Estructura de la Materia 2

Clase 11 - Teoría

Docentes

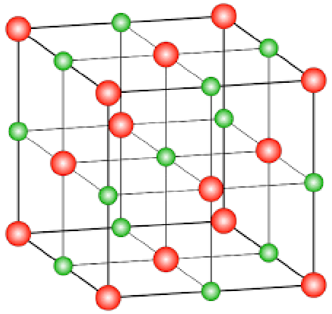
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Tomás Bortolin, Agustina Casafuz

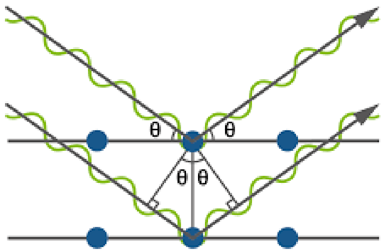
Departamento de Física, FCEN, UBA – 2do Cuatrimestre, 2020

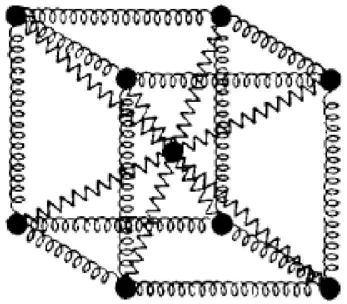
Web: http://materias.df.uba.ar/edlm2a2020c2

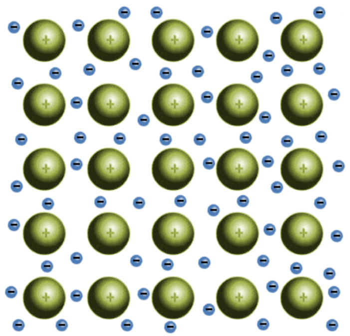
Programa de la materia

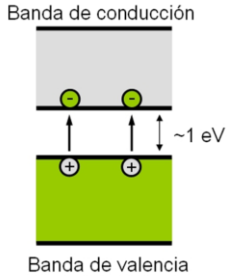
- Red cristalina, red recíproca y difracción de rayos X
- Clasificación de los sólidos y energía de cohesión
- Vibraciones, fonones y propiedades térmicas
- Electrones en sólidos
- Semiconductores y juntura semiconductora
- Magnetismo en sólidos
- Introducción a los aisladores topológicos

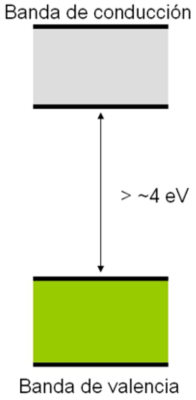


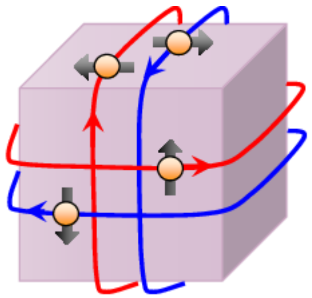








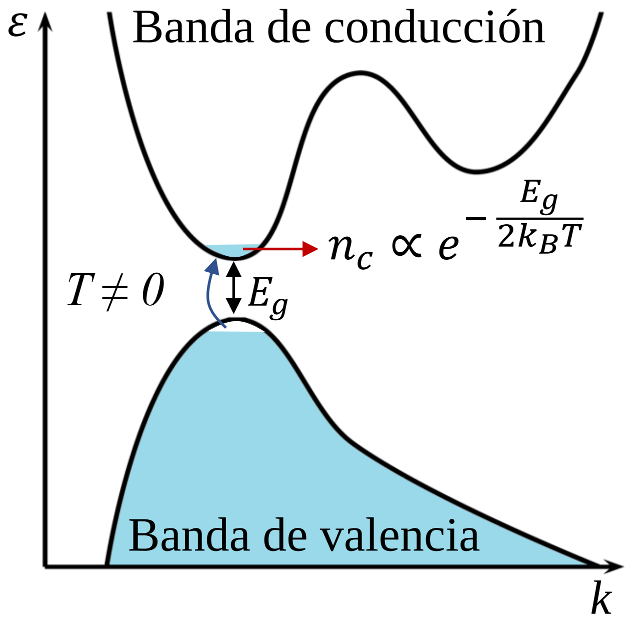




Semiconductores

Semiconductor y aislante

Si el sólido presenta un ancho de banda prohibida (de energía $E_g > 0$) entre el estado ocupado más energético y el primer estado disponible, entonces es un aislante si $E_g > 4$ eV, y un semiconductor si $E_g < 4$ eV.



Compuesto	E_g (eV)	Compuesto	E_g	Compuesto	E_g	Compuesto	E_g	Compuesto	E_g
C (IV)	5.47	Te (VI)	0.33	AlSb (III-V)	1.6	InAs (III-V)	0.36	ZnS (II-VI)	3.54
Si (IV)	1.12	BN (III-V)	6.0	GaN (III-V)	3.44	InSb (III-V)	0.17	ZnTe(II-VI)	2.25
Ge (IV)	0.67	BP (III-V)	2.0	GaP (III-V)	2.26	CdSe (II-VI)	1.74	PbSe (IV-VI)	0.27
Sn (IV)	0.1	BAs (III-V)	1.14	GaAs (III-V)	1.43	CdS (II-VI)	2.42	PbS (IV-VI)	0.37
S (VI)	2.6	AlN (III-V)	6.28	GaSb (III-V)	0.73	CdTe (II-VI)	1.49	PbTe (IV-VI)	0.32
Se (VI)	1.74	AlP (III-V)	2.45	InN (III-V)	0.7	ZnO (II-VI)	3.37	SnS (IV-VI)	1.0
Se (VI)	2.05	AlAs (III-V)	2.16	InP (III-V)	1.35	ZnSe (II-VI)	2.7	SnTe (IV-VI)	0.18

