

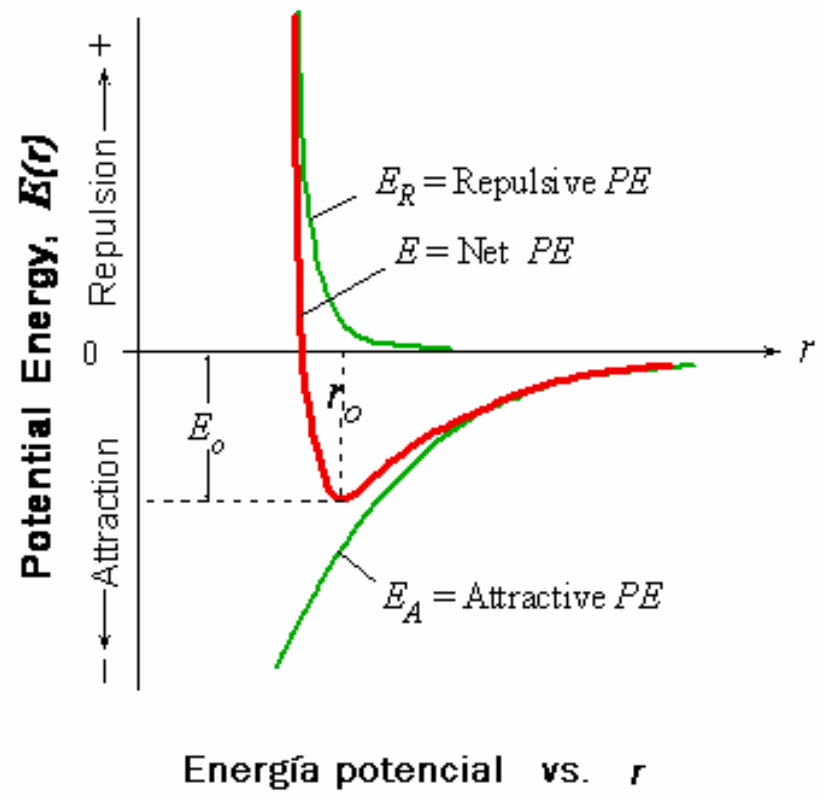
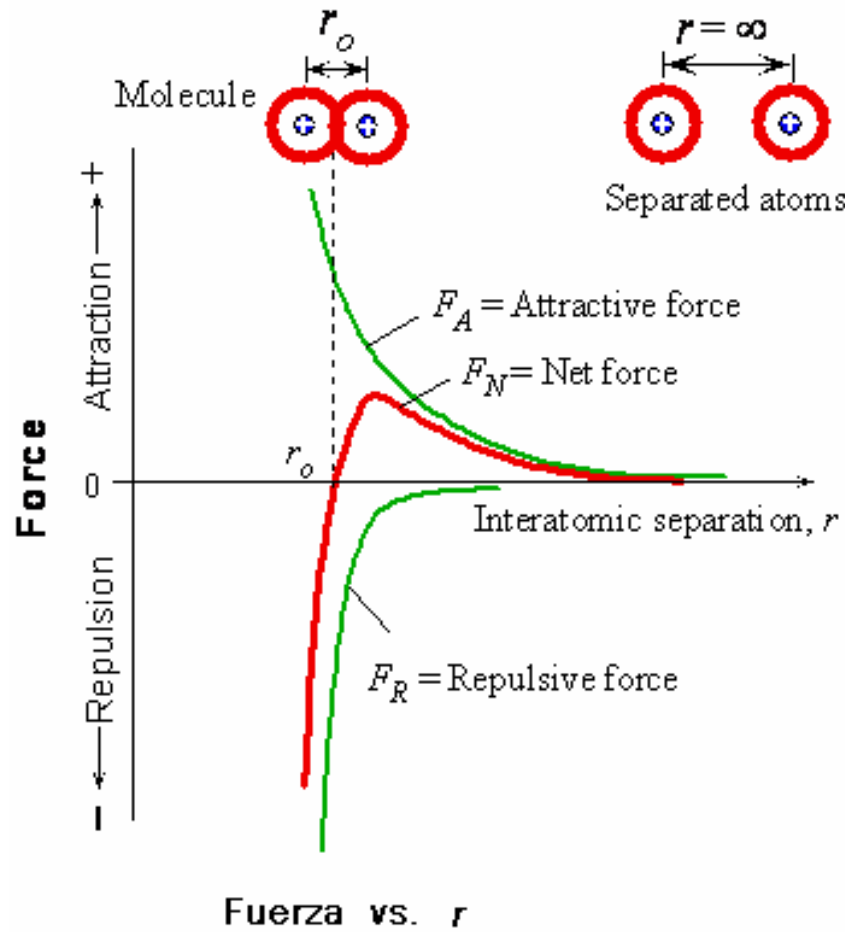
1.Introducción a la Física Electrónica

1.3 Bandas de energía y portadores de carga en semiconductores

- ☞ Bandas de conducción y de valencia y como se forman las bandas prohibidas.
- ☞ Concepto de dopado en semiconductores.
- ☞ Propiedades eléctricas de semiconductores

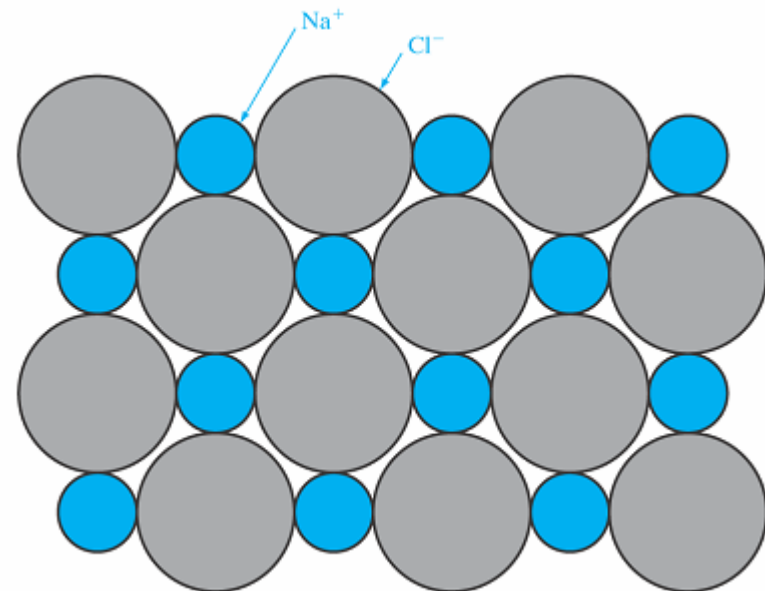
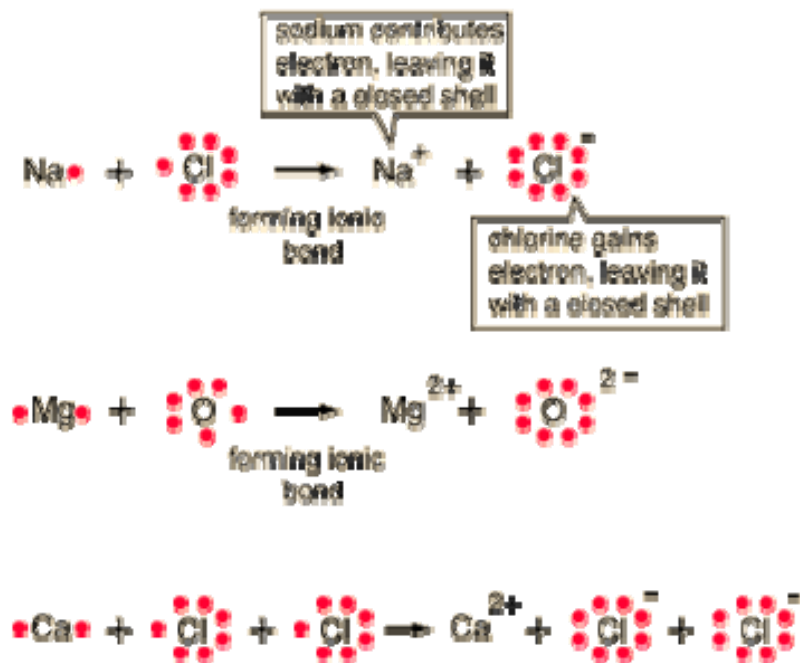
■ Fuerzas de enlace y bandas de energía en sólidos

- Las fuerzas de Coulomb son simples: atractiva entre electrones y el núcleos, repulsiva entre electrones y entre núcleos. La fuerza entre átomos se da por la suma de todas las fuerzas individuales, y el hecho de que los electrones están localizados en la región exterior del átomo y el núcleo en el centro.
- Cuando dos átomos están muy cerca, la fuerza entre ellos es siempre repulsiva, debido a que los electrones están en el exterior y los núcleos se rechazan.
- A menos que ambos átomos sean iones de la misma carga, las fuerzas entre los átomos es siempre atractiva a distancias internucleares r muy largas.
- Desde que la fuerza sea repulsiva a pequeñas r , y atractiva a grandes r , existe una distancia a la cual la fuerza es cero.



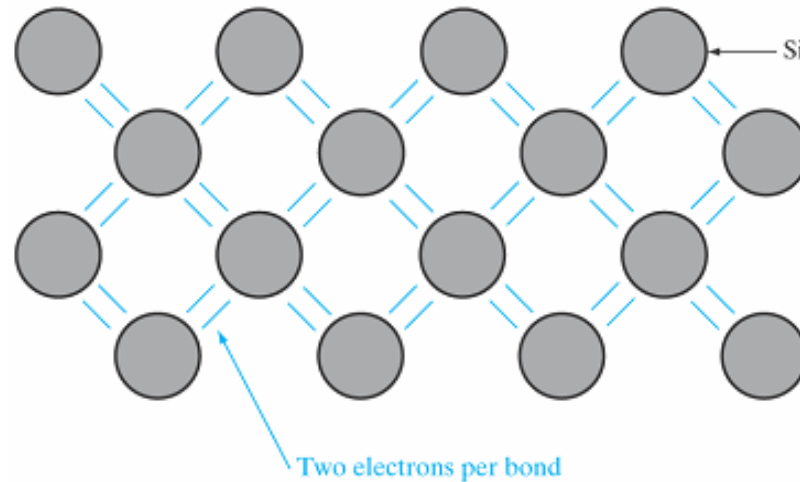
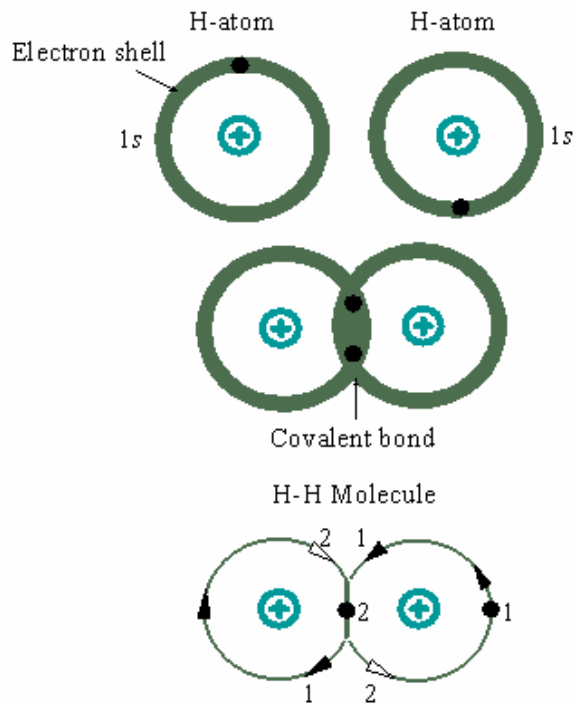
■ Enlace iónico

- Enlace cuando uno de los átomos es negativo (tiene un electrón extra) y otro átomo es positivo (ha perdido un electrón). Entonces existe una fuerte atracción directa Coulombica. Un ejemplo es el NaCl. En la molécula hay más electrones alrededor de Cl, forman Cl^- y menos alrededor de Na, formando Na^+ . Los enlaces iónicos son los más fuertes. En sólidos reales, el enlace iónico generalmente se combina con un enlace covalente.

