

Semiconductores: Comentarios y Ejercicios Resueltos

Problema 3. Semiconductor intrínseco 2D

Una manera mnemotécnica aunque no demasiado formal de llegar a una expresión para la densidad de estados por unidad de superficie cuando la energía sólo depende del módulo del vector de onda (como todos los problemas de la materia), consiste en computar: ¹:

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{l} n^\circ \text{ de est.. por} \\ \text{unidad de sup.} \end{array} \right) &= \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{k},s} 1 = \frac{2}{S} \sum_{\mathbf{k}} 1 \cdot \frac{\Delta \bar{k}}{\Delta k} \approx \frac{2}{S} \int \int \frac{d\bar{k}}{\Delta k} = \frac{2}{(2\pi)^2} \int \int k dk d\phi \\ \left(\begin{array}{l} n^\circ \text{ de est.. por} \\ \text{unidad de sup.} \end{array} \right) &\approx \frac{1}{\pi} \int k dk = \frac{1}{\pi} \int \frac{k}{\left| \frac{dE(k)}{dk} \right|} dE \\ \left(\begin{array}{l} n^\circ \text{ de est.. por} \\ \text{unidad de sup.} \end{array} \right) &\equiv \int g(E) dE, \end{aligned}$$

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:

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

Tal cual como vimos, la densidad de estados por unidad de superficie 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 de forma análoga a la del problema 1 (bajo la aproximación de semiconductor no degenerado).

Problema 5. Órbitas de impurezas: el InSb (antimoniuro de indio) tiene un gap $\varepsilon_g = 0,23$ 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 $U(r) =$

¹Recuerden que en 2D 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 $\Delta \bar{k} = (2\pi)^2/S$.

$-\frac{Ze^2}{\epsilon r}$, donde Ze es la carga del ión de impureza y ϵ 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

$$\epsilon_n = \epsilon_C - \frac{m_c^* e^4 Z^2}{2\hbar^2 \epsilon^2} \frac{1}{n^2} = \epsilon_C - Ry \frac{Z^2}{\epsilon^2} \left(\frac{m_c^*}{m} \right) \frac{1}{n^2} \equiv \epsilon_C - \frac{\epsilon_D}{n^2}$$

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:

$$\epsilon_1 \equiv \epsilon_D = \epsilon_C - Ry \frac{Z^2}{\epsilon^2} \left(\frac{m_c^*}{m} \right),$$

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

$$I_D = \epsilon_C - \epsilon_D = Ry \frac{Z^2}{\epsilon^2} \left(\frac{m_c^*}{m} \right) = 6,3 * 10^{-4} eV = 0,63 meV \ll \epsilon_g$$

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

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

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), $Ze \rightarrow \frac{Ze}{\epsilon}$, 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

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

Este radio es 100 veces del orden que la constante de red del InSb^2 , por lo cual 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

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

entonces 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.

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

Problema 4. Comentarios

SEMICONDUCTOR CON IMPUREZAS DONADORAS O DEL TIPO n

(iv-v) Estimación de la temperatura intrínseca y de la temperatura de saturación

La ecuación de balance de carga o de electroneutralidad se escribe en este caso por medio de: $n_C = p_V + N_D^+ = p_V + N_D - n_D$, donde n_D es la concentración de electrones en la banda donora y N_D^+ la densidad de impurezas donadoras ionizadas. Esta ecuación se puede simplificar de acuerdo a cómo sea el valor de temperatura del sistema, la que determina distintos regímenes.

Debido a la cercanía entre el nivel dador y el fondo de la banda de conducción, podemos 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 a baja temperatura estará entonces controlada por las impurezas, en principio; el semiconductor se dice entonces que está en el **régimen de ionización o régimen extrínseco**. Una vez que todas las impurezas donadoras están ionizadas, lo cual ocurre a partir de una **temperatura llamada de saturación** T_s , se está en el **régimen de saturación** en el que $n_C \approx N_D$ (y es independiente de la temperatura en cierto rango). Al seguir aumentando la temperatura, comenzarán a romperse enlaces covalentes del semiconductor matriz, y por tanto electrones en la banda de valencia saltan térmicamente hacia la banda de conducción; se tiene entonces que $n_C = p_V + N_D^+ = p_V + N_D$. Puede ocurrir además que a una temperatura suficientemente alta el número de electrones procedentes de la banda de valencia supere a los electrones debidos 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 $n_C \approx n_i \approx p_V$.

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 $T_i \approx 585K$. 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 $\mu(T_s) = \varepsilon_D$, por 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 donadoras ya están ionizadas.

(vi) SEMICONDUCTOR DOPADO SÓLO CON IMPUREZAS ACEPTORAS O DEL TIPO p.

El principal cambio en cuanto a los cálculos parte de la ecuación de balance de carga o de electroneutralidad. Si el semiconductor es dopado solamente con impurezas aceptoras, como mencionamos en clase, la ecuación de balance se escribe en general según:

$$n_C + N_A^- = p_V,$$

donde n_C es la concentración de electrones en la banda de conducción, p_V la densidad de huecos en la banda de valencia y N_A^- la concentración de impurezas aceptoras ionizadas; ésta última se calcula restando la concentración de huecos en el nivel aceptor p_A de la concentración de impurezas aceptoras totales N_A , es decir

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

³Por la deducción de la expresión de p_A ver por ejemplo las pp. 581-582 del libro de Ashcroft y Mermin (*Solid State Physics*).