$$\underline{E_g = 4eV}: e^{-\frac{E_g}{2k_BT_a}} \approx 10^{-35}$$

$\sim 25\ meV$

$$\underline{E_g = 0.2eV}: e^{-\frac{E_g}{2k_BT_a}} \approx 10^{-2}$$

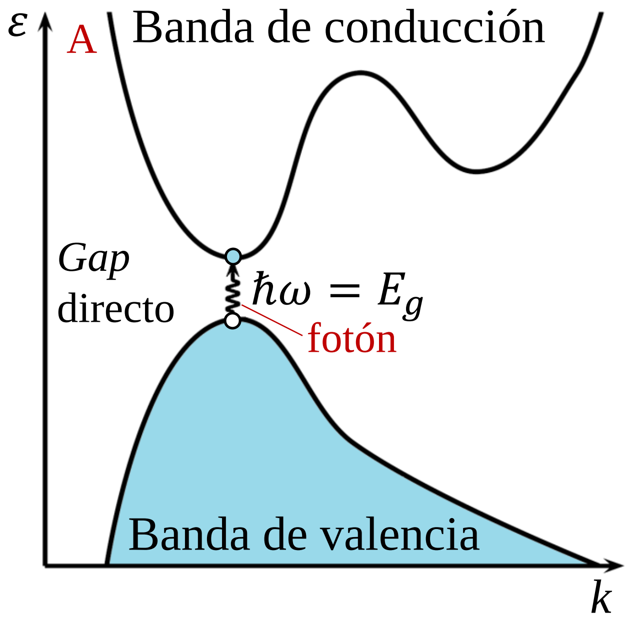
¿Qué sucede con la conductividad al aumentar T? $\longrightarrow$ $\sigma_{BC} = \dfrac{e^2 n_c \tau_c}{m_c}$

Si bien τ_c disminuye al aumentar T, n_c aumenta mucho más rápido, por lo que la conductividad crece fuertemente con T.

Semiconductores

<u>Banda prohibida directa e indirecta</u> (*gap* directo e indirecto)

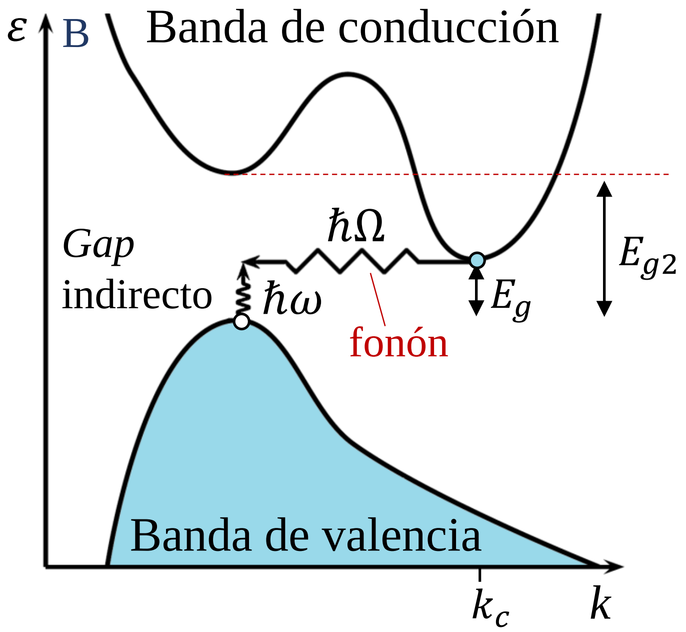
Si el máximo de la BV y el mínimo de la BC ocurren a igual $\bar{k}$, la banda prohibida se dice que es directa, en caso contrario, se dice que es indirecta.



$$k_{fotón} = \frac{2\pi}{\lambda} \ll 1ZB$$

10^3-10^4 Å

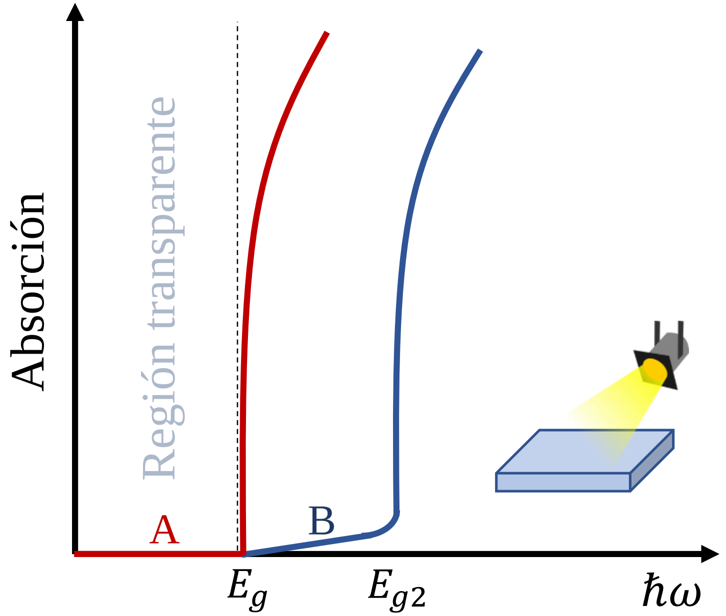
→ La transición es (casi) vertical



$$\bar{k}_{fotón} = \bar{k}_c + \bar{k}_{fonón} \approx 0$$

$\hbar\Omega \sim 10^{-2}\ eV$ → $\hbar\omega \approx E_g$

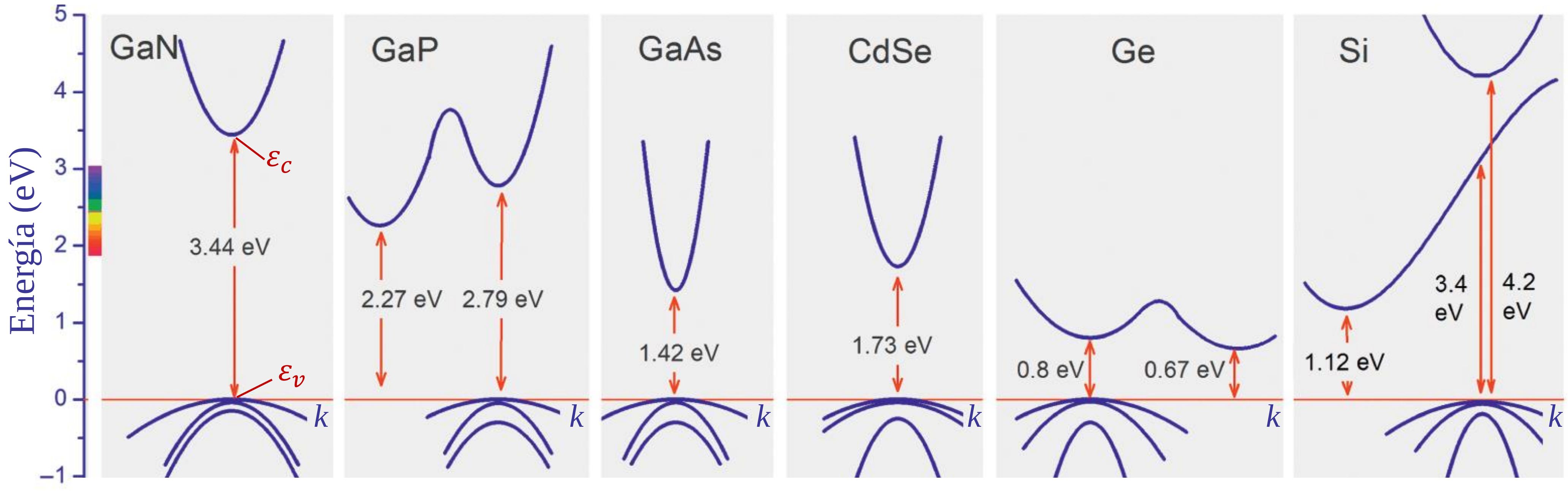
Un fonón es una “fuente de momento” de baja energía.