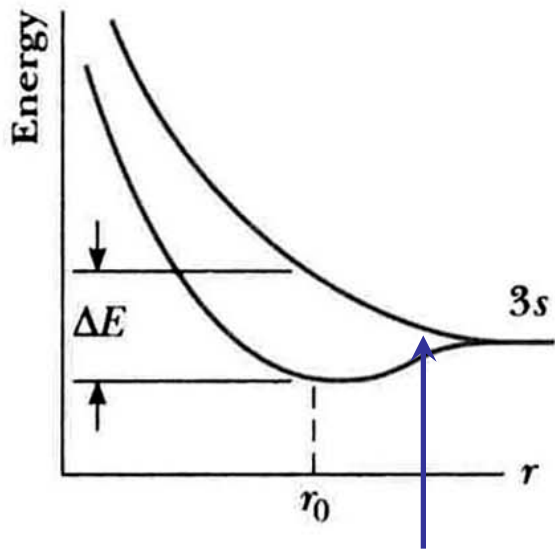


■ Enlace Covalente

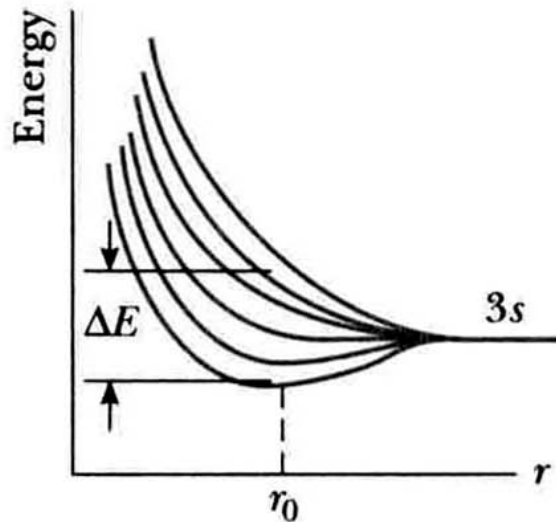
- En un enlace covalente, los electrones se comporten entre las moléculas, para saturar la valencia. El ejemplo más sencillo es la molécula de H_2 ,



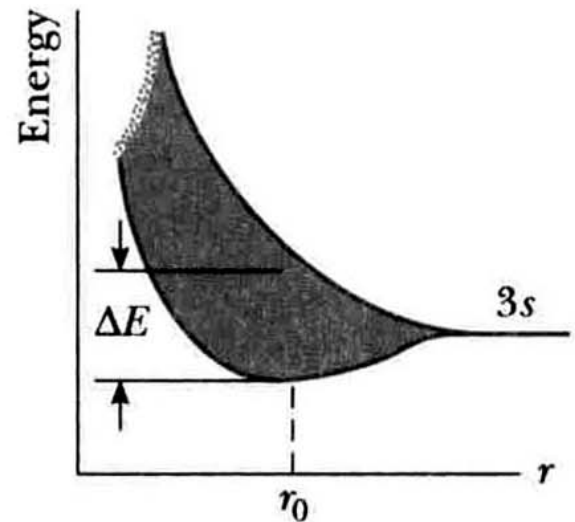
Dos átomos



Seis átomos



Sólido de 10^{22} átomos

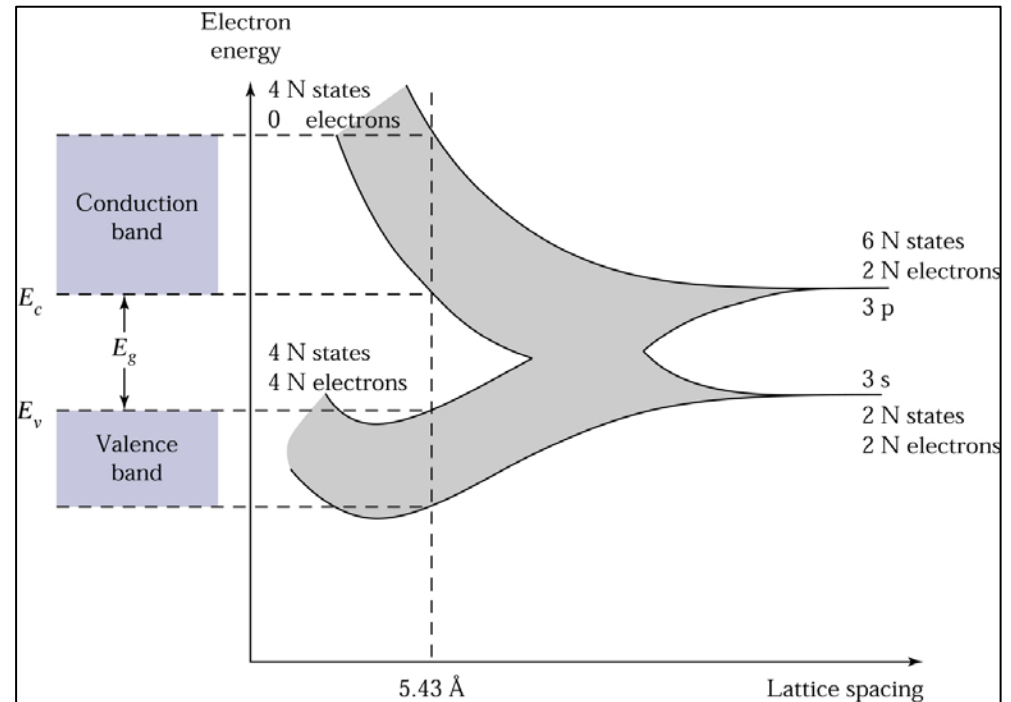


Electrones deben ocupar diferentes energías debido al Principio de Exclusión de Pauli

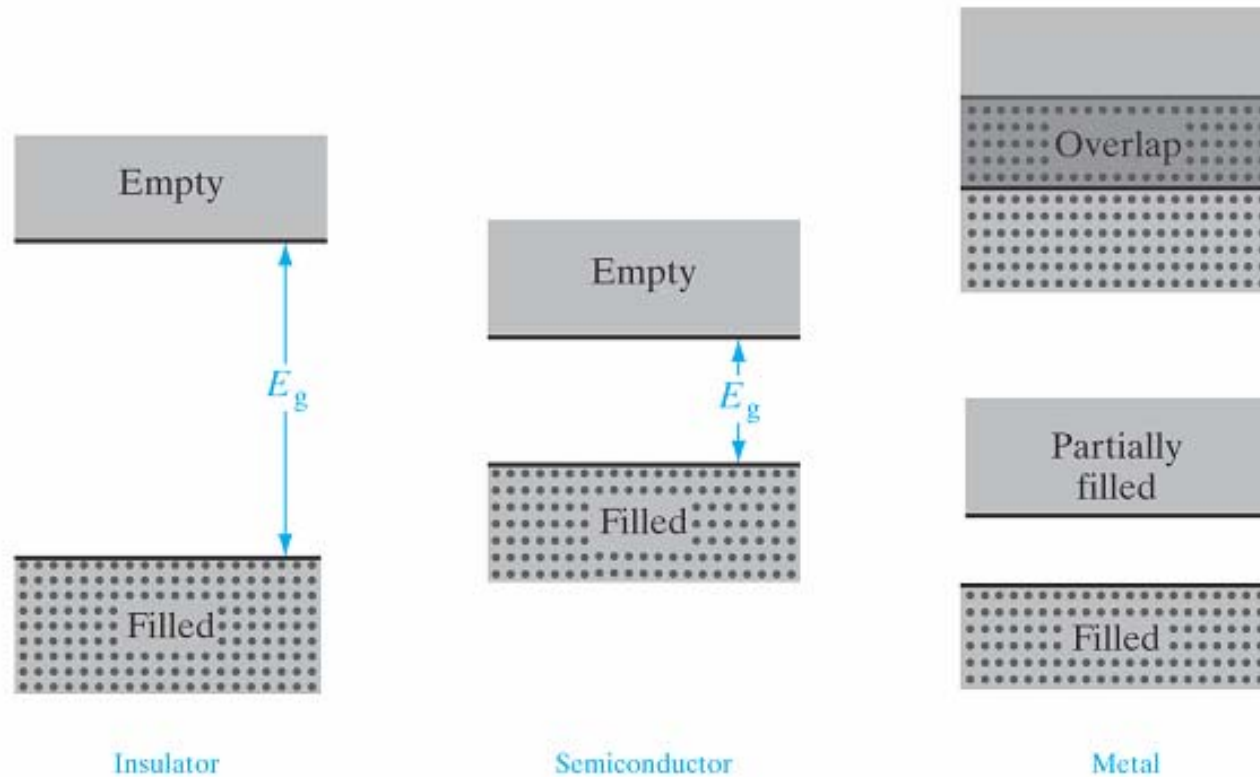
■ Bandas de Energía

$$E_g (\text{Si}) = 1.12 \text{ eV}$$

$$E_g (\text{GaAs}) = 1.42 \text{ eV}$$

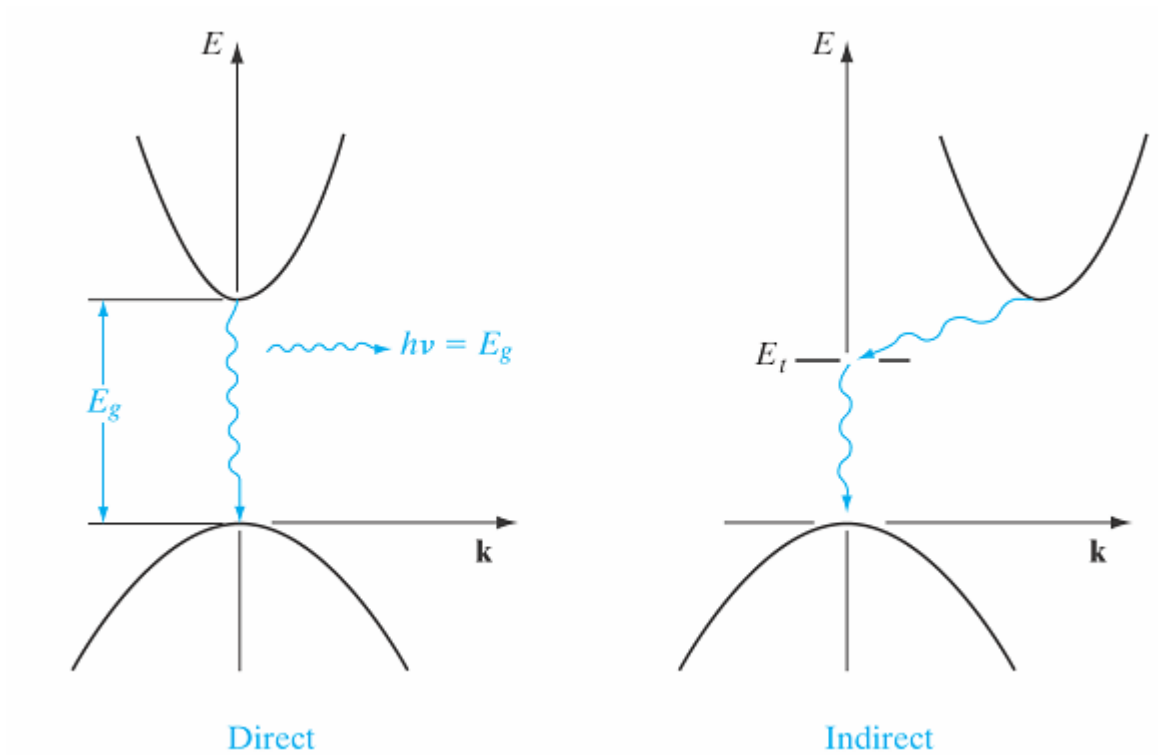


- Niveles degenerados de energía en átomos aislados separados en bandas de valencia y de conducción en el estado sólido.
- Excitaciones térmicas en semiconductores por arriba de los 0°K permite a los electrones saltar la energía de banda prohibida de la bande de valencia a la de conducción ... esencialmente la energía necesaria para romper un enlace.



