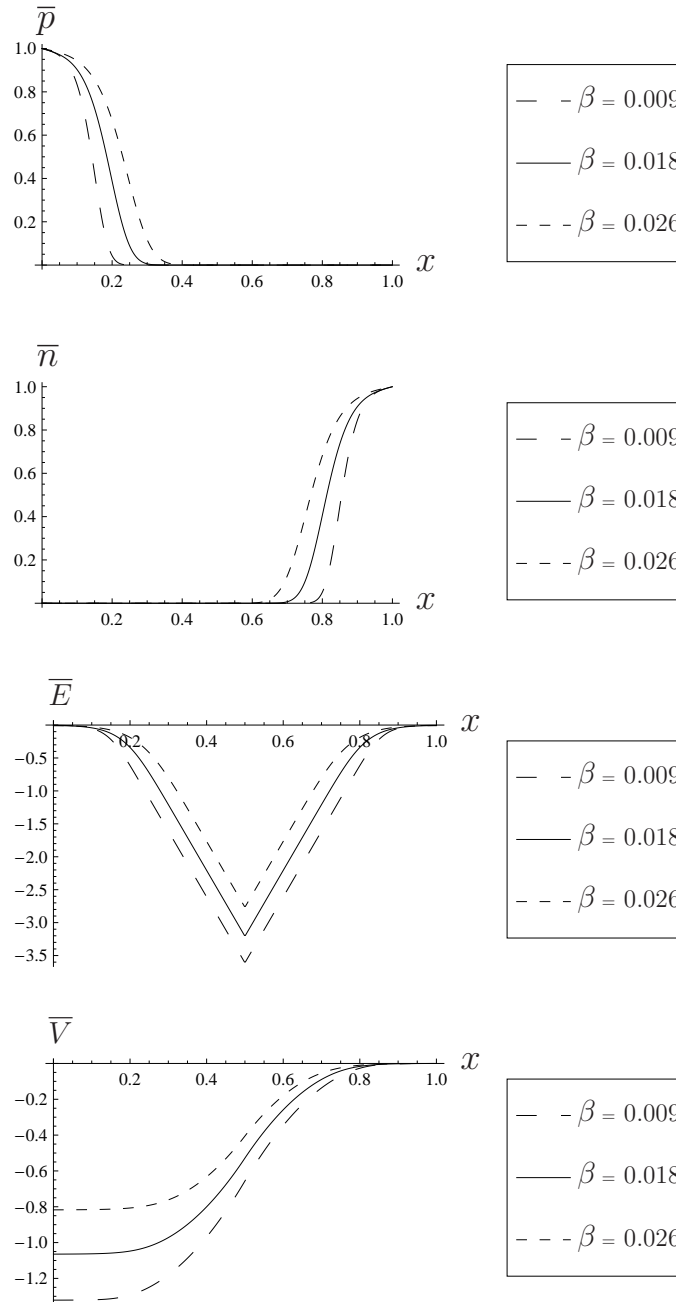


Figura 6.6: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 10$ y $\gamma_2 = 1$.

La Figura 6.7³ presenta la variación de β con las concentraciones de los transportadores en los bordes desacopladas de la temperatura, es decir concentraciones en los bordes constantes e independientes del β escogido. Se puede apreciar que al aumentar β aumenta la difusión en los bordes (aumenta el gradiente de la densidad de transportadores en los bordes), aumenta el ‘built-in voltage’, y se hace más intenso el campo

³Algunos de los valores usados en la construcción de esta figura se escapan a propósito de los presentados en la Tabla 4.2 para acentuar las diferencias con Figura 6.6

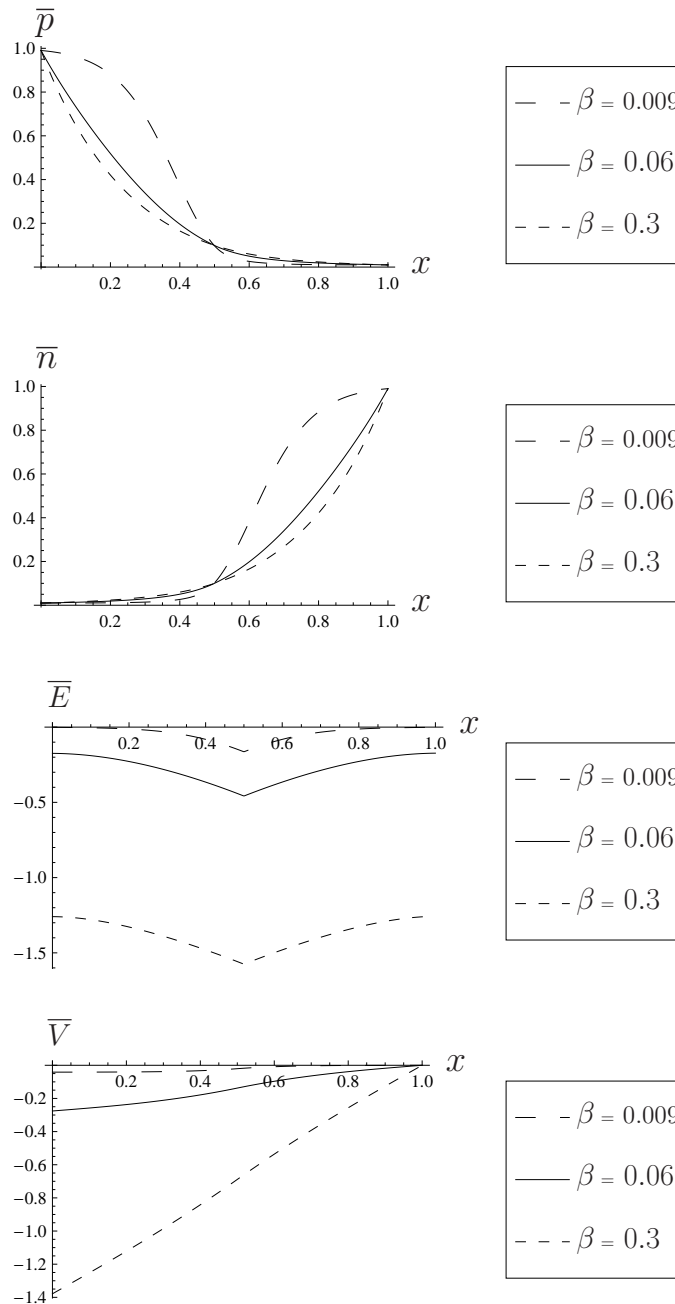


Figura 6.7: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado y en oscuridad con $R_e = 0.0005$, $\alpha = 1$ y $\gamma_2 = 0.3$. Con β desacoplado de las condiciones de borde.

eléctrico. Con lo anterior queda claro que la disminución de la difusión al aumentar la temperatura en la Fig. 6.6 se debe al cambio de las condiciones de borde y no a un fenómeno relacionado directamente con un problema de transporte. De hecho, si se logrará aumentar la temperatura de los transportadores (aumentar β) sin cambiar la densidad intrínseca, el aumento de la temperatura sería favorable en celdas solares (un análisis más detallado se hará en la secciones 6.5 y 6.6).

Finalmente notar, que tanto las Figs. 6.4 y 6.5 como la Fig. 6.6 son la solución estacionaria y en equilibrio

(en oscuridad y sin voltaje aplicado), por ende, la velocidad adimensional de los transportadores es igual a cero ($u_e = u_h = 0$), es decir, no hay movimiento.

6.4. Resultados en Oscuridad con Voltaje Aplicado

A continuación se exponen los resultados en oscuridad con voltaje aplicado. Primero se muestran las distribuciones espaciales de las variables en estudio y después se presentan las curvas características de voltaje aplicado versus corriente total (V_{ap} v/s J_T) para distintos valores de los parámetros de operación.

6.4.1. Distribución Espacial de las Variables, en Oscuridad y con Voltaje

La Fig. 6.8 presenta la distribución de las variables para voltajes aplicados positivos, en ellas se aprecia que a mayor voltaje aplicado más transportadores se acumulan en la junta.

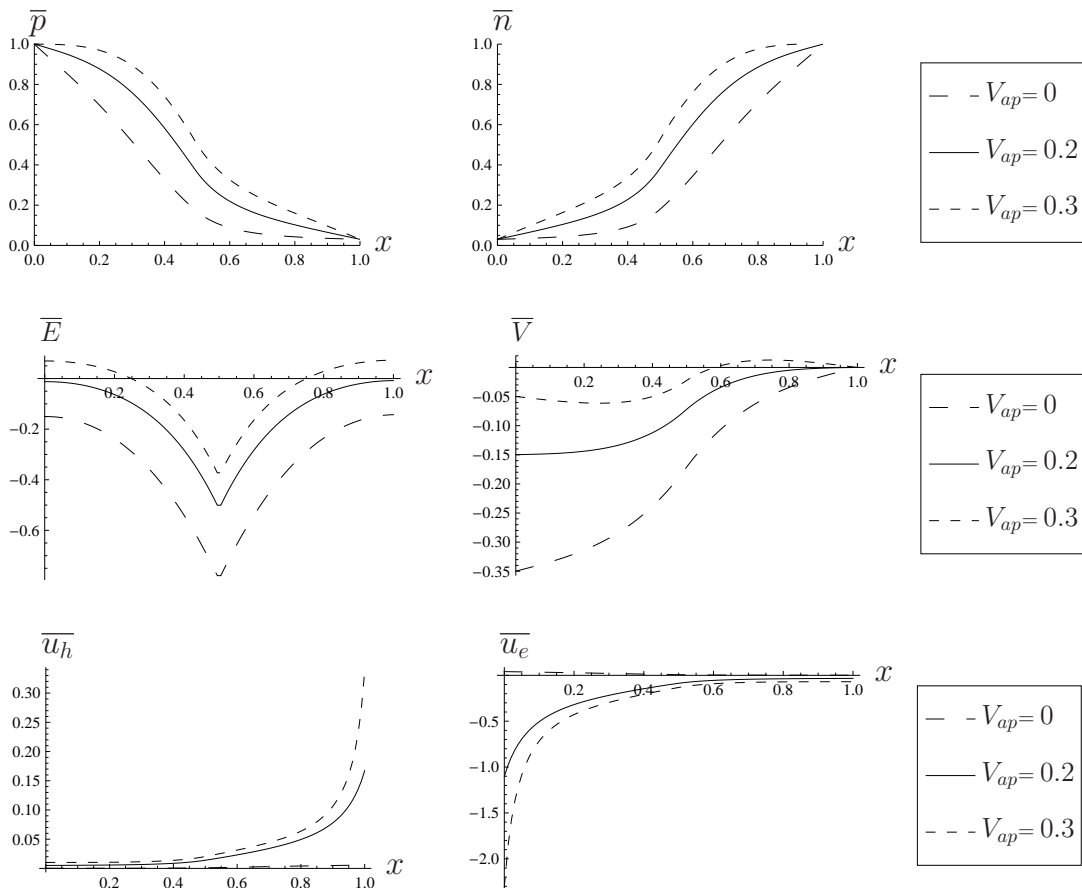


Figura 6.8: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con voltaje aplicado positivo (forward) y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = 0.12$, $\beta_p = 0.12$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$.

Además en la Fig. 6.8 se ve claramente que a mayor voltaje aplicado positivo la aproximación de una zona vacía se hace más irreal, de hecho los transportadores minoritarios⁴ aumentan considerablemente cerca de la junta. La diferencia de potencial electrostático se hace menor al aumentar el voltaje aplicado positivo, lo anterior es totalmente coherente si se hace notar que a cero voltaje aplicado existe un potencial electrostático negativo ('built-in voltage') que disminuye (en módulo) al aplicar un voltaje positivo⁵.

Que el campo eléctrico sea igual en los bordes ($E(x=0) = E(x=1)$) se debe a la condición de neutralidad de carga, es decir a la propiedad de que el dispositivo como un todo es eléctricamente neutro. Lo anterior es fácil de deducir al integrar en x las Ecs. (4.21a) y (4.21b) sobre todo el dominio.

Con respecto a las velocidades observadas en la Fig. 6.8, éstas en magnitud (módulo) aumentan al aumentar el voltaje aplicado. Por otro lado, las concentraciones en los bordes de la densidad de transportadores en este caso no cambian, por ende podemos inferir que al aumentar el voltaje aumenta la corriente que pasa a través de la junta.

En cuanto al sentido de los electrones y hoyos estos van en dirección a la junta lo que es consecuente para una condición 'forward' (ver sección 2.7.3). Notar que la velocidad alcanzada por los electrones es mayor en magnitud que la de hoyos, ya que los hoyos poseen mayor inercia y las fuerzas que experimentan electrones y hoyos son del mismo orden. Además las mayores velocidades son alcanzadas por los transportadores minoritarios, pues en este caso como no existe una tasa de generación-recombinación neta distinta de cero el producto de la velocidad de transportadores con la densidad de los mismos debe ser constante, y por ende a menores concentraciones mayores velocidades deben existir. Lo anterior se deduce de la ecuación de continuidad.

Los resultados de la Fig. 6.9 muestran claramente que entre más se aplica voltajes negativos, la junta más se vacía de transportadores, el campo eléctrico se hace más intenso (el valor promedio del campo aumenta en módulo), la diferencia de potencial electrostático aumenta, y la magnitud de las velocidades sube. Notar además que las pendientes en los bordes de los transportadores mayoritarios sube al incrementar en módulo el voltaje negativo aplicado, por lo que la difusión se ve favorecida en dichos bordes con una intensificación del estado 'reverse'.

Como era de esperar en 'reverse' (Fig. 6.9) el sentido de flujo de los transportadores es alejándose de la junta (ver sección 2.7.3). Es en esta condición que trabaja la mayoría de las celdas solares, en 'reverse' se favorece la evacuación de los transportadores generados, además disminuye las posibilidades de recombinación de electrones-hoyos al tener menos posibilidades de encontrarse. Ya que en la disposición de los semiconductores para celdas solares convencionales (ver Fig. 2.17) la generación de transportadores se ubica cerca de la zona de incidencia de la radiación (lado N y cerca de la junta PN), por lo que en 'reverse' la dirección seguida por los transportadores generados es en el sentido de su zona mayoritaria, es decir en 'reverse' los hoyos se dirigen al lado P y los electrones al lado N disminuyendo las posibilidades de colisión con el transportador opuesto.

Notar que la distribución espacial de las velocidades en 'reverse' (ver Fig. 6.9) poseen un máximo cerca de la junta, el cual se hace más pronunciado al aumentar en módulo el voltaje negativo. Lo anterior es consecuente con que la densidad de transportadores baje en la zona de máxima velocidad, pues al no existir generación-recombinación neta distinta de cero el producto entre la densidad de transportadores y la velocidad debe ser constante. Sería interesante poner atención en este fenómeno para futuros modelos que incluyan las ecuaciones de energía pues podría estar relacionado con la pérdida de eficiencia de las celdas en zonas cercanas a la junta.

⁴Se llama transportadores minoritarios al transportador con menor concentración, de esta forma en lado P el transportador minoritario es el electrón.

⁵Notar que el voltaje no es idéntico al potencial electrostático en una junta PN (ver sección 2.3).

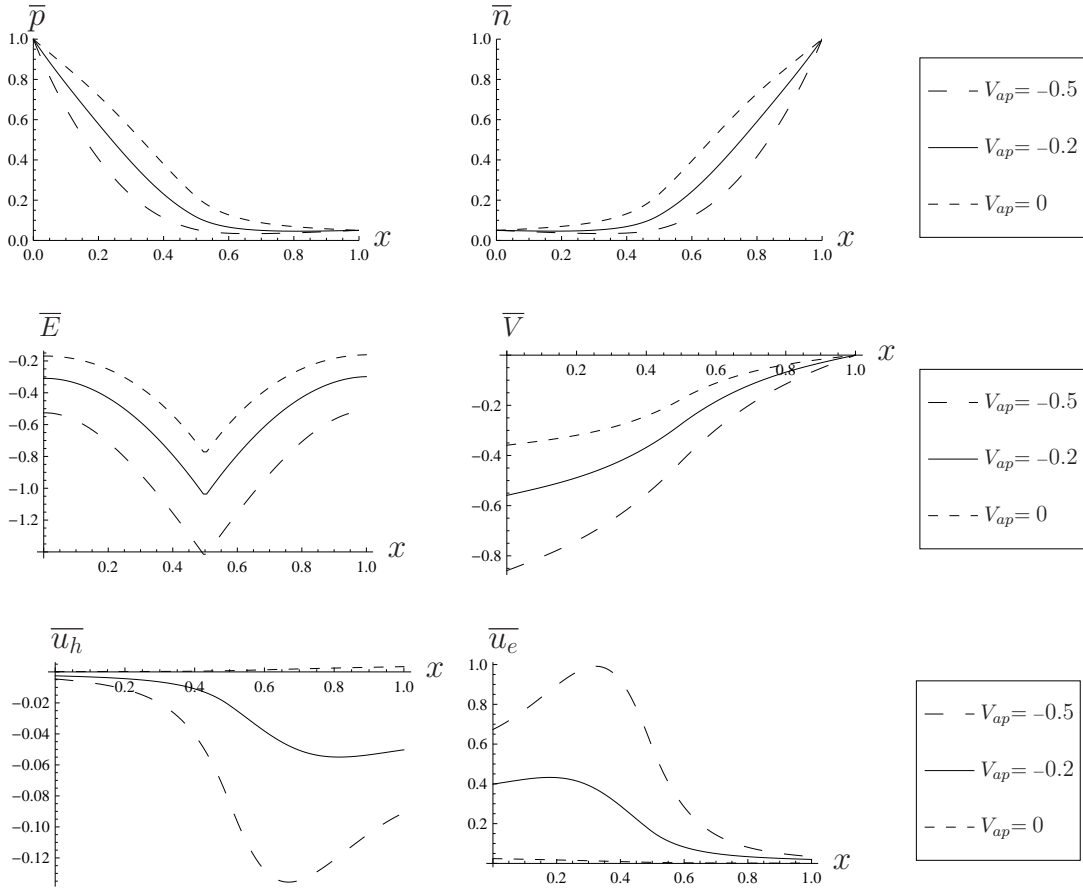


Figura 6.9: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con voltaje aplicado (reverse) y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = 0.12$, $\beta_p = 0.12$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$.

Al comparar las Figs. 6.8 y 6.9 se puede apreciar que la junta es más sensible a cambios de voltaje positivos, pues para valores de voltaje inferiores (en valor absoluto) se generan corrientes y velocidades de mayor magnitud. Finalmente, notar que la diferencia de \bar{V} no corresponde a la diferencia de voltaje entre los bordes de la junta. La variable \bar{V} es el potencial electrostático, el voltaje para una junta PN no solo queda definido con el potencial electrostático sino que también esta formado por el potencial electroquímico definido en los antecedentes de este documento (Sec. 2.3).

La Fig. 6.10 muestra el efecto del cambio de la temperatura de transportadores en la distribución de las variables en estudio para un voltaje positivo aplicado en oscuridad. En este caso la temperatura del cristal es distinta a la de los transportadores, pero electrones y hoyos siguen estando en equilibrio térmico ($T_e = T_h \neq T_L$). Se puede observar que al aumentar β aumenta el gradiente de la densidad de transportadores mayoritarios en el borde de la junta, es decir para los hoyos el gradiente de concentración sube en el borde del lado P, y para electrones en el borde del lado N.

Se observa en la Fig. 6.10 que la densidad de los transportadores minoritarios en los bordes (hoyos en el borde del lado N, electrones en el borde del lado P) aumenta al subir la temperatura de electrones y hoyos (el cambio de β siempre esta asociado a cambios en las condiciones de borde), además al aumentar β se hace más

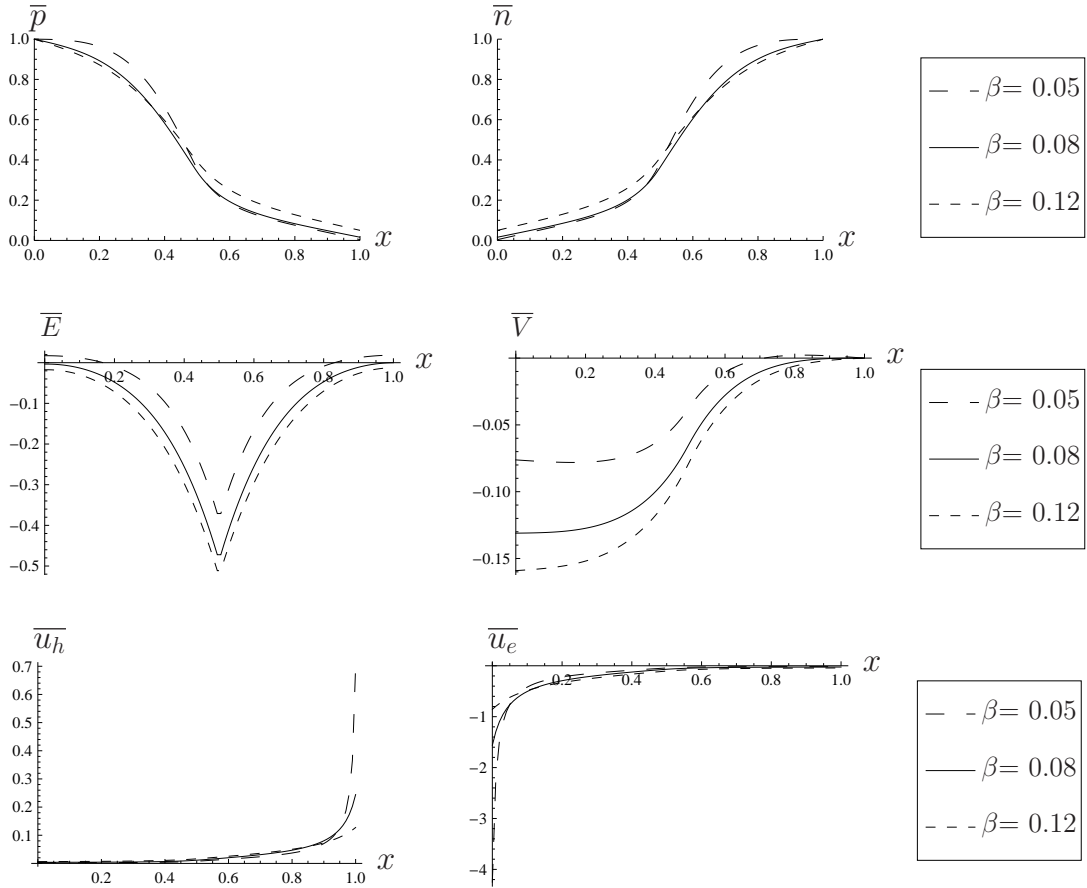


Figura 6.10: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = 0.2$ y en oscuridad con $R_e = 1.5 \times 10^{-5}$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$.

puntiagudo el campo eléctrico, disminuye el modulo de la magnitud de la velocidad de los transportadores, y contrario a lo esperado la diferencia de potencial electrostático incrementa al aumentar la temperatura de transportadores.