Si las energías del rango visible (1.6 - 3.2 eV; 380 - 750 nm) son menores a la del *gap*, entonces el material es transparente!

Semiconductores

Diagrama de bandas de algunos semiconductores



Aproximación para $\varepsilon(\bar{k})$

Real y simétrico

$$\underbrace{\left[\overleftrightarrow{M}^{-1}\right]_{ij}} = \pm \frac{\partial^2 \varepsilon(\bar{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$

+ (Fondo BC: e^-)
− (Tope BV: h^+)

En torno a ε_c y ε_v

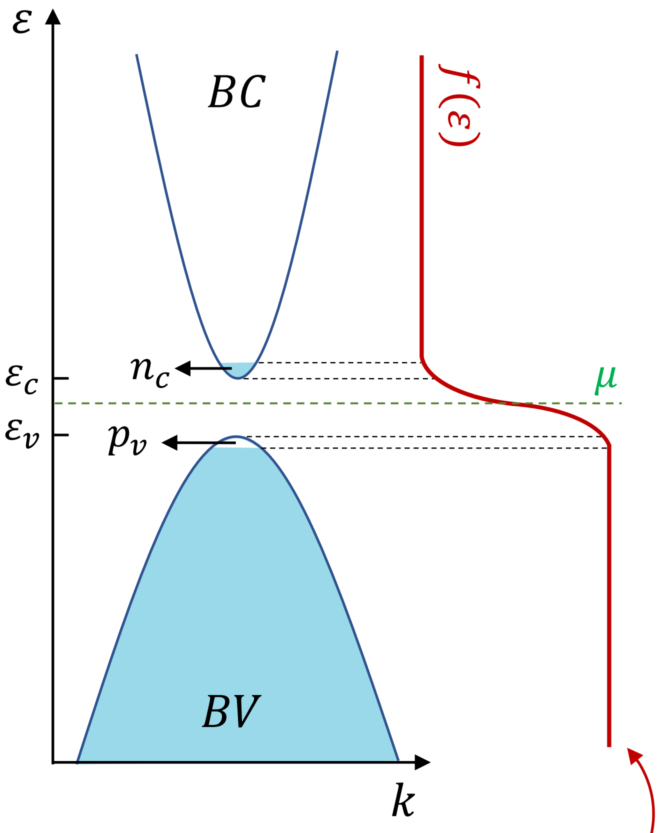
$$\begin{cases} \varepsilon(\bar{k}) = \varepsilon_c + \dfrac{\hbar^2}{2}\displaystyle\sum_{ij} k_i\left[\overleftrightarrow{M}^{-1}\right]_{ij}k_j = \varepsilon_c + \hbar^2\left(\dfrac{k_1^2}{2m_1} + \dfrac{k_2^2}{2m_2} + \dfrac{k_3^2}{2m_3}\right) \\ \varepsilon(\bar{k}) = \varepsilon_v - \dfrac{\hbar^2}{2}\displaystyle\sum_{ij} k_i\left[\overleftrightarrow{M}^{-1}\right]_{ij}k_j = \varepsilon_v - \hbar^2\left(\dfrac{k_1^2}{2m_1} + \dfrac{k_2^2}{2m_2} + \dfrac{k_3^2}{2m_3}\right) \end{cases}$$

Tomando ejes principales ortogonales

Semiconductores

Densidad de portadores en equilibrio térmico

Queremos calcular $n_c(T)$ (N° de e^- en la BC por unidad de V) y $p_v(T)$ (N° de h^+ en la BV por unidad de V).



$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT} + 1}$$

$$\begin{cases} n_c(T) = \displaystyle\int_{\varepsilon_c}^{\infty} f(\varepsilon) g_c(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT} + 1} g_c(\varepsilon) d\varepsilon \\ p_v(T) = \displaystyle\int_{-\infty}^{\varepsilon_v} \big(1 - f(\varepsilon)\big) g_v(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} \frac{1}{e^{(\mu-\varepsilon)/k_BT} + 1} g_v(\varepsilon) d\varepsilon \end{cases}$$

$$\begin{cases} \varepsilon_c - \mu \gg k_BT \\ \mu - \varepsilon_v \gg k_BT \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} \dfrac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT} + 1} \approx e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_BT}}, & \varepsilon > \varepsilon_c \\ \dfrac{1}{e^{(\mu-\varepsilon)/k_BT} + 1} \approx e^{-\frac{\mu-\varepsilon}{k_BT}}, & \varepsilon < \varepsilon_v \end{cases}$$

(Condición de no-degeneración)

$$\longrightarrow \begin{cases} n_c(T) = \left[\displaystyle\int_{\varepsilon_c}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon-\varepsilon_c}{k_BT}} g_c(\varepsilon) d\varepsilon\right] e^{-\frac{\varepsilon_c-\mu}{k_BT}} = \boxed{N_c(T) e^{-\frac{\varepsilon_c-\mu}{k_BT}}} \\ p_v(T) = \left[\displaystyle\int_{-\infty}^{\varepsilon_v} e^{-\frac{\varepsilon_v-\varepsilon}{k_BT}} g_v(\varepsilon) d\varepsilon\right] e^{-\frac{\mu-\varepsilon_v}{k_BT}} = \boxed{P_v(T) e^{-\frac{\mu-\varepsilon_v}{k_BT}}} \end{cases}$$