- El resultado más importante de la aplicación de la mecánica cuántica a la descripción de los electrones es que los niveles permitidos de energía de los electrones se agrupan en dos bandas.
- Las bandas están separadas por regiones de energía que los electrones en los sólidos no pueden poseer: niveles prohibidos.

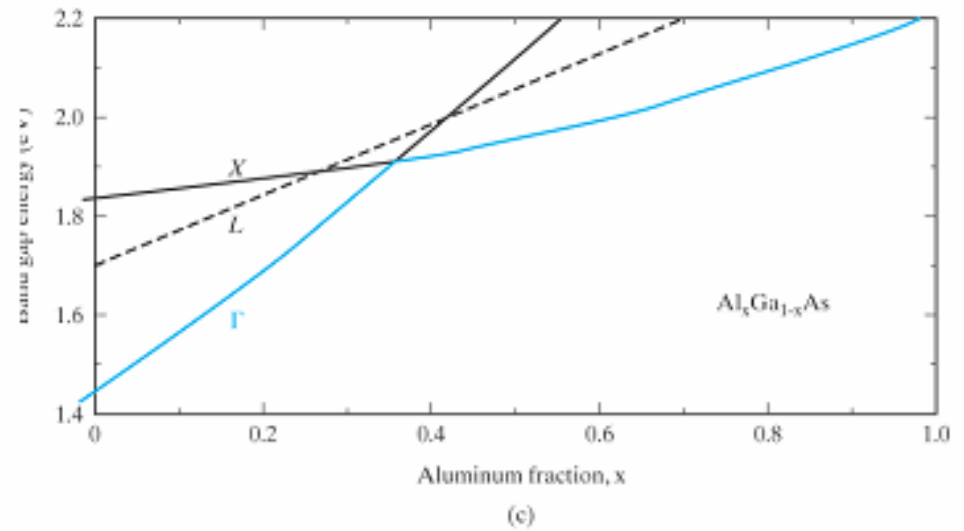
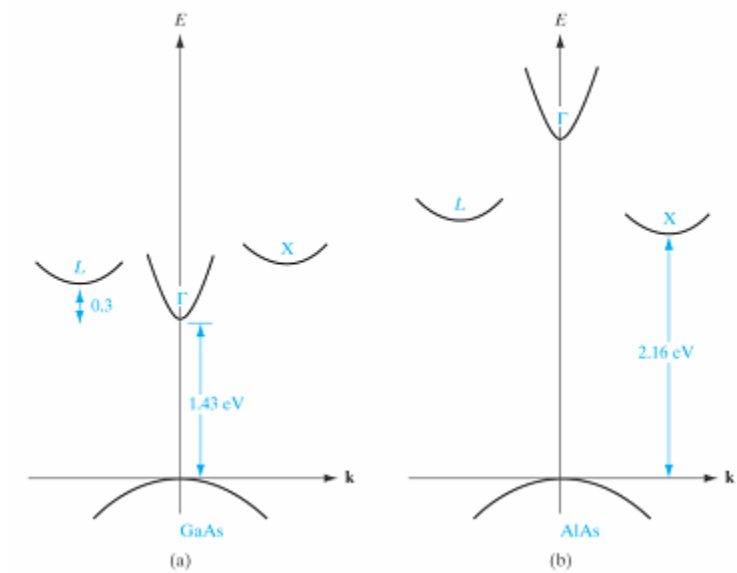
Diagramas de bandas de energía (E - k)



Banda directa (GaAs)

Banda indirecta (Si)

Variaciones de Bandas de Energía con aleaciones

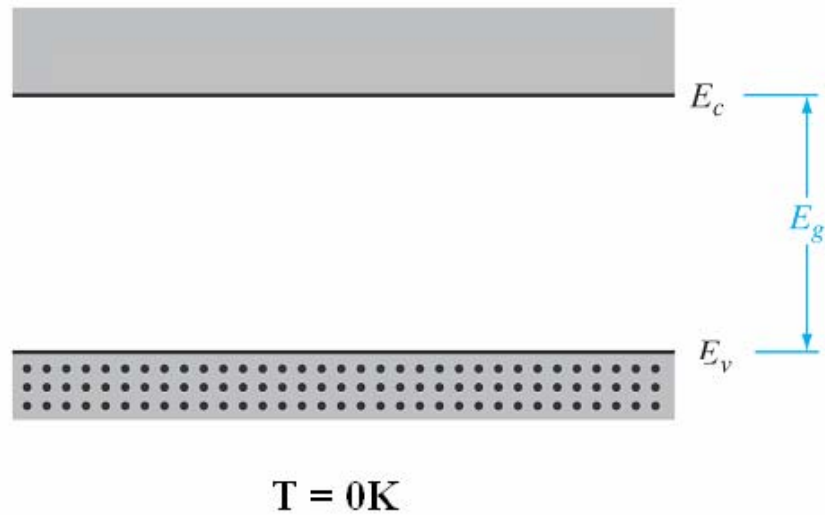


■ Portadores de carga en semiconductores

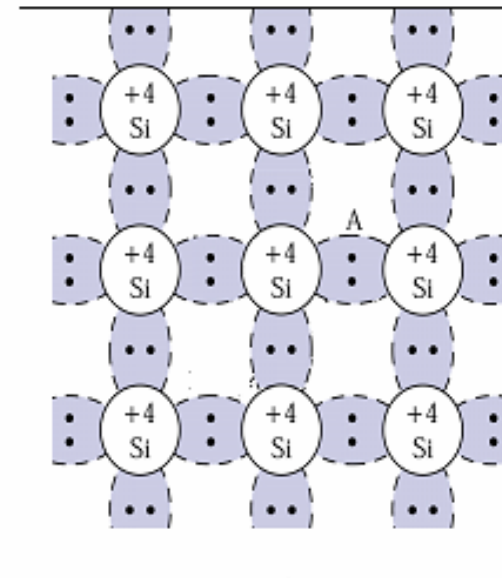
- El mecanismo de conducción de corriente es relativamente fácil de visualizar en el caso de un metal; los átomos de un metal están inmersos en un “mar” de electrones relativamente libres, y estos electrones se mueven en grupo bajo la influencia de un campo eléctrico.
- Sin embargo, en el caso de los semiconductores las propiedades eléctricas dependen de la temperatura, dopado y, campos eléctricos y magnéticos.

Electrones y Huecos

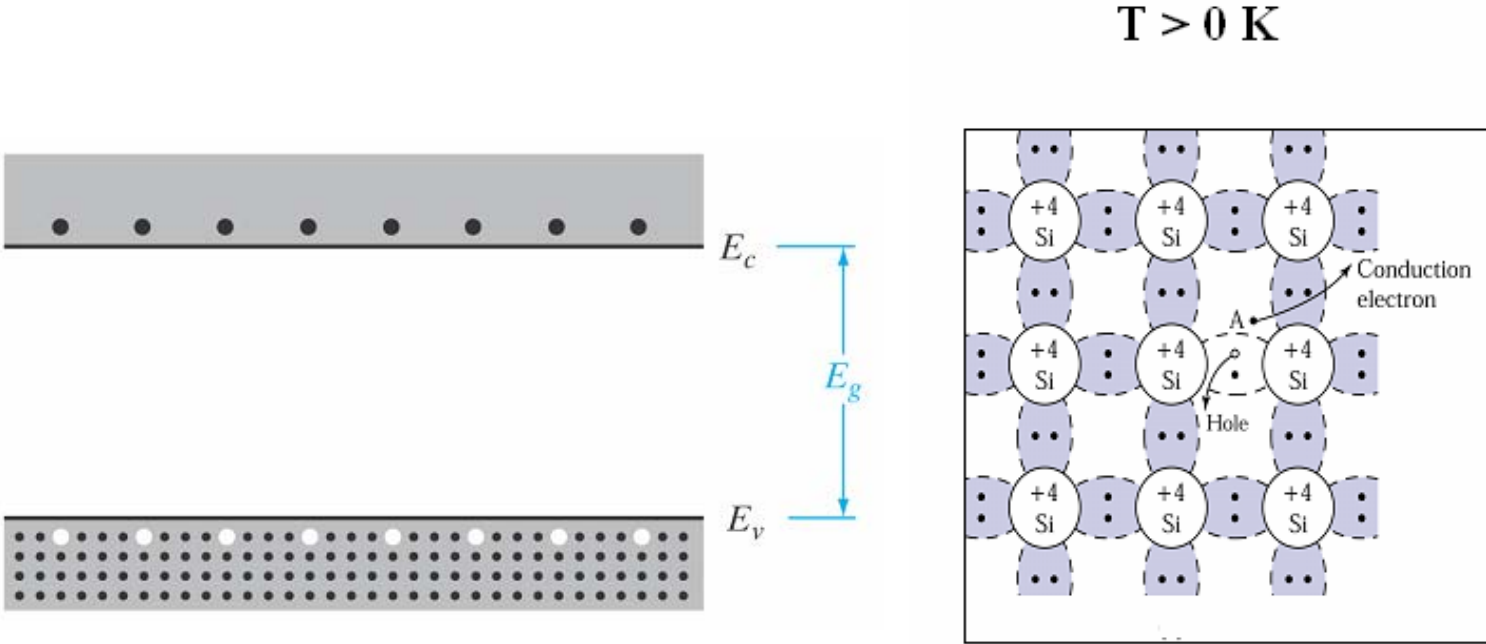
➤ A $T=0\text{K}$ todos los enlaces permanecen intactos - aislante



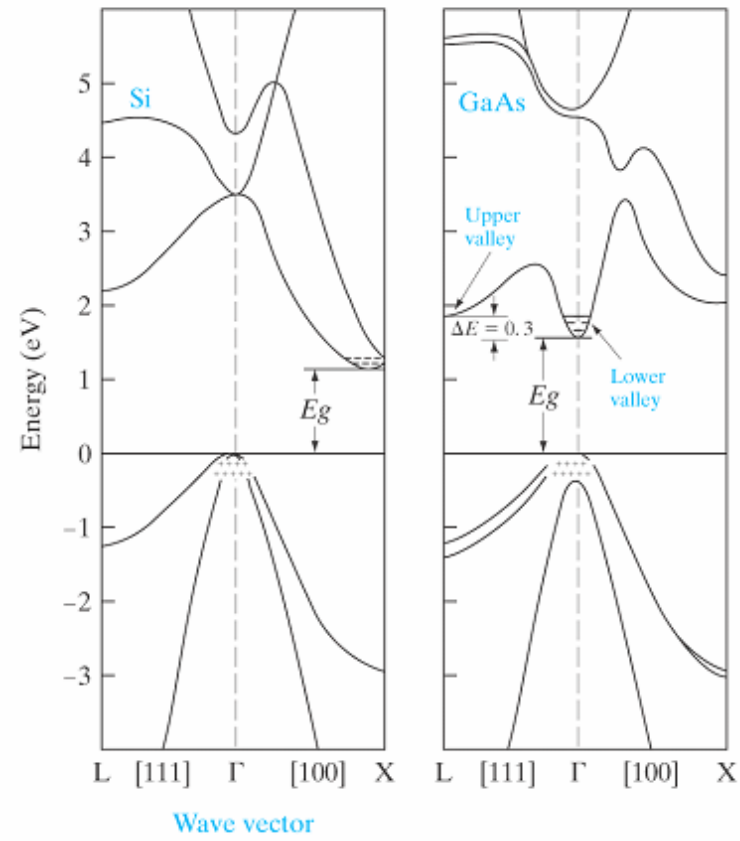
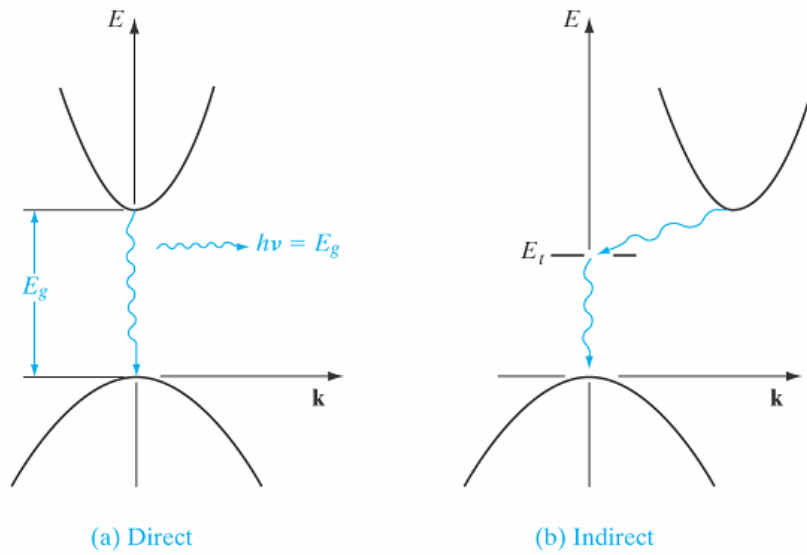
$T = 0\text{K}$



