

Estructura de la Materia 2
Segundo cuatrimestre de 2012
Guía 7: Semiconductores

1. Semiconductor intrínseco

Considere un semiconductor con bandas de valencia (v) y de conducción (c) de forma parabólica general en un entorno de los respectivos puntos extremos, masas efectivas m_v , m_c y energías E_v , E_c .

- i) Exprese y grafique las densidades de estados por unidad de volumen.
- ii) Exprese y grafique las funciones de Fermi de electrones y huecos superpuestas sobre el gráfico anterior. Suponga $\mu = \frac{E_c + E_v}{2}$ y úselo como cero de energía.
- iii) Exprese la concentración de electrones en la banda de conducción n_c y de huecos en la banda de valencia p_v .
- iv) Suponga satisfecha la condición de no degeneración $\frac{|\mu - E_{c,v}|}{kT} \gg 1$ en escala de kT , μ está en el interior del gap ($E_g = E_c - E_v$) lejos de los extremos de las bandas. Calcule y grafique $\mu(T) = \mu_i(T)$ (i por intrínseco). Use masas típicas para Ge: $m_v = 0,37m$, $m_c = 0,56m$. Estime el valor de E_g a partir del cual se viola la condición anterior a temperatura ambiente. ($E_g(\text{Ge}) = 0,67 \text{ eV}$)
- v) Calcule $n_c(T)$ y $p_v(T)$.

2. Masas efectivas de huecos y electrones.

Para semiconductores con gaps de 1 eV y 0.1 eV

- i) ¿ En cuánto deben diferir las masas efectivas de electrones y huecos para que el potencial químico μ se ubique a una energía KT_a ($T_a = 300K$) por debajo de la banda de conducción?
- ii) Grafique la densidad de estados para electrones y huecos en ambos casos.

3. i) Argumente, por comparación con un átomo hidrogenoide, que el radio aproximado de la órbita de un electrón ligado a una impureza donora es $r = \frac{\epsilon a_0 m}{m^*}$ y que su energía es $E_d = E_c - \frac{m^*}{m\epsilon^2} \text{ Ry}$. Compare $E_c - E_d$ con E_g para casos típicos ($a_0 = \frac{\hbar^2}{m\epsilon^2} \approx 0,53AA$ es el radio de Bohr, ϵ

es la constante dieléctrica, $1\text{Ry} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13,6\text{eV}$ es la energía del nivel fundamental del átomo de hidrógeno.

ii) Halle la expresión de la concentración de electrones en el n nivel donador n_d , para un semiconductor fabricado con uno intrínseco agregando una concentración de impurezas donoras N_d .

iii) Exprese el balance de carga en este caso.

iv) La condición de no degeneración ahora es $\frac{|\mu - E_d|}{kT} \gg 1$.

Utilícela para calcular $\mu(T)$ y compare con $\mu_i(T)$ del ejercicio 1 para $N_d = 10^{12}\text{m}^{-3}$. Note la existencia de una región de temperatura dominada por el comportamiento intrínseco y otra dominada por el comportamiento extrínseco. Estime el rango de temperatura en el cual vale la condición de no degeneración.

v) Obtenga $n_c(T)$ y $p_v(T)$ y compare con $n_i(T)$ del ejercicio 1.

Ayuda: Para i) la energía del nivel n de un átomo hidrogenoide de carga Ze es $E_n = \frac{-mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}$ y el radio de la órbita $r_n = \frac{\hbar^2n^2}{mZe^2}$. Por otro lado en un medio de constante dieléctrica ϵ la carga nuclear se apantalla según $Ze \rightarrow Ze/\epsilon$.

4. Orbitas de impurezas: el InSb tiene un gap $E_g = 0,23\text{eV}$, una constante dieléctrica $\epsilon = 18$ y una masa efectiva $m_c^* = 0,015m$. Calcular

i) La energía de ionización del donador.

ii) El radio típico del estado fundamental.

iii) La concentración de donores a la que comenzarán a superponerse los orbitales correspondientes a átomos de impurezas adyacentes.

5. Ionización de donores: en un dado semiconductor hay 10^{13} donores/ cm^3 , con una energía de ionización $E_d = 1\text{meV}$ y una masa efectiva $m_c^* = 0,01m$.

i) Estimar la concentración n de electrones de conducción a $T=4$ K.

ii) Calcular el coeficiente Hall. Suponer que no hay impurezas aceptoras presentes y que $E_d \gg kT$. Recordar que $R_H = -1/nec$

6. Los átomos de silicio en su estructura diamante poseen entornos de primeros vecinos con simetría tetraédrica. Los enlaces atómicos en dicha

configuración pueden ser aproximados con funciones de onda $2sp^3$, que son combinaciones lineales de los orbitales hidrogenoides $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$ (ϕ_j):

$$\psi_i(2sp^3) = \sum_j a_{ij}\phi_j, \text{ con } i, j = 1, 2, 3, 4$$

y donde los orbitales ϕ_j en coordenadas esféricas son:

$$\phi(2s) = ce^{-\rho}(1 - \rho),$$

$$\phi(2p_z) = ce^{-\rho}\rho \cos \theta,$$

$$\phi(2p_x) = ce^{-\rho}\rho \sin \theta \cos \varphi,$$

$$\phi(2p_y) = ce^{-\rho}\rho \sin \theta \sin \varphi,$$

donde $\rho = Zr/2a_0$ (a_0 es el radio de Bohr y Z la carga de núcleo)

Se requiere que las funciones ψ_i , al igual que los orbitales ϕ_i sean ortonormales:

$$\int \psi_i \psi_k dr = \delta_{ik}.$$

- i) Grafique las funciones ϕ (ρ constante, θ , φ) para los orbitales $2s$ y $2p$.
- ii) Muestre que la ortonormalidad requerida para las funciones de onda ψ_i ($2sp^3$) implican que:

$$\sum_j a_{ij}a_{kj} = \delta_{ik}, \text{ con } a_{ij} = a_{ji}^*$$
- iii) Determine cuatro funciones ψ ortonormales tales que $a_{ij} = 1/2$ o $a_{ij} = -1/2$.
- vi) Muestre que los máximos de las funciones $|\psi|^2$ se encuentran en las direcciones tetraédricas, es decir, en las vértices de un cubo cuyas aristas son paralelas a los ejes x , y y z .
- v) Muestre que la densidad electrónica $\sum_{i=1}^4 |\psi_i|^2$ tiene simetría esférica.
- vi) Explique por qué, sin embargo, la densidad electrónica de valencia en un cristal tipo diamante no tiene simetría esférica sino que se localiza en las direcciones tetraédricas de las ligaduras.