La diferencia de potencial electrostático entre los bordes de la junta PN se puede calcular como:

$$\Delta\bar{V} = V_{ap} - |V_{bi}| \quad (6.5)$$

, por lo que según la Ec. (6.3) dado un voltaje aplicado la diferencia de potencial electrostático puede ser aumentado en la junta aumentando la temperatura de los transportadores, o aumentando la diferencia de concentración entre los bordes de la junta. Por lo expuesto anteriormente, que la diferencia del potencial electrostático aumente al aumentar β es totalmente plausible.

El aumento de la temperatura de transportadores aumenta la densidad intrínseca, es decir disminuye la diferencia de densidad de electrones (u hoyos) entre los bordes de la junta. Que la densidad intrínseca aumente favorece la disminución del potencial electrostático. Por otro lado, un aumento de β desacoplado del cambio en n_i favorece el crecimiento del potencial electrostático (ver Fig. 6.7). Por todo lo anterior, un aumento de β puede significar un aumento de $\Delta\bar{V}$ como se muestra en Fig. 6.10, o en una disminución como se muestra en la Fig. 6.11. Esto significa que el modelo predice que no siempre un aumento en la temperatura de transportadores provoca una baja en la eficiencia de las celdas solares como comúnmente se piensa.

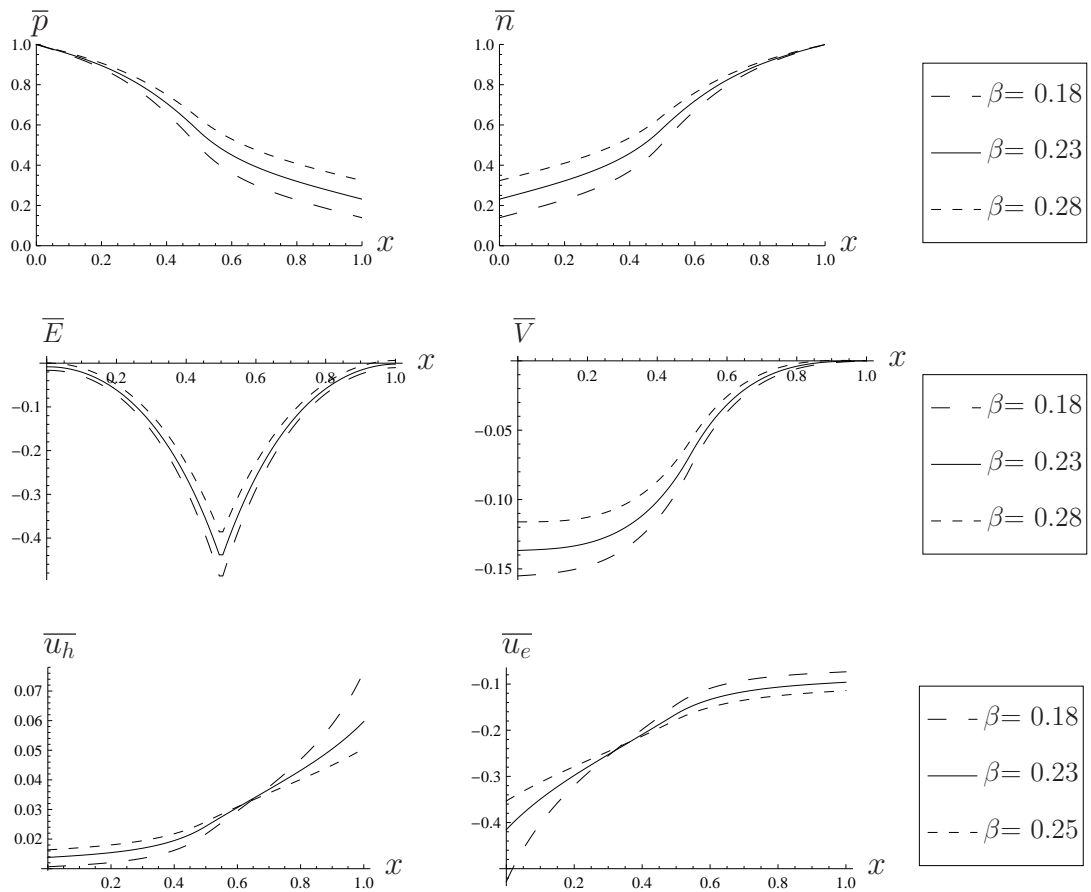


Figura 6.11: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = 0.2$ y en oscuridad con $R_e = 1.5 \times 10^{-5}$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$.

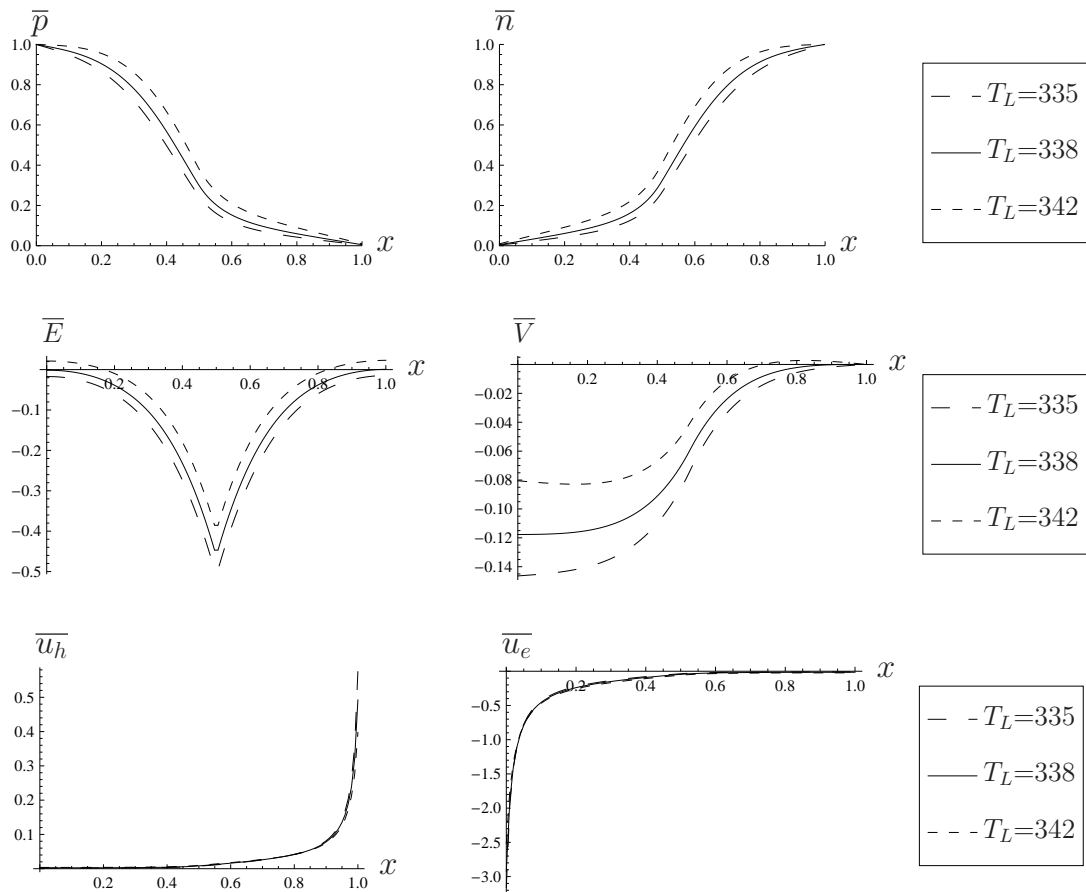


Figura 6.12: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = 0.2$ y en oscuridad con $R_e = 1.5 \times 10^{-5}$, $\alpha = 3$, $\beta = 0.06$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$.

La Fig. 6.11 se diferencia de la Fig. 6.10 en que ahora la variación de β se produce a temperaturas mayores. Para los valores presentados en la Fig. 6.11, al aumentar β la densidad de transportadores minoritarios en los bordes (electrones en el borde P, y hoyos en el borde N) aumenta, el campo eléctrico se hace menos puntiagudo, la diferencia de potencial electrostático se hace menor, y las velocidades en magnitud disminuyen. En este caso los gradientes de la concentración de transportadores en los bordes permanece relativamente invariante al cambio de β . Se aprecia una termalización importante de los transportadores (aumento de n_i que provoca un aumento de los transportadores minoritarios).

En la Fig. 6.12 se muestra el cambio de las distribuciones con la temperatura del cristal ($T_L^* = T_L \cdot 1[K]$) para un voltaje aplicado de 0.2[V]. Los principales cambios se observan en las densidad de transportadores, el campo eléctrico y el voltaje. El aumento de T_L provoca un aumento en la cantidad de transportadores en la junta, una disminución de la intensidad del campo eléctrico, y una baja considerable en la diferencia de potencial electrostático ($\Delta\bar{V}$). Dichos cambios se producen con pequeñas variaciones en la temperatura del cristal (del orde de 3[K]).

Comparando las Figs. 6.10 y 6.11 con la Fig. 6.12 queda en evidencia que el modelo predice que la junta PN, y los dispositivos que forma, es mucho más sensible a cambios de la temperatura del cristal que a cambios de la temperatura de los transportadores. Dicho de otra forma, cambios en la temperatura de los transportadores no produce cambios tan drásticos como los observados al cambiar en pequeños valores en la temperatura del cristal. Es más, para ciertos rangos de temperatura el aumento de β es favorable para las celdas solares (ver Fig. 6.10).

El efecto del cambio de β para un voltaje aplicado negativo ($V_{ap} = -0.2$) se presenta en la Fig. 6.13. Se puede deducir lo mismo que para una variación de β en un voltaje aplicado positivo (Fig. 6.10 y 6.11), es decir dependiendo de las magnitudes involucradas el aumento de β puede ser favorable o desfavorable para la eficiencia de la celda. Para aumentos de β a temperaturas de transportadores baja, la difusión domina sobre la termalización y entonces aumentos de la temperatura de transportadores ayudan a una mejor eficiencia de la celda a base de junta PN (esto quedará más claro cuando se presenten los resultados de las curvas corriente v/s voltaje con generación neta). Para aumentos de β a temperaturas altas, domina la termalización sobre el aumento de difusión por lo tanto al aumentar los transportadores su temperatura hacen bajar la eficiencia de las celdas.

Para las dos formas de cambiar los grupos adimensionales α , R_e , y γ_2 consideradas (ver Sec. 6.2), variaciones de γ_2 considerando los demás parámetros adimensionales constantes y la temperatura del cristal constante representan cambios en τ_{hl} . Por ende, no hace diferencia en este caso considerar una u otra forma. Por lo anterior y para no redundar, solo se presentan los resultados con cambios en γ_2 dejando constante τ_{el} .

Cambios en γ_2 (τ_{el}/τ_{hl}) solo afectan la velocidad de los hoyos (\bar{u}_h) como se muestra en la Fig. 6.14, las demás distribuciones adimensionales permanecen invariantes. Al aumentar γ_2 disminuye \bar{u}_h , es decir conforme el tiempo promedio de colisión hoyo-cristal (τ_{hl}) se hace más pequeño que el tiempo promedio de colisión entre electrón-cristal (τ_{el}) la velocidad del hoyo disminuye. Lo anterior se explica teniendo en cuenta que a menor tiempo promedio de colisión más colisiones ocurren, por ende más resistencia existe al paso de hoyos en una dirección.

Finalmente se ha incluido en esta sección los resultados de la junta en oscuridad con voltaje aplicado para distintos R_e (ver 6.15 y 6.16). En la Fig. 6.15 se observa que a mayores R_e menos transportadores se acumulan en el dispositivo, el campo es más intenso, y la diferencia de potencial electrostático aumenta. En cambio la Fig. 6.16 muestra que para esos R_e no se producen cambios apreciables. La Fig. 6.15 cambia el R_e considerando N_0 variable (por tanto cambios en las condiciones de borde), en este caso aumentos del R_e significan aumentos de N_0 . La Fig. 6.16 considera N_0 fijo (es decir, cambios de R_e no modifican las condiciones de frontera).

Por analogía a los fenómenos fluido-dinámicos es posible definir una viscosidad para el flujo de electrones $\nu = L^2/\tau_{el}$ (Ec. 4.27). Para viscosidades mayores el R_e baja, es decir, para tiempos de colisión electron-hoyo menores el R_e disminuye. Ahora bien, el R_e no aparece en las ecuaciones de orden cero ni de orden uno.

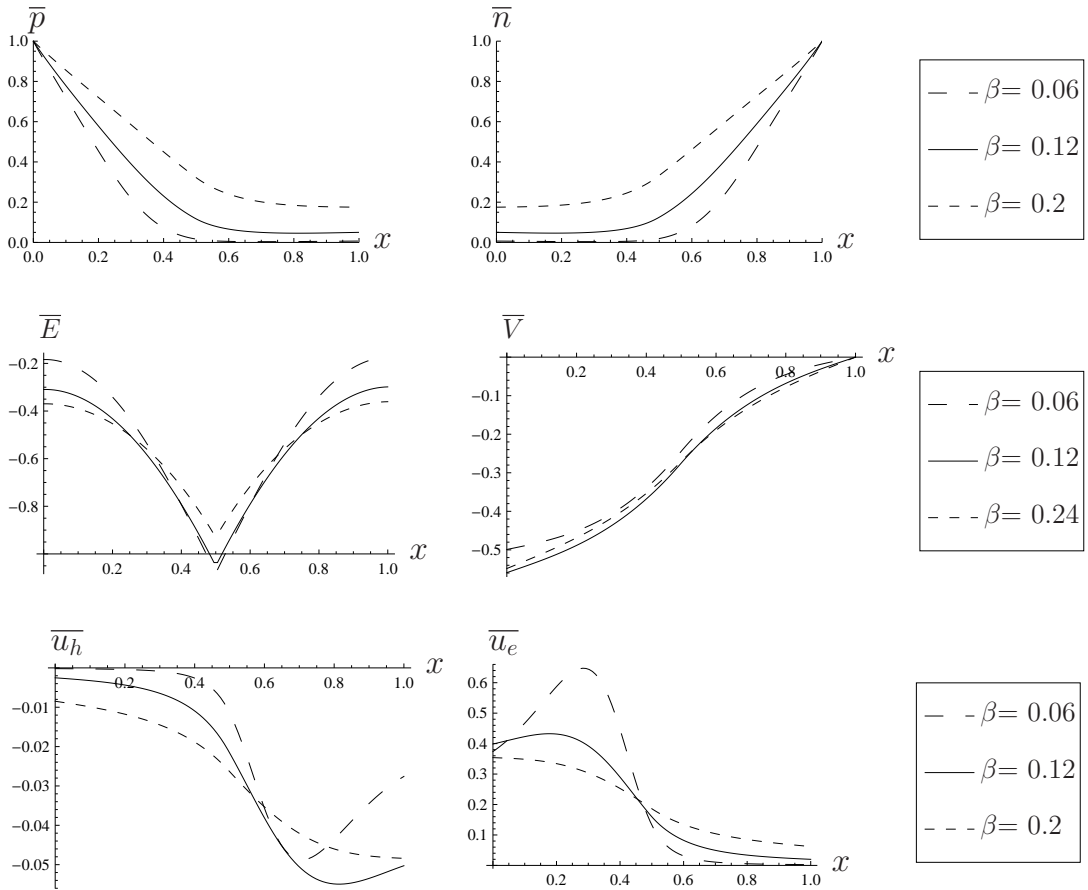


Figura 6.13: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = -0.2$ y en oscuridad con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$.

Numéricamente el R_e es un ponderador de la solución de orden uno, es decir el R_e aumenta o disminuye los efectos de orden uno. Como los R_e considerados son bajos no se aprecian mayores cambios en las soluciones debidos directamente al R_e (ver Fig. 6.16). Los cambios que se aprecian en la Fig. 6.15 se deben a los cambios producidos en N_0 al cambiar el R_e . No obstante lo anterior en la Sec. 6.6 se mostrará para los mismos R_e considerados aquí pequeñas variaciones en la curva de corriente de la junta PN bajo iluminación.

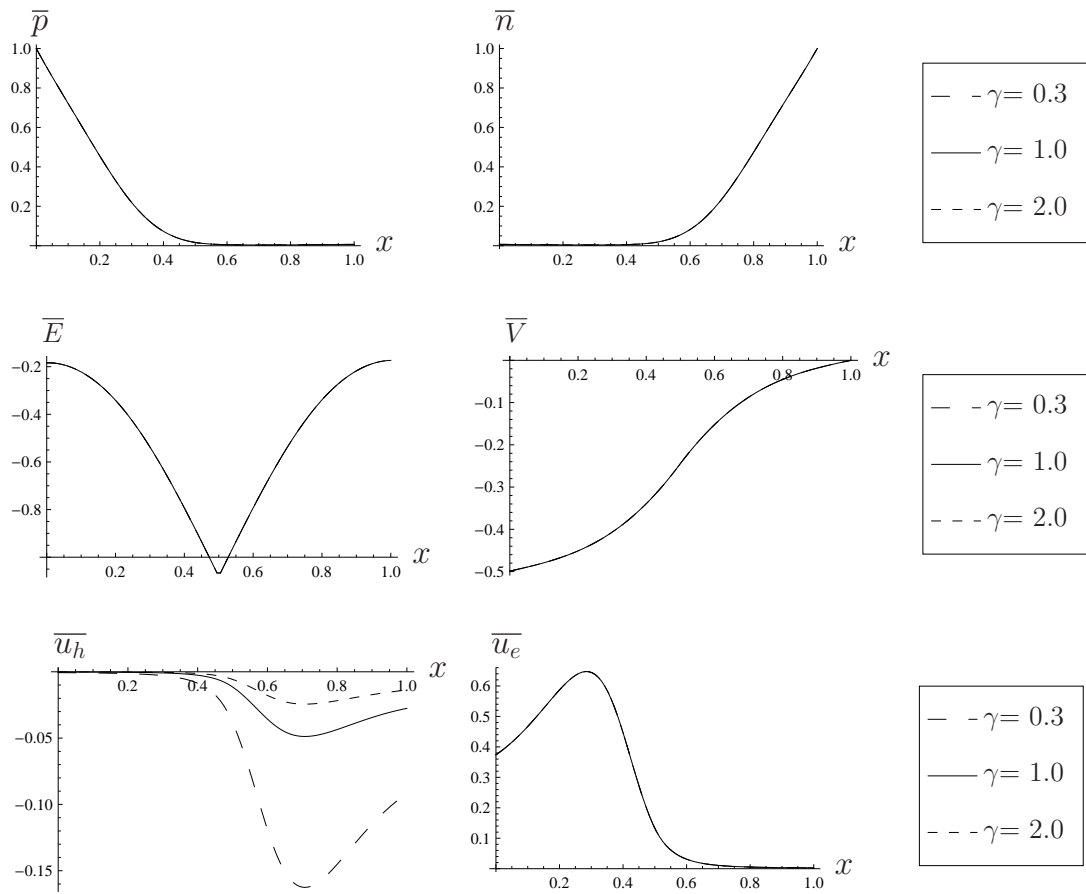


Figura 6.14: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = -0.2$ y en oscuridad con $R_e = 1.5 \times 10^{-5}$, $\alpha = 3$, $\beta_n = 0.06$, $\beta_p = 0.06$ y $T_L = 340$.

