

Estructura de la Materia 2

Primer Cuatrimestre - 2020

Guía 6 - Parte III

En esta última entrega les dejo algunas aclaraciones y/o sugerencias para abordar los ejercicios sobre los temas que no llegué a incluir en el video de ayer.

Ej. 4 Para completar el ejercicio, si introducimos las energías del *gap* y el valor de $k_B T = 25$ meV, nos quedan

$$\frac{N_c}{P_v} = e^{1 - \frac{\epsilon_g}{2k_B T}} \sim \begin{cases} 5 \times 10^{-9}, & \text{para } \epsilon_g = 1 \text{ meV} \\ 4 \times 10^{-1}, & \text{para } \epsilon_g = 0,1 \text{ meV.} \end{cases} \quad (1)$$

Por lo tanto, excepto en semiconductores con un *gap* muy chico, se requiere una diferencia de densidades de estados tan grande para romper la condición de no degeneración que, en general, no se da en los materiales. Por eso, esta condición termina dando siempre una buena aproximación.

Ej. 6/7 Ojo, en la guía **hay un error** en la expresión de E_n para el átomo hidrogenoide: debería decir $E_n = -Z^2 E_0/n^2$. Para encontrar la energía de los niveles de impurezas dadoras y los radios de los estados ligados vamos a hacer un paralelo con el átomo de hidrógeno donde reemplazamos:

- el continuo de estados no ligados de electrones por la banda de conducción
- la masa m por la masa efectiva m_c^* de la banda de conducción
- la interacción Coulombiana por su expresión considerando el apantallamiento debido a la constante dieléctrica

$$\frac{e^2}{r} \rightarrow \frac{e^2}{\epsilon r}$$

Vamos a considerar que la carga del núcleo de la impureza ionizada corresponde a $Z = 1$, debido que solo un electrón se separa, rompiendo la neutralidad del átomo. Por lo tanto, las demás capas electrónicas apantallan el resto de la carga *real* del núcleo. Esto da un Hamiltoniano efectivo

$$H^* = \epsilon_c + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_c^* r^2} - \frac{e^2}{\epsilon r} = \epsilon_c + \frac{m}{m_c^*} \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{m_c^*}{m \epsilon} \frac{e^2}{r} \right] \quad (2)$$

La expresión entre corchetes es la de un átomo hidrogenoide con un núcleo de carga efectiva $Z^* e = \frac{m_c^* e}{m \epsilon}$, por lo tanto, sus autovalores serán $E_n = -Z^{*2} E_0/n^2$ y sus radios $r_n = a_0 n^2 / Z^*$. Tomando el nivel fundamental ($n = 1$) y las demás constantes en la expresión de H^* , nos queda que la energía fundamental de la impureza será

$$\epsilon_d = \epsilon_c - \frac{m}{m_c^*} \left(\frac{m_c^*}{m \epsilon} \right)^2 E_0 = \epsilon_c - \frac{m_c^*}{m \epsilon^2} E_0. \quad (3)$$

Para saber cuando los orbitales de impurezas se superponen, podemos preguntarnos qué densidad de impurezas haría que sus orbitales llenaran todo el volumen. Vale aclarar que en un material real no tienen por qué estar distribuidas uniformemente ni valdría el modelo del átomo hidrogenoide cerca de esta densidad. Por lo tanto, este cálculo daría una cierta cota superior de la densidad de impurezas para la cual vale el modelo. Ahora sí, asignando un volumen esférico por cada impureza, nos queda

$$N_d \sim \frac{1}{V} = \frac{3}{4\pi r^{*3}} = \frac{3 Z^{*3}}{4\pi a_0^3} = \left(\frac{m_c^*}{m \epsilon} \right)^3 \times 1,6 \text{ \AA}^{-3} \quad (4)$$

Ej. 8 Este ejercicio nos guía para encontrar las densidades de portadores y el potencial químico en el caso en el que las impurezas se encuentran completamente ionizadas. Parte de estos cálculos fueron presentados en la teórica (Clase 13), donde el desarrollo se hizo (con mayor detalle) para el caso de las impurezas dadoras. Quería aclarar algunos puntos con respecto a las aceptoras:

- Decimos que aportan huecos, pero ¿cómo? La impureza no trae de por sí un hueco orbitando entre sus capas de electrones. Lo que ocurre es que el nivel de las impurezas aceptoras se comporta como un posible estado excitado de los electrones de la banda de valencia de energía $\epsilon_a - \epsilon_v \ll \epsilon_g$, es decir, mucho menor que la banda de conducción. Por lo tanto, un electrón puede ser excitado térmicamente con mucha más facilidad, dejando un hueco en la banda de valencia, pero sin aportar un electrón a la banda de conducción.
- La degeneración de las impurezas dadoras ocupadas era doble por sus dos posibles estados de espín. Esto se debe a que la impureza dadora tiene un número impar de electrones en su capa externa, por lo tanto el electrón *de más* queda desapareado. Una impureza aceptora también tiene un número impar de electrones y, por lo tanto, en su estado no excitado tendrá una degeneración doble de espín. En cambio, cuando un electrón salta de la banda de valencia al estado de impureza, esta pasa a tener un número par de electrones y ya no hay degeneración de espín. Desde el punto de vista de los huecos, cuando el hueco está en la impureza, es decir, en el estado no excitado, hay degeneración es doble, mientras que cuando el hueco pasa a la banda de valencia, al estado excitado, no hay más degeneración. Por eso se mantiene la simetría con el caso de los electrones de las impurezas donoras con respecto a la ocupación en la banda de conducción.

Ej. 9 Este ejercicio apunta a analizar el régimen de ionización en un semiconductor dopado con impurezas dadoras. Es decir, queremos conocer la densidad de portadores cuando la temperatura es suficientemente baja como para que

- las impurezas no estén completamente ionizadas, $n_d > 0$
- los huecos generados en la banda de valencia sean despreciables, $p_v \simeq 0$ (por eso no importan las propiedades de la banda de valencia)

Por lo tanto ahora el balance de carga nos queda $n_c + n_d \simeq N_d$. Reemplazando n_c y n_d por sus expresiones en función de la temperatura y el potencial químico puede despejarse $\mu(T)$.