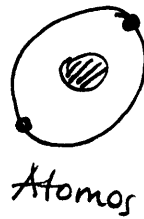


Introducción al Transporte de carga en materiales

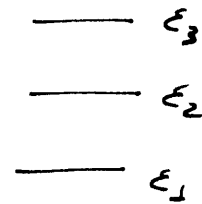
Mecánica cuántica

escala de energía 'eV'

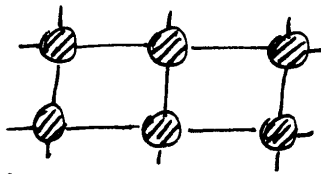
$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ Joules}$$



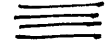
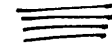
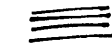
Átomos



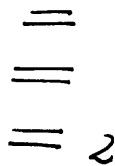
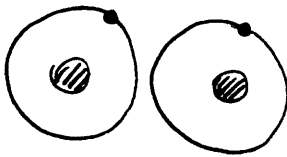
niveles de energía
discretos (permitidos
para electrones)



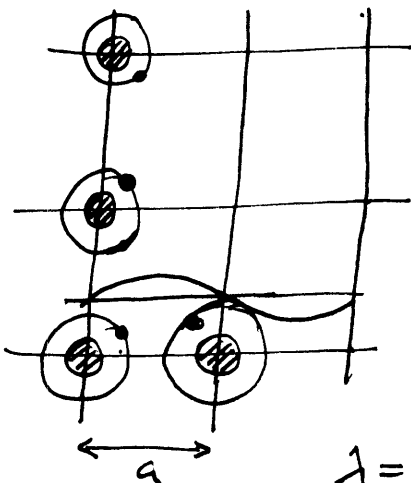
Átomos en una
lattice periódica ~ (CRYSTAL)



↑ ΔAP (prohibidas)
} Banda de
"Banda" energía



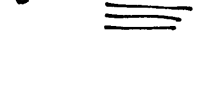
energías permitidas



Band



Band



~ 'Band gap' ~ 'eV'

↓ N

$\lambda = 2a$: longitud de onda de la radiación electromagnética.

$k = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow k = \frac{\pi}{a}$ número de onda
(wavenumber)

Time-dependent Schrödinger equation (wave equation) ②

$$\underbrace{\frac{-\hbar^2}{2m}}_{\text{mass of particle}} \nabla^2 \Psi + \underbrace{U(x, y, z)}_{\text{potential energy of the system}} \Psi = \underbrace{-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}}_{i = \sqrt{-1}}$$

⇒ solución
⇓
Bandas de energía

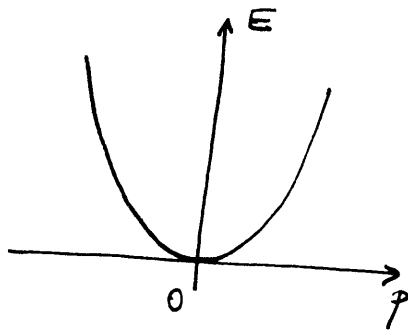
Dualidad partícula-Onda

h : constante de Planck $h = 6.63 \times 10^{-34}$ joule-sec

$\hbar = h/2\pi$ $\phi = h/\lambda$ Broglie relationship
momentum

La energía E de un electrón libre es

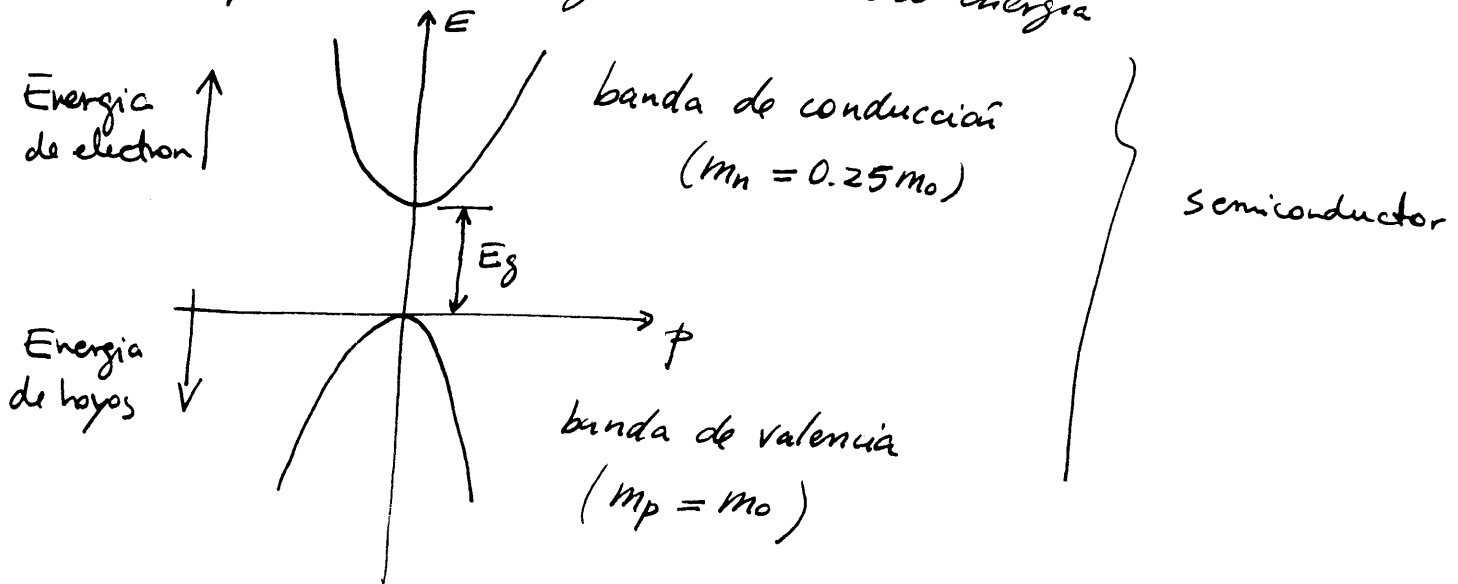
$$E = \frac{\phi^2}{2m_0} \rightarrow \text{masa electron libre}$$