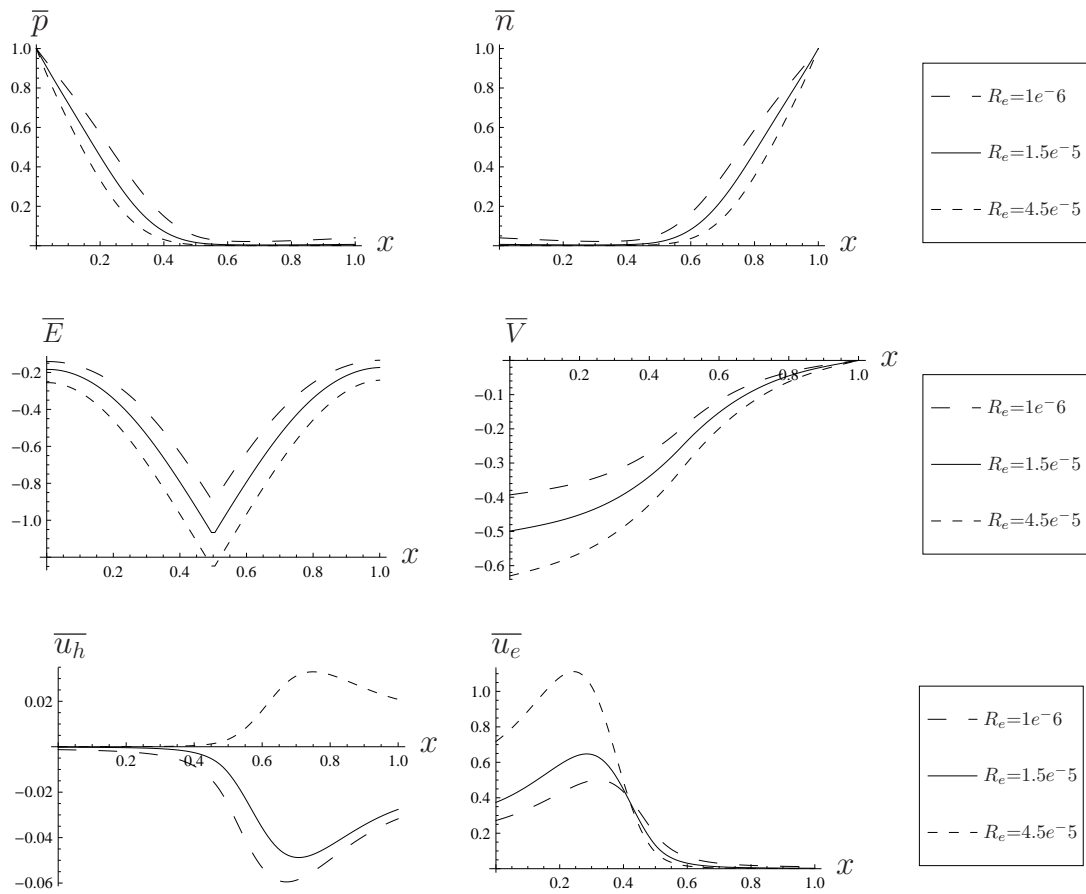


Figura 6.15: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = -0.2$ y en oscuridad con $\alpha = 3$, $\beta_n = 0.06$, $\beta_p = 0.06$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$. Las soluciones mostradas consideran N_0 variable.

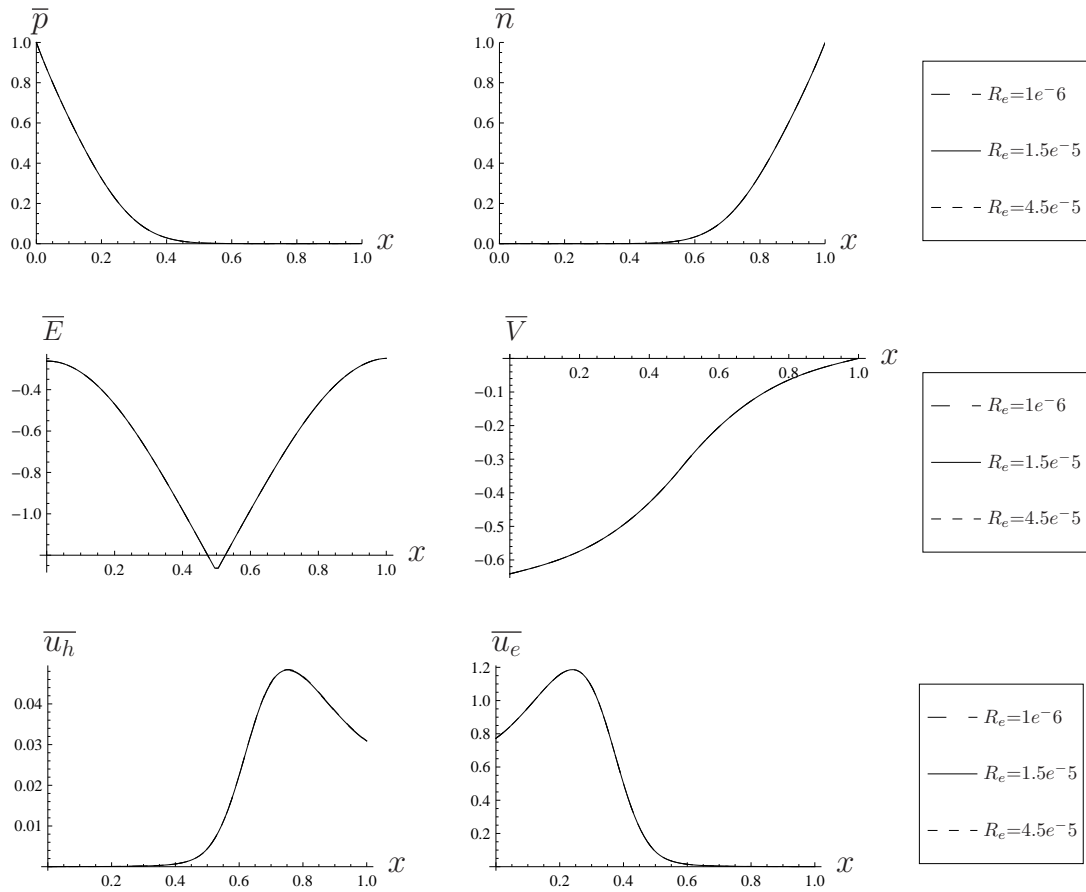


Figura 6.16: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = -0.2$ y en oscuridad con $\alpha = 3$, $\beta_n = 0.06$, $\beta_p = 0.06$, $T_L = 340$, y $\gamma_2 = 1$. Las soluciones mostradas consideran N_0 fijo.

6.4.2. Curvas Corriente v/s Voltaje en Oscuridad

Las figuras a continuación muestran los cambios que se producen en la curva corriente versus voltaje de una junta PN al variar parámetros adimensionales del modelo. La corriente de las figuras es la densidad de corriente total adimensional por unidad de carga del electrón (J_T) definida como:

$$J_T = p_0 \cdot u_{h0} - n_0 \cdot u_{e0} + R_e \cdot (p_0 \cdot u_{h1} + p_1 \cdot u_{h0} - n_0 \cdot u_{e1} - n_1 \cdot u_{e0}) \quad (6.6)$$

Las figuras presentadas en esta sección han sido calculadas sin generación neta, es decir en oscuridad. Las curvas fueron construidas con iteraciones sucesivas del modelo para distintos voltajes aplicados, y para distintas configuraciones de las constantes adimensionales. Las curvas reproducen la forma de ‘j’ conocida en la literatura para las juntas PN, que en una condición de oscuridad posee un cero justo en el origen como era de esperar.

Las Figs. 6.17 y 6.18 muestran el efecto en la curva voltaje versus corriente de variar α manteniendo los otros parámetros constantes. En la Fig. 6.17 se cambia α cambiando N_0 , vale decir aumento de la diferencia de transportadores entre los bordes de la junta. En la Fig. 6.18 se cambia α cambiando conjuntamente L , τ_{el} y τ_{hl} que no producen modificaciones en las condiciones de borde.

Al aumentar α (aumento de N_0) en la Fig. 6.17 para un mismo voltaje se obtienen corrientes menos intensas. Considerando que para una condición de equilibrio (oscuridad y sin voltaje aplicado) a mayores α mayores eran los campos internos producidos (ver Fig. 6.4), entonces, es lógico que para α grandes los mismos voltajes produzcan corrientes menores pues tienen que vencer campos internos más intensos para producir un flujo.

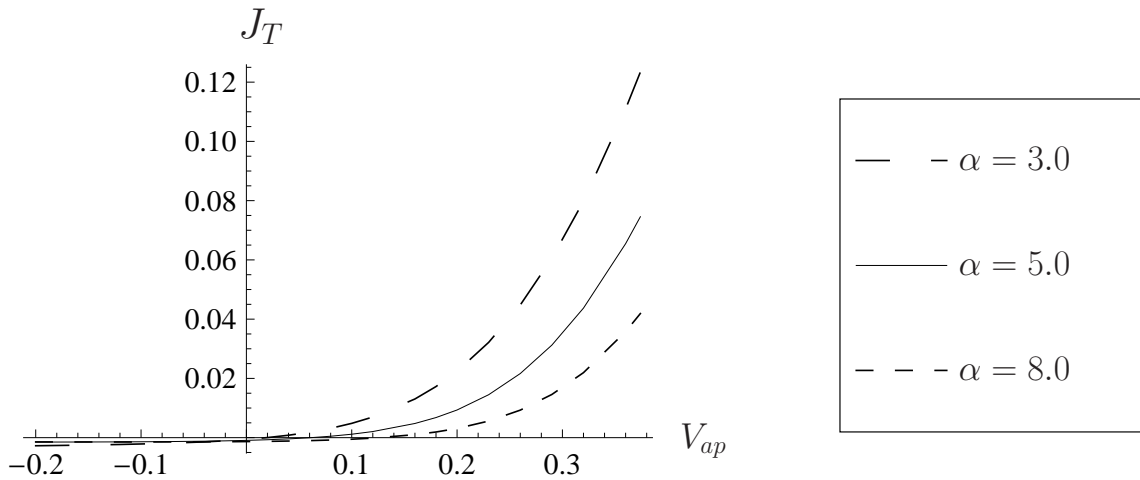


Figura 6.17: Curva corriente v/s voltaje para $R_e = 1.5 \cdot 10^{-5}$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$. Las curvas mostradas consideran N_0 variable.

En el caso de variar α dejando fijo N_0 , ver Fig. 6.18, también se aprecian cambios pero mucho menores que en la Fig. 6.17. El modelo predice que aumentos de α en este caso producen aumentos de la resistencia al flujo que hacen que para mismos voltajes, α mayores generen corrientes un poco menores. Notar que cambiar α en Fig. 6.18 no modifica las condiciones de borde.

El cambio de la curva ‘ J_T v/s V_{ap} ’ con la temperatura de transportadores es presentado en las Figs. 6.19 y 6.20. En ellas, se observa un cambio en la forma y en el ángulo de la curva de corriente con la abscisa (justo en el origen). Con el aumento de β la curva de corriente tiende a una línea recta, además las magnitudes de la corriente son mayores (en modulo) para un mismo voltaje. También con forme aumenta la temperatura de transportadores, el ángulo entre la curva y la abscisa justo en el origen aumenta.

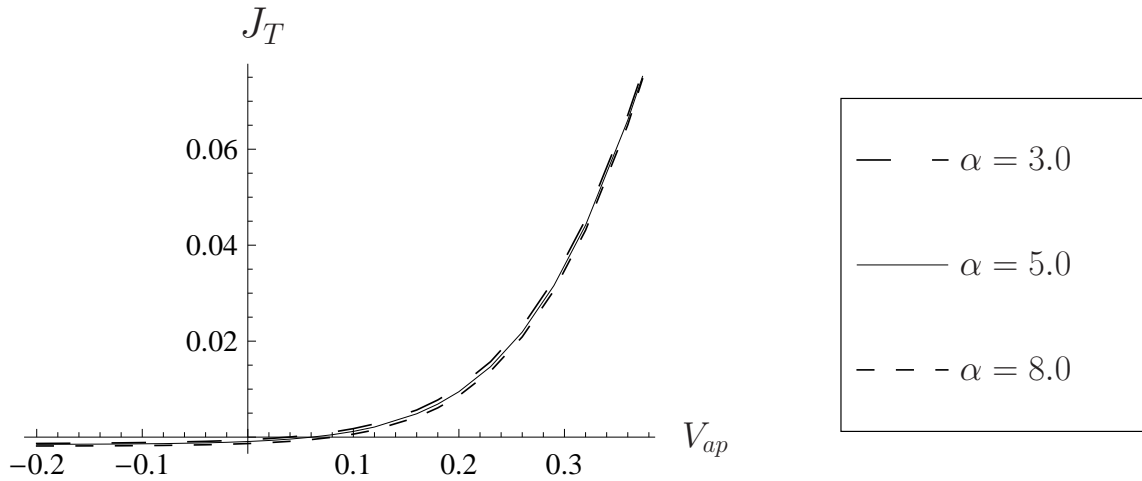


Figura 6.18: Curva corriente v/s voltaje para $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$. Las curvas mostradas consideran N_0 fijo.

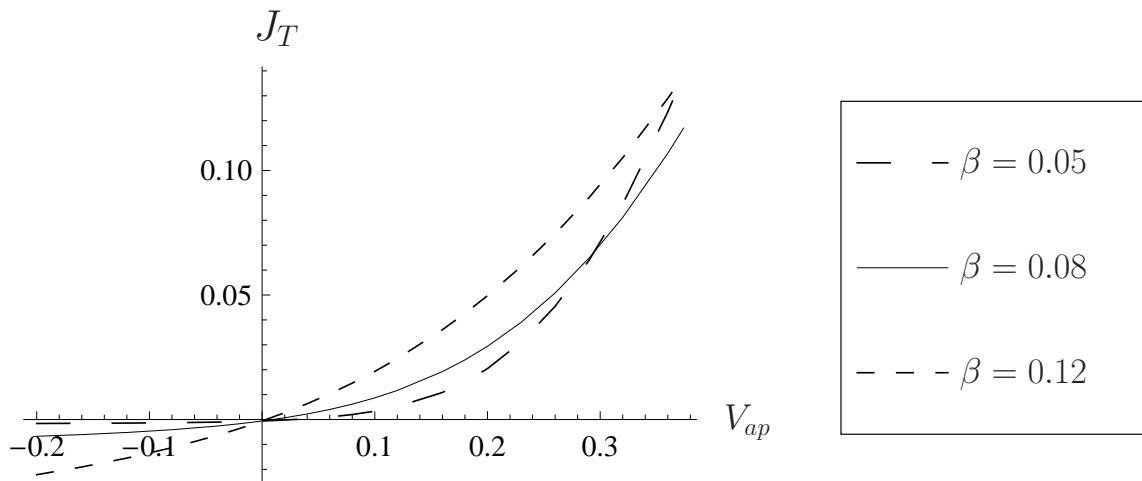


Figura 6.19: Curva corriente v/s voltaje para $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$.

Para explicar los cambios presentados en las Figs. 6.19 y 6.20 se debe notar que un aumento de β favorece la difusión y la termalización. La forma característica de un diodo, una junta PN, es la curva de corriente en forma de 'j', está característica se va perdiendo al aumentar la temperatura debido a la termalización. Pues la termalización aumenta la densidad intrínseca, disminuyendo así las diferencias relativas entre el lado P y el lado N. De hecho, al aumentar β la curva corriente tiende a la curva de un conductor ohmico (que responde a la ley de Ohm). Se volverá más adelante sobre este punto y su efecto sobre la eficiencia de la celda solar en la secciones 6.5 y 6.6.

La Fig. 6.21 muestra el efecto del cambio de γ ($\gamma = \gamma_2$) sobre la curva de corriente de la junta PN. El parámetro γ esta ligado a las colisiones entre el cristal y los transportadores. En la curva se aprecia que a mayores γ el ángulo entre la curva corriente y la abscisa baja provocando que para voltajes iguales γ mayores produzcan corrientes menores. Para cambiar γ sin variar los otros parámetros se debe cambiar τ_{hl} , o cambiar conjuntamente τ_{el} y L , o una combinación de las dos opciones anteriores. Notar además que es el cambio relativo entre los términos de colisión lo que produce el cambio, si se cambiará en la misma razón τ_{el} y τ_{hl} entonces γ no

cambiaría y no habría cambios en la curva de corriente adimensional.

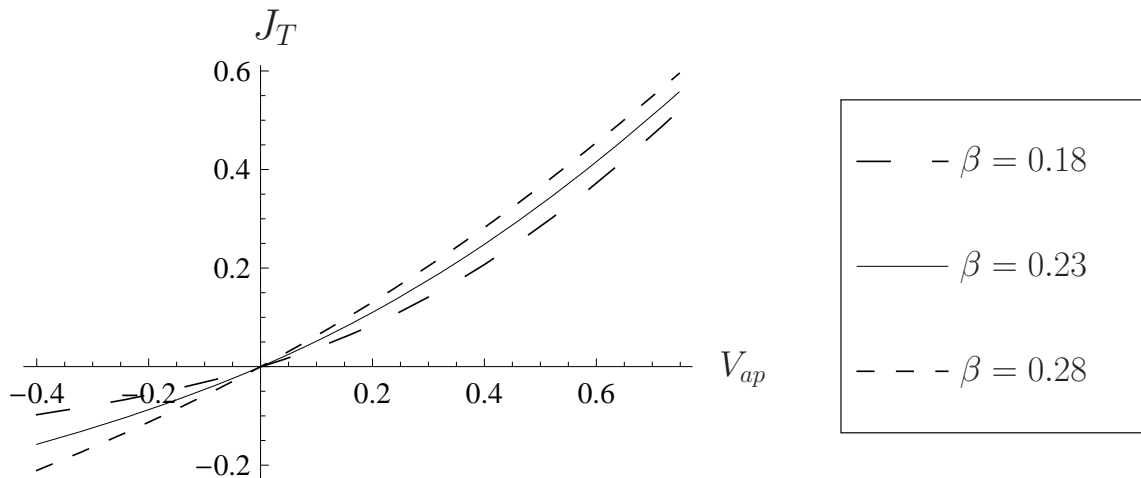


Figura 6.20: Curva corriente v/s voltaje para $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$.

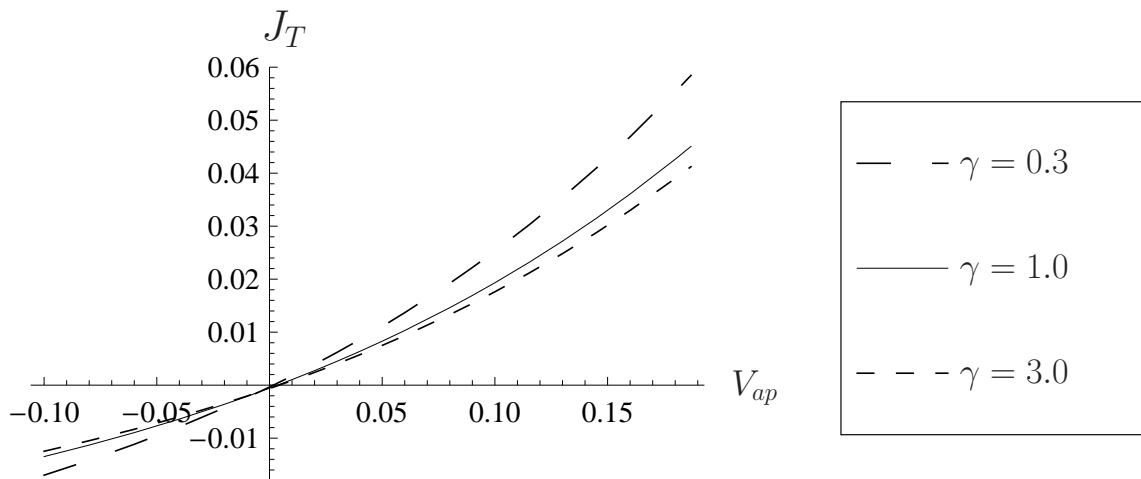


Figura 6.21: Curva corriente v/s voltaje para $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.12$ y $T_L = 340$.

Finalmente en esta sección se ha incluido el efecto del R_e sobre la curva de corriente de la junta PN en oscuridad. En la Fig. 6.22 cambios del R_e que consideran cambios en N_0 provocan que a mayores R_e la corriente producida para un mismo voltaje sea inferior comparativamente. En este caso variar el R_e sin modificar otra variable significa cambiar al mismo tiempo L y N_0 . Es decir, para producir los cambios que el modelo predice se actuar sobre parámetros de diseño de la junta como los son el largo L y la densidad de dopantes N_0 .

La Fig. 6.23 muestra la curva de corriente para la junta PN para distintos valores del R_e considerando N_0 constante. No se aprecian cambios.