➤ A $T > 0\text{K}$ excitaciones térmica pueden causar que los enlaces se rompan resultando en electrones y huecos libres – conducción



Estructuras de banda ideal y real en semiconductores



■ Masa efectiva de portadores

Cuando el borde de la banda de conducción esta en $k = 0$ se puede representar la estructura de banda como una parábola simple

$$E(k) = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

donde E_c es la energía de la banda de conducción y m_e^* es la masa efectiva del electrón.

$$m_e^* = \left[\frac{d^2 E}{d\hbar^2 k^2} \right]^{-1}$$

Parábola estrecha - masa efectiva pequeña

$$\text{GaAs } m_e^* = 0.063m_0 \quad \text{Si } m_e^* = 0.19m_0$$

Similarmente, la relación de la energía para la banda de valencia es

$$E = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*}$$

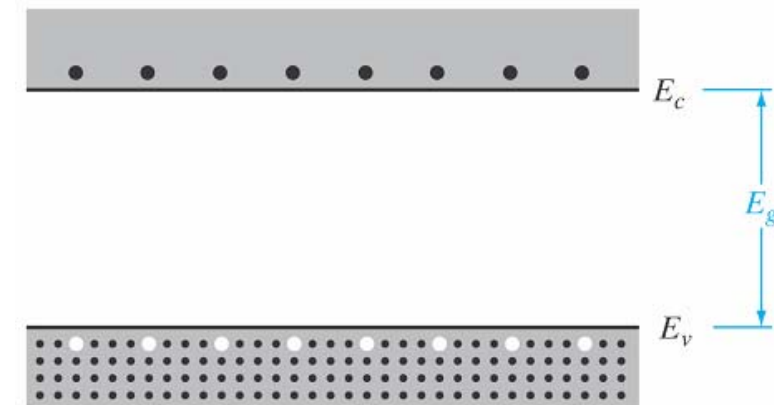
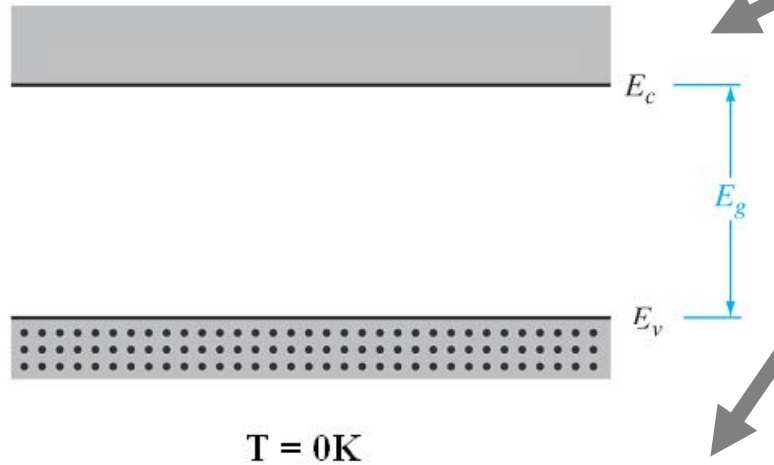
donde E_V es la energía de la banda de valencia y m_h^* es la masa efectiva de un hueco

Existen dos bandas cerca del tope de la banda de valencia de diferentes espesores, para huecos pesados y huecos ligeros.

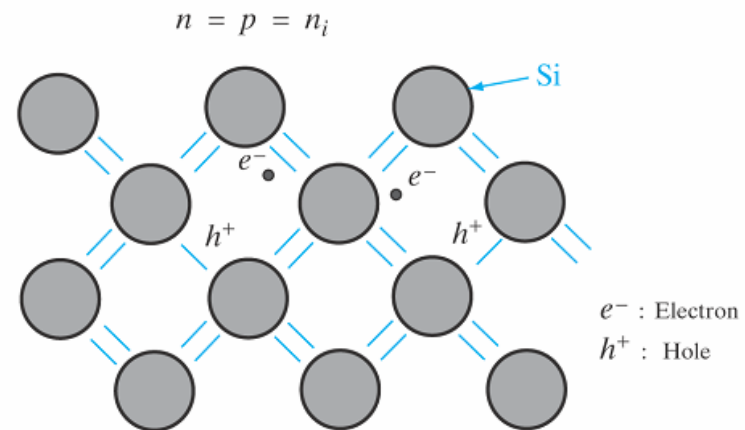
GaAs $m_{hh}^* = 0.45m_0$, $m_{lh}^* = 0.08m_0$

Si $m_{hh}^* = 0.49m_0$, $m_{lh}^* = 0.16m_0$

Material Intrínseco

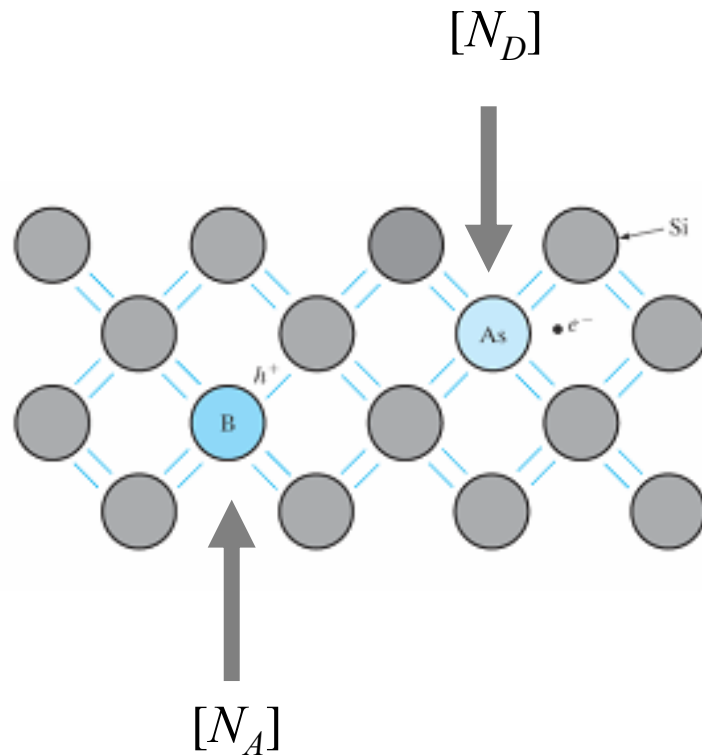


- Un cristal perfecto de semiconductor sin impurezas.
- No hay portadores de carga a $T = 0\text{K}$.
- A temperaturas mayores se generan EHPs como electrones en la banda de valencia excitados térmicamente a través de la banda prohibida hacia la banda de conducción.
- Si una concentración de portadores en estado estacionario se mantiene. Se da una recombinación a la misma razón de su generación $r_i = g_i$



■ Material Extrínseco

➤ Cuando un átomo del grupo V (As) o del grupo III (B) substituye a un átomo de Si en la red, un electrón es donado o aceptado y el semiconductor se vuelve tipo-n o tipo-p respectivamente.



En un semiconductor extrínseco a cualquier temperatura, la concentración de portadores tiene dos contribuciones:

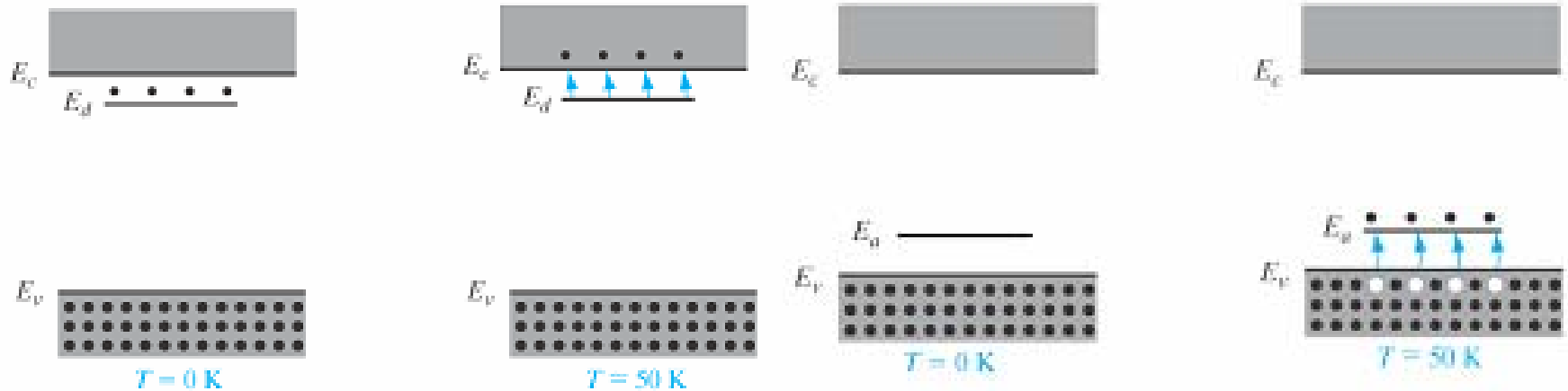
1. Térmica
2. Dopado [N_D or N_A]

(c) En un semiconductor tipo-n a temperatura ambiente

$$n = N_D \text{ and } p = n_i^2 / N_D$$

semiconductor tipo-p

$$n = n_i^2 / N_A \text{ and } p = N_A$$



- A 0°K los electrones extras asociados con los átomos donadores están “fijos” a los sitios donadores en el nivel de energía E_d
- Conforme la temperatura se incrementa, hay suficiente energía térmica para ionizar los átomos donadores, esto es, para que un electrón realice la transición hacia la banda de conducción, donde $E_d \ll E_g$.
- Para crear huecos en la banda de valencia en un semiconductor tipo-p, los electrones necesitan únicamente una energía de E_a para alcanzar el nivel aceptor, donde $E_a \ll E_g$.