Semiconductores

Densidad de portadores en equilibrio térmico

$$\begin{cases} n_c(T) = N_c(T)e^{-\frac{\varepsilon_c-\mu}{k_BT}} \\ p_v(T) = P_v(T)e^{-\frac{\mu-\varepsilon_v}{k_BT}} \end{cases}$$

$$\begin{cases} N_c(T) = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon-\varepsilon_c}{k_BT}} g_c(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{1}{4}\left(\frac{2m_ck_BT}{\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \\ P_v(T) = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} e^{-\frac{\varepsilon_v-\varepsilon}{k_BT}} g_v(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{1}{4}\left(\frac{2m_vk_BT}{\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \end{cases}$$

$$\left(g_{c,v}(\varepsilon) = \frac{m_{c,v}^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2|\varepsilon-\varepsilon_{c,v}|}\right)$$

Aprox. cuadrática para $\varepsilon(\bar{k})$

Ley de acción de masas

$$\boxed{n_cp_v = N_cP_ve^{-\frac{\varepsilon_c-\varepsilon_v}{k_BT}} = N_cP_ve^{-\frac{E_g}{k_BT}}}$$

$$\xrightarrow{n_i = \sqrt{n_cp_v}} n_i(T) = [N_cP_v]^{1/2}e^{-\frac{E_g}{2k_BT}} = \frac{1}{4}\left(\frac{2k_BT}{\pi\hbar^2}\right)^{3/2}(m_cm_v)^{3/4}e^{-\frac{E_g}{2k_BT}}$$

$= n_c = p_v$ (semiconductor puro)

Intrínseco

$$n_c = p_v \rightarrow N_ce^{-\frac{\varepsilon_c-\mu}{k_BT}} = P_ve^{-\frac{\mu-\varepsilon_v}{k_BT}} \rightarrow \ln N_c - \frac{\varepsilon_c-\mu}{k_BT} = \ln P_v - \frac{\mu-\varepsilon_v}{k_BT} \rightarrow \frac{2\mu - \overbrace{(\varepsilon_v+\varepsilon_c)}^{= E_g + 2\varepsilon_v}}{k_BT} = \ln\left(\frac{P_v}{N_c}\right)$$

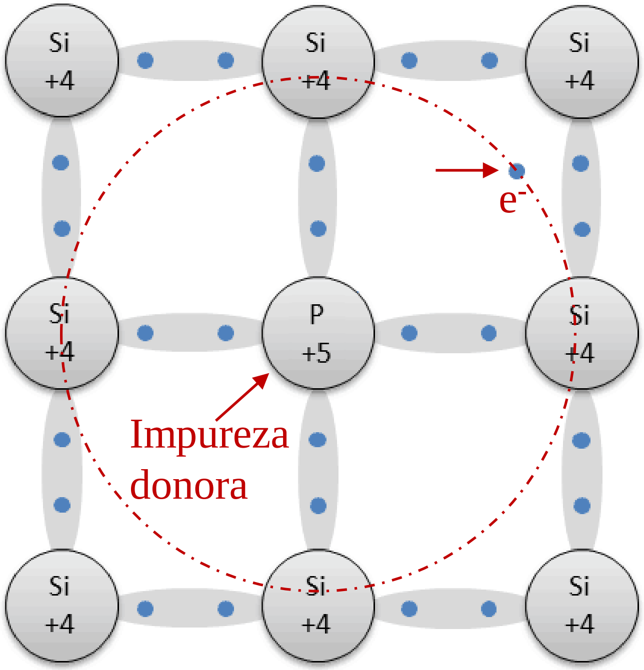
$$\rightarrow 2\mu - E_g - 2\varepsilon_v = k_BT\ln\left(\frac{P_v}{N_c}\right) \rightarrow \mu = \mu_i = \varepsilon_v + \frac{E_g}{2} + \frac{1}{2}k_BT\ln\left(\frac{P_v}{N_c}\right) = \varepsilon_v + \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4}k_BT\ln\left(\frac{m_v}{m_c}\right)$$

A $T = 0$ el potencial químico queda en el medio del *gap*, y si $m_v = m_c$ resulta independiente de T.

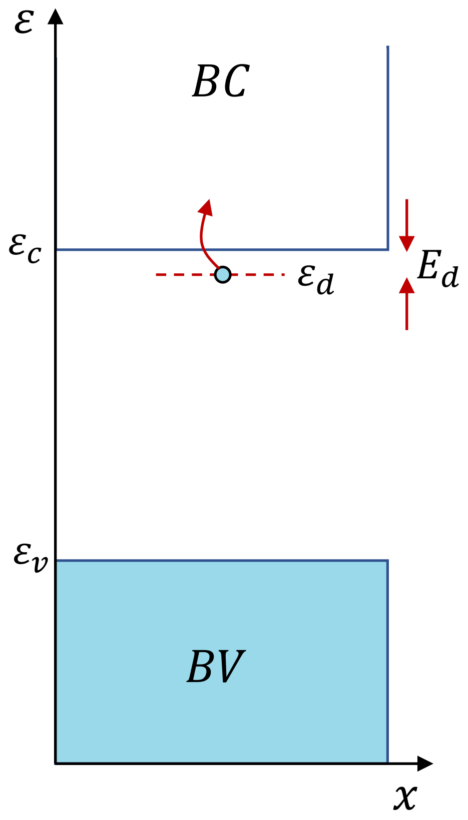
Semiconductor extrínseco

Semiconductor extrínseco

Dopamos al semiconductor con una baja concentración de impurezas para controlar sus propiedades eléctricas y ópticas.



Dopamos al Si(IV) con P(V), lo que resulta en un exceso de carga +e en el núcleo, y un electrón adicional.



¿A dónde va el e⁻ adicional?