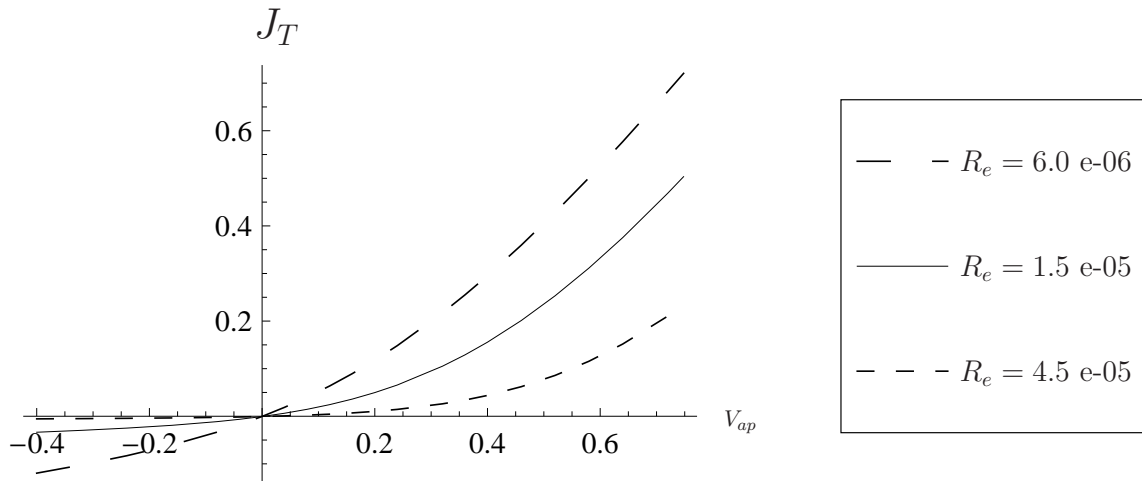


Figura 6.22: Curva corriente v/s voltaje para $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$.

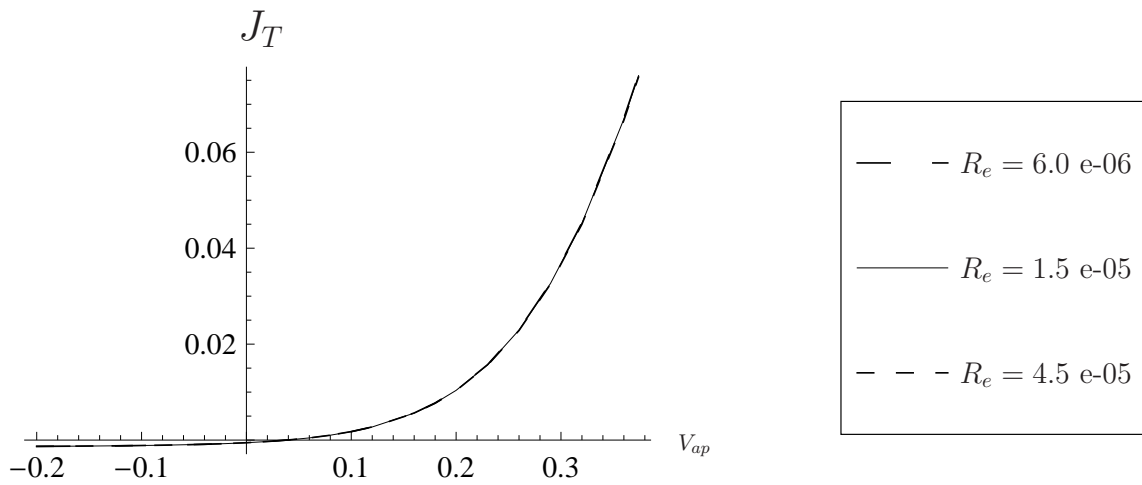


Figura 6.23: Curva corriente v/s voltaje para $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 1$.

6.5. Resultados Junta Iluminada sin Voltaje Aplicado

A continuación se presentan los resultados obtenidos para una junta con generación neta distinta de cero sin voltaje aplicado.

6.5.1. Interpretación de la Generación Adimensional

La Fig. 6.24 presenta los resultados para la distribución de variables a lo largo de la junta con generación neta adimensional distinta de cero ($G - R_{SRH} \neq 0$). La generación neta $G - R_{SRH}$ se define como:

$$G - R_{SRH} = \alpha\eta (G_n^* - R_{SRH,n}^*) = \alpha\eta (G_p^* - R_{SRH,p}^*) \quad (6.7)$$

, donde $\eta = m_e \epsilon_s / (N_0^2 e^2 \tau_{el})$, $G - R_{SRH}$ es la generación adimensional neta, G generación adimensional, $G_i^* - R_{SRH,i}^*$ generación dimensional neta, y G_i^* generación dimensional.

Se muestra en la Fig. 6.24 que a mayor generación adimensional más transportadores disponibles en la junta, mayores magnitudes de velocidad son alcanzadas. El campo eléctrico y la distribución de voltaje no se ven afectadas mayormente, salvo por pequeños cambios debido a los cambios en la distribución de transportadores que hacen que la forma del campo eléctrico cambie al cambiar G .

El valor de la radiación incidente para los valores adimensionales considerados en las Figs. 6.24–6.35 es del orden de los $300 [W/m^2]$ para un valor de $G = 0.2$.

El cambio inducido por la mayor generación de electrones y hoyos se refleja directamente en la distribución de densidades de los transportadores. Dicho cambio en las densidades provoca que el campo eléctrico salga del equilibrio. El sistema tiende a volver al equilibrio, por lo tanto debe evacuar el exceso de transportadores (se genera corriente).

El movimiento del exceso de transportadores provocado por un valor de G no nulo puede ser explicado de la siguiente forma. Antes de haber generación neta distinta de cero la junta en oscuridad y sin voltaje aplicado esta en equilibrio, las fuerzas electrostáticas y difusivas están compensadas. Con la inclusión de un exceso de transportadores el equilibrio electrostático directamente no se ve afectado, pues la misma cantidad de electrones y hoyos es generada y la Ecs. (4.21a y 4.21b) no son afectadas. Sin embargo, las fuerzas difusivas disminuyen al incluir nuevos transportadores ($1/\bar{n} \cdot \partial\bar{n}/\partial x$ y $1/\bar{p} \cdot \partial\bar{p}/\partial x$ bajan con el exceso de electrones y hoyos) porque la densidad de transportadores aumenta (por ende $1/\bar{n}$ y $1/\bar{p}$ disminuyen) y el gradiente permanece constante ($\partial(n + cte)/\partial x = \partial n/\partial x$). Por lo tanto, el exceso de transportadores sigue la dirección inducida por el campo eléctrico.

En resumen, con generación neta distinta de cero el sistema es sacado del equilibrio, las fuerzas electrostáticas permanecen constantes y las fuerzas difusivas bajan. El sistema requiere volver al equilibrio y como las fuerzas difusivas han disminuido, entonces, evacua el exceso de transportadores de acuerdo a la dirección de flujo que impone el campo eléctrico. Es decir, los electrones se mueven de potenciales menores a mayores y en la dirección contraria se mueven los hoyos (como en ‘reverse’) (ver Figs. 6.24, 6.25, 6.26, 6.27, 6.28, 6.30 y 6.30).

De la Ec. (6.7) se puede apreciar que no solo un cambio en la generación dimensional neta ($G_n^* - R_n^*$ o $G_p^* - R_p^*$) hacen variar G , sino que cambios en N_0 , L o τ_{el} . De esta forma, si N_0 sube G baja, si L aumenta G aumenta, por último si τ_{el} disminuye G aumenta.

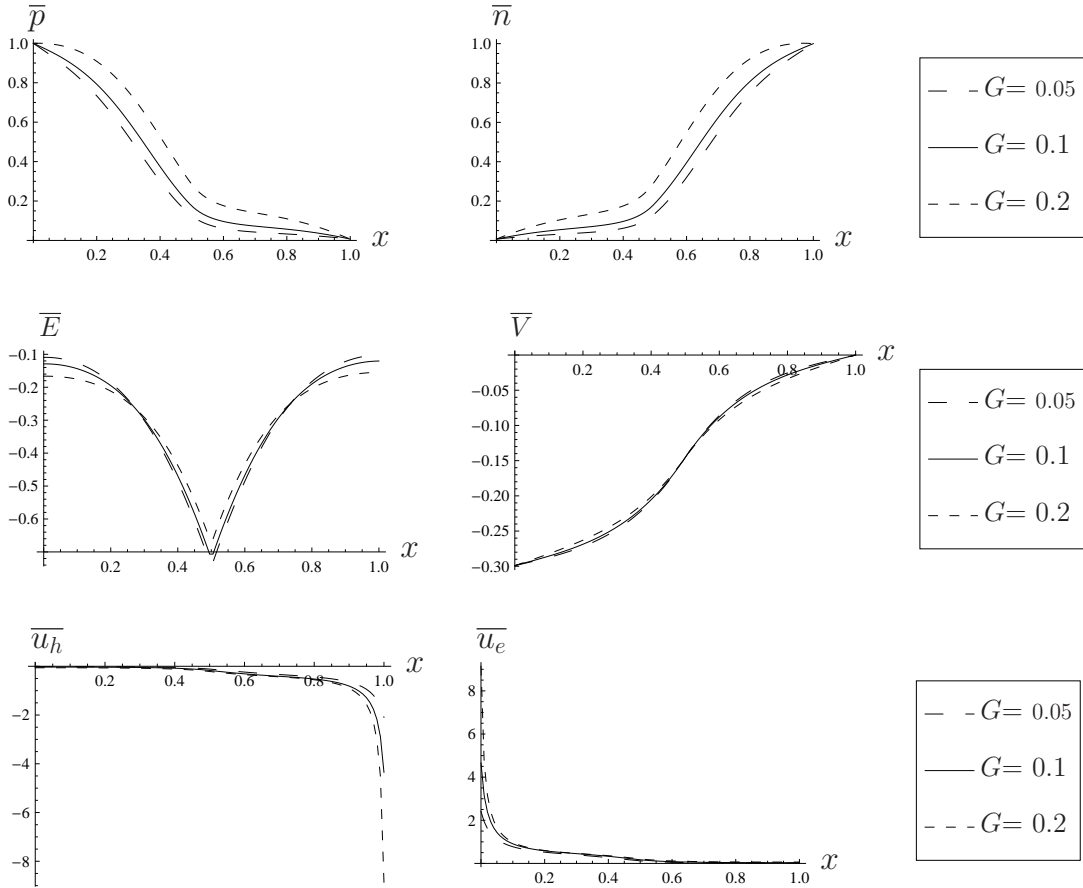


Figura 6.24: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado con $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas consideran N_0 fijo.

6.5.2. Distribución Espacial de las Variables, Junta Iluminada y sin Voltaje

Las Figs. 6.25 y 6.26 presentan la variación de la distribución de variables con una generación adimensional $G = 0.128$ sin voltaje aplicado para el parámetro α . La Fig. 6.25 se ha construido considerando N_0 variable, y la Fig. 6.26 considerando N_0 fijo (no cambian las condiciones de borde). Si se comparan estos resultados con los de las Figs. 6.4 y 6.5 se observa que al haber generación neta los cambios en la densidad de transportadores son menores entre distintos α . Cambios en el campo eléctrico son más apreciables. Notar que a diferencia de 6.4 y 6.5 ahora existen velocidades no nulas y por ende corrientes.

El efecto del cambio de β con $G = 0.128$ se presenta en la Fig. 6.27. En ella se observan las mismas tendencias que las vistas para los resultados en oscuridad (Figs. 6.6, 6.10 y 6.11). La única diferencia es que ahora las densidades de transportadores son mayores debido al efecto de generación.

En la Fig. 6.28 se observa los resultados del modelo con generación neta distinta de cero sin voltaje aplicado para variaciones del parámetro γ_2 . Se aprecia que los mayores cambios en las variables ocurren en el lado P de la junta. Lo anterior se explica considerando que γ_2 solo aparece en la ecuación de conservación de momentum para hoyos, por ende donde los hoyos sean mayoritarios se apreciarán cambios más significativos. En el lado N de la junta también se producen cambios pero más pequeños debidos a los hoyos minoritarios presentes y al acople de las ecuaciones.

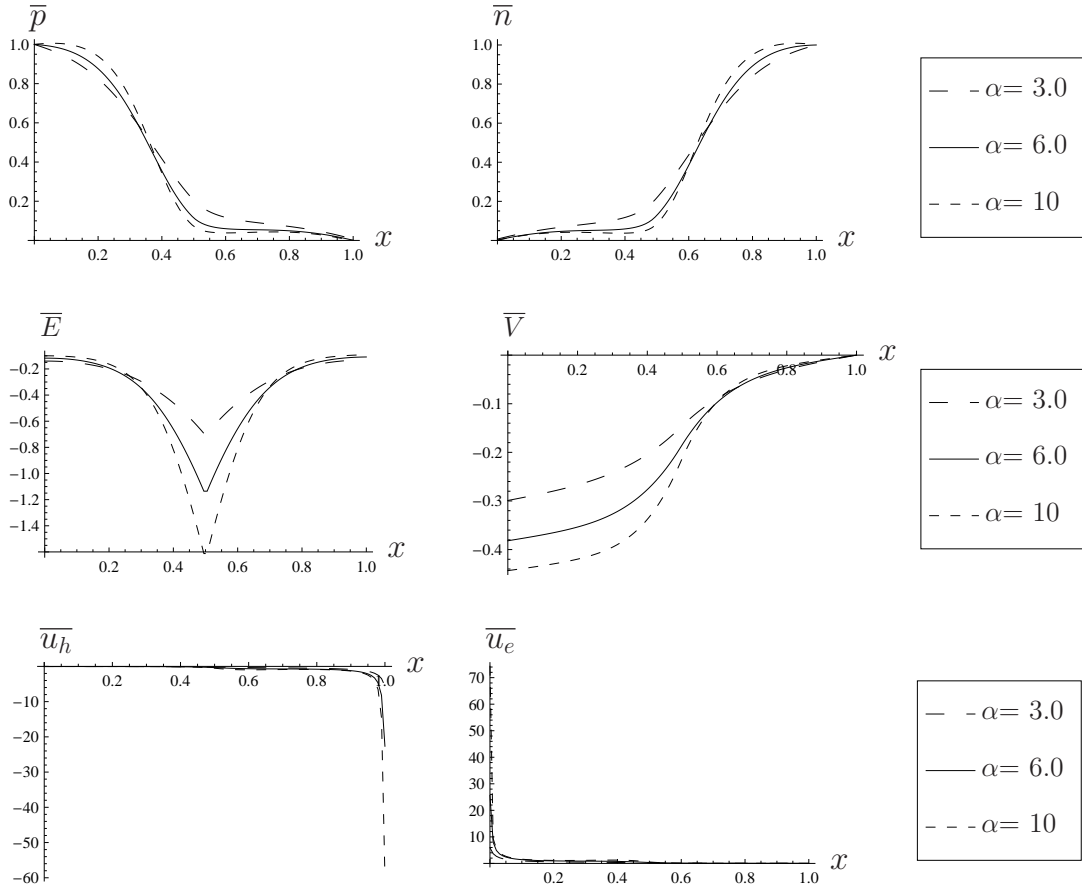


Figura 6.25: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \cdot 10^{-5}$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas consideran N_0 variable.

El efecto de variar γ_2 produce que en generación neta no nula (ver Fig. 6.28) existan más transportadores conforme γ_2 aumenta. Con respecto a las velocidades, en el borde de los transportadores minoritarios (en el borde del lado N para hoyos, y en el borde del lado P para electrones) a mayor γ_2 la magnitud de la velocidad (en valor absoluto) aumenta. No obstante lo anterior en la mayor parte de la junta la tendencia es justamente al revés: las mayores velocidades (en valor absoluto) las alcanza la junta con el menor γ_2 .

Al comparar los resultados en oscuridad (ver 6.14) con los de la junta iluminada (ver 6.28) se observa gran diferencia. Lo anterior se debe a que una alta generación potencia el acople de los efectos, es decir que cambios en la velocidad de hoyos afectan más a las otras variables cuanto más alto es G . Lo contrario también es verdad, cuanto menos es la generación neta menos es el acople entre la velocidad del hoyo (\bar{u}_h) y las demás variables como se observa en la Fig. 6.29.

En un flujo de electrones se puede re-definir la viscosidad cinemática como $\nu = L^2/\tau_{el}$ (Ec. 4.27). Una de las formas de disminuir el R_e es aumentando la viscosidad, y la forma más directa de hacerlo es disminuir el tiempo medio entre colisiones del electrón (τ_{el}). Si se quiere disminuir el R_e según lo planteado anteriormente sin cambiar ningún otro parámetro adimensional, entonces, necesariamente debe disminuirse también τ_{hl} .

La Fig. 6.30 muestra los resultados para variaciones del R_e considerando N_0 variable. En ella se observa

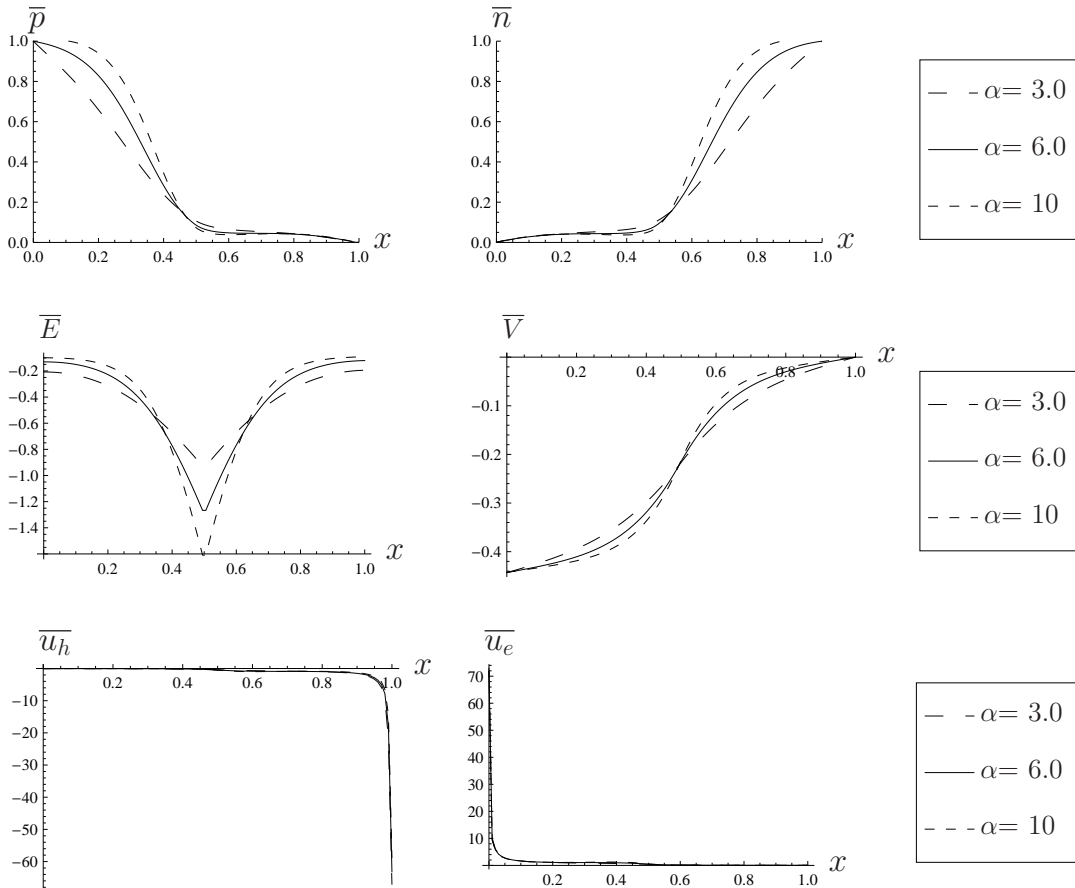


Figura 6.26: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas consideran N_0 fijo.

que a menores reynolds más transportadores hay en la junta, menor es la intensidad del campo eléctrico (consecuentemente menor diferencia de potencial electrostático), y menores velocidades (en modulo) alcanzan los transportadores de carga. Cabe destacar que en la obtención de las soluciones presentadas en Fig. 6.30 aumentar el R_e dejando los demás parámetros constantes equivale a disminuir L y a aumentar N_0 .