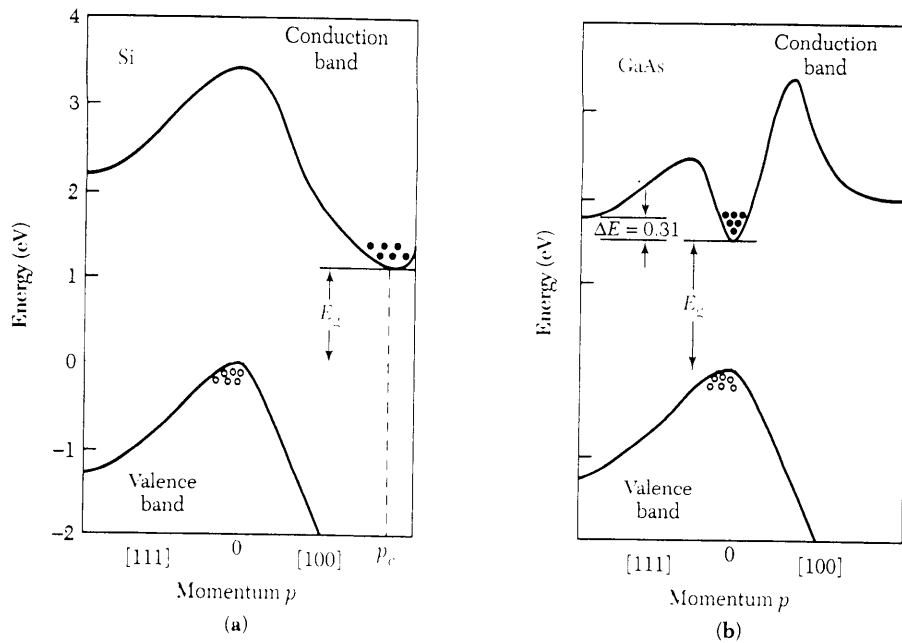


$$m_n = \left(\frac{d^2 E}{dp^2} \right)^{-1} \text{ masa efectiva de electrón}$$

Ejemplo

Diagrama de banda de energía





Energy band structures of Si and GaAs. Circles (o) indicate holes in the valence bands and dots (•) indicate electrons in the conduction bands.

Conducción en metales, semiconductores y aisladores

La variación en la conductividad eléctrica puede ser explicada cualitativamente en términos de su banda de energía.

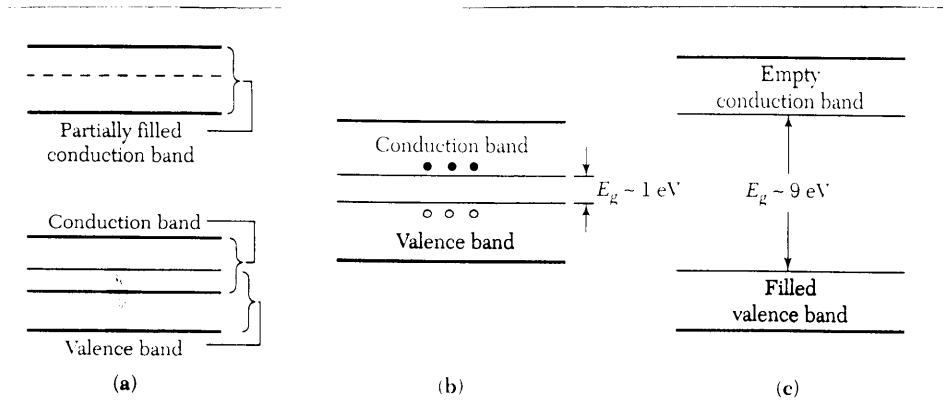
Metales: (conductor) $\rightarrow$ muy bajo valor de resistividad
 $\rightarrow$ banda de conducción esta parcialmente completa (ej. Cu) o traslapa la banda de valencia (ej. Zn, Pb). En este caso no hay gap de banda.