Tratamos al problema en analogía con el átomo de H, en donde tenemos la interacción entre un e⁻ y un protón (carga +e), con la diferencia de que aquí el entorno no es el vacío, sino silicio sólido.

$$V = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r};\ m_e \rightarrow V = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \varepsilon_r r};\ m_c$$

Cte. dieléctrica del Si

E. de ligadura del e⁻

$$E_H = \frac{m_e e^2}{8\varepsilon_0^2 h^2} = 13.6\ eV \rightarrow E_d = \frac{m_c}{m_e}\frac{E_H}{\varepsilon_r^2} \sim 10^{-2} eV$$

Radio de la órbita del e⁻

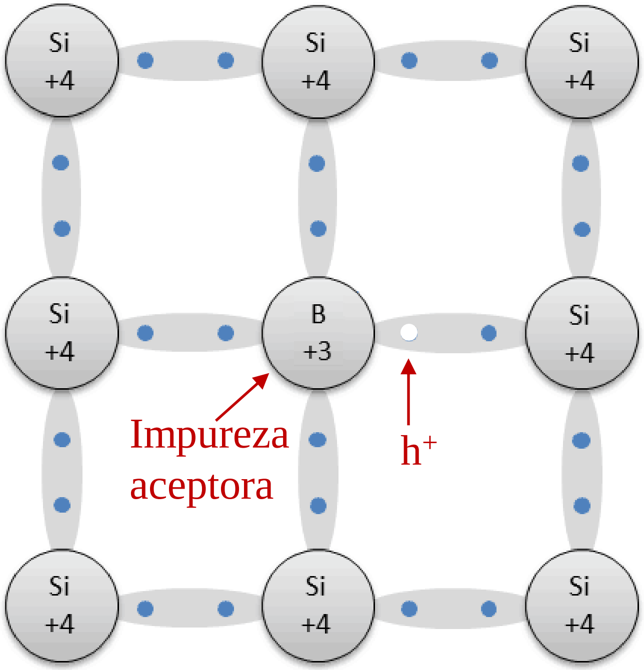
$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} = 0.5\ \text{Å} \rightarrow a_d = \frac{m_e}{m_c}\varepsilon_r a_0 \sim 10^2\ \text{Å}$$

El e⁻ queda muy débilmente ligado, y a T_a tiene alta probabilidad de ser “donado” a la BC. Hablamos entonces de estados donores de e⁻.

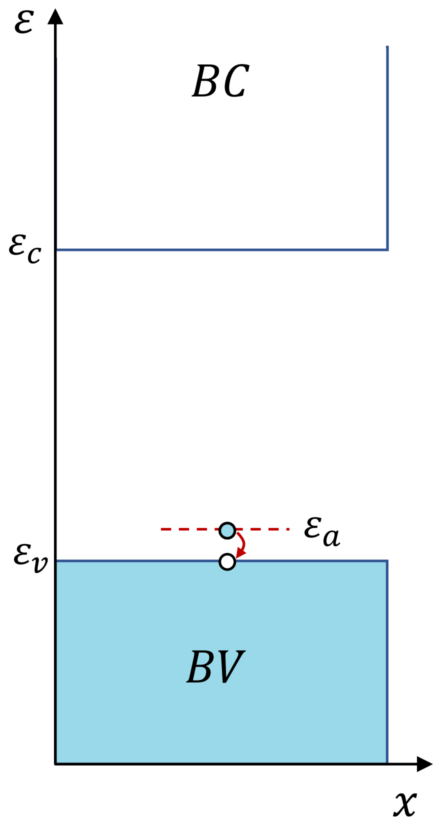
Semiconductor extrínseco

Semiconductor extrínseco

Dopamos al semiconductor con una baja concentración de impurezas para controlar sus propiedades eléctricas y ópticas.



Dopamos al Si(IV) con B(III), lo que resulta en una disminución de carga -e en el núcleo, y un electrón menos.



¿A dónde va el hueco h^+?

El h^+ queda muy débilmente ligado, y a T_a tiene alta probabilidad de aceptar un e^- de la BV. Hablamos entonces de estados aceptores de e^-.

Algunas generalidades

- Cuando dopamos con impureza donora, hablamos de dopaje tipo *n* (por negativo), y cuando es con impureza aceptora, dopaje tipo *p* (por positivo).

- Una dopaje tan bajo como 1 en 10^8, puede disminuir la resistividad en 3 órdenes de magnitud.

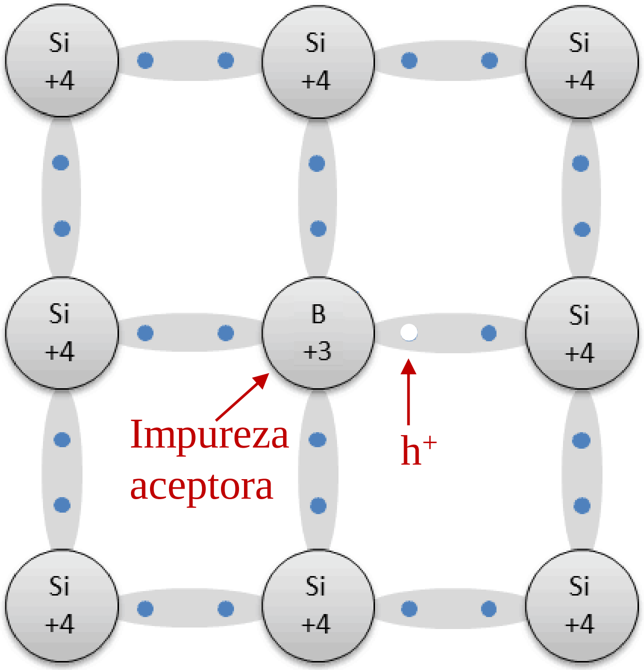
- Si el dopaje es muy alto, las impurezas "se ven" y se forman bandas de impurezas.

- Si tenemos ambos tipos de impurezas, hablamos de un semiconductor compensado.

