

# Comentarios y un Ejercicio Resuelto de la Guía 8

## Comentario Problema 1: SEMICONDUCTOR INTRÍNSECO

¿Qué cuentas hubiesen cambiado en la resolución del problema si el semiconductor fuera un material bidimensional? La variación más directa se encuentra en la densidad de estados por unidad de superficie<sup>1</sup>:

$$\left( \begin{array}{l} \text{n}^\circ \text{ de estados por} \\ \text{unidad de superficie} \end{array} \right) = \frac{2}{S} \int \int \frac{d\bar{k}}{\Delta\bar{k}} = \frac{2}{(2\pi)^2} \int \int k dk d\phi = \frac{1}{\pi} \int k dk = \frac{1}{\pi} \int \frac{k}{\left| \frac{dE(k)}{dk} \right|} dE \equiv \int g(E) dE$$

donde hemos supuesto que las bandas sólo dependen del módulo del vector de onda, lo cual es válido bajo la aproximación parabólica del problema. La densidad de estados por unidad de superficie es entonces, para este semiconductor intrínseco en dos dimensiones,

$$g(E) = \frac{1}{\pi} \frac{k}{\left| \frac{dE(k)}{dk} \right|}$$

La densidad de estados interviene en los cálculos de las densidades efectivas de electrones en la banda de conducción,  $N_C(T)$  y de huecos en la banda de valencia,  $P_V(T)$ , que se calculan como vimos en la primera clase práctica sobre el tema (bajo la aproximación de semiconductor no degenerado).

**Problema 4. Órbitas de impurezas: el InSb (antimoniuro de indio) tiene un gap  $\epsilon_g = 0,23 eV$ , una constante dieléctrica  $\epsilon = 18$  y una masa efectiva  $m_c^* = 0,015 m$ . 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.**

i) La clase pasada vimos que en la ecuación de Schrödinger para el electrón débilmente ligado a la impureza dadora podemos describir el potencial (aproximado) por medio del coulombiano  $U(r) = -\frac{Ze^2}{\epsilon r}$ , donde  $Ze$  es la carga del ión de impureza y  $\epsilon$  es la constante dieléctrica que representa la inmersión del electrón en el medio semiconductor (que se considera macroscópico; esto luego será justificado por el valor que toma el radio de las órbitas, mucho mayores que la constante de red). Llegamos a una ecuación análoga a la de un átomo hidrogenoide, para la cual, los niveles de energía medidos desde el fondo de la banda de conducción resultan

<sup>1</sup>Recuerden que hacemos un pasaje al continuo debido a la alta densidad de estados, por medio de un factor adimensional que incluye la superficie ocupada por un estado permitido  $\Delta\bar{k} = (2\pi)^2/S$ .

$$\varepsilon_n = \varepsilon_C - \frac{m_c^* e^4 Z^2}{2\hbar^2 \varepsilon^2} \frac{1}{n^2} = \varepsilon_C - Ry \frac{Z^2}{\varepsilon^2} \left( \frac{m_c^*}{m} \right) \frac{1}{n^2} \equiv \varepsilon_C - \frac{\varepsilon_d}{n^2}$$

donde  $Ry = 13,6 eV$  es la energía de ionización del átomo de hidrógeno.

La energía fundamental del átomo de impureza donadora (que en algunos libros se escribe en términos de una constante de Rydberg efectiva para la impureza) está dada entonces por

$$\varepsilon_1 \equiv \varepsilon_D = \varepsilon_C - Ry \frac{Z^2}{\varepsilon^2} \left( \frac{m_c^*}{m} \right)$$

con lo cual la energía de ionización del donador es en este caso

$$\varepsilon_C - \varepsilon_D = Ry \frac{Z^2}{\varepsilon^2} \left( \frac{m_c^*}{m} \right) = 6,3 * 10^{-4} eV = 0,63 meV \ll \varepsilon_g$$

ii) Nuevamente, por comparación con la solución del átomo hidrogenoide, el radio de las órbitas está dado por

$$r_n = \frac{\varepsilon \hbar^2}{m_c^* e^2} \frac{n^2}{Z} = \frac{\hbar^2}{m e^2} \frac{\varepsilon n^2}{Z} \left( \frac{m}{m_c^*} \right) = a_0 \frac{\varepsilon n^2}{Z} \left( \frac{m}{m_c^*} \right)$$

con  $a_0 = 0,53 \text{Å}$  el radio de Bohr del átomo de hidrógeno. El reemplazo sugerido por la guía al final del enunciado del ejercicio (3),  $Ze \rightarrow \frac{Ze}{\varepsilon}$ , puede pensarse en términos de la carga nuclear de la impureza apantallada por el entorno dado por el cristal semiconductor.

Sustituyendo los datos, el radio de la primera órbita, la órbita fundamental, es

$$r_1 \equiv a = 1200 a_0 = 636 \text{Å}$$

Este radio es 100 veces del orden que la constante de red del  $\text{InSb}^2$ , por lo que la aproximación macroscópica para la interacción del electrón de la impureza con entorno cristalino del semiconductor es razonable.

iii) Comenzarán a superponerse o solaparse los orbitales de los átomos de impurezas adyacentes (solapamiento que tiende a producir una banda de impurezas) si las impurezas pueden interactuar entre sí, es decir, si la separación  $l$  entre éstas satisface que

$$l \lesssim 2a = 1,27 * 10^{-5} cm$$

Por lo tanto la concentración máxima de impurezas no interactuantes es  $N_D \approx \frac{1}{l^3} = 4,88 * 10^{14} cm^{-3}$ . Para concentraciones mayores habrá conducción eléctrica por saltos de electrones de una impureza a otra.