Esto trae como consecuencia que los electrones de más arriba en la banda de conducción parcialmente completa o los electrones en la parte superior de la banda de valencia puedan moverse al próximo nivel de energía disponible más alto cuando ellos ganan energía cinética, por ejemplo, desde un campo eléctrico.

Electrones son libres de moverse con solo un campo aplicado pequeño en un metal porque hay muchos estados no ocupados cercanos a los estados de energía ocupados. Así, la conducción de corriente puede fácilmente ocurrir en conductores.

Aisladores: en un aislador, tal como dióxido de silicio (SiO_2), los electrones de valencia forman fuertes enlaces entre átomos vecinos. Estos enlaces son difíciles de romper, y en consecuencia no hay electrones libres para participar en conducción de corriente a o cerca de la temperatura ambiente ($T=300\text{K}$)
room temperature

Semiconductores: si consideramos un material con un gap de energía mucho más pequeño, $\sim 1\text{eV}$, estos materiales son llamados semiconductores. A $T=0\text{K}$, todos los electrones están en la banda de valencia y no hay electrones en la banda de conducción. Así, semiconductores son pobres conductores a bajas temperaturas. A temperatura ambiente y con una atmósfera normal, $E_g \sim 1.12\text{eV}$ para Si, $E_g \sim 1.42\text{eV}$ para GaAs. La energía termal $k_B T$ a temp. ambiente es una buena fracción de E_g , y una apreciable cantidad de electrones son excitados térmicamente desde la banda de valencia a la banda de conducción. Ya que hay muchos estados vacíos en la banda de conducción, un pequeño potencial aplicado puede fácilmente mover estos electrones $\Rightarrow$ corriente moderada



Schematic energy band representations of (a) a conductor with two possibilities (either the partially filled conduction band shown at the upper portion or the overlapping bands shown at the lower portion), (b) a semiconductor, and (c) an insulator.

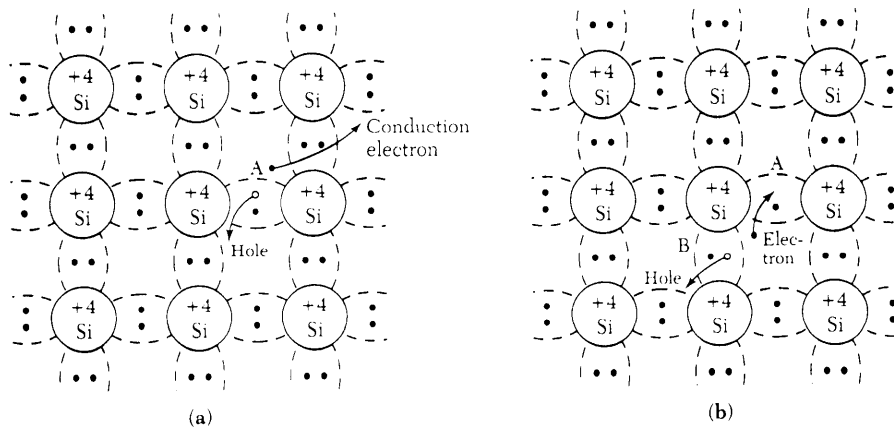
Semiconductores : Átomos en el cristal : Grupo IV : Si, Ge

III - V : GaAs, InP, InAs,

GaN, ...