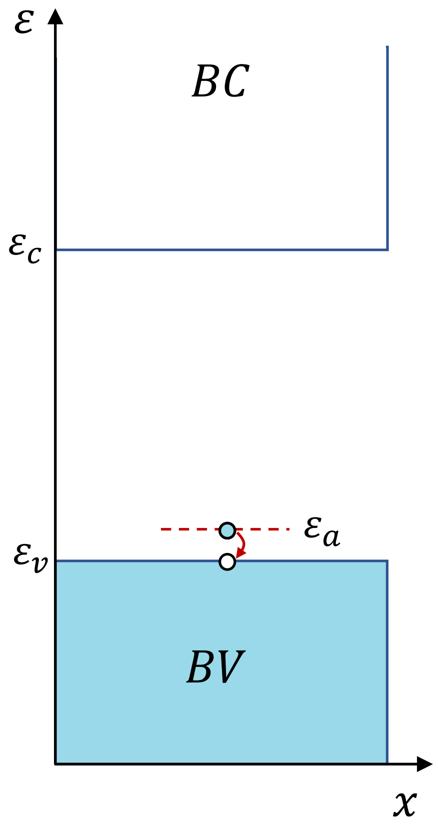
Semiconductor extrínseco

<u>Semiconductor extrínseco</u>

Dopamos al semiconductor con una baja concentración de impurezas para controlar sus propiedades eléctricas y ópticas.

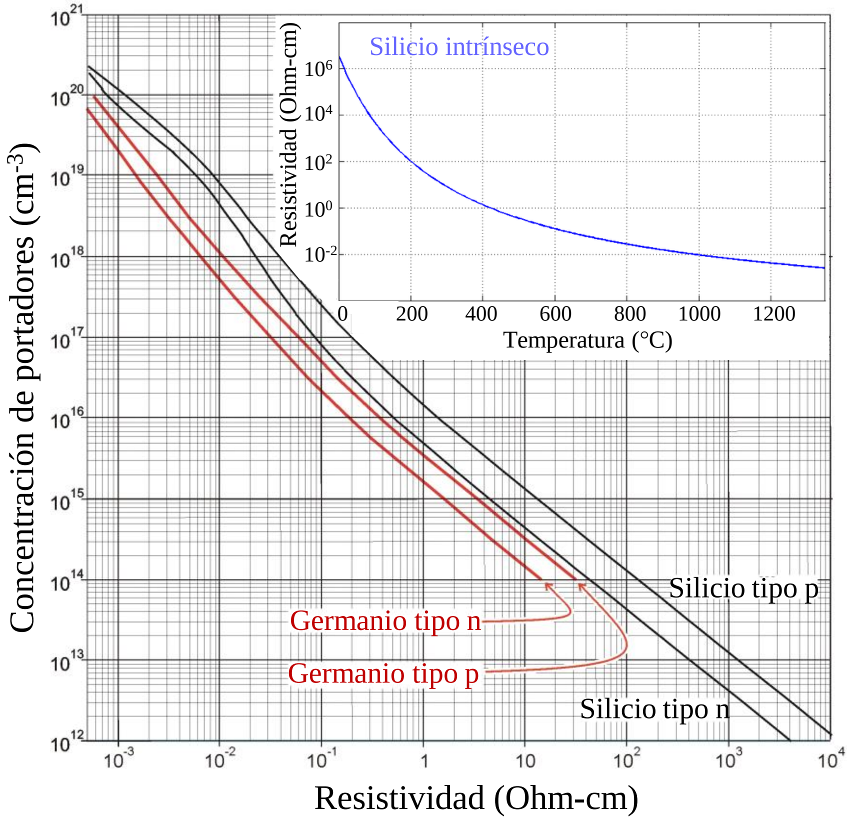


Dopamos al Si(IV) con B(III), lo que resulta en una disminución de carga -e en el núcleo, y un electrón menos.



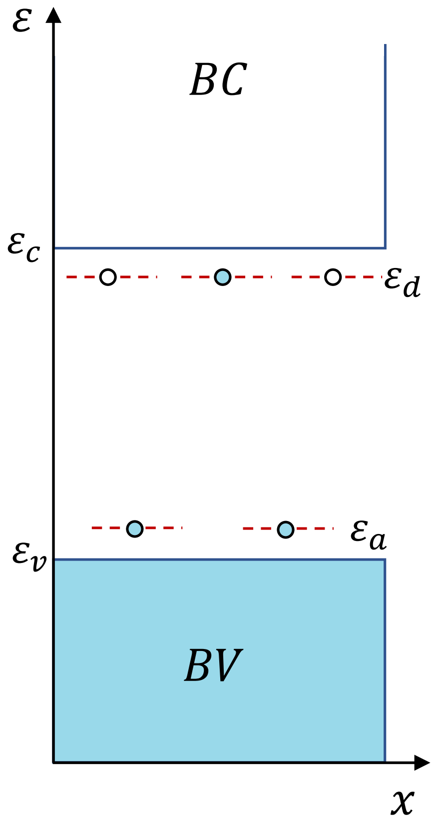
¿A dónde va el hueco h^+?

El h^+ queda muy débilmente ligado, y a T_a tiene alta probabilidad de aceptar un e^- de la BV. Hablamos entonces de estados aceptores de e^-.



Semiconductor extrínseco

Población de niveles de impureza



A T = 0, los e⁻ del nivel donor “caen” al nivel aceptor.

Ocupación media de e⁻ en un sistema en equilibrio térmico: $< n >= \dfrac{\sum_j N_j e^{-\beta(E_j-\mu N_j)}}{\sum_j e^{-\beta(E_j-\mu N_j)}}$ (E_j y N_j son la energía y el N° de e⁻ en el estado j)

Degeneración de espín

Concentración de impurezas donoras

Impureza donora: $n_d = \left(\dfrac{0+2e^{-\beta(\varepsilon_d-\mu)}}{1+2e^{-\beta(\varepsilon_d-\mu)}}\right) N_d = \boxed{\dfrac{N_d}{\frac{1}{2}e^{\beta(\varepsilon_d-\mu)}+1}}$

N° de e⁻ en un nivel donor por unidad de volumen.

Análogamente, para una impureza aceptora: $\boxed{p_a = \dfrac{N_a}{\frac{1}{2}e^{\beta(\mu-\varepsilon_a)}+1}}$

N° de h⁺ en un nivel aceptor por unidad de volumen.