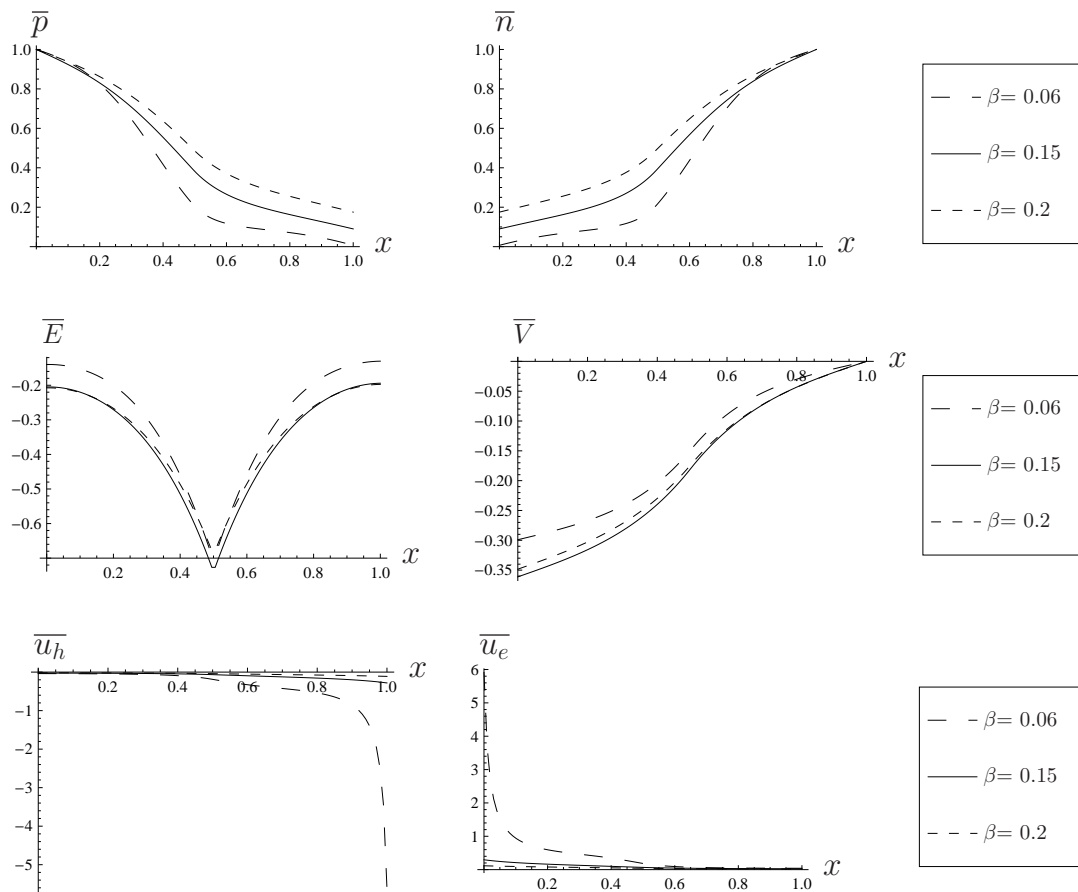


Figura 6.27: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$, con el cambio de β no se ve afectado $G_{adim} = U * N_o / L$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$.

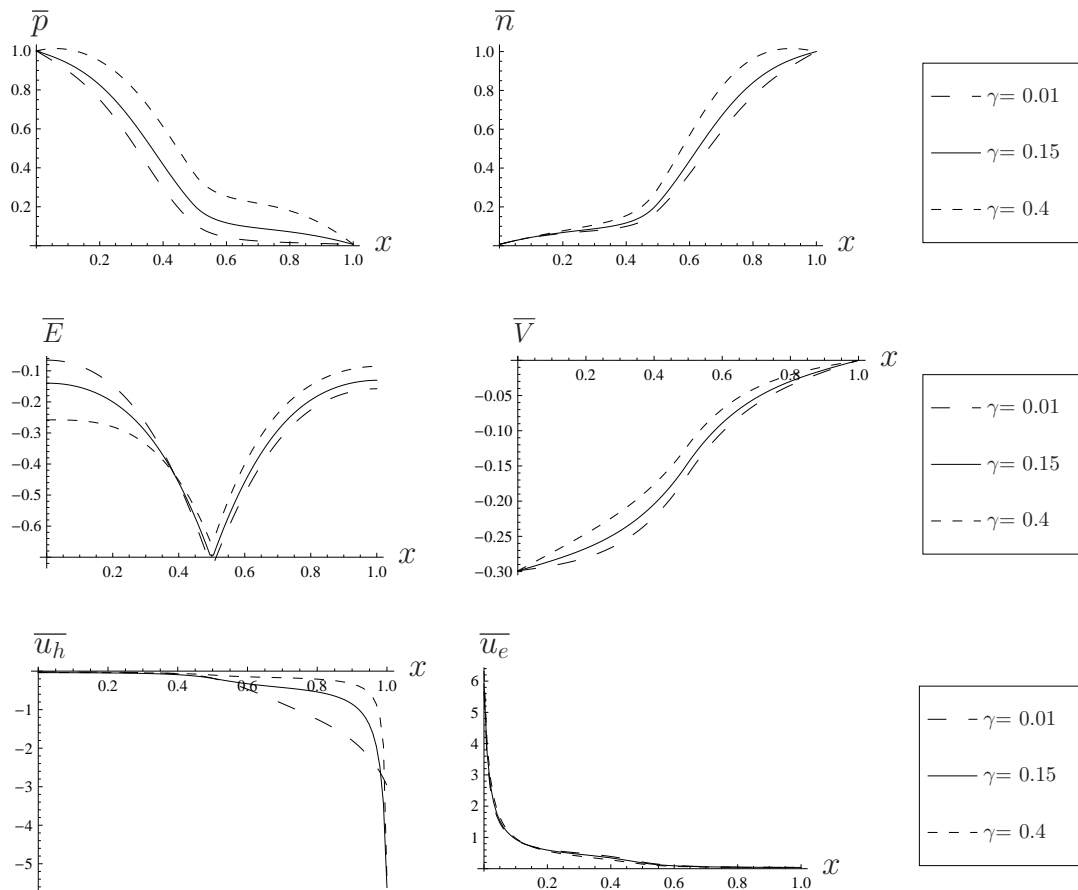


Figura 6.28: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$ y $T_L = 340$.

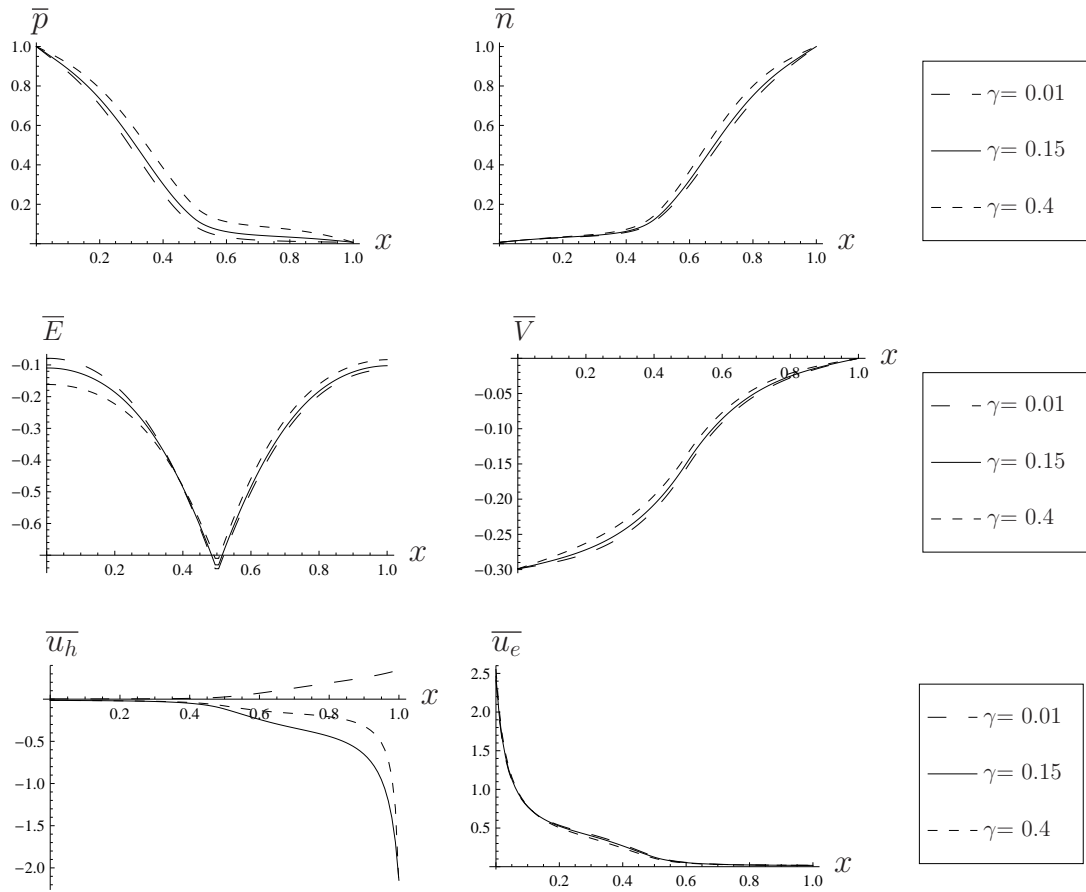


Figura 6.29: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.0128 ($G = 0.0128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$ y $T_L = 340$.

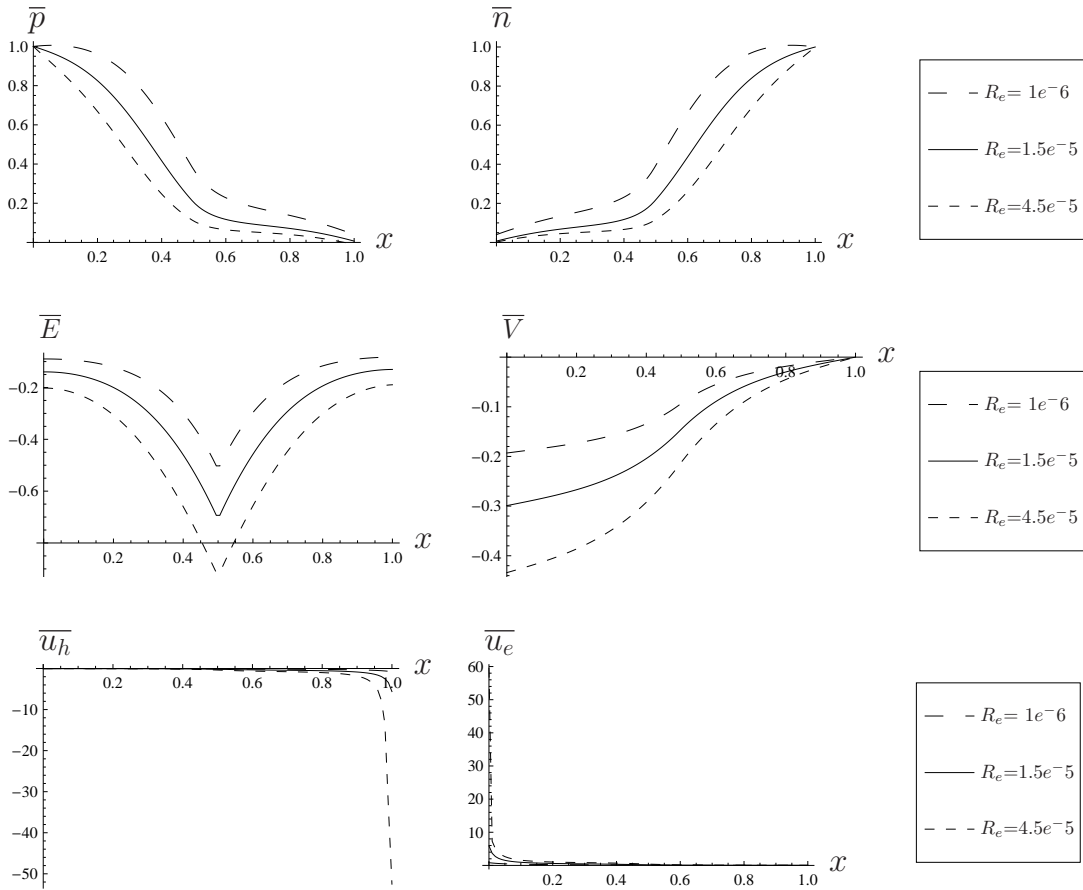


Figura 6.30: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas consideran N_0 variable.

La Fig. 6.31 muestra los resultados para variaciones del R_e considerando N_0 fijo. Solo se aprecian cambios apenas perceptibles en la velocidad de hoyos. Esto demuestra que el cambio observado en los resultados de la Fig. 6.30 se deben al cambio de las condiciones de borde producidos por cambios en N_0 , y no directamente a variaciones del R_e en la solución de las ecuaciones.

Los pequeños cambios que se observan en la Fig. 6.31 se ven reflejados en la curva de corriente para generación no nula como se verá en la Sec. 6.6.3.

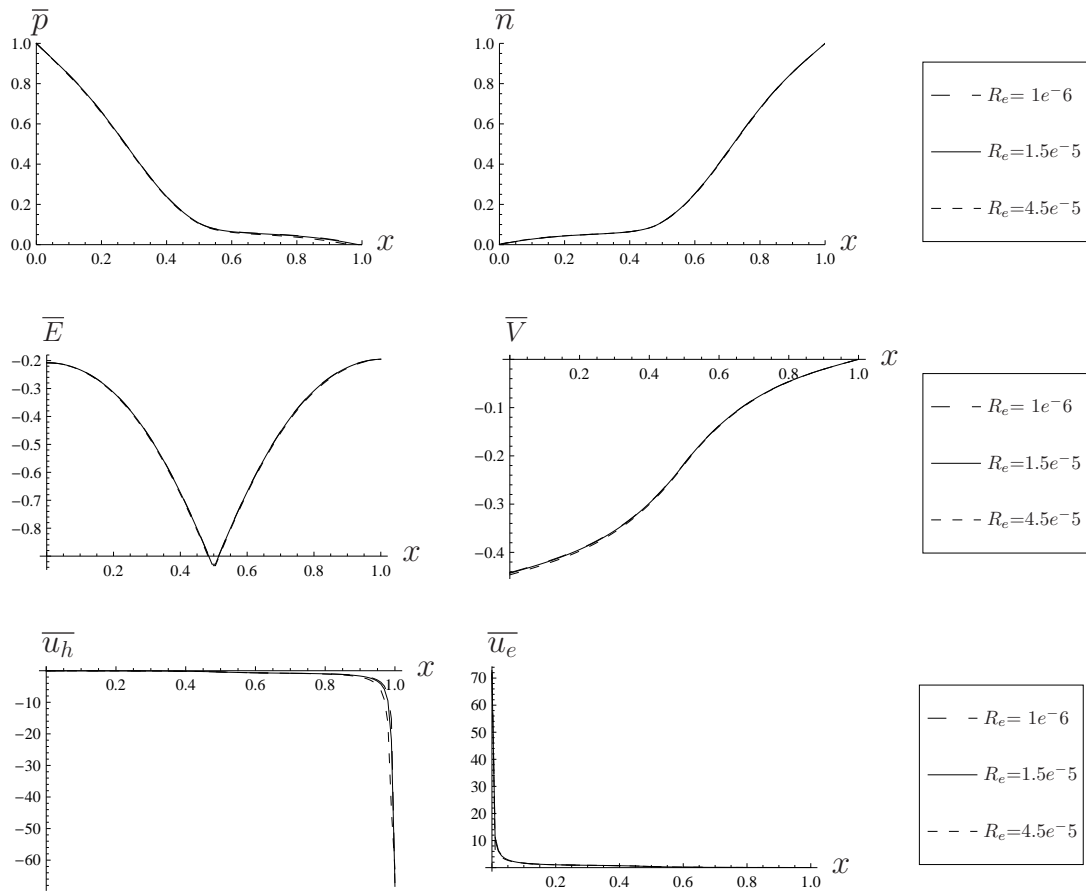


Figura 6.31: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, sin voltaje aplicado, con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas consideran N_0 fijo.

6.6. Resultados Junta Iluminada con Voltaje Aplicado

En esta sección se muestran los resultados obtenidos para la junta PN iluminada y con voltaje aplicado. Se ha incluido un apartado (Sec. 6.6.1) que resume los principales resultados presentados hasta ahora en las secciones anteriores, y desarrolla algunos conceptos que ayudan a entender la dinámica del transporte de carga en la junta PN. Posteriormente, se presentan los resultados de las distribuciones de variables y de la curva de corriente de la junta PN iluminada.

6.6.1. Equilibrios Internos y Generación de Corriente en la Junta PN

La junta PN en oscuridad y sin voltaje aplicado esta en equilibrio: las fuerzas electrostáticas se compensan con las fuerzas difusivas; y las temperaturas del electrón, del hoyo y del cristal son iguales (ver Sec. 6.3). La distribución espacial de las variables en equilibrio (oscuridad y sin voltaje) queda determinada por: (i) los parámetros adimensionales y (ii) la condición en la frontera de la densidad de transportadores de carga. Dichas condiciones no son independientes entre si, por ejemplo al cambiar β indirectamente cambia n_i que hace cambiar la densidad de transportadores supuesta en los bordes de la junta.

Para la junta en oscuridad sin voltaje aplicado los grupos adimensionales importantes son α y β . Las demás constantes adimensionales solo importan cuando existe un flujo de transportadores (velocidades no nulas). Es decir, las distribuciones que la junta toma en equilibrio dependen solamente de estos dos grupos adimensionales (α y β). Además, como ha sido analizado en las secciones anteriores no es lo mismo cambiar los grupos adimensionales haciendo variable N_0 que dejando el dopaje constante.

Dos condiciones han sido analizadas que sacan a la junta de su estado de equilibrio: (i) la junta con voltaje aplicado y (ii) la junta iluminada. Del punto de vista cualitativo, las magnitudes y las direcciones de las corrientes generadas pueden ser descritas de acuerdo a como la junta es sacada del equilibrio. Por ejemplo, una junta en oscuridad con un voltaje aplicado positivo disminuye las fuerzas electroestáticas que existen en equilibrio haciendo que los transportadores se muevan en la misma dirección que las fuerzas difusivas ('forward'). Además, si en equilibrio la junta no posee campos eléctricos intensos, entonces, voltajes aplicados positivos menores producirán las mismas corrientes que voltajes positivos mayores aplicados a juntas que en equilibrio tienen campos más intensos (equilibrios más intensos).

Por otro lado, en una junta iluminada sin voltaje aplicado las fuerzas difusivas se ven disminuidas con el exceso de transportadores (ver Sec. 6.5.1) provocando que la corriente se mueva en la misma dirección que las fuerzas electroestáticas.

De esta forma, las características de la junta PN bajo voltaje y/o iluminación están fuertemente influenciadas por la condición de equilibrio lograda en oscuridad y sin voltaje aplicado.

6.6.2. Distribución Espacial de las Variables, Junta Iluminada con Voltaje

La Fig. 6.32 muestra los resultados para una celda iluminada con voltaje aplicado. En ella se aprecia que conforme aumenta el voltaje aplicado positivo más transportadores existen en la junta, el campo eléctrico se hace más ‘positivo’, y la diferencia de potencial electrostático se hace menor. Al comparar estos resultados con los obtenidos para voltajes similares pero en oscuridad (ver Fig. 6.8) se aprecia claramente que con la generación neta no nula más transportadores se acumulan en la junta.

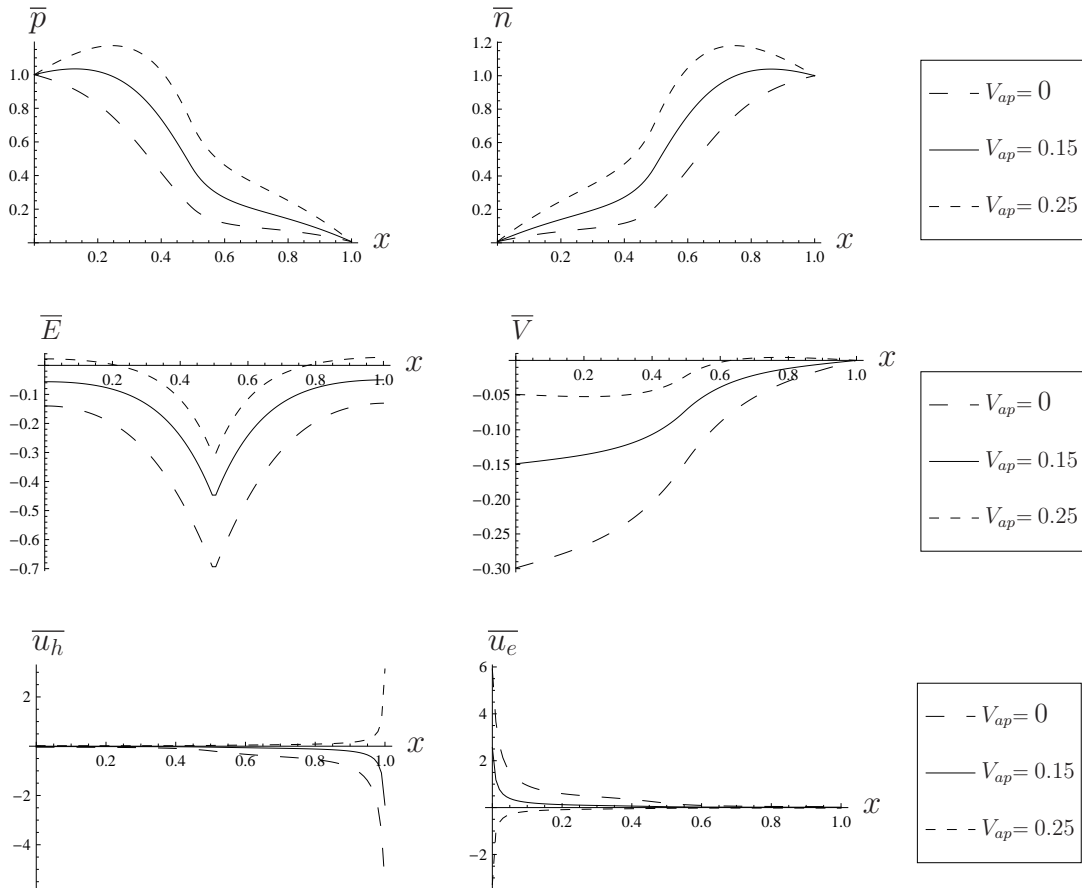


Figura 6.32: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con voltaje aplicado (forward), generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$.