Niveles de ionización de dopantes

$$E_D = \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon_S} \right)^2 \left(\frac{m_e^*}{m_0} \right) E_H \rightarrow \text{Niveles de energía del Hidrógeno}$$

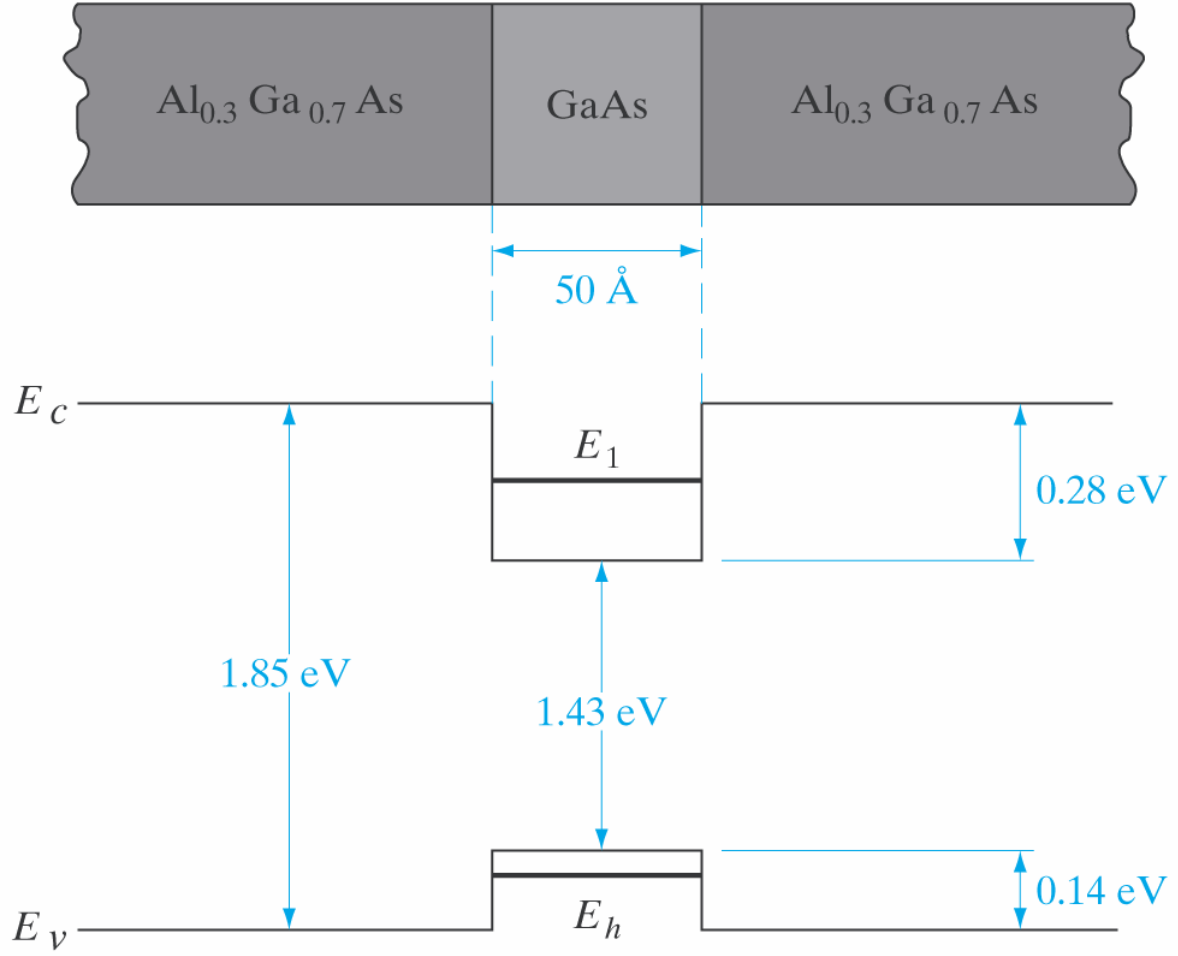
→ 25 meV para Si
7 meV para GaAs

└─ Niveles donadores

50 meV para Si, GaAs — Niveles aceptores
cf. $k_B T$ a 300 K = 26 meV

Los diferentes dopantes tienen diferentes niveles de ionización y niveles profundos ($|E| > 3k_B T$), lo cual puede ser importante, pero este modelo da el orden correcto de magnitud.

Electrones y huecos en pozos cuánticos



Densidad de estados (DoS)

➤ Para obtener la densidad de portadores por unidad de volumen primero se calcula el número de estados permitidos (incluyendo el spin) por rango de energía por unidad de volumen, la densidad de estados,

Para electrones en la banda de conducción donde la relación $E-k$ es de la forma,

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

La densidad de estados se determina por,

$$N(E) = 4\pi \left(\frac{2m_e^*}{h^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$

Similarmente, para huecos en la banda de conducción donde la relación $E-k$ es de la forma,

$$E = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*}$$

La densidad de estados esta dada por,

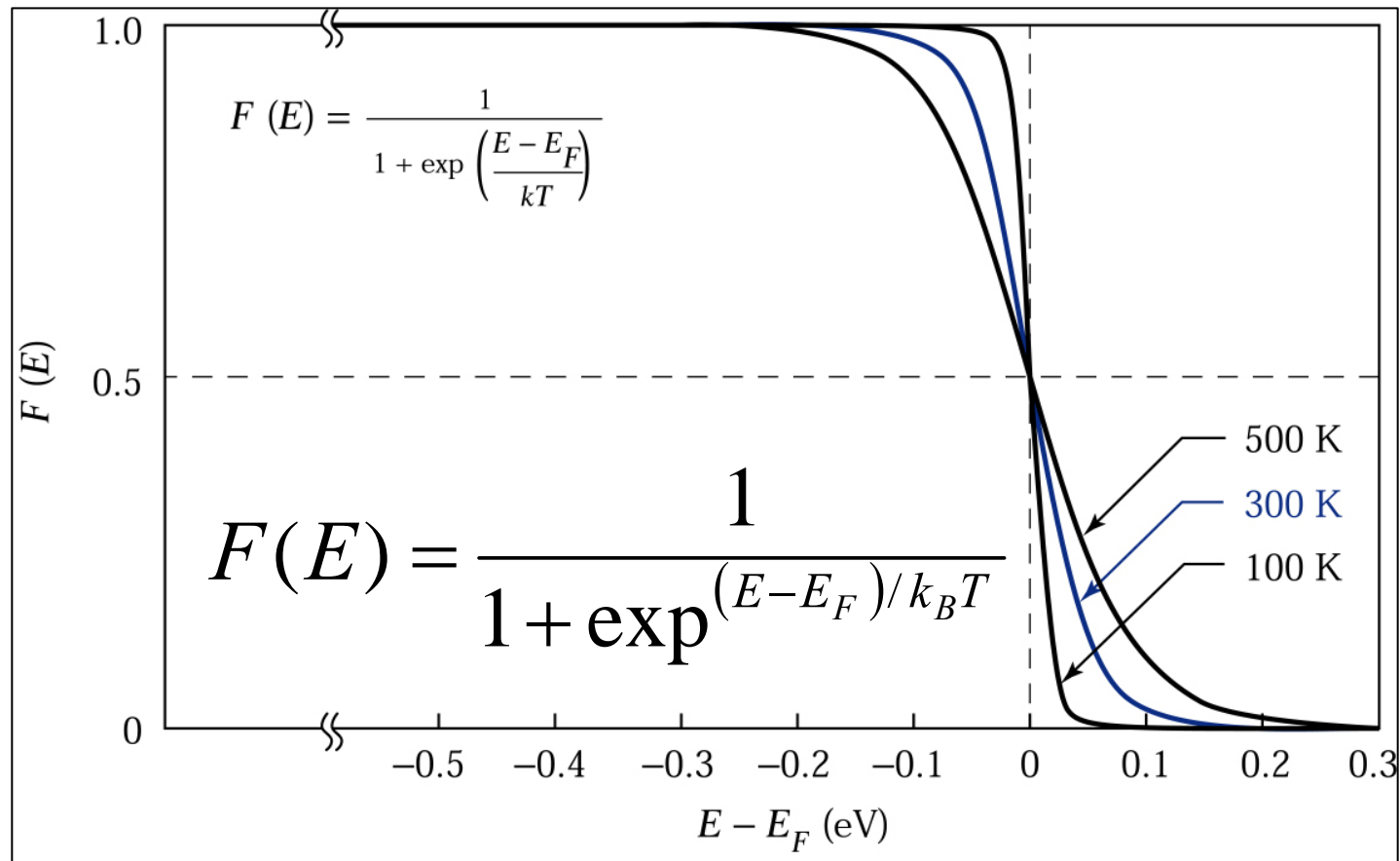
$$N(E) = 4\pi \left(\frac{2m_h^*}{h^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$

La contribución de huecos ligeros y pesados

$$m_h^{*3/2} = \left(m_{lh}^{*3/2} + m_{hh}^{*3/2} \right)$$

Energía de Fermi

➤ La probabilidad de que un electrón ocupe un estado electrónico con energía E esta dada por la distribución de Fermi-Dirac



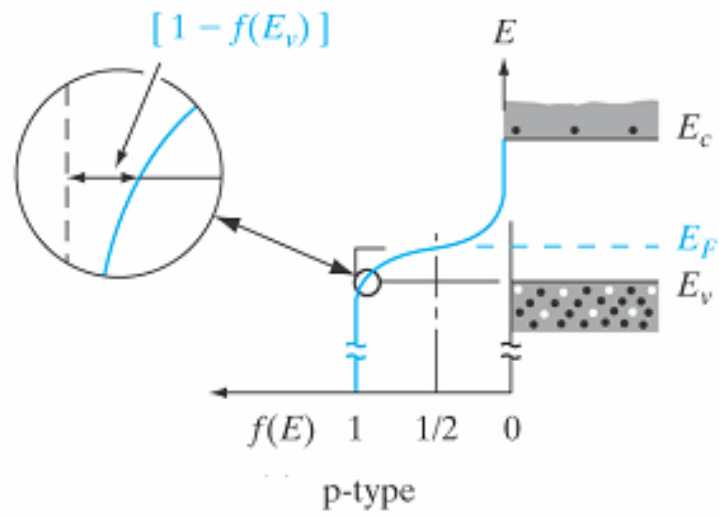
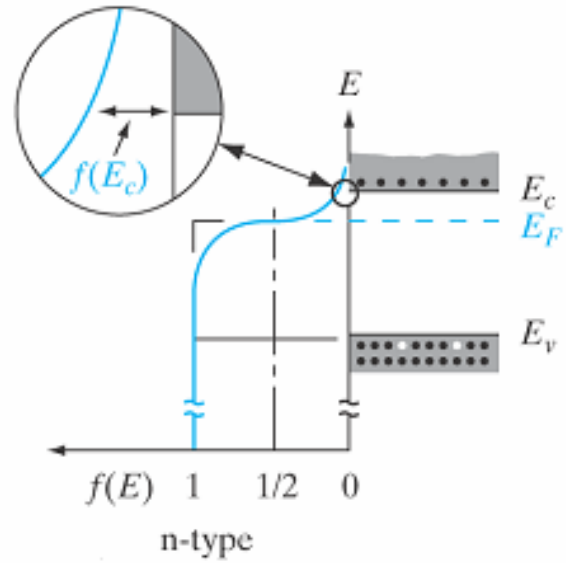
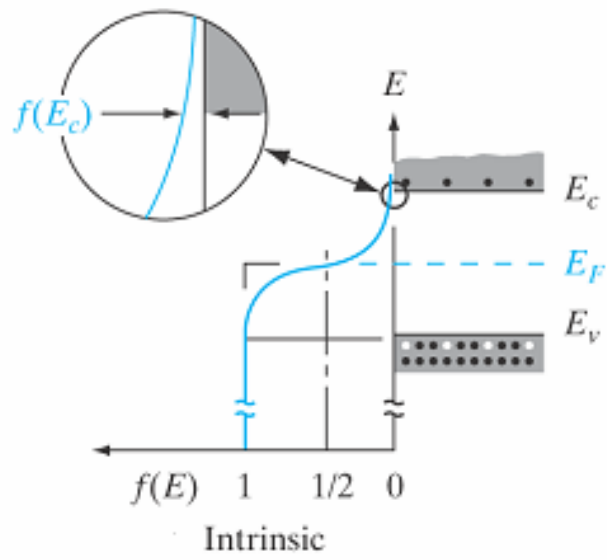
➤ La energía de Fermi es la energía por la cual la probabilidad de ocupación de un electrón es exactamente $\frac{1}{2}$