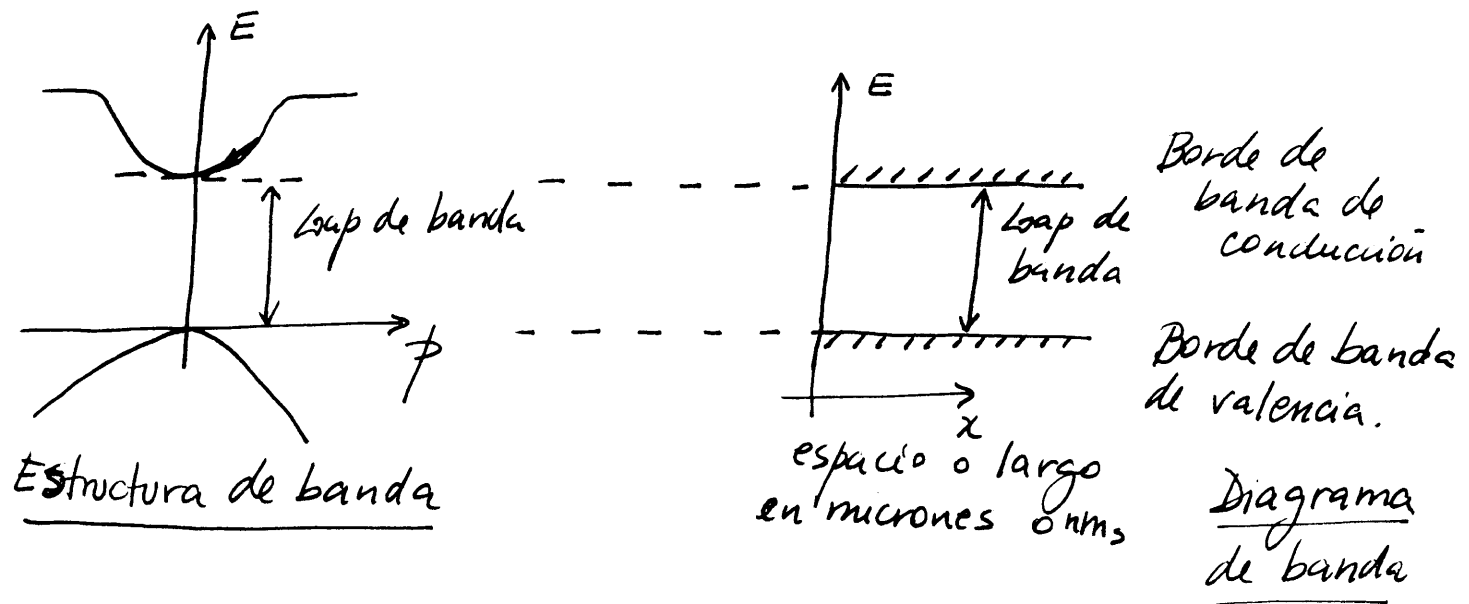
II - VI : CdTe, ZnO...

4 electrones de valencia/átomo son necesarios para semiconductores



The basic bond representation of intrinsic silicon. (a) A broken bond at position A, resulting in a conduction electron and a hole. (b) A broken bond at position B.

Estructura de banda: son las energías permitidas en el ⑥ cristal para diferentes momentum de electrón. (E vs p)



Excitación externa $\rightarrow$ luz, presión o campo eléctrico.

Para una temperatura dada, una continua agitación termal resulta en una excitación de electrones desde la banda de valencia a la banda de conducción y deja un número igual de hoyos en la banda de valencia.

Semiconductor intrínseco: contiene una cantidad relativamente pequeña de impurezas comparado con los electrones y hoyos generados termalmente.

Densidad de electrones en un semiconductor intrínseco ⑦

Densidad de electrones, n , $\rightarrow$ número de electrones por unidad de volumen

Metales 10^{22} átomos/cm³ $\rightarrow$ 10^{22} electrones/cm³

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

$N(E)$ densidad de estados (densidad de estados de energía permitidos, incluyendo el spin del electrón, por rango de energía y por unidad de volumen)

$F(E)$ probabilidad de ocupación de ese rango de energía.

Así, $n = \int_{E_c=0}^{E_{top}} N(E) F(E) dE$ en la banda de conducción.
 $E_c = 0$ - inferior de banda de conducción por simplicidad

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

$$n \left[\frac{1}{\text{cm}^3} \right], \quad N(E) \left[\frac{1}{\text{cm}^3 \text{ eV}} \right]$$

La probabilidad de que un electrón ocupe un estado electrónico con energía E está dado por la función de distribución de Fermi-Dirac (distribución de Fermi) ⑧

$$F(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/k_B T}}$$

k_B : constante de Boltzmann

T : temp. absoluta en K

E_F : energía del nivel de Fermi.

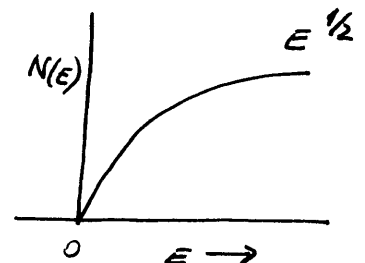
La energía de Fermi es la energía a la que la probabilidad de ocupación por un electrón es exactamente $1/2$.

$$F(E) \simeq e^{-(E-E_F)/k_B T} \quad \text{para } (E-E_F) > 3k_B T$$

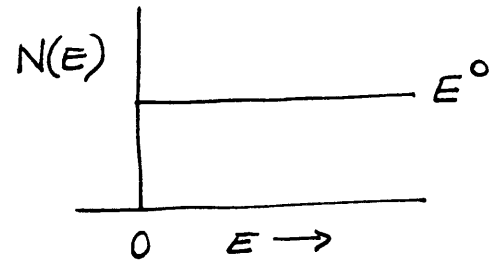
$$F(E) \simeq 1 - e^{-(E-E_F)/k_B T} \quad \text{para } (E-E_F) < 3k_B T$$