Notar que en la Fig. 6.32 para $V_{ap} = 0.15$ las direcciones de las velocidades de electrones y hoyos son las correspondientes al estado ‘reverse’ siendo que hay un voltaje positivo aplicado. Esto muestra que no siempre un voltaje positivo corresponde a una dirección ‘forward’.

En la Fig. 6.33 se presentan los resultados para la junta iluminada con voltajes negativos. Se observa que a medida que el voltaje se hace más negativo la junta queda más vacía de transportadores, las velocidades de los mismos aumentan en valor absoluto, las diferencias del potencial electrostático se hacen mayores, y como consecuencia el campo eléctrico se hace más intenso y negativo.

Al comparar los resultados de la Fig. 6.33 con la Fig. 6.9 se aprecia que en el caso de junta iluminada las

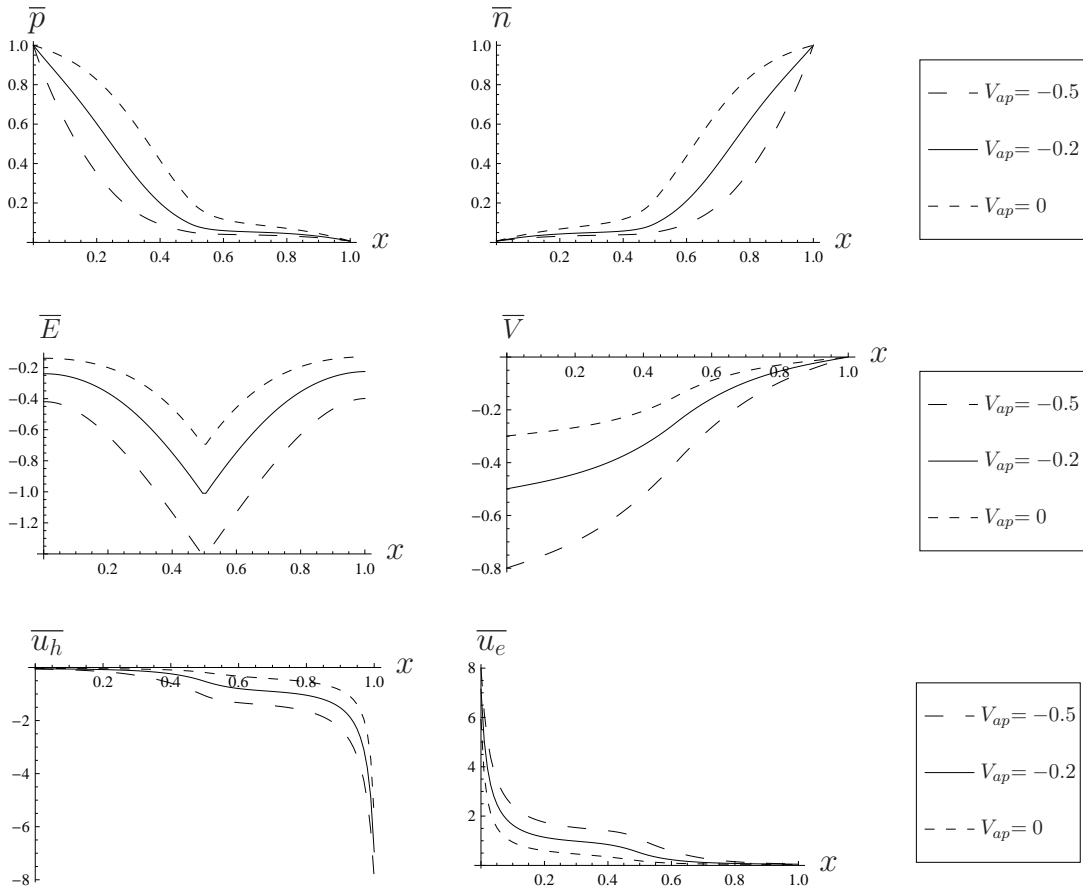


Figura 6.33: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con voltaje aplicado (reverse), generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$.

densidades de transportadores suben un poco como era de esperar. Y las velocidades se hacen más negativas (aumentan en valor absoluto), es decir, la junta con generación neta distinta de cero y voltajes aplicados negativos genera más corriente en la dirección ‘reverse’.

Las Fig. 6.34 y 6.35 muestran el cambio de β para un voltaje aplicado positivo y negativo respectivamente. En ella se puede apreciar lo mismo que ya se ha mostrado en las secciones anteriores, con la diferencia que la generación neta positiva aumenta la densidad de transportadores, y potencia la dirección ‘reverse’ de la corriente en la junta.

El cambio de β produce tres efectos cuyos resultados pueden verse en las Figs. 6.34 y 6.35. A saber, el aumento de β potencia las fuerzas difusivas, aumenta o disminuye el V_{bi} dependiendo del rango de β considerado (si β es bajo aumentar β aumenta el V_{bi}), y produce un aumento relativo de la densidad de transportadores minoritarios con respecto a los transportadores mayoritarios (termalización). Claramente el efecto dominante en las figuras mostradas es la termalización y el aumento de los transportadores minoritarios.

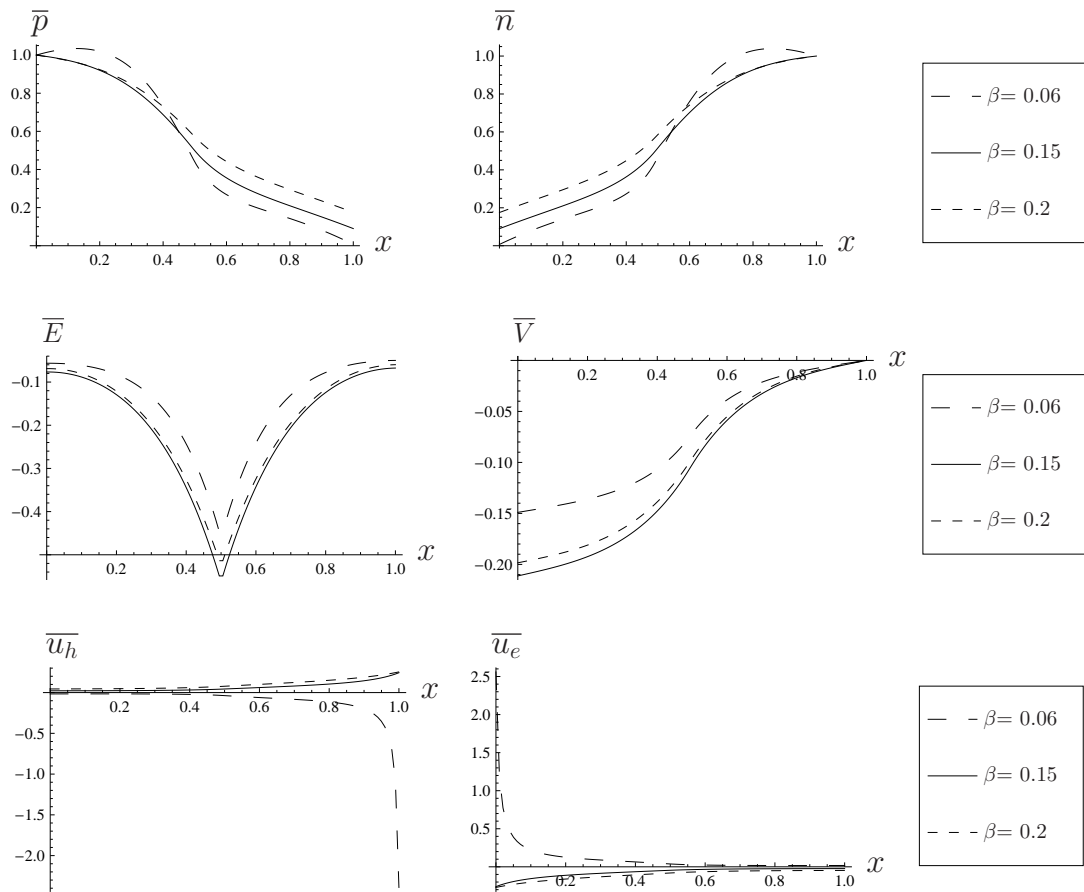


Figura 6.34: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = 0.15[V]$ y para una junta con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$.

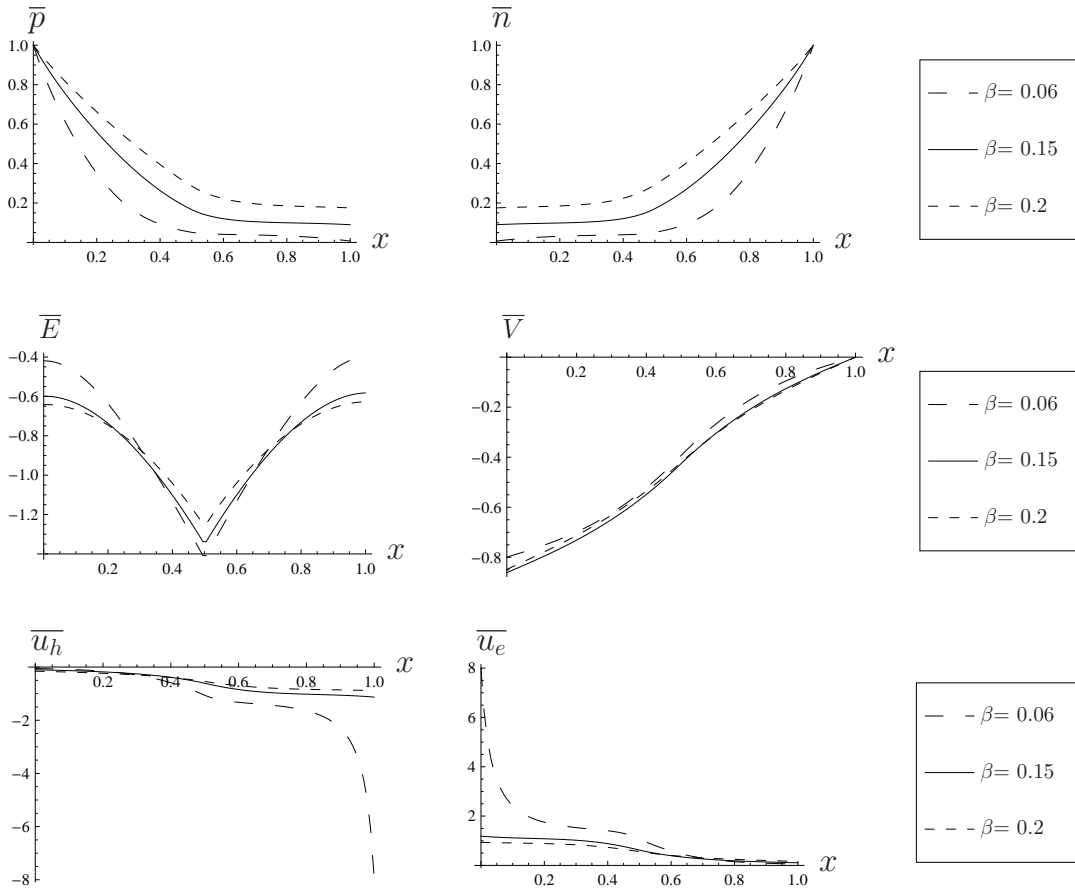


Figura 6.35: Solución adimensional estacionaria para una junta PN, con $V_{ap} = -0.5[V]$ y para una junta con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$.

6.6.3. Curvas Corriente v/s Voltaje para Junta Iluminada

En esta sección se presentan las curvas de corriente versus voltaje para una junta iluminada. Cabe hacer notar que la potencia adimensional (P) que la junta da ($P < 0$) o requiere ($P > 0$) para generar corriente es:

$$P = V_{ap} \cdot J_T \quad (6.8)$$

, así la operación de la junta que genera potencia útil considera corrientes negativas con potenciales aplicados positivos.

La Fig. 6.36 muestra las curvas de corriente de la junta para distintos valores de α considerando N_0 variable y los demás parámetros dimensionales fijos (por ende los demás grupos adimensionales también están fijos). En este caso, aumentos de α significan aumentos del dopaje. Se observa claramente en la figura que aumentos en el dopaje favorecen la potencia que puede entregar una celda para un mismo G .

Con el aumento de α en la Fig. 6.36 la corriente generada a $V_{ap} = 0$ no cambia apreciablemente. Lo que cambia, y hace que la junta pueda entregar una potencia útil mayor es la sensibilidad a voltajes aplicados. Con el aumento del dopaje (aumento de α para N_0 variable) la junta sin voltaje y en oscuridad genera equilibrios más

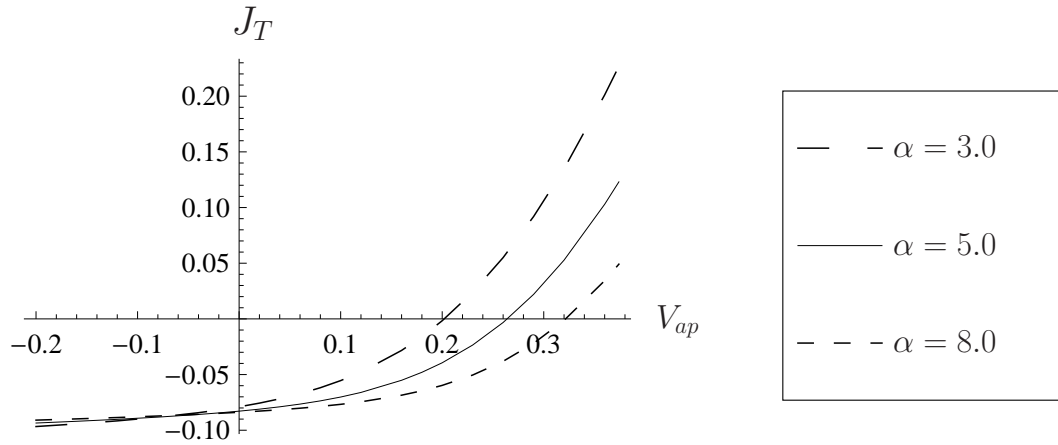


Figura 6.36: Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas considera a N_0 variable.

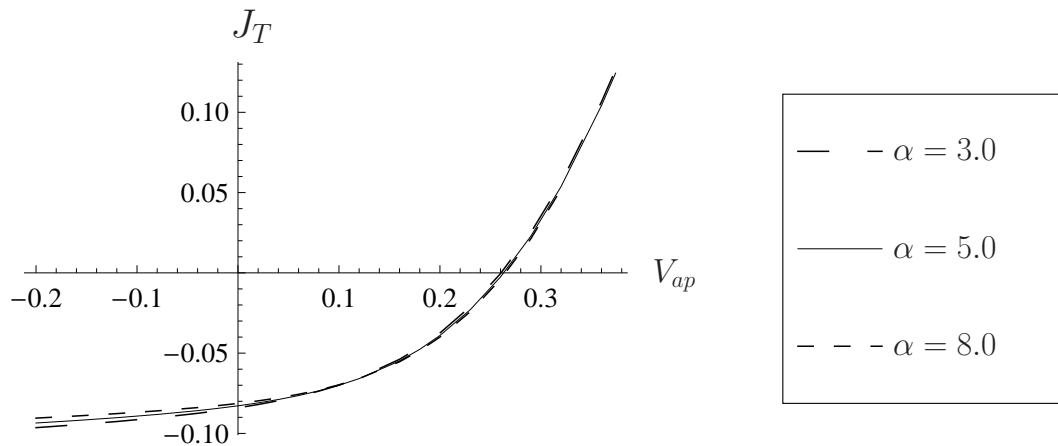


Figura 6.37: Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$. Las soluciones mostradas considera a N_0 fijo.

intensos que provocan que para sacar alejar a la junta del estado de equilibrio se requieran voltajes de mayor magnitud (en valor absoluto) generando así mayor potencia.

En la Fig. 6.37 se muestran las curvas de corriente para cambios de α que consideran N_0 fijo, es decir, en este caso cambios de α no significan cambios en las condiciones de frontera. Los demás grupos adimensionales permanecen constantes. Consecuentemente con lo obtenido en secciones anteriores cambios de α con N_0 fijo no producen cambios apreciables en la curva de corriente.

Dado que un cambio en el largo L significa cambios de α y Re que no modifican las condiciones de borde (ni de transportadores, ni de potencial electrostático), y como se ha visto cambios de α y Re desacoplados de las condiciones de frontera no producen cambios apreciables en la curva de corriente (ver Figs. 6.37, 6.18, 6.23 y 6.43) entonces cambios en L no producen cambios apreciables en el comportamiento del dispositivo (para los largos considerados).

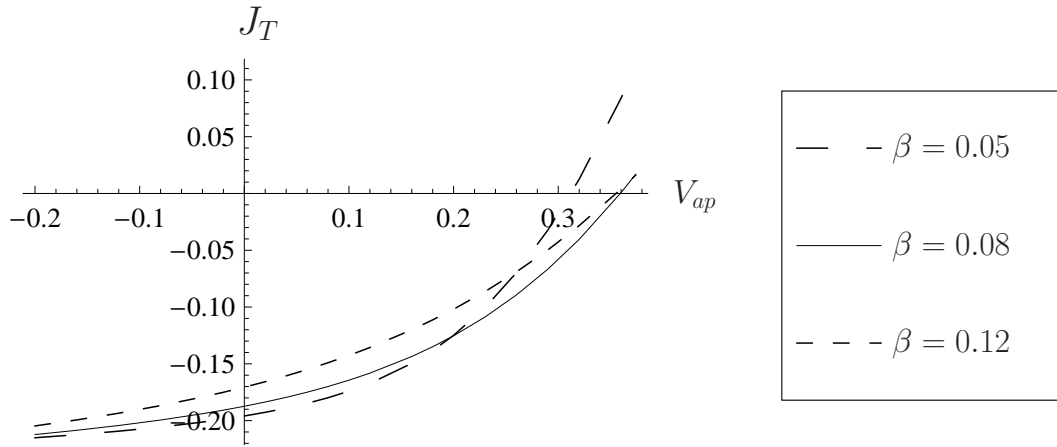


Figura 6.38: Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.288 ($G = 0.288$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3.0$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$.

Los resultados para cambios de β se presentan en las Figs. 6.38 y 6.39. La temperatura del cristal permanece constante, solo cambian las temperaturas de los transportadores. Los demás grupos adimensionales, para las dos figuras, son idénticos. De las curvas presentadas se ve claramente que la curva correspondiente a $\beta = 0.08$ (al rededor de 900[K]) genera la mayor potencia útil. Es decir, que existe un óptimo de operación para las temperaturas de electrón y hoyo que no corresponde a la menor temperatura posible.

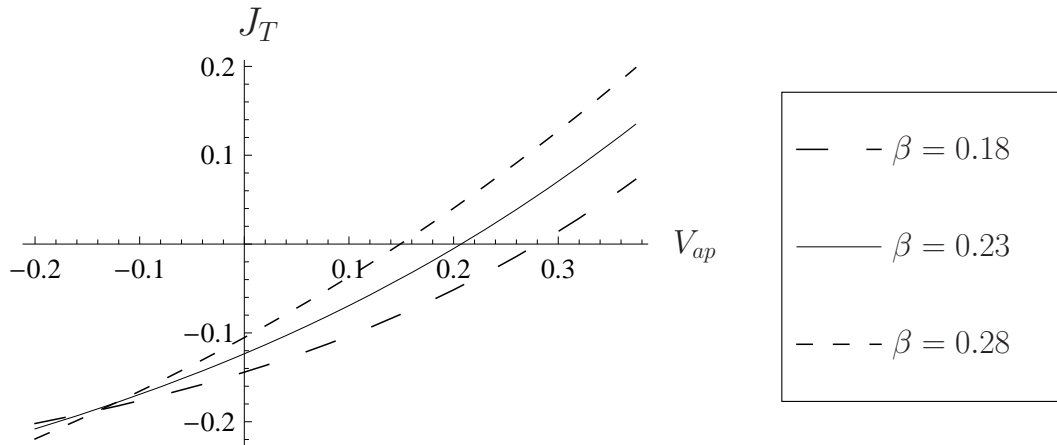


Figura 6.39: Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.288 ($G = 0.288$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3.0$, $T_L = 340$ y $\gamma_2 = 0.15$.

El resultado de las Figs. 6.38 y 6.39 se explica considerando que al aumentar β no solo se potencia los términos difusivos en las ecuaciones hidrodinámicas (Ec. 4.21) que deberían generar equilibrios más intensos en la junta en oscuridad y sin voltaje que provocarían finalmente mejores prestaciones de la celda. Si no que también afecta la densidad intrínseca causando fenómenos de termalización, y la disminución del V_{bi} para β altos. Por ende, que las potencia útil generada disminuya con el aumento de β no es un fenómeno propiamente de transporte, sino que de termalización (cambio perjudicial de las condiciones de borde).