➤ La función de distribución de Fermi se simplifica para un electrón en la banda de conducción,

$$(E - E_F) > 3k_B T \quad \therefore F(E) \approx e^{-(E-E_F)/k_B T}$$

➤ Para un hueco en la banda de valencia

$$(E - E_F) < 3k_B T \quad \therefore F(E) \approx 1 - e^{-(E-E_F)/k_B T}$$

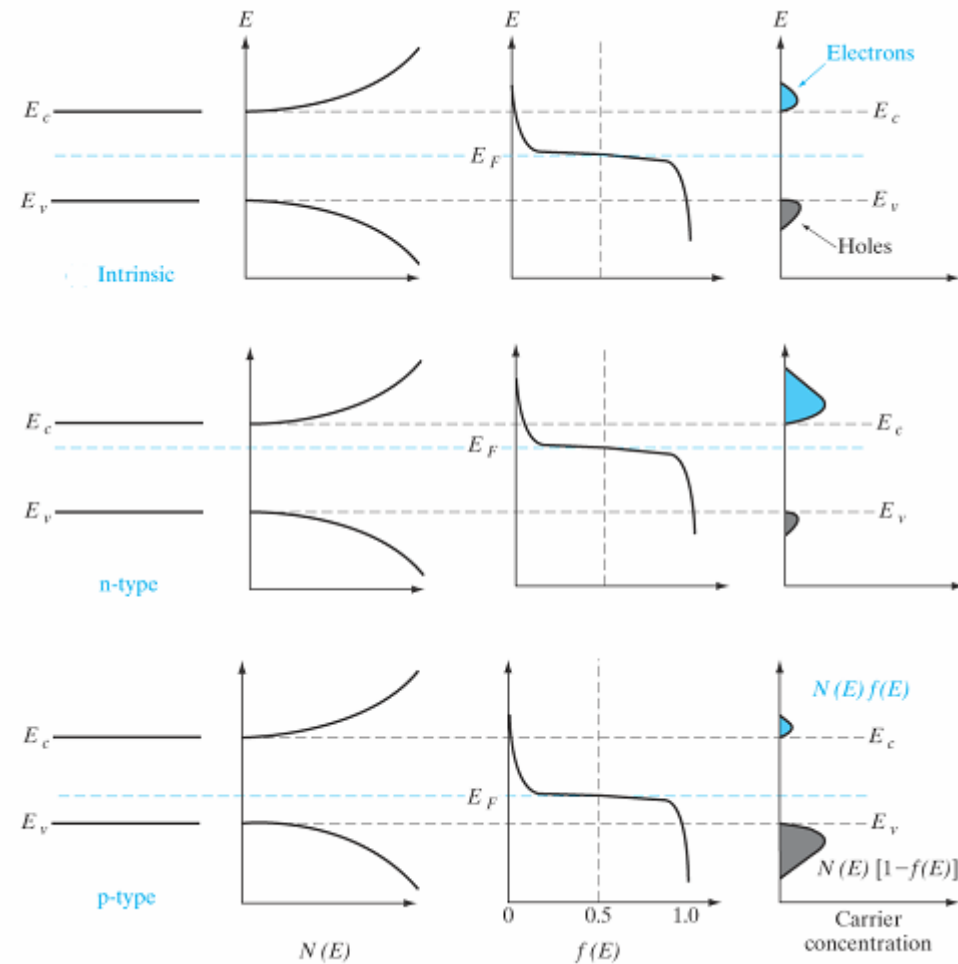


La concentración de electrones en la banda de conducción es:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} f(E)N(E)dE$$

La concentración de huecos en la banda de valencia es:

$$p = \int_{E_v}^{\infty} [1 - f(E)]N(E)dE$$



Concentración de electrones

La densidad de electrones en la banda de conducción esta dada por,

$$n = \int_0^{E_{top} \rightarrow \infty} n(E) dE = \int_0^{E_{top} \rightarrow \infty} N(E) F(E) dE$$

Tomando en el fondo de la banda de conducción $E=0$

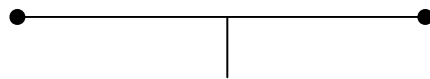
Tomando la expresión simplificada de $F(E)$,

$$n = 4\pi \left(\frac{2m_e^*}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} E^{1/2} \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT} \right) dE$$

Con $x = E / kT$

$$n = 4\pi \left(\frac{2m_e^*}{h^2} \right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} \exp\left(\frac{E_F}{k_B T} \right) \int_0^\infty x^{1/2} e^{-x} dx$$

$$n = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_F}{k_B T} \right)$$



Densidad efectiva de estados en la banda de conducción, N_C


Tomando el fondo de la banda de conducción como E_C en vez de $E=0$,

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right)$$

Para Si (300 K)	$N_C = 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
Para GaAs (300 K)	$N_C = 4.7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

Concentración de Huecos

De manera similar para huecos en la banda de valencia,

$$p = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right) \quad \text{where} \quad N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2}$$


La densidad de estados efectiva en la banda de valencia, N_V

Para Si (300 K)	$N_V = 1.04 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
Para GaAs (300 K)	$N_V = 7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

■ Ley de acción de masa

$$np = n_i^2 = N_C N_V \exp\left(\frac{E_g}{k_B T}\right)$$

Esta expresión es independiente de E_F y es válida para semiconductores extrínsecos.

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

Para Si (300 K)	$n_i = 9.65 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$
Para GaAs (300 K)	$n_i = 2.25 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$

Ley de acción de masa para semiconductores extrínsecos

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right) \quad p = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right)$$

El producto np es entonces,

$$np = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right) n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right)$$

$$np = n_i^2$$

Por lo tanto la ley de acción de masa permanece para semiconductores extrínsecos

Cálculo para el nivel de Fermi extrínseco

A 300K generalmente hay suficiente energía térmica para ionizar completamente los átomos dopantes, para un semiconductor tipo-n $n = N_D$ (concentración de donadores)

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right)$$

$$N_D = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right)$$

$$\therefore E_C - E_F = k_B T \ln\left(\frac{N_C}{N_D}\right)$$

Conforme la concentración de átomo donadores incrementa el nivel de Fermi se desplaza hacia la banda de conducción.

Similarmente para un semiconductor tipo-p, $p = N_A$ (concentración de aceptores)

$$p = N_V \exp\left(\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right)$$

$$N_A = N_V \exp\left(\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right)$$

$$\therefore E_F - E_V = k_B T \ln\left(\frac{N_V}{N_A}\right)$$

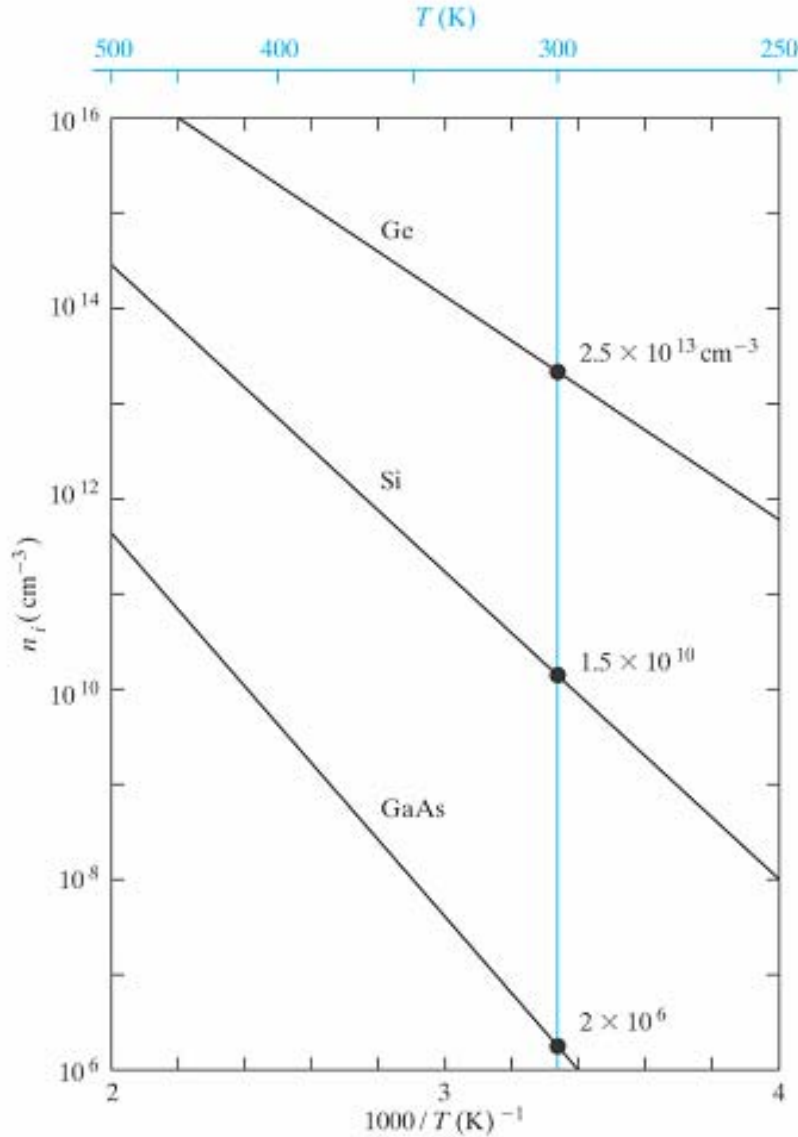
Conforme la concentración de átomos aceptores incrementa el nivel de Fermi se desplaza hacia la banda de valencia

➤ A menudo es útil expresar la densidad de portadores en términos de la concentración intrínseca de portadores y del nivel de Fermi intrínseco,

Para electrones,

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_i}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right) \quad n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right)$$

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right) \quad \text{Similarmente para huecos,} \quad p = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right)$$



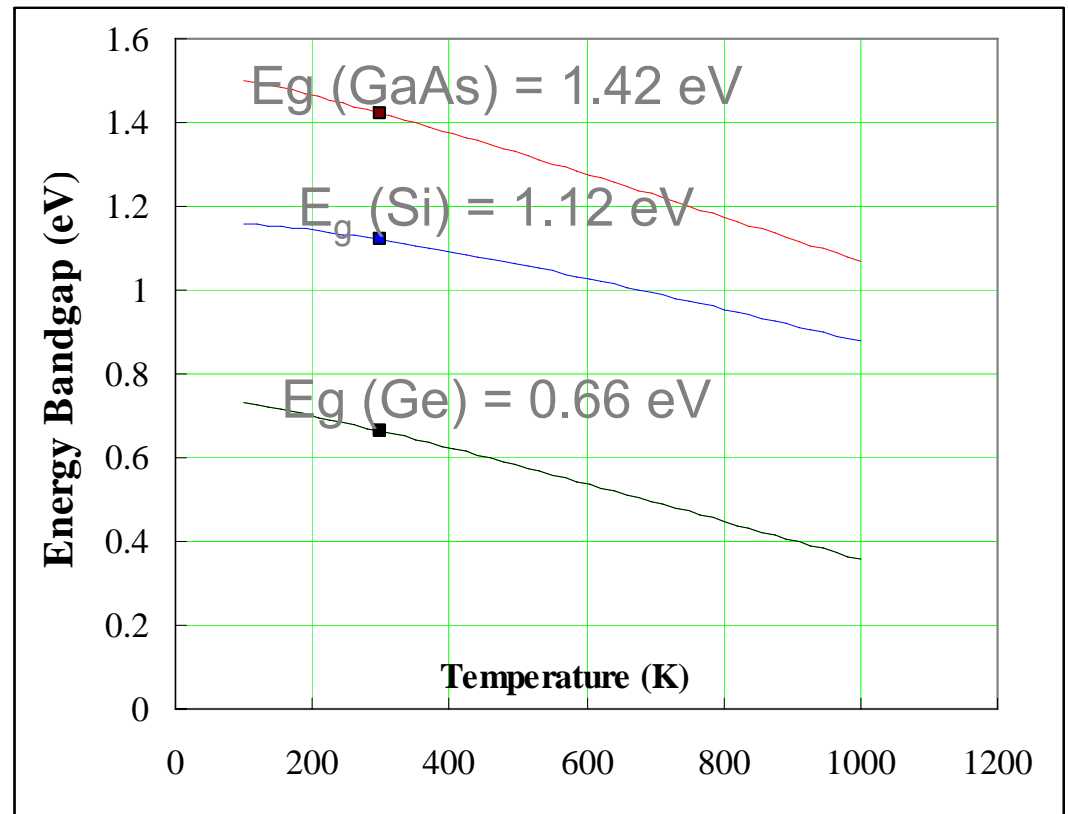
Densidad intrínseca de portadores para Si, Ge y GaAs en función del inverso de la temperatura