Ecuación de Schrödinger $\rightarrow$ densidad de estados
dimensión del sistema determina densidad de estados

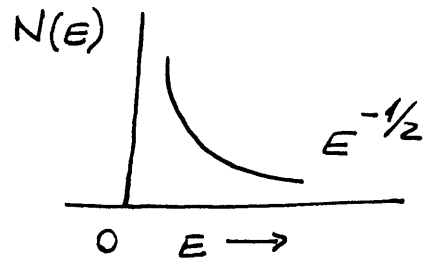
$$3D \Rightarrow N(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} \sim \sqrt{E}$$



$$2D \Rightarrow N(E) \simeq E^0$$

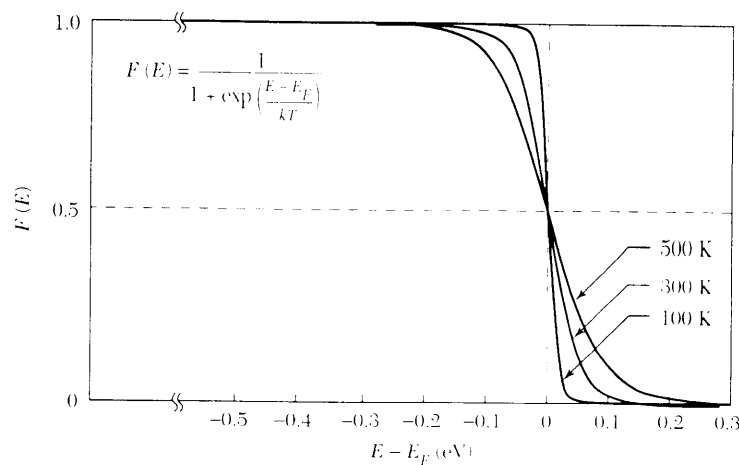


$$1D \Rightarrow N(E) \simeq 1/\sqrt{E}$$

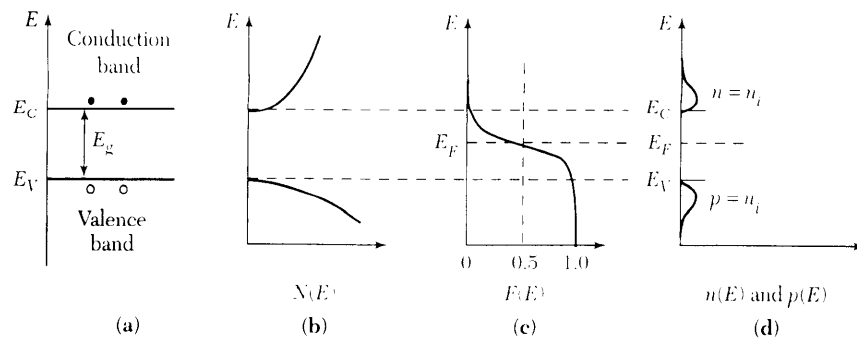


Las dimensiones estan relacionadas con los grados de libertad del movimiento de electrones.

Estructuras 3D pueden tener restringido el movimiento de electrones a 2D (Quantum well)



Fermi distribution function $F(E)$ versus $(E - E_F)$ for various temperatures.



Intrinsic semiconductor. (a) Schematic band diagram. (b) Density of states. (c) Fermi distribution function. (d) Carrier concentration.

Existe un gran número de estados permitidos en la banda de conducción. Sin embargo, en un semiconductor intrínseco no hay muchos electrones en la banda de conducción. Por lo tanto, la probabilidad de un electrón ocupando uno de estos estados es pequeña.

También hay un gran número de estados permitidos en la banda de valencia, la mayoría de estos están ocupados por electrones. Así, la probabilidad de un electrón ocupando uno de estos estados en la banda de valencia es ~ 1 . Existirán solo unos pocos estados de electrón no ocupados, esto es, hoyos, en la banda de valencia.

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c (k_B T)^{-3/2} \int_0^{\infty} E^{1/2} e^{[-(E-E_F)/k_B T]} dE \quad (*)$$

donde $N_c = 12 \left(2\pi m_n k_B T / h^2 \right)^{3/2}$ para Si
 (masa efectiva)

$$j \quad N_c = 2 \left(2\pi m_n k_B T / h^2 \right)^{3/2} \text{ para GaAs (arseniato de galio)} \quad (11)$$

donde fue usado $E_{top} = \infty$ ya que $F(E) \sim 0$
cuando $(E - E_c) \gg k_B T$

Integrando (*) obtenemos

$$n = N_c e^{E_F / k_B T}$$

$$\text{si usamos } E_c \neq 0 \Rightarrow n = N_c e^{[-(E_c - E_F) / k_B T]} \quad (**)$$

donde N_c : densidad efectiva de estados en la banda de conducción.

$$\begin{aligned} N_c &\simeq 2.86 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3} & \text{Si} \\ &\simeq 4.7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} & \text{GaAs} \end{aligned} \quad T = 300 \text{ K}$$

Similarmemente se puede obtener la densidad de hoyos, p , en la banda de valencia

$$p = N_v e^{[-(E_F - E_v) / k_B T]} \quad (***)$$

$$N_v = 2 \left(2\pi m_p k_B T / h^2 \right)^{3/2}$$

\
densidad efectiva de estados en la banda de valencia.