Otro aspecto importante de analizar es el efecto en la curva de corriente para distintas temperaturas del cristal (ver Fig. 6.40). Se observa claramente que temperaturas mayores del cristal son desfavorables para la

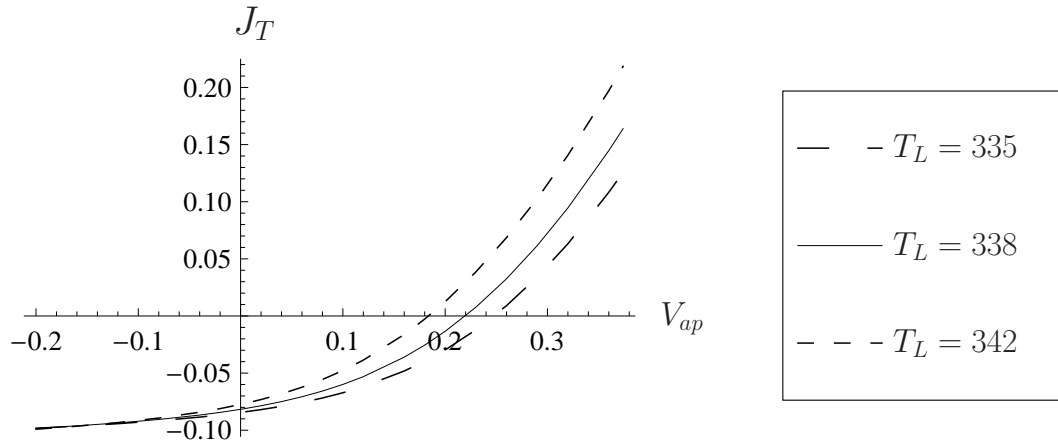


Figura 6.40: Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.288 ($G = 0.288$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3.0$, $\beta = 0.06$ y $\gamma_2 = 1.0$.

generación de potencia útil por parte de la junta PN. Además, al comparar las Figs. 6.38 y 6.39 con la Fig. 6.40 se puede afirmar que aumentos en la temperatura del cristal son más desfavorables para la eficiencia de la celda que cambios en las temperaturas de los transportadores.

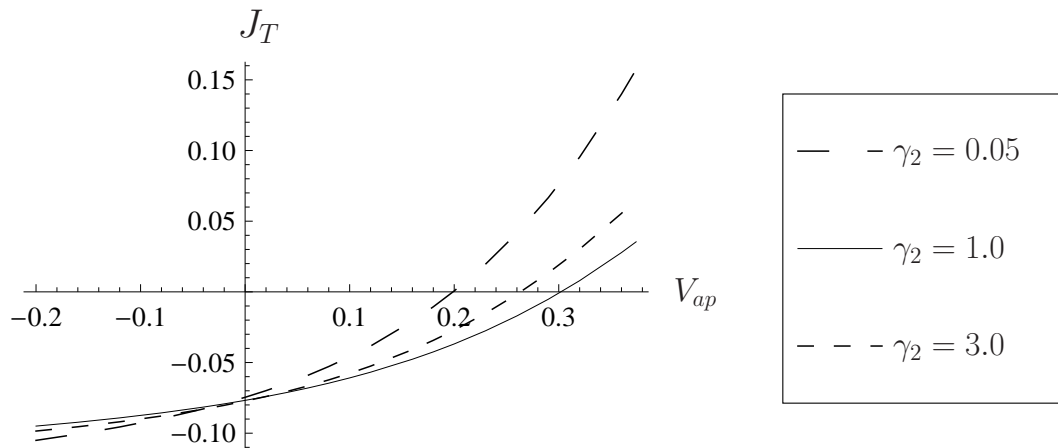


Figura 6.41: Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $R_e = 1.5 \text{ e-}05$, $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.12$ y $T_L = 330$.

El cambio de γ_2 (ver Fig. 6.41) tiene un comportamiento no esperado pues la curva que genera mayor potencia útil es la de $\gamma_2 = 1.0$ y no $\gamma_2 = 3.0$ que de acuerdo a la Fig. 6.21 debería haber sido la de mejor eficiencia. Con la junta PN iluminada (ver Fig. 6.28) se aprecian efectos para el cambio de γ_2 que no se observan en la junta en oscuridad (ver Fig. 6.14). Además con la junta iluminada se quiebra la simetría en el campo de velocidades como se muestra en la Fig. 6.28. Se piensa que este hecho puede explicar el resultado de la curva de corriente en la Fig. 6.41, pues conforme γ_2 aumenta su valor el campo del lado P se hace más negativo y al mismo tiempo el lado N se hace menos negativo. Debe haber un punto en el que, en promedio, al aumentar γ_2 el campo ya no se haga más negativo sino que empiece levemente a subir en el promedio. Y esto explicaría que la curva de corriente con $\gamma_2 = 3.0$ genere menos potencia útil que la curva con $\gamma_2 = 1.0$.

Las Figs. 6.42 y 6.43 muestran el efecto del R_e sobre la curva de corriente de la junta PN. En la Fig.

6.42 aumentos del R_e significan conjuntamente disminuciones de L y aumentos de N_0 para que α se mantenga constantes. En la Fig. 6.43 aumentos del R_e significan aumentos de τ_{el} y τ_{hl} para dejar constante γ_2 , pero no significan cambios en las condiciones de borde.

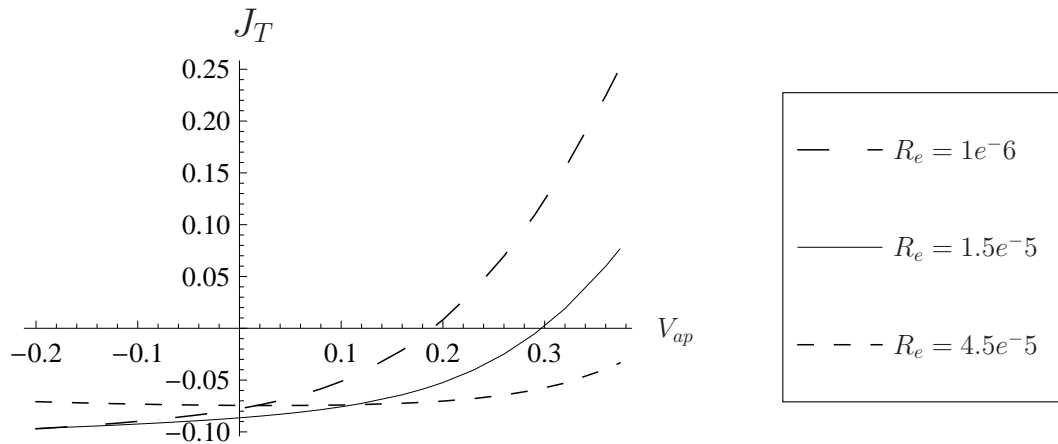


Figura 6.42: Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 330$ y $\gamma_2 = 0.15$.

Para R_e mayores según lo obtenido en la Fig. 6.42 claramente se obtienen potencias útiles mayores. Considerando que cambios en L no deberían producir cambios apreciables en la curva de corriente, entonces, aumentos del R_e que en el caso de la Fig. 6.42 significan aumentos en N_0 explican los resultados mostrados en dicha figura.

En las secciones anteriores cambios del R_e dejando fijo N_0 y variando τ_{el} no habían provocado cambios apreciables en los resultados presentados. Sin embargo en la Fig. 6.43 si se aprecian los efectos de la variación de τ_{el} . A mayores R_e (mayores τ_{el}) menores potencias útiles generadas.

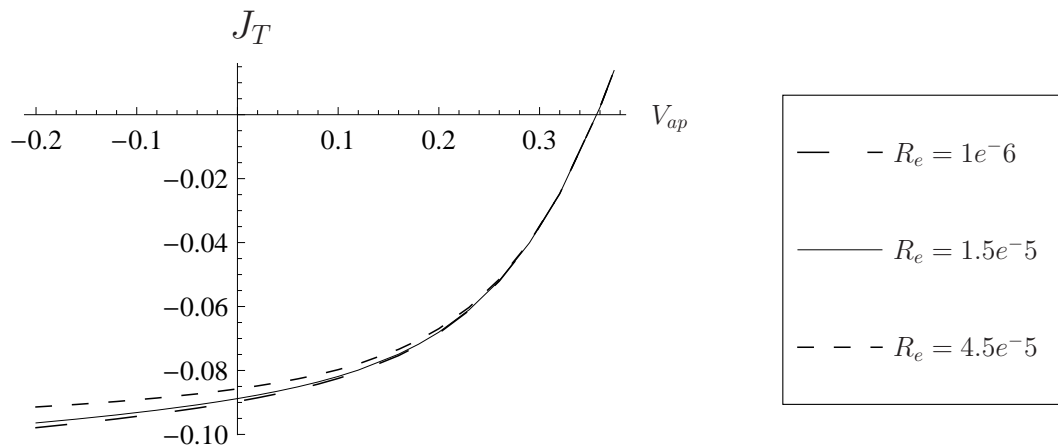


Figura 6.43: Curva corriente v/s voltaje para una junta PN con generación adimensional total constante igual a 0.128 ($G = 0.128$), $\alpha = 3$, $\beta_n = \beta_p = 0.06$, $T_L = 330$ y $\gamma_2 = 0.15$.

6.7. Potencia Lineal Dimensional

Los análisis que se han hecho en las secciones anteriores han sido análisis adimensionales. Ahora bien, la potencia lineal dimensional que requiere o entrega la junta PN viene dada por:

$$P^* = e \cdot V_{ap} \cdot J_T \cdot N_0 \cdot U = P \cdot N_0 \cdot \frac{e^2 V_0 \tau_{el}}{m_e L} \quad (6.9)$$

En la ecuación anterior (Ec. 6.9) sólo V_{ap} y J_T pueden ser negativos, es decir sólo la potencia adimensional (P) define si la junta entregará o requerirá potencia en su funcionamiento.

Como se ha visto en la Sec. 6.6.3 el aumento del dopaje favorece la potencia útil adimensional que puede ser utilizada y de la Ec. (6.9) claramente este efecto positivo se ve potenciado, ya que J_T esta ponderado por N_0 .

Según lo visto el cambio de L no influía mayormente en la potencia adimensional obtenida (P). Si se considera a L como el largo del dispositivo entonces según la Ec. (6.9) dispositivos más pequeños serían más aptos para generar potencia útil. Lo anterior se explica considerando que para una misma diferencia de voltaje aplicada largos menores generan un campo eléctrico más intenso en la junta, y esto como se ha visto favorece la eficacia de la celda en la generación de potencia útil. Por lo demás es sabido que la disminución del tamaño en dispositivos eléctricos hace más difícil evacuar el calor interno generado, y como se ha mostrado el aumento de la temperatura (aunque sean pocos grados) del cristal es desfavorable para la generación de potencia útil. De ahí la importancia de administrar correctamente el calor que se generará en la junta, ya que la disminución del largo de la junta podría ser infructuoso si la temperatura del cristal sube considerablemente.

Finalmente notar que según Ec. 6.9 el aumento de τ_{el} (mayor tiempo entre colisiones de electrones) favorece la generación de potencia útil, sin embargo se debe recordar que cambiar τ_{el} modifica P por medio del cambio de γ_2 por lo que un τ_{el} óptimo debe ser encontrado.

6.8. Validación del Modelo

No se cuenta con validación experimental directa del modelo pues escapa al alcance y recursos de esta tesis. Validación experimental encontrada en la literatura en cuanto a la distribución espacial de las variables resueltas tampoco existe para la junta PN⁶. Lo anterior debido principalmente que es difícil de medir dichas variables, pues no existe ninguna técnica directa de medición.

No obstante lo anterior, bajo ciertos supuestos el modelo hidrodinámico usado se simplifica al modelo DD ('Drift-Diffusion') ampliamente validado y utilizado en el diseño de celdas solares (Rev. apéndice B). Además los resultados de las curvas de corriente de la junta PN obtenidos para el caso de variaciones del dopaje N_0 , el largo L , y la temperatura del cristal T_L son consecuentes con lo informado por medio de la literatura revisada [10, 11, 23, 26, 28].

Por lo demás, según se ha visto en esta capítulo los resultados obtenidos pueden ser explicados razonablemente en base a los principios físicos de electrostática, las ecuaciones de transporte de una variable, y a analogías con la mecánica de fluidos (concepto de viscosidad por ejemplo).

Por todo lo anterior, si bien en rigor el modelo requiere de una validación experimental y ajustes en los parámetros y constantes del modelo serían requeridos para obtener valores reales de corrientes y otras variables estudiadas. Los resultados y el modelo usado, es consecuente con lo esperado según literatura.

⁶Algunos experimentos se han hecho pero para transistores.

6.9. Trabajos Futuros

El objetivo principal de esta tesis era lograr describir a través de un modelo hidrodinámico el transporte de carga en la junta PN. Para ello se resolvieron ecuaciones de conservación de masa y momentum, más la ecuación de Poisson. Se asume en esta tesis equilibrio térmico entre hoyos y electrones, y se considera las temperaturas de los transportadores constantes. Dichas temperaturas pueden ser distintas al cristal.

Ahora bien, el objetivo global dentro del cual se enmarca este trabajo es lograr describir los fenómenos térmicos que ocurren en la junta⁷. Para poder diseñar estrategias de ‘manejo de calor’ (thermal management) que permitan mejorar la eficiencia de las celdas solares a base de semiconductores. En esta línea ya se está trabajando, y se han incluido ecuaciones de energía para el cristal y los electrones:

$$\frac{\partial^2 V^*}{\partial x^{*2}} = -\frac{e}{\epsilon_s} (p^* - n^* - N_A), \quad x^* < x_J^* \quad (6.10a)$$

$$\frac{\partial^2 V^*}{\partial x^{*2}} = -\frac{e}{\epsilon_s} (p^* + N_D - n^*), \quad x^* > x_J^* \quad (6.10b)$$

$$\frac{\partial n^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(u_e^* n^*)}{\partial x^*} = G_n^* - R_n^*, \quad (6.10c)$$

$$\frac{\partial p^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(u_h^* p^*)}{\partial x^*} = G_p^* - R_p^*, \quad (6.10d)$$

$$\frac{\partial u_e^*}{\partial t^*} + u_e^* \frac{\partial(u_e^*)}{\partial x^*} = \frac{e}{m_e} \frac{\partial V^*}{\partial x^*} - \frac{k_B T_e^*}{m_e n^*} \frac{\partial n^*}{\partial x^*} - \frac{u_e^*}{\tau_{el}} - \frac{\mu_{eh}}{m_e} \frac{(u_e^* - u_h^*)}{\tau_{eh}} - \frac{u_e^*}{n^*} (G_n^* - R_n^*), \quad (6.10e)$$

$$\frac{\partial u_h^*}{\partial t^*} + u_h^* \frac{\partial(u_h^*)}{\partial x^*} = -\frac{e}{m_h} \frac{\partial V^*}{\partial x^*} - \frac{k_B T_h^*}{m_h p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x^*} - \frac{u_h^*}{\tau_{hl}} - \frac{\mu_{eh}}{m_h} \frac{(u_h^* - u_e^*)}{\tau_{eh}} - \frac{u_h^*}{p^*} (G_p^* - R_p^*), \quad (6.10f)$$

$$\frac{\partial T_C^*}{\partial t^*} + u_e^* \frac{\partial T_C^*}{\partial x^*} = -\frac{2}{3} T_C^* \frac{\partial(u_e^*)}{\partial x^*} + \frac{2}{3n^* k_B} \frac{\partial}{\partial x^*} \left(k_e \frac{\partial T_C^*}{\partial x^*} \right) - \frac{T_C^* - T_L^*}{\tau_E} + \frac{m_e^* u_e^{*2}}{3k_B \tau_E} + \frac{q_{heat}^*}{3n^* k_B}, \quad (6.10g)$$

$$C_L \frac{\partial T_L^*}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial x^*} \left(k_L \frac{\partial T_L^*}{\partial x^*} \right) + \frac{3n^* k_B}{2} \left(\frac{T_C^* - T_L^*}{\tau_E} \right) \quad (6.10h)$$

, donde T_C^* es la temperatura de los transportadores (en equilibrio térmico), T_L^* la temperatura del cristal, q_{heat}^* el calor absorbido por radiación por los electrones u hoyos, τ_E tiempo de relajación de energía de electrones, k_l y k_E conductividades térmicas del cristal y electrón respectivamente, y C_L la capacidad calorífica del cristal. Para la resolución de estas ecuaciones se está tomando como base códigos programados en esta tesis en cuanto al método de perturbaciones y al algoritmo numérico usado.

Además del trabajo que ya está en curso con la inclusión de las ecuaciones de energía. Esta tesis da oportunidad de extender el trabajo realizado en cuanto a:

- Extensión de las ecuaciones 1D a 2D o 3D.
- Estudios de optimización de la junta PN teniendo como base el código ya realizado más algún método de optimización u algoritmo genético (teniendo como base la Ec. 6.9).
- Buscar soluciones para otros rangos del R_e que no han sido analizados en esta tesis y que presentan mayores similitudes con los flujos tratados a través de la mecánica de fluidos [17].
- Validaciones experimentales del modelo.

⁷Área de investigación liderada por el profesor Williams Calderón del DIMEC de la U. de Chile.

Capítulo 7

Conclusiones

En esta tesis se estudió el flujo de transportadores de carga, electrones y hoyos, en una junta PN a través de un modelo hidrodinámico, que incluyó la ecuación de Poisson y ecuaciones de conservación de masa y momentum para electrones y hoyos.

El modelo utilizado aventaja al que comúnmente se usa para el diseño de estos dispositivos (el modelo ‘Drift-Diffusion’, DD) en que: (i) no asume una zona vacía de transportadores cerca de la junta sino que resuelve dichas densidades, (ii) puede asumir para los transportadores temperaturas distintas a la del cristal y (iii) efectos de colisión (electrón–cristal, hoyo–cristal y electrón–hoyo) pueden ser estudiados. Además, entrega información acerca de la distribución espacial de las densidades y velocidades de electrones y hoyos en todo el dispositivo; características que el modelo DD no entrega.

El modelo hidrodinámico fue adimensionalizado, definiéndose un conjunto de grupos adimensionales. Uno de estos grupos es el número de Reynolds, R_e , y en analogía con la mecánica de fluidos permitió definir una viscosidad cinemática para el flujo de electrones $\nu = L^2/\tau_{el}$. Se encontró dependencia entre los grupos adimensionales y las condiciones de borde para la densidad de transportadores y el ‘built-in voltage’ (V_{bi}).

Se determinó las distribuciones espaciales de la densidad de transportadores, campo eléctrico, potencial electrostático, y velocidades de electrones y hoyos para distintas configuraciones de operación y diseño (variación de grupos adimensionales, condiciones de borde y términos de generación). Se obtuvieron también las curvas de corriente versus el voltaje aplicado con y sin iluminación. Se consideró equilibrio térmico entre electrones y hoyos ($T_e = T_h$) en la obtención de los resultados. Para las condiciones de: (i) junta iluminada, (ii) junta en oscuridad con voltaje aplicado, y (iii) junta iluminada con voltaje aplicado se consideraron temperaturas de transportadores distintas al cristal ($T_e = T_h \neq T_L$).

En oscuridad y sin voltaje aplicado la junta llega a un equilibrio térmico (entre las temperaturas del cristal, electrones y hoyos, $T_L = T_e = T_h$) y electrónico (cero corriente y voltaje aplicado). En dicho equilibrio las fuerzas difusivas y electrostáticas se compensan. Se forma un potencial electrostático interno, V_{bi} , cuyo valor depende del dopaje, las temperaturas del cristal y transportadores, y la densidad intrínseca. Campos eléctricos más intensos son alcanzados principalmente aumentando el dopaje y aumentando el V_{bi} .

Variaciones de la temperatura de electrones y hoyos afectan el ‘built-in voltage’ (V_{bi}), pudiendo provocar aumentos ó disminuciones de V_{bi} dependiendo del rango en el que se muevan las temperaturas de los transportadores. Cuando la temperatura de transportadores aumenta (aumentos de $\beta = \beta_n = \beta_p$) desde valores altos, se observan disminuciones del ‘built-in voltage’ (V_{bi}). Cuando la temperatura de transportadores aumenta desde valores bajos, se obtienen aumentos de V_{bi} . La magnitud de V_{bi} indica la intensidad alcanzada por la junta en equilibrio térmico (en oscuridad y sin voltaje aplicado), mayores voltajes internos para un mismo largo indican

equilibrios más intensos.

Aumentos de la temperatura del cristal siempre significan disminuciones de V_{bi} . El ‘built-in voltage’ es más sensible a cambios de la temperatura del cristal que a cambios de la temperatura de los transportadores. El fenómeno físico responsable de la baja de V_{bi} con el aumento de la temperatura es la termalización. La termalización hace subir los valores de la densidad intrínseca (n_i) que provocan disminuciones de V_{bi} , y por ende campos eléctricos internos menos intensos.

En esta tesis dos condiciones que sacan del equilibrio (térmico y electrónico) a la junta han sido analizadas: (i) la junta con voltaje aplicado y (ii) la junta iluminada. Las características de la junta PN bajo voltaje y/o iluminación están fuertemente influenciadas por la condición de equilibrio lograda en oscuridad y sin voltaje aplicado, que como se ha mencionado depende directamente de la magnitud de V_{bi} (mayores voltajes internos para un mismo L , equilibrios más intensos son alcanzados) y del dopaje aplicado (N_0 , a mayor dopaje, más intenso es el equilibrio).