➤ La dependencia de la temperatura de la energía de banda prohibida, E_g , se ha determinado experimentalmente de la siguiente expresión:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$$

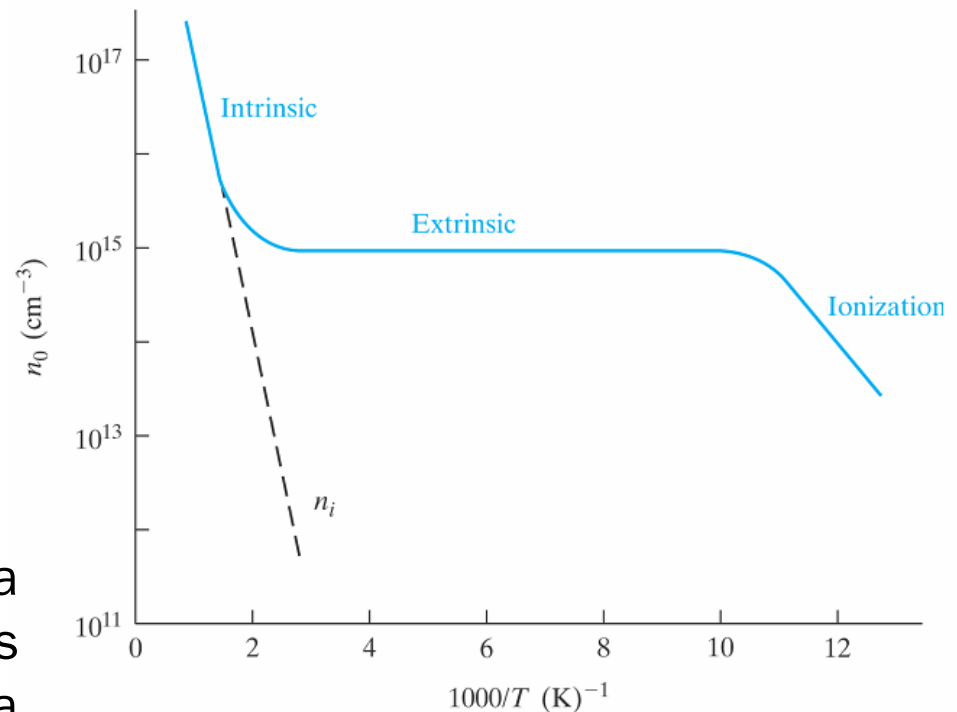
Donde $E_g(0)$, α y β son parámetros de ajuste.

	Germanium	Silicon	GaAs
$E_g(0)$ (eV)	0.7437	1.166	1.519
α (meV/K)	0.477	0.473	0.541
β (K)	235	636	204

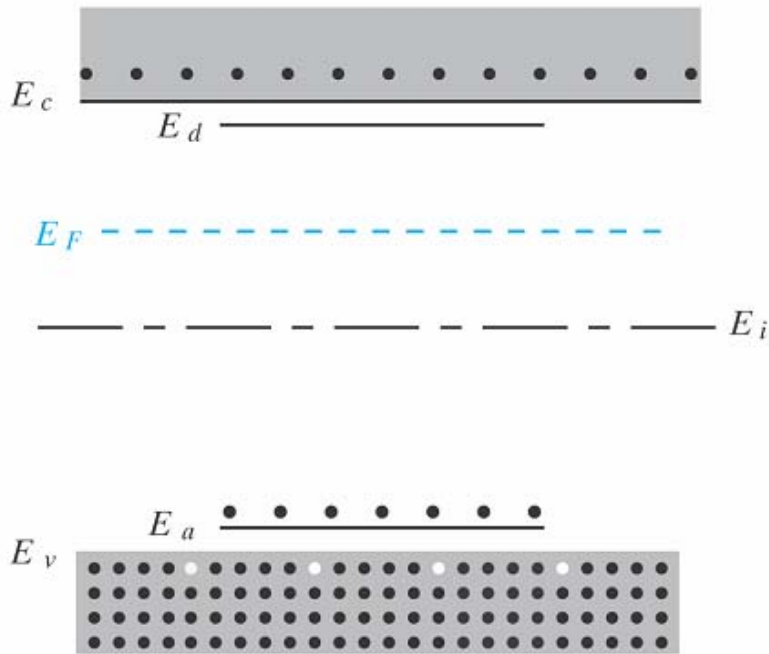


Densidad de electrones en función de la temperatura

- A bajas temperaturas la energía térmica es insuficiente para ionizar todos los átomos donadores, entonces $n < N_D$
- A altas temperaturas la energía térmica es suficiente para ionizar todos los átomos, entonces $n = N_D$
- A ciertas temperaturas la densidad intrínseca de portadores se vuelve comparable a la concentración de donadores y más allá de este punto el semiconductor se vuelve intrínseco



Compensación y neutralidad de la carga espacial



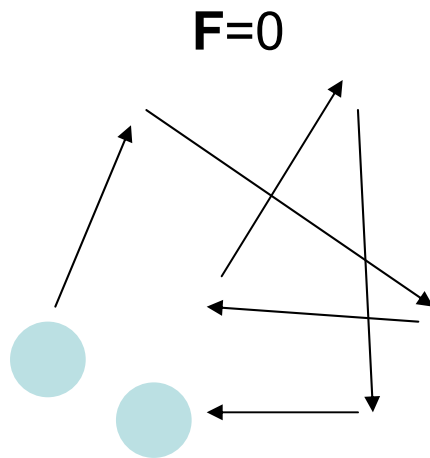
Si tanto las impurezas donadoras como aceptoras están presentes al mismo tiempo, el nivel de Fermi se ajusta para preservar la neutralidad de carga

$$n + N_A^- = p + N_D^+$$

$$\Rightarrow n = p + N_D^+ - N_A^-$$

Conductividad y Movilidad

(bajo la influencia de un pequeño campo eléctrico, \mathbf{F})



Movimiento térmico aleatorio v_{th}

Electrones dispersados de átomos

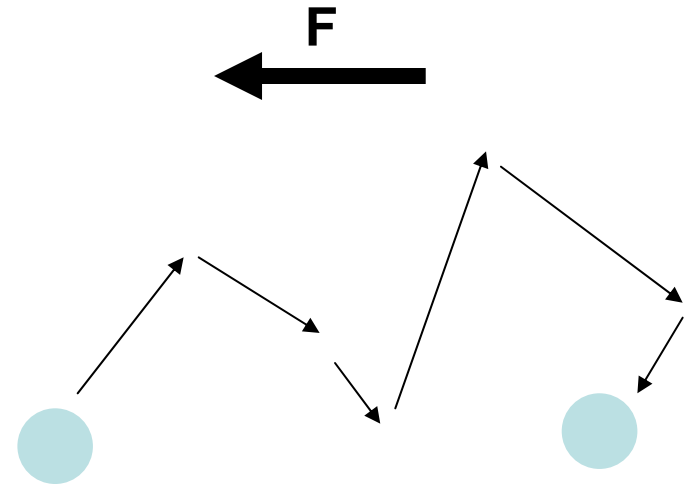
No existe desplazamiento neto a lo largo del tiempo

Tiempo promedio entre colisiones

$$\bar{t} \sim 10^{-12} \text{ s}$$

Conductividad y Movilidad

(bajo la influencia de un pequeño campo eléctrico, F)



Electrones acelerados en la dirección opuesta al campo aplicado entre colisiones tal que un desplazamiento neto y una componente adicional de la velocidad de deriva $\langle v_x \rangle$

$$-qF\bar{t} = m_e^* \langle v_x \rangle$$

$$\langle v_x \rangle = - \left(\frac{e\tau_c}{m_e^*} \right) F$$



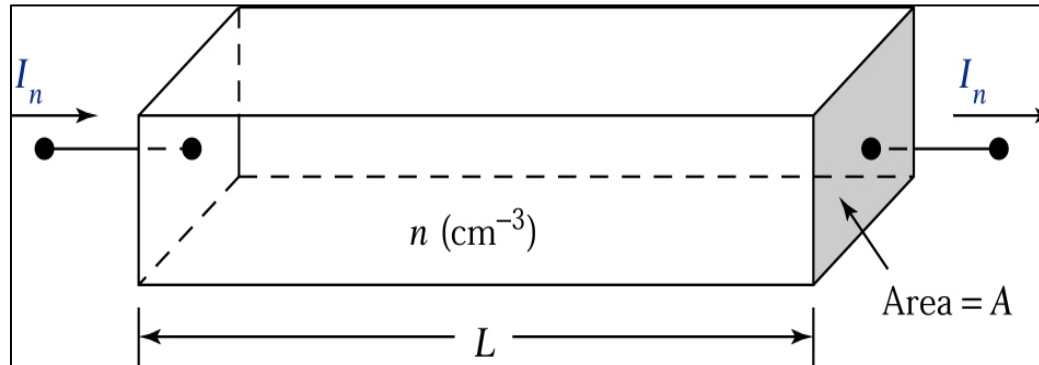
La movilidad del electron ($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)

$$\langle v_x \rangle = -\mu_n F$$

Similarmente para
huecos en la banda
de valencia
moviéndose en
dirección del campo
eléctrico

$$\langle v_p \rangle = \mu_p F$$

Densidad de corriente de deriva



La densidad de corriente del electrón se encuentra por el producto de la carga y la velocidad para todos los electrones por unidad de volumen,

$$J_n = \frac{I_n}{A} = -qn \langle v_x \rangle = qn \mu_n F$$

Similar para los huecos, $J_p = \langle qp v_x \rangle = qp \mu_p F$

Conductividad

La densidad de corriente de deriva total es sencillamente la suma de ambas densidades de corriente, del electrón y del hueco