Para un semiconductor intrínseco, el número de electrones por unidad de volumen en la banda de conducción es igual al número de hoyos por unidad de volumen en la banda de valencia, $n = p = n_i$, donde n_i es la densidad de portador intrínseca. (ver fig. pag. 10)

El nivel de Fermi para un semiconductor intrínseco es obtenido igualando (**) y (***)

$$E_F = E_i = (E_c + E_v)/2 + (k_B T/2) \ln(N_v/N_c)$$

A temp. ambiente ($T = 300\text{K}$), el segundo término es mucho más pequeño que el gap de banda. Así, el nivel de Fermi intrínseco E_i de un semiconductor intrínseco generalmente está muy cerca de la mitad del gap de banda.

Entonces

$$np = n_i^2$$

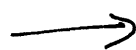
$$n_i^2 = N_c N_v e^{(-E_g/k_B T)}$$

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{(-E_g/2k_B T)}$$

con $E_g = E_c - E_v$

Donadores y Aceptadores

semiconductor dopado con impurezas



semiconductor extrínseco

y

niveles de energía de impurezas son introducidos

En Silicio, si reemplazamos un átomo por uno de arsénico con 5 electrones de valencia $\Rightarrow$ 1 electrón "donado" a la banda de conducción. (Es ionizado $\Rightarrow$ llegando a ser un electrón de conducción a una temperatura moderada).

En este caso, arsénico es llamado "donador" y el silicio llega a ser de tipo n por la adición de un transportador de carga negativa.

Si reemplazamos un átomo de Silicio por uno de boro, con 3 electrones de valencia, un electrón adicional es "aceptado" para formar 4 enlaces covalentes alrededor del boro, y una carga positiva, hoyo, es creado en la banda de valencia. Este es un semiconductor tipo p , y el boro es un "aceptador".

Energía de ionización para el donador

$$E_D \approx \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon_s} \right)^2 \left(\frac{m_n}{m_0} \right) E_H$$

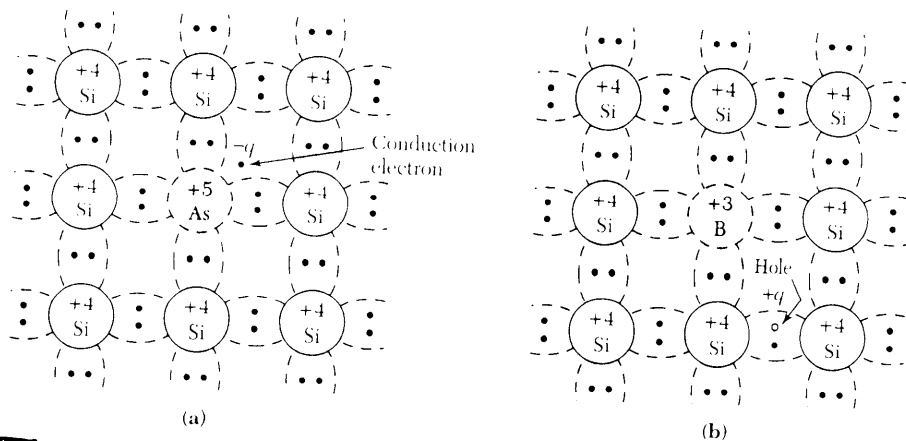
(como campo eléctrico es afectado)
 permitividad espacio libre
 masa efectiva del electrón
 niveles de energía de átomos de hidrógeno aislados
 masa de electrón libre
 permitividad de semiconductor