Bajo un voltaje externo aplicado (V_{ap}), disminuye o aumenta las fuerzas electrostáticas que existen en equilibrio (disminuye o aumenta el potencial electrostático interno, $V_{ap}^* - |V_{bi}^*|$), haciendo que los transportadores se muevan en la dirección impuesta por el campo eléctrico si las fuerzas electrostáticas son potenciadas con una diferencia de voltaje aplicado negativa (que aumenta la diferencia de potencial), o en la dirección de las fuerzas difusivas para una diferencia de voltaje aplicado positiva (que disminuye la diferencia de potencial). Además, se ha encontrado que si en equilibrio la junta no posee campos eléctricos intensos, entonces, voltajes aplicados que en módulo son menores producirán las mismas corrientes que voltajes que en módulo son mayores aplicados a juntas que en equilibrio tienen campos más intensos (equilibrios más intensos).

Con voltaje aplicado el sentido de la corriente puede ser hacia adelante (forward direction) o hacia atrás (reverse direction). En la dirección hacia adelante los electrones de la zona tipo ‘n’ y los hoyos de la zona tipo ‘p’ fluyen hacia la junta PN. En la dirección hacia atrás los electrones y hoyos fluyen lejos de la junta PN. En la dirección hacia adelante, que generalmente se da con diferencias de voltaje aplicado positivo, los transportadores minoritarios aumentan considerablemente, la diferencia de potencial electrostático entre los bordes se hace menor, y las velocidades en módulo aumentan. En cambio, para la condición ‘reverse’ entre diferencias de voltaje más negativas se aplican la junta más se vacía de transportadores y más aumenta en módulo la velocidad de transportadores. De lo estudiado se puede concluir que la junta PN es más sensible a cambios de voltaje aplicado positivos, ya que se generan corrientes y velocidades de mayor magnitud en comparación con voltajes negativos de igual módulo.

Cuando la junta esta bajo radiación solar generación neta distinta de cero es provocada, el sistema es sacado del equilibrio produciendo que las fuerzas electrostáticas permanezcan constantes y las fuerzas difusivas bajen. El sistema requiere volver al equilibrio y como las fuerzas difusivas han disminuido, entonces, evacua el exceso de transportadores de acuerdo a la dirección de flujo que impone el campo eléctrico. Es decir, los electrones se mueven de potenciales menores a mayores y en la dirección contraria se mueven los hoyos (como en ‘reverse’).

El modelo utilizado predice la forma de ‘j’ usualmente observada en curvas de corriente para la junta PN. Se ha visto que parámetros de operación y diseño afectan la forma de la curva y la magnitud de la corriente alcanzada para mismos voltajes aplicados. Juntas que en equilibrio (oscuridad y sin voltaje aplicado) tienen campos eléctricos más intensos son más eficaces para generar potencia útil cuando existe radiación (junta con voltaje e iluminada). En este sentido de acuerdo a la Ec. (6.9) para la potencia lineal dimensional (P^*) y del análisis de las curvas de densidad de corriente adimensional (J_T) versus voltaje aplicado: aumentos del dopaje, aumentos de los tiempos entre colisión de electrones (a γ_2 constante), disminuciones de la temperatura del cristal, y una temperatura adecuada de transportadores¹ favorecen la generación de potencia útil por parte de la junta PN. Además, disminuciones del largo de la junta también aumentarían la potencia útil que podría ser generada bajo

¹Del orden de 900[K] para los casos estudiados

radiación, siempre y cuando disminuciones del tamaño del dispositivo no signifiquen aumentos muy grandes de la temperatura del cristal.

Los parámetros relacionados con la resistencia al flujo, R_e y la razón entre los tiempos medios de colisión entre electrones y hoyos (γ_2), afectan como se ha mostrado en la eficacia de la junta para generar corriente bajo iluminación. Como tendencia general, cuando cambiando el R_e y γ_2 se logra hacer que la curva de corriente de la junta sea más insensible a cambios del voltaje aplicado, la generación de potencia útil con radiación se ve beneficiada.

Finalmente, cabe destacar que se han construido códigos numéricos que permitirán extensiones de este trabajo, incluyendo por ejemplo las ecuaciones de energía. En este sentido, el trabajo de tesis ha logrado plenamente lo que se esperaba: servir como punto de partida para futuros análisis térmicos.

Bibliografía

- [1] Azoff, D. K.: *Generalized energy-momentum conservation equation in the relaxation time approximation*. Solid-State Electron, 30(1):913–917, 1987.
- [2] Blotekjaer, K.: *Transport equations for electrons in two-valley semiconductors*. IEEE Transactions on Electron Devices, 17(1):38–47, 1970.
- [3] Bohm, D.: *Quantum Theory*. Prentice - Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1951.
- [4] Calderón-Muñoz, W., Debdeep Jena y Mihir Sen: *Hydrodynamic instability of confined two-dimensional electron flow in semiconductors*. Journal of Applied Physics, 106(1):014506–1–014506–10, 2009.
- [5] Calderón-Muñoz, W., Debdeep Jena y Mihir Sen: *Temperature influence on hydrodynamic instabilities in a one-dimensional electron flow in semiconductors*. Journal of Applied Physics, 107(7):074504–1–074504–11, 2010.
- [6] Calderón-Muñoz, W., Mihir Sen y Debdeep Jena: *Hydrodynamic instability of one-dimensional electron flow in ungated semiconductors*. Journal of Applied Physics, 102(2):023703–1–023703–8, 2007.
- [7] E. A. Fatemi, J. W. Jerome y S. Osher: *Solution of the hydrodynamic device model using high-order non-oscillatory shock capturing algorithms*. IEEE Trans. Comput.-Aided Des., 232:232, 1991.
- [8] Ferry, D. K. y R. O. Grondin: *Physics of Submicron Devices*. Plenum, New York, 1991.
- [9] Fischetti, M. V. y S. E. Laux: *Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects*. Phys. Rev. B, 38(14):9721 – 9745, 1988.
- [10] Fushinobu, K., A. Majumdar y K. Hijikata: *Heat generation and transport in submicron semiconductor devices*. Journal of Heat Transfer, 117:25–31, 1995.
- [11] Grundmann, Marius: *The Physics of Semiconductors, An Introduction Including Devices and Nanophysics*. Springer, New York, 2006.
- [12] Haar, D. Tear: *Elements Statistical Mechanics*. Butterworth-Heinemann, Oxford, 1995.
- [13] Hess, K.: *Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond*. Kluwer Academics, Boston, 1991.
- [14] Holmes, M. H.: *Introduction to Perturbation Methods*. Springer, New York, 1995.
- [15] I.N. Volovichev, J.E Velazquez Perez y Yu. G. Gurevich: *Transport boundary conditions for solar cells*. Solar Energy Materials & Solar Cells, 93(1):6–10, 2009.
- [16] Jünger, A.: *Transport Equation for Semiconductors*. Springer, Berlin, 2009.
- [17] Kamran Mohseni, Ali Shakouri, Rajeev J. Ram y Mathew C. Abraham: *Electron Vortices in Semiconductors Devices*. Physics of Fluids, 17(10):100602–1–100602–7, 2005.

- [18] Kiusalaas, Jaan: *Numerical Methods in Engineering with MATLAB*. Cambridge University Press, Cambridge, 2010.
- [19] K.Mishra, Umesh y Jasprit Singh: *Semiconductor Devices Physics and Design*. Springer, New York, 2008.
- [20] Lee, S. C. y T. W. Tang: *Transport coefficients for a silicon hydrodynamic model extracted from inhomogeneous monte-carlo calculations*. Solid-State Electron, 35(4):561 – 569, 1992.
- [21] Lundstrom, Mark: *Fundamentals of Carrier Transport*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [22] Majumdar, A., K. Fushinobu y K. Hijikata: *Effect of gate voltage on hot-electron and hot-phonon interaction and transport in a submicrometer transistor*. Journal of Applied Physics, 77(12):6686–6694, 1995.
- [23] Nelson, J.: *The Physics of Solar Cells*. Imperial College Press, London, 2003.
- [24] Quarteroni, A., R. Sacco y F. Saleri: *Numerical Mathematics*. Springer, New York, 2000.
- [25] S., Datta: *Quantum Phenomena*. Addison-Wesley, Massachusetts, 1989.
- [26] Sah., Chih Tang: *Fundamentals of Solid-State Electronics*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 1991.
- [27] Scharfetter, D. L. y H. K. Gummel: *Large-signal analysis of a silicon read diode oscillator*. IEEE Trans. Electron Devices, ED-16:64–77, 1969.
- [28] Shur., M.: *Introduction to Electronic Devices*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1996.
- [29] Sze, S.M: *Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 2002.
- [30] Tibor Grasser, Ting-Wei Tang, Hans Kosina y Siegfried Selberherr: *A Review of Hydrodynamic and Energy-Transport Models for Semiconductor Device Simulation*. Proceedings of the IEEE, 91(2):251–273, 2003.
- [31] Tien, C. L., A. Majumdar y F.M. Gerner: *Microscale Energy Transport*. Taylor & Francis, Washington, DC, 1998.
- [32] Würfel, Peter: *Physics of Solar Cells, From Basic Principles to Advanced Concepts*. WILEY-VCH, Weinheim, 2009.

Apéndice A

Derivación de las Ecuaciones Hidrodinámicas a partir de los Momentos de la Ecuación de Boltzman

¹La función distribución $f(t, x_i, v_i)$, que representa el número de partículas en el espacio de seis dimensiones $dx_1 dx_2 dx_3 dv_1 dv_2 dv_3$ en un tiempo t , obedece a la ecuación de transporte de Boltzman:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial v_i} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}, \quad (\text{A.1})$$

donde x_i corresponde a las coordenadas espaciales, v_i a las coordenadas de velocidad, F_i representa la fuerza externa (por unidad de masa), y el término del lado derecho representa el cambio de la función distribución debido a las 'colisiones' (procesos de generación, recombinación y choque entre partículas).

A.1. Ecuación de Continuidad

Integrando la ecuación (A.1) sobre el espacio de velocidades, se obtiene,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f}{\partial t} dv_1 dv_2 dv_3 + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} dv_1 dv_2 dv_3 \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F_i \frac{\partial f}{\partial v_i} dv_1 dv_2 dv_3 \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} dv_1 dv_2 dv_3. \end{aligned}$$

¹En este apéndice se usa notación indicial

Integrando por partes en el tercer término, se tiene que,

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f dv_1 dv_2 dv_3 + \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} v_i f dv_1 dv_2 dv_3 \\
& - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} f dv_1 dv_2 dv_3 + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (F_1 f)|_0^0 dv_2 dv_3 \\
& - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f \frac{\partial F_1}{\partial v_1} dv_1 dv_2 dv_3 + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (F_2 f)|_0^0 dv_1 dv_3 \\
& - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f \frac{\partial F_2}{\partial v_2} dv_1 dv_2 dv_3 + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (F_3 f)|_0^0 dv_1 dv_2 \\
& - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f \frac{\partial F_3}{\partial v_3} dv_1 dv_2 dv_3 \\
& = \left(\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f dv_1 dv_2 dv_3 \right)_{coll} \\
& = \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll},
\end{aligned}$$

donde el hecho de que $f = 0$, o $f \rightarrow 0$ cuando $v_i \rightarrow \pm\infty$ ha sido usado. Asumiendo que F_i es independiente de v_i , esta expresión puede ser escrita como

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f dv_1 dv_2 dv_3 + \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} v_i f dv_1 dv_2 dv_3 \\
& - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} f dv_1 dv_2 dv_3 \\
& = \left(\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f dv_1 dv_2 dv_3 \right)_{coll} \\
& = \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll},
\end{aligned}$$

donde n corresponde al número de partículas en el espacio tridimensional $dx_1 dx_2 dx_3$ en el tiempo t . Como v_i es independiente de x_i , entonces $\partial v_i / \partial x_i = 0$. Además, si se separa la velocidad en una componente termal y otra de desplazamiento (*drift*), $v_i = v_i^d + v_i^{th}$, y se considerando el hecho de que el promedio de la componente termal de la velocidad sobre el espacio de velocidad es cero ($\langle v_i^{th} \rangle = 0$). Entonces la expresión obtenida es:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial (v_i^d n)}{\partial x_i} = \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{A.2})$$

Esta corresponde a la ecuación de continuidad. El término de colisión $(\partial n / \partial t)_{coll}$ representa la tasa de los procesos de generación-recombinación.

A.2. Ecuación de Momentum

Para obtener la ecuación de momentum es necesario multiplicar la ecuación (A.1) por el momentum $p_j = m_e v_j$ y integrar sobre el espacio de velocidad. Haciendo esto se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f}{\partial t} m_e v_j dv_1 dv_2 dv_3 + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} m_e v_j dv_1 dv_2 dv_3 \\
& + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F_i \frac{\partial f}{\partial v_i} m_e v_j dv_1 dv_2 dv_3 \\
& = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} m_e v_j dv_1 dv_2 dv_3.
\end{aligned}$$

Donde,

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f}{\partial t} m_e v_j dv_1 dv_2 dv_3 \\
& = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f m_e v_j dv_1 dv_2 dv_3 \\
& = \frac{\partial (n m_e v_j^d)}{\partial t},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} m_e v_j dv_1 dv_2 dv_3 \\
& = \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} v_i f m_e v_j dv_1 dv_2 dv_3 \\
& = \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (v_i^d + v_i^h) f m_e (v_j^d + v_j^h) dv_1 dv_2 dv_3,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F_i \frac{\partial f}{\partial v_i} m_e v_j dv_1 dv_2 dv_3 \\
& = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^0 d(F_1 f m_e v_j) dv_2 dv_3 + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^0 d(F_2 f m_e v_j) dv_1 dv_3 \\
& + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^0 d(F_3 f m_e v_j) dv_1 dv_2 - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f \frac{\partial (F_i m_e v_j)}{\partial v_i} dv_1 dv_2 dv_3,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} m_e v_j dv_1 dv_2 dv_3 \\
& = \left(\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f m_e v_j dv_1 dv_2 dv_3 \right)_{coll} \\
& = \left(\frac{\partial (n m_e v_j^d)}{\partial t} \right)_{coll},
\end{aligned}$$

Además, el término $m_e v_j$ depende solo de v_j (es independiente de x_i y t), $\langle v_j^h \rangle = 0$, y $\langle v_j^d \rangle = v_j^d$, luego se obtiene que

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial (n m_e v_j^d)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (v_i^d + v_i^h) f m_e (v_j^d + v_j^h) dv_1 dv_2 dv_3 \\
& - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f \frac{\partial (F_i m_e v_j)}{\partial v_i} dv_1 dv_2 dv_3 \\
& = \left(\frac{\partial (n m_e v_j^d)}{\partial t} \right)_{coll}.
\end{aligned}$$

Esta expresión es equivalente a

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(nm_e v_j^d)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f m_e (v_i^d v_j^d + v_i^d v_j^{th} + v_i^{th} v_j^d + v_i^{th} v_j^{th}) dv_1 dv_2 dv_3 \\ & - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f \frac{\partial(F_i m_e v_j)}{\partial v_i} dv_1 dv_2 dv_3 \\ & = \left(\frac{\partial(nm_e v_j^d)}{\partial t} \right)_{coll} . \end{aligned}$$

Donde $\langle v_i^d v_j^{th} \rangle = v_i^d \langle v_j^{th} \rangle = 0$, por lo que

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(nm_e v_j^d)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle nm_e v_i^d v_j^d \rangle + nm_e \langle v_i^{th} v_j^{th} \rangle) \\ & - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f \frac{\partial(F_i m_e v_j)}{\partial v_i} dv_1 dv_2 dv_3 \\ & = \left(\frac{\partial(nm_e v_j^d)}{\partial t} \right)_{coll} . \end{aligned}$$

La energía térmica puede ser relacionada con la temperatura a través de $\frac{3}{2}nk_B T = \frac{1}{2}nm_e \langle v_j^{th} v_j^{th} \rangle$. Según el teorema de equipartición (que aplica para fases en equilibrio térmico (consigo mismas), en este caso equilibrio local) la energía termal para cada grado de libertad k_d es $\frac{1}{2}nk_B T = \frac{1}{2}nm_e \langle v_{k_d}^{th} v_{k_d}^{th} \rangle$. Usando la densidad de momentum $p_{nj}^d = nm_e v_j^d$, se obtiene

$$\begin{aligned} & \frac{\partial p_{nj}^d}{\partial t} + \frac{\partial(v_i^d p_{nj}^d)}{\partial x_i} + \frac{\partial(nk_B T_e)}{\partial x_j} \\ & - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f \frac{\partial(F_i m_e v_j)}{\partial v_i} dv_1 dv_2 dv_3 = \left(\frac{\partial p_{nj}^d}{\partial t} \right)_{coll} . \end{aligned}$$

donde $\partial v_j / \partial v_i = \delta_{ij}$, entonces,

$$\frac{\partial p_{nj}^d}{\partial t} + \frac{\partial(v_i^d p_{nj}^d)}{\partial x_i} + \frac{\partial(nk_B T_e)}{\partial x_j} - F_j nm_e = \left(\frac{\partial p_{nj}^d}{\partial t} \right)_{coll} ,$$

donde F corresponde a la fuerza externa por unidad de masa de cada partícula. Usando la expresión de la fuerza de Lorentz por unidad de masa, $F_j^{tot} = -e \frac{1}{m_e} (\mathcal{E}_j + \varepsilon_{ikj} v_i^d B_k)$, se obtiene

$$\frac{\partial p_{nj}^d}{\partial t} + \frac{\partial(v_i^d p_{nj}^d)}{\partial x_i} = -ne(\mathcal{E}_j + \varepsilon_{ikj} v_i B_k) - \frac{\partial(nk_B T_e)}{\partial x_j} + \left(\frac{\partial p_{nj}^d}{\partial t} \right)_{coll} ,$$

que corresponde a la ecuación de momentum.

Substituyendo $p_{nj}^d = nm_e v_j^d$, se obtiene,

$$\begin{aligned} & nm_e \frac{\partial v_j^d}{\partial t} + m_e v_j^d \frac{\partial n}{\partial t} + nm_e v_i^d \frac{\partial v_j^d}{\partial x_i} + m_e v_j^d \frac{\partial(nv_i^d)}{\partial x_i} \\ & = -ne(\mathcal{E}_j + \varepsilon_{ikj} v_i^d B_k) - \frac{\partial(nk_B T_e)}{\partial x_j} + nm_e \left(\frac{\partial v_j}{\partial t} \right)_{coll} + m_e v_j^d \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll} . \end{aligned}$$

Apéndice B

Derivación del modelo ‘Drift Diffusion’ a partir del Modelo Hidrodinámico

El modelo ‘Drift–Diffusion’ (DD) puede ser deducido de las ecuaciones de orden cero del modelo hidrodinámico de esta tesis. Si se considera $\gamma_1 = 0$ se obtiene:

$$\frac{\partial^2 V_0}{\partial x^2} = -\alpha \left(p_0 - n_0 - \frac{N_A}{N_0} \right), \quad x < x_J, \quad (\text{B.1a})$$

$$\frac{\partial^2 V_0}{\partial x^2} = -\alpha \left(p_0 - n_0 + \frac{N_D}{N_0} \right), \quad x > x_J, \quad (\text{B.1b})$$

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} + \frac{\partial(u_{e0}n_0)}{\partial x} = (G_n - R_n), \quad (\text{B.1c})$$

$$\frac{\partial p_0}{\partial t} + \frac{\partial(u_{h0}p_0)}{\partial x} = (G_p - R_p), \quad (\text{B.1d})$$

$$\frac{\partial V_0}{\partial x} - \frac{\beta_n}{n_0} \frac{\partial n_0}{\partial x} - u_{e0} = 0, \quad (\text{B.1e})$$

$$-m_r \left[\frac{\partial V_0}{\partial x} + \frac{\beta_p}{p_0} \frac{\partial p_0}{\partial x} \right] - \gamma_2 u_{h0} = 0 \quad (\text{B.1f})$$

Considerando estado estacionario, que las densidades de corriente se definen como $J_n = qn_0u_{e0}$ y $J_p = qp_0u_{h0}$, y que $E_0 = -\frac{\partial V_0}{\partial x}$. Con q la carga eléctrica del electrón, entonces se obtienen las ecuaciones del modelo

DD adimensionalizadas:

$$\frac{\partial^2 V_0}{\partial x^2} = -\alpha \left(p_0 - n_0 - \frac{N_A}{N_0} \right), \quad x < x_J, \quad (\text{B.2a})$$

$$\frac{\partial^2 V_0}{\partial x^2} = -\alpha \left(p_0 - n_0 + \frac{N_D}{N_0} \right), \quad x > x_J, \quad (\text{B.2b})$$

$$\frac{\partial(J_n)}{\partial x} = (G_n - R_n), \quad (\text{B.2c})$$

$$\frac{\partial(J_p)}{\partial x} = (G_p - R_p), \quad (\text{B.2d})$$

$$J_n = qn_0 E_0 q \beta_n \frac{\partial n_0}{\partial x}, \quad (\text{B.2e})$$

$$J_p = \frac{qm_r}{\gamma_2} \left[p_0 E_0 - \beta_p \frac{\partial p_0}{\partial x} \right] \quad (\text{B.2f})$$

Además quienes usan el modelo DD generalmente asumen la existencia de una zona neutra ($\frac{\partial V_0}{\partial x} = 0$) para el cálculo de la corriente.