$$J = J_n + J_p$$

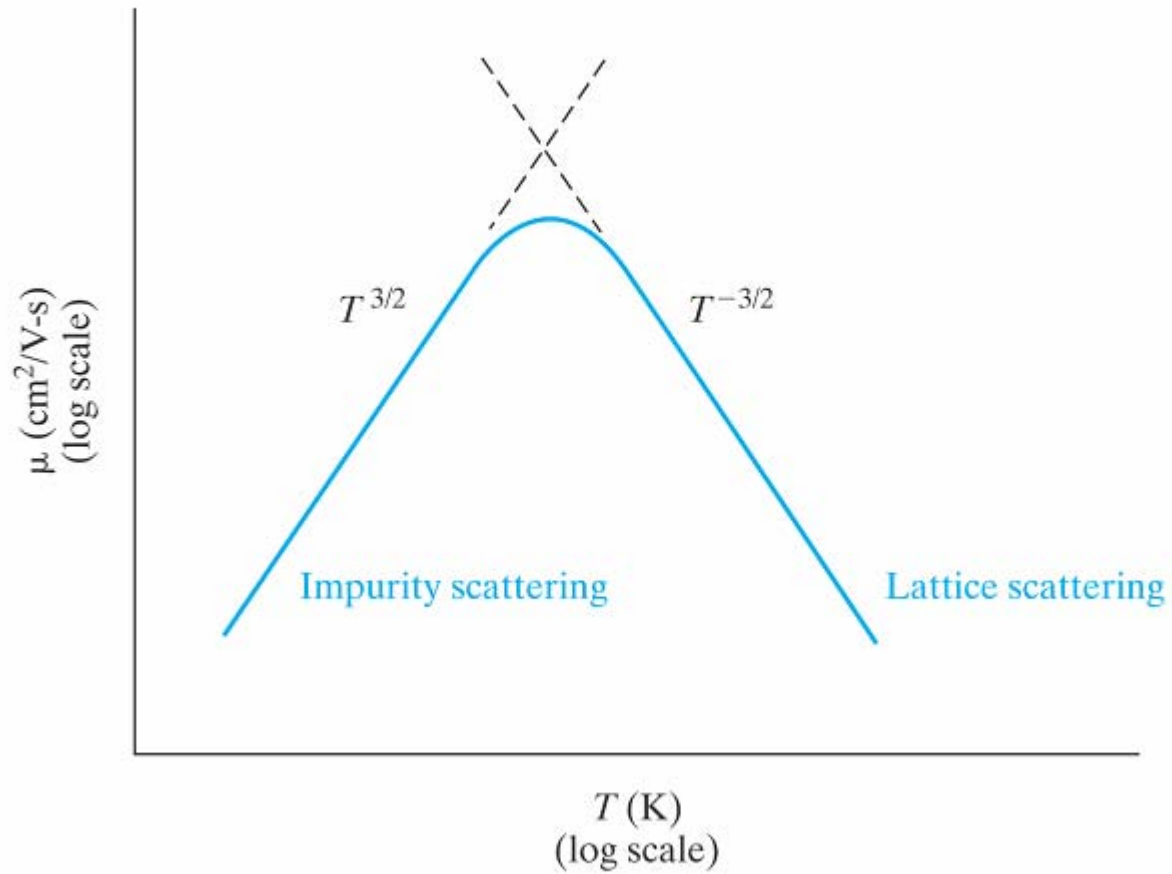
$$J = (qn\mu_n + qp\mu_p)F$$

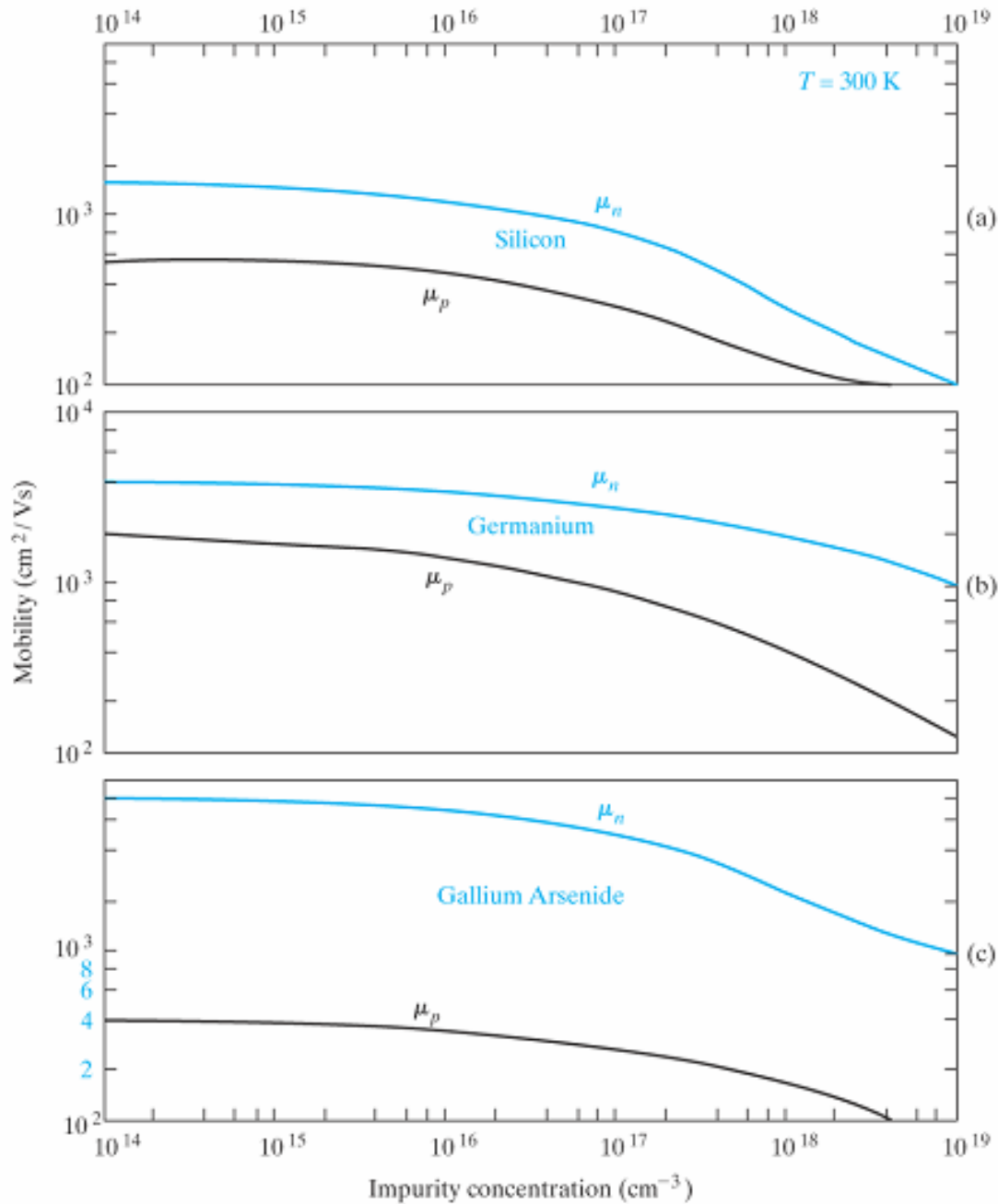


conductividad

$$\sigma = q(n\mu_n + p\mu_p)$$

Dependencia de la temperatura con la movilidad para dispersión de red y de impurezas



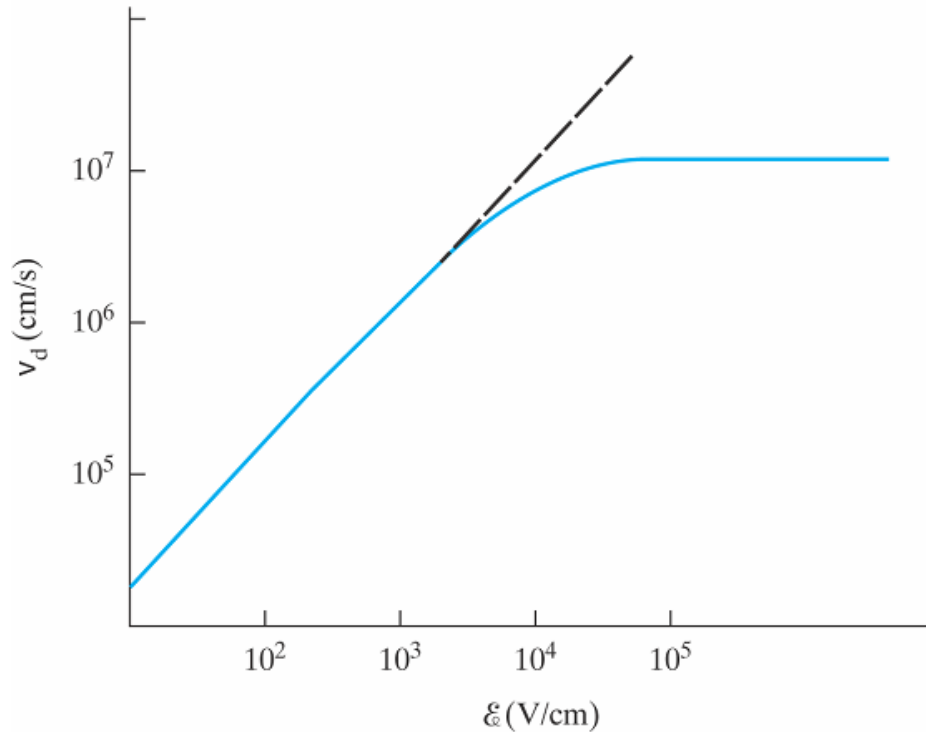


Variación de la movilidad con la concentración de impurezas para Si, Ge y GaAs a 300 K.

La movilidad debido a dos o más mecanismos de dispersión,

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} + \dots$$

Efectos de campo alto



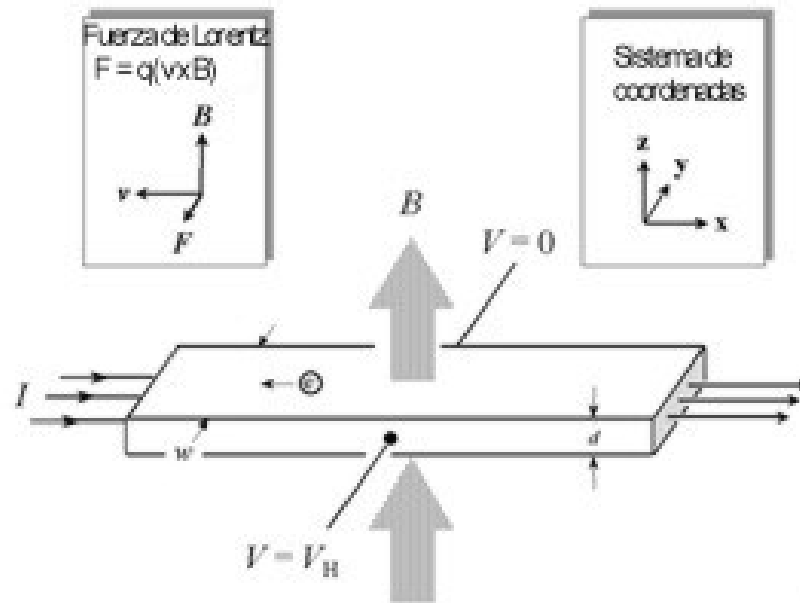
En muchos casos se alcanza un límite superior para la velocidad de deriva de portadores en un campo alto. Este límite ocurre cerca de v_{th} (10^7 cm/s), y representa el punto en el cual la energía generada por el campo eléctrico se transfiere a la red en vez de incrementar la velocidad de portadores

El Efecto Hall

- Al aplicarse un campo eléctrico E a un cristal, los portadores libres adquieren una velocidad promedio denominada velocidad de arrastre proporcional al campo eléctrico aplicado

$$\bar{v}_d = \mu E$$

- El coeficiente de proporcionalidad μ es la movilidad del portador, μ_n para electrones y μ_p para huecos.



- Al aplicar un campo magnético B perpendicular a la trayectoria de la corriente I , la trayectoria de los electrones que viajan con una velocidad v_d se ve afectada por la fuerza de Lorentz

$$\vec{F} = q(\vec{v}_d \times \vec{B})$$

- Desviación de los electrones, origen a un campo eléctrico E_y
- Condición de neutralidad de fuerzas

$$-qE_y = q(v_d B)$$

➤ Considerando las expresiones para la densidad de corriente

$$j = -nqv_d \quad \text{y} \quad j = \frac{I}{wd}$$

$$\Rightarrow E_y = -\frac{IB}{nqwd}$$

Voltaje y constante Hall $V_H = E_y w = -\frac{1}{nq} \frac{IB}{d}$

$\frac{1}{nq}$ es llamada la constante de Hall (R_H)

$$\Rightarrow V_H = -R_H \frac{IB}{d} \quad \text{y} \quad R_H = \frac{V_H d}{IB}$$

➤ Movilidad de portadores

$$\mu_n = \frac{\sigma_n}{qn} = \sigma_n R_H$$

$$\mu_p = \frac{\sigma_p}{qp} = \sigma_p R_H$$

➤ Densidad de portadores

$$n = \frac{1}{R_H q}$$

$$p = \frac{1}{R_H q}$$