$$E_D \approx 0.025 \text{ eV en Silicio.}$$

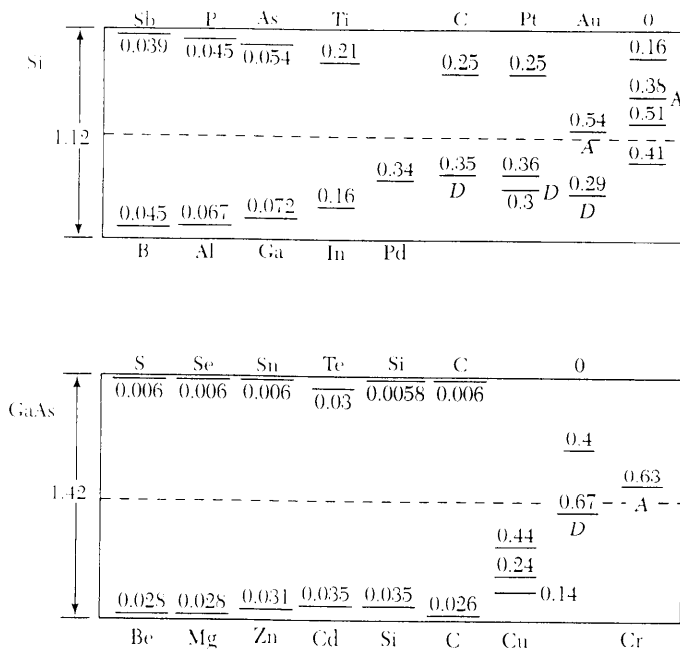
$$E_D \approx 0.007 \text{ eV en GaAs.}$$

medidos desde el borde de la banda de conducción

La energía de ionización para aceptadores, medida desde el borde de la banda de valencia, es 0.05 eV para Si y GaAs. (Usando modelo basado en átomo de hidrógeno).



Schematic bond pictures for (a) n-type Si with donor (arsenic) and (b) p-type Si with acceptor (boron).



Measured ionization energies (in eV) for various impurities in Si and GaAs. The levels below the gap center are measured from the top of the valence band and are acceptor levels unless indicated by *D* for donor level. The levels above the gap center are measured from the bottom of the conduction band and are donor levels unless indicated by *A* for acceptor level.

El modelo del átomo de hidrógeno (simple) no puede tomar en cuenta los detalles de la energía de ionización, particularmente para los niveles de impurezas profundos en semiconductores (esto es, con energías de ionización $\gg 3k_B T$)

Semiconductor no degenerado

Un semiconductor se dice no degenerado cuando la concentración de electrones o hoyos es mucho menor que la densidad efectiva de estados en la banda de conducción o en la banda de valencia. En otras palabras, el nivel de Fermi E_F es al menos $3k_B T$ sobre E_v o $3k_B T$ bajo E_c .

Para donadores de superficie (shallow donors), donde los niveles de energía nuevos producto de impurezas no están más alejados que $3k_B T$ desde el borde más bajo de la banda de conducción, en Si y GaAs hay usualmente suficiente energía termal para ionizar todas las impurezas donantes a temperatura ambiente (T_{room}) y así proporcionar el mismo número de electrones en la banda de conducción $\Rightarrow$ condición de ionización completa.

$$\Rightarrow n = N_D$$


 concentración de donantes

Los electrones en la banda de conducción son móviles.
Los iones donantes son no móviles.

Fermi level $E_C - E_F = k_B T \ln (N_C / N_D)$ ✓

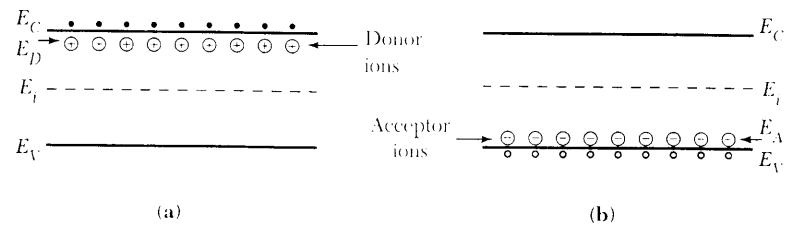
Para aceptadores de superficie (shallow acceptors), si hay ionización completa, la concentración de hoyos es

$p = N_A$
 ↑
 concentración de aceptadores

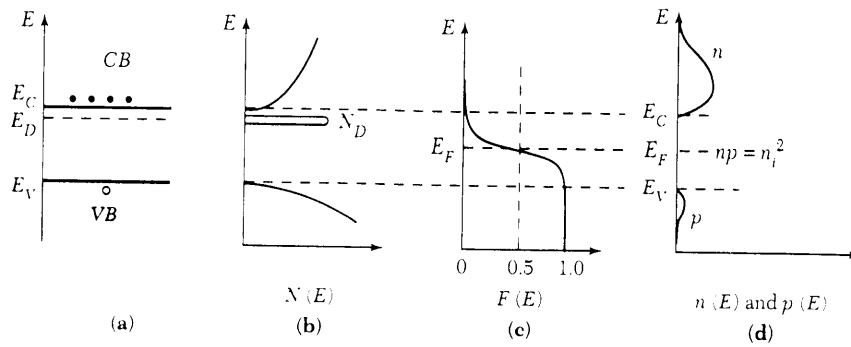
Fermi level $E_F - E_V = k_B T \ln (N_V / N_A)$ ✓✓

✓ Si $N_D \uparrow \Rightarrow E_C - E_F \downarrow \Rightarrow E_F$ se moverá más cerca del fondo de la banda de conducción.