<sup>2</sup>Ver <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InSb/index.html> (parámetros básicos a T ambiente)

### Comentario Problema 3 -SEMICONDUCTOR CON IMPUREZA DONADORA O DEL TIPO n- (iv)

La cercanía del nivel dador a la banda de conducción hace esperar que sea mucho más probable la promoción de electrones a la banda de conducción desde el nivel dador que desde la banda de valencia. La concentración de portadores estará entonces controlada por las impurezas en principio; el semiconductor se dice que está entonces en el régimen de ionización. Una vez que todas las impurezas donadoras están ionizadas, lo cual ocurre a partir de una temperatura llamada de saturación, se está en el régimen de saturación en el que  $n_c \approx N_D$  (y es independiente de la temperatura). Al aumentar la temperatura lo suficiente ocurre que el número de electrones procedentes de la banda de valencia supere a los electrones debidos a la ionización de impurezas, siendo así  $n_c \gg N_D$ ; en este caso se está en el régimen intrínseco (como mencionamos en clase) en el que la presencia de impurezas no resulta relevante y  $n_c \approx n_i$ .

La temperatura a partir de la cual se entra en este régimen, denominada temperatura intrínseca, puede estimarse de la relación

$$n_i(T_i) \approx N_D$$

$$\sqrt{N_C(T_i)P_V(T_i)} \exp\left(-\frac{\epsilon_g}{2k_B T_i}\right) = N_D \Rightarrow T_i = \frac{\epsilon_g}{k_B \ln\left(\frac{N_C(T_i)N_V(T_i)}{N_D^2}\right)}$$

donde usamos la expresión de la concentración en el caso intrínseco (que ya determinamos en el ejercicio 1, en clase). Estimemos su valor para el silicio (extraigo los datos de la referencia mencionada en el pie de la página anterior) si  $N_D \sim 10^{15} \text{cm}^{-3}$ :

$$N_C(T_i) = 6,2 * 10^{15} T_i^{3/2} \text{cm}^{-3}$$

$$P_V(T_i) = 3,5 * 10^{15} T_i^{3/2} \text{cm}^{-3}$$

$$\epsilon_g = 1,12 \text{eV} \Rightarrow \frac{\epsilon_g}{k_B} = 12993 \text{K}$$

$$T_i = \frac{\epsilon_g}{k_B \ln\left(\frac{N_C(T_i)N_V(T_i)}{N_D^2}\right)}$$

$$3,077 + 3 \ln(T_i) = \frac{12993}{T_i}$$

Esta es una ecuación trascendente que debe resolverse numérica o gráficamente; haciéndolo pueden llegar a que  $T_i \approx 585 \text{K}$ . A una temperatura mucho mayor que ésta la presencia de impurezas no resulta relevante.

¿Cómo estimarían la temperatura de saturación  $T_s$  a partir de la cual todas las impurezas dadoras están ionizadas y la concentración de electrones procedentes de la banda de valencia es despreciable? Un criterio es a partir de  $\mu(T_s) = \epsilon_D$ , con lo cual, de la ecuación de electroneutralidad y asumiendo

válida la condición de no degeneración para la banda de conducción  $\beta|\mu - \varepsilon_C| \gg 1$ ,

$$n_C(T_s) = N_C(T_s) \exp\left(-\frac{\varepsilon_C - \mu(T_s)}{k_B T_s}\right) = N_D$$

$$T_s = \frac{\varepsilon_C - \varepsilon_D}{k_B \ln\left(\frac{N_C(T_s)}{N_D}\right)}$$

Típicamente la energía de ionización de impurezas dadoras en silicio es  $\varepsilon_C - \varepsilon_D \sim 0,05eV$ , con lo cual, sustituyendo los valores se obtiene

$$1,82 + \frac{3}{2} \ln(T_s) = \frac{580,05}{T_s}$$

y numéricamente  $T_s \approx 71K$ . Notamos entonces que a temperatura ambiente, todas las impurezas ya están ionizadas.

### Comentario Problema 5

¿Qué hubiera cambiado si el dopado fuera sólo con impurezas aceptoras en vez de donadoras? Como la temperatura es baja no se toma en cuenta la promoción térmica de electrones en la banda de valencia hacia la de conducción. La conducción es por huecos y podemos escribir la condición de balance de carga según

$$p_V \approx N_A^-$$

donde  $N_A^-$  es la concentración de impurezas aceptoras ionizadas, que se calcula restando la concentración de huecos en el nivel aceptor  $p_A$  de la concentración de impurezas aceptoras totales  $N_A$ ; es decir

$$p_V \approx N_A^- = N_A - p_A = N_A - \frac{N_A}{1 + \frac{1}{2} \exp(\beta(\mu - \varepsilon_A))}$$

En este caso el signo del coeficiente Hall es positivo. El coeficiente se usa para determinar la concentración de portadores y su carga, experimentalmente.