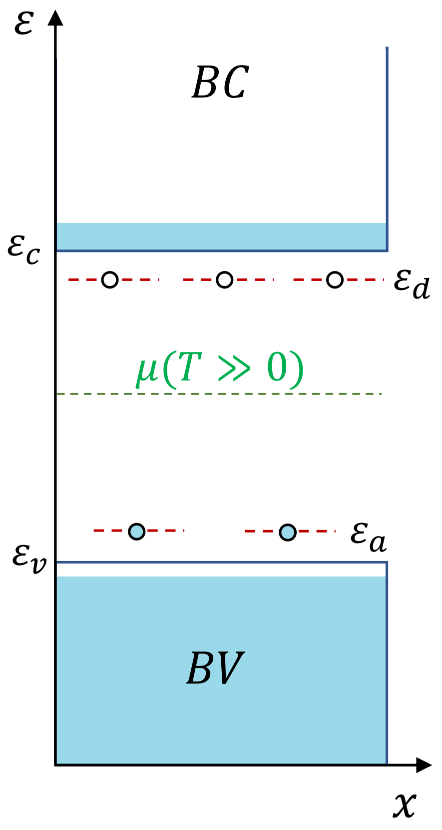
Balance de carga: $\boxed{n_c + n_d = N_d - N_a + p_v + p_a}$

Semiconductor extrínseco

<u>Densidad de portadores en equilibrio térmico</u>

$$\begin{bmatrix} n_c p_v = n_i^2 \\ n_c - p_v = \Delta n \end{bmatrix} \rightarrow n_c(n_c - \Delta n) = n_i^2 \rightarrow n_c^2 - n_c\Delta n - n_i^2 = 0 \rightarrow n_c = \frac{1}{2}\Delta n + \frac{1}{2}\left[(\Delta n)^2 + 4n_i^2\right]^{1/2}$$

$$\rightarrow p_v = -\frac{1}{2}\Delta n + \frac{1}{2}\left[(\Delta n)^2 + 4n_i^2\right]^{1/2}$$



$$\begin{cases} n_c = e^{\beta(\mu-\mu_i)} n_i \\ p_v = e^{-\beta(\mu-\mu_i)} n_i \end{cases} \rightarrow \Delta n = n_i\left(e^{\beta(\mu-\mu_i)} - e^{-\beta(\mu-\mu_i)}\right) \rightarrow \frac{\Delta n}{n_i} = 2\sinh(\beta(\mu - \mu_i))$$

$$\begin{cases} \varepsilon_d - \mu \gg k_B T \\ \mu - \varepsilon_a \gg k_B T \end{cases} \rightarrow \begin{cases} n_d = \dfrac{N_d}{\frac{1}{2} e^{\beta(\varepsilon_d - \mu)} + 1} \approx 0 \\ p_a = \dfrac{N_a}{\frac{1}{2} e^{\beta(\mu - \varepsilon_a)} + 1} \approx 0 \end{cases} \rightarrow \Delta n = n_c - p_v = N_d - N_a$$

Cond. de no-degeneración para niveles de impurezas

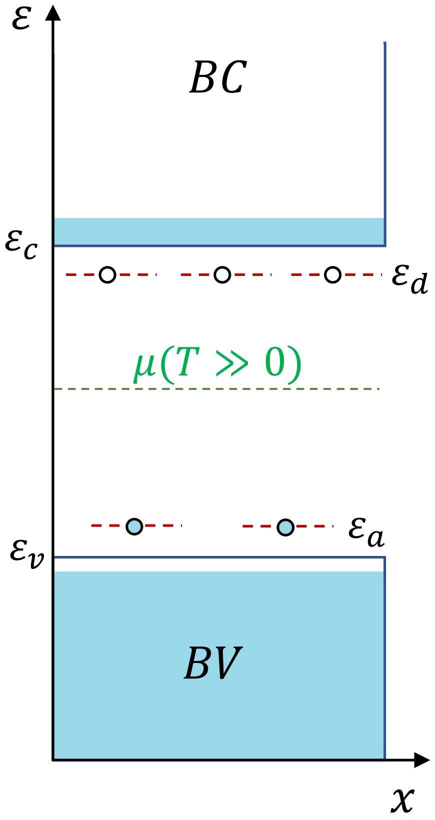
Impurezas totalmente ionizadas

$$\rightarrow \begin{Bmatrix} n_c \\ p_v \end{Bmatrix} = \pm\frac{1}{2}(N_d - N_a) + \frac{1}{2}\left[(N_d - N_a)^2 + 4n_i^2\right]^{\frac{1}{2}}; \quad \frac{N_d - N_a}{n_i} = 2\sinh(\beta(\mu - \mu_i))$$

Semiconductor extrínseco

Densidad de portadores en equilibrio térmico

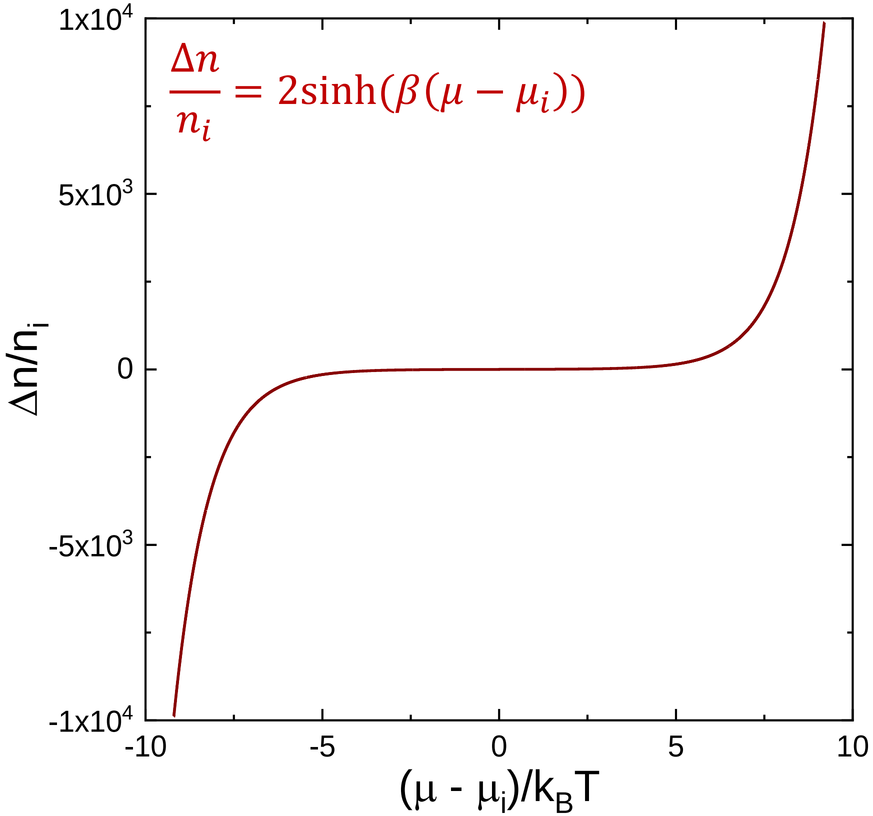
$$\begin{Bmatrix} n_c \\ p_v \end{Bmatrix} = \pm\frac{1}{2}\overbrace{(N_d - N_a)}^{\Delta n} + \frac{1}{2}\left[(N_d - N_a)^2 + 4n_i^2\right]^{\frac{1}{2}} \xrightarrow{n_i \gg |N_d - N_a|} \begin{Bmatrix} n_c \\ p_v \end{Bmatrix} \approx \pm\frac{1}{2}(N_d - N_a) + n_i$$