¿Cómo escribirían la condición de no degeneración en este caso?

¿Qué expresión tendría la ecuación de electroneutralidad si tuvieran impurezas de los dos tipos? (semiconductor compensado)

Problema 6. Ionización de donores: en un dado semiconductor hay $N_D = 10^{13}$ donores/cm³, con una energía de ionización $I_D = 1$ meV y una masa efectiva en la banda de conducción $m_C^* = 0,01 m$.

i) Estimar la concentración $n_C(T)$ de electrones de conducción y el potencial químico $\mu(T)$ a $T = 4$ K.
ii) Calcular el coeficiente Hall. Suponer que no hay impurezas aceptoras presentes y que $I_D \gg kT$. Recordar además que $R_H = -1/nec$ (CGS) (aunque esta ecuación no es válida si se tienen dos tipos de portadores).

i) Establezcamos una serie de hipótesis antes de calcular lo que se pide en este ítem:

- $N_A^- = 0$, pues $N_A = 0$ (no hay impurezas aceptoras en el cristal semiconductor, según se dice en el enunciado).
- Al ser la temperatura $T = 4$ K mucho menor que la temperatura de saturación, es seguro que no todas las impurezas dadoras no están ionizadas. En términos del enunciado del problema 4 no vale la condición de no degeneración en la banda donora, esto es, no vale que $|\varepsilon_D - \mu| \gg kT$.
- Como la temperatura es muy baja se desprecia la promoción térmica de electrones de la banda de valencia a la banda de conducción: $p_V = 0$.
- ¿Valdrá la condición de no degeneración en la banda de conducción? ¿Será $\varepsilon_C - \mu \gg kT$? Recordemos que en ese caso podíamos aproximar la distribución de Fermi-Dirac por la de Maxwell-Boltzmann $f_{FD}(E, T) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \approx e^{-\beta(E-\mu)}$, ($E \geq \varepsilon_C$ para la banda de conducción) pues la exponencial en el denominador sería mucho mayor que 1. Para ver si en este caso esta condición es válida, podemos adoptar una postura conservadora. Recordemos que a $T=0$ K la banda donadora está completamente ocupada (pues los electrones sobrantes de las impurezas están débilmente ligados a ellas). Según comentamos en clase, el potencial químico a esa temperatura (coincidente con la energía de Fermi) debería estar por encima de la energía del nivel donador, y al aumentar su temperatura su valor debe descender en consonancia con el despoblamiento de la banda donora (sus electrones pasan a la banda de conducción); esperamos que el potencial químico a la temperatura del enunciado ($T=4$ K) sea inferior y cercano al valor que tendría a temperatura nula en el medio de la banda de conducción y la banda dadora, según se esquematiza en la Figura 1 (considero que las bandas de conducción y de valencia tienen forma parabólica pues el tensor de masa efectiva es isótropo).

Así, de forma conservadora, podemos estimar el error cometido si consideramos que el potencial químico a 4K está en el medio entre la banda de conducción y donadora (su valor real a esa temperatura es menor según comentamos)

$$\beta(\varepsilon_C - \mu) \gtrsim \beta \frac{(\varepsilon_C - \varepsilon_D)}{2} = \frac{I_D}{2kT} = \frac{1 \text{ meV}}{2 * 8,62 * 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}} * 4\text{K}} = 1,45 = x$$

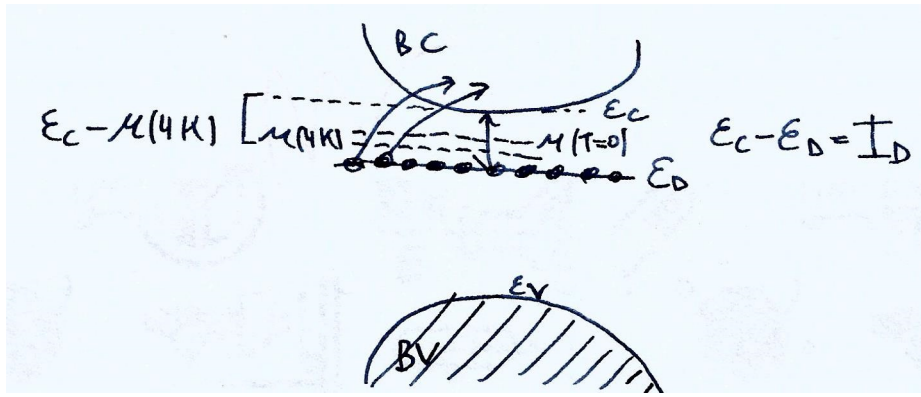


Figura 1

Se tiene entonces que $\frac{1}{e^x+1} = 0,19$ y $e^{-x} = 0,23$, por lo que resulta sensato utilizar la condición de no degeneración, pudiendo escribir así:

$$n_C(T) = N_C(T)e^{-\beta(\epsilon_C - \mu)}, \quad (1)$$

donde $N_C(T) = \int_{\epsilon_C}^{\infty} g_C(E)e^{-\beta(E - \epsilon_C)} dE$ es la densidad efectiva de portadores que se calcula como vimos en el problema 1.