✓✓ Si $N_A \uparrow \Rightarrow E_F - E_V \downarrow \Rightarrow E_F$ se moverá más cerca de la parte superior de la banda de valencia



Schematic energy band representation of extrinsic semiconductors with (a) donor ions and (b) acceptor ions.



n -Type semiconductor. (a) Schematic band diagram. (b) Density of states. (c) Fermi distribution function. (d) Carrier concentration. Note that $np = n_i^2$.

Es útil expresar las densidades de electrón y hoyos en términos de la concentración de transportadores intrínsecos n_i y el nivel de Fermi intrínseco E_i , ya que E_i es usado frecuentemente como un nivel de referencia en la discusión de semiconductores extrínsecos.

$$\begin{aligned} n &= N_c e^{[-(E_c - E_F)/k_B T]} \\ &= N_c e^{[-(E_c - E_i)/k_B T]} e^{[(E_F - E_i)/k_B T]} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow n = n_i e^{[(E_F - E_i)/k_B T]}$$

y de la misma forma,

$$p = n_i e^{[(E_i - E_F)/k_B T]}$$

así, $np = n_i^2 \leftarrow$ ley de acción de masa, válida para semiconductores intrínsecos y extrínsecos bajo conducción en equilibrio térmico.

(20)

En un semiconductor extrínseco, el nivel de Fermi se mueve hacia el fondo de la banda de conducción (tipo n) o a la parte superior de la banda de valencia (tipo p). Ya sea transportadores tipo n o p serán dominantes, pero el producto de los dos tipos de transportadores permanecerá constante a una temperatura dada.

Si impurezas aceptadoras o donadoras están presentes simultáneamente, la impureza que este presente en una mayor concentración determina el tipo de conductividad en el semiconductor. El nivel de Fermi debe autoajustarse para preservar la neutralidad de carga $\Rightarrow$ el total de cargas negativas (electrones y aceptadores ionizados) deben igualar el total de cargas positivas (hoyos y donadores ionizados).

Condición de
ionización
completa $\Rightarrow$ $n + N_A = p + N_D$

Usando $np = n_i^2$ en un semiconductor tipo n (21)

$$\Rightarrow n_n = \frac{1}{2} \left[N_D - N_A + \sqrt{(N_D - N_A)^2 + 4n_i^2} \right], \text{ transportador mayoritario}$$

$$p_n = n_i^2 / n_n \quad \text{transportador minoritario}$$

Semiconductor tipo p :

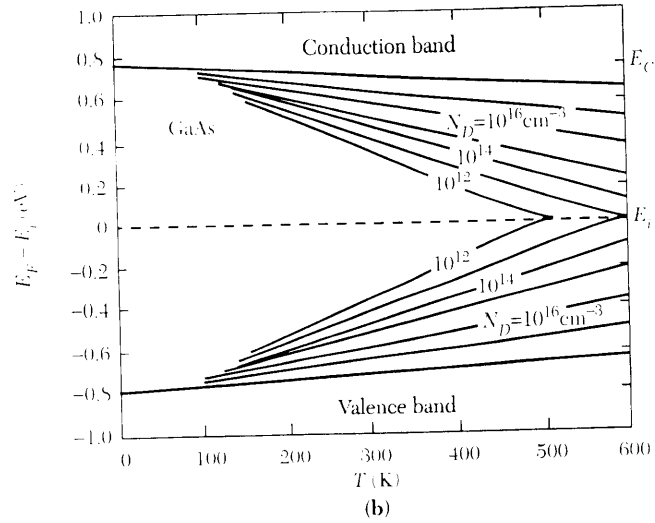
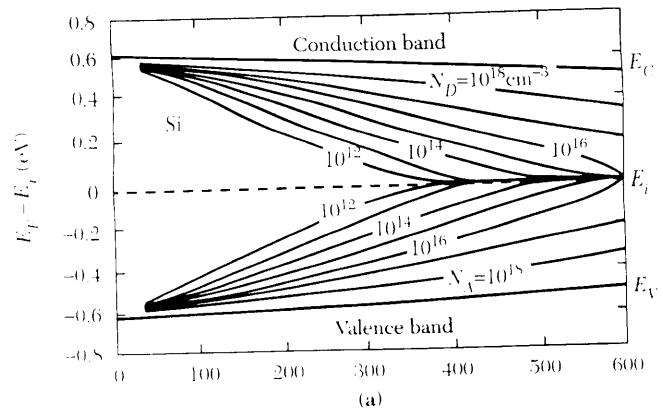
$$\text{transportador mayoritario } p_p = \frac{1}{2} \left[N_A - N_D + \sqrt{(N_D - N_A)^2 + 4n_i^2} \right],$$

$$\text{transportador minoritario } n_p = n_i^2 / p_p$$