$$\xrightarrow{n_i \ll |N_d - N_a|}$$

$$\begin{cases} \varepsilon_d - \mu \gg k_B T \\ \mu - \varepsilon_a \gg k_B T \end{cases}$$

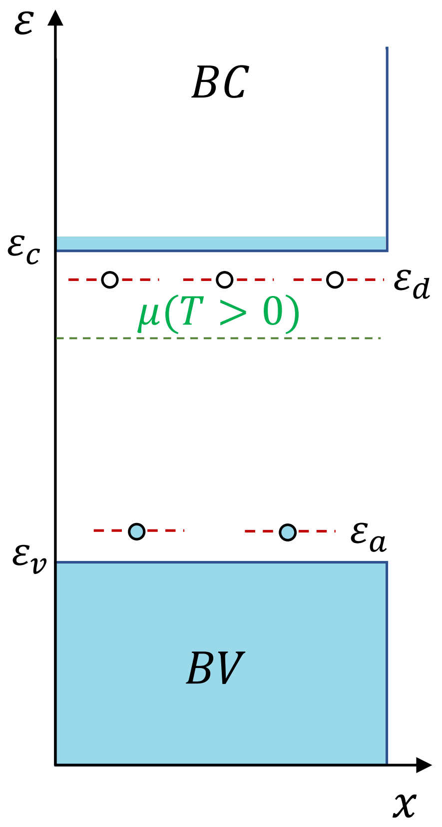
$$\begin{cases} N_d > N_a & \begin{cases} n_c \approx N_d - N_a \\ p_v \approx \dfrac{n_i^2}{N_d - N_a} \end{cases} \\ N_a > N_d & \begin{cases} n_c \approx \dfrac{n_i^2}{N_a - N_d} \\ p_v \approx N_a - N_d \end{cases} \end{cases}$$



Semiconductor extrínseco

Densidad de portadores en equilibrio térmico

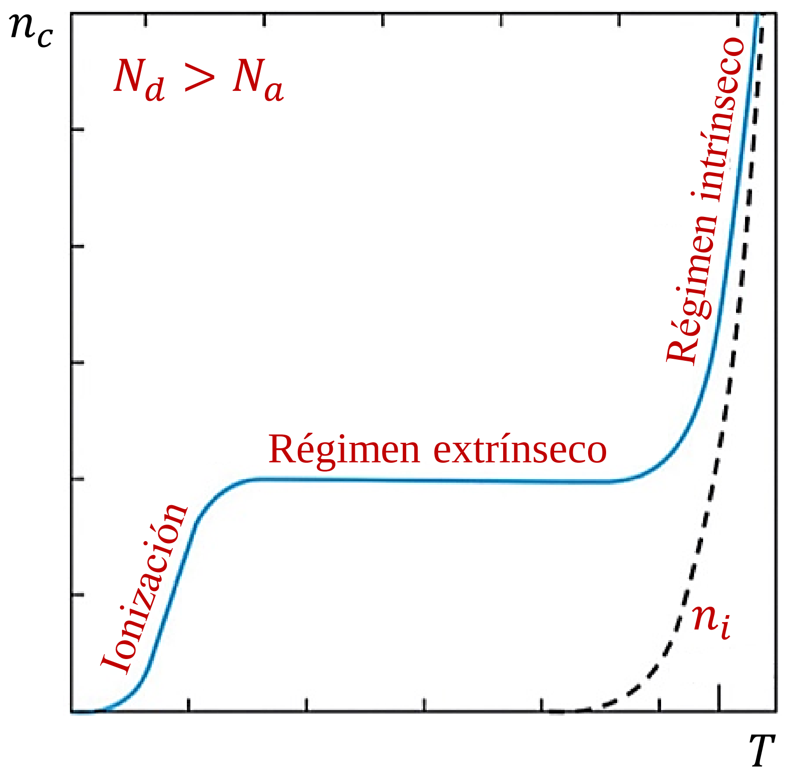
$$\begin{Bmatrix} n_c \\ p_v \end{Bmatrix} = \pm\frac{1}{2}\overbrace{(N_d - N_a)}^{\Delta n} + \frac{1}{2}\left[(N_d - N_a)^2 + 4n_i^2\right]^{\frac{1}{2}} \xrightarrow{\;n_i \gg |N_d - N_a|\;} \begin{Bmatrix} n_c \\ p_v \end{Bmatrix} \approx \pm\frac{1}{2}(N_d - N_a) + n_i$$



$$\xrightarrow[\left\{\begin{array}{l} \varepsilon_d - \mu \gg k_B T \\ \mu - \varepsilon_a \gg k_B T \end{array}\right.]{\;n_i \ll |N_d - N_a|\;} \left\{\begin{array}{ll} N_d > N_a & \left\{\begin{array}{l} n_c \approx N_d - N_a \\ p_v \approx \dfrac{n_i^2}{N_d - N_a} \end{array}\right. \\ N_a > N_d & \left\{\begin{array}{l} n_c \approx \dfrac{n_i^2}{N_a - N_d} \\ p_v \approx N_a - N_d \end{array}\right. \end{array}\right.$$

$N_d > N_a$: Los e⁻ son portadores mayoritarios y los h⁺ son portadores minoritarios (rég. ext.)

(Lo opuesto ocurre si $N_a > N_d$)



Resumen

- Semiconductor y aislante
- Semiconductor intrínseco
- Densidad de portadores en equilibrio térmico
- Semiconductor extrínseco y niveles de impureza
- Dependencia en T de la concentración de portadores mayoritarios