Habiendo hecho estas observaciones podemos comenzar a resolver el problema. Uno de los primeros pasos siempre consiste en plantear una ecuación de balance de carga o de electroneutralidad. En base a los comentarios anteriores, a baja temperatura estará dada por:

$$n_C = p_V + N_D^+ = N_D - n_D = N_D - \frac{N_D}{\frac{1}{2}e^{\beta(\epsilon_D - \mu)} + 1} \Rightarrow$$

$$n_C = \frac{N_D}{1 + 2e^{-\beta(\epsilon_D - \mu)}}. \quad (2)$$

Para hallar n_C puede despejarse de (1) el potencial químico, $e^{\beta\mu} = \frac{n_C(T)}{N_C(T)} e^{\beta\epsilon_C}$, y reemplazarlo en (2), obteniendo:

$$n_C(T) = \frac{N_D}{1 + 2\frac{n_C(T)}{N_C(T)} e^{\beta(\epsilon_C - \epsilon_D)}} = \frac{N_D}{1 + 2\frac{n_C(T)}{N_C(T)} e^{\beta I_D}} \Rightarrow$$

$$n_C^2 + \frac{N_C(T)}{2} e^{-\beta I_D} n_C - \frac{N_C(T) N_D}{2} e^{-\beta I_D} = 0,$$

una ecuación cuadrática de la que resulta:

$$n_C = \frac{N_C(T)}{4} e^{-\beta I_D} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{N_C(T)}{2} e^{-\beta I_D}\right)^2 + 4 \left(\frac{N_C(T)}{2} e^{-\beta I_D}\right) N_D}$$

$$n_C = \frac{N_C(T)}{4} e^{-\beta I_D} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{8N_D}{N_C(T)} e^{\beta I_D}}\right). \quad (3)$$

Para simplificar (3), puede notarse que a la temperatura del enunciado (muy baja T):

$$\begin{aligned}
N_C(T = 4K) &= \frac{1}{4} \left(\frac{2m_C^* kT}{\pi \hbar^3} \right)^{3/2} = 2,5 * 10^{19} \text{ cm}^{-3} \left(\frac{T}{300K} \right)^{3/2} \left(\frac{m_C^*}{m} \right)^{3/2} = 3,84 * 10^{13} \text{ cm}^{-3} \\
e^{\frac{I_D}{kT}} &= e^{\frac{I_D}{k4K}} = 18,18 \\
N_D &= 10^{13} \\
\frac{8N_D}{N_C(T = 4K)} e^{\beta I_D} &= 37,88 \gg 1,
\end{aligned}$$

lo cual implica que las unidades dentro y fuera de la raíz sean despreciables frente a este último término, resultando finalmente:

$$n_C(T = 4K) \approx \sqrt{\frac{N_C(T)N_D}{2}} e^{-\frac{I_D}{2kT}} = 3,2 * 10^{12} \text{ cm}^{-3}. \quad (4)$$

Reemplazando la expresión (4) en la (1), el potencial químico a muy baja temperatura toma la expresión:

$$e^{\beta\mu} = \frac{n_C(T)}{N_C(T)} e^{\beta\epsilon_C} \Rightarrow \mu(T = 4K) = \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{N_D}{2N_C(T)} \right) + \frac{\epsilon_C + \epsilon_D}{2} = -0,35 \text{ meV} + \frac{\epsilon_C + \epsilon_D}{2}, \quad (5)$$

y podemos notar que a T=0K se encuentra localizado justo en el medio de la brecha que existe entre el nivel dador y la banda de conducción, y a T=4K está un poco más por debajo de éste valor, pero no por debajo del nivel dador ϵ_D .

ii) En un caso general de conductancia mixta (portadores positivos o huecos y negativos o electrones), el coeficiente de Hall toma la forma:

$$R_H = \frac{1}{ce} \frac{p_V \mu_p^2 - n_C \mu_n^2}{(p_V \mu_p + n_C \mu_n)^2} \text{ (CGS)}, \quad (6)$$

donde μ es la movilidad del portador, cociente entre la velocidad de deriva promedio de éste y E campo eléctrico (longitudinal) aplicado. Como en este problema (pues la temperatura es muy baja) no hay promoción de electrones desde la banda de valencia hacia la de conducción, $p_V = 0$, por lo cual:

$$R_H = -\frac{1}{cen_C} = -2,12 * 10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ s}$$

Para llegar a ese resultado se usó que: $n_C(4K) = 3,24 * 10^{-12} \text{ cm}^{-3}$, $e = 4,85 * 10^{-10} \text{ statC}$ y que $c \approx 3 * 10^{10} \text{ cm/s}$.

El coeficiente Hall se usa para determinar experimentalmente la densidad de portadores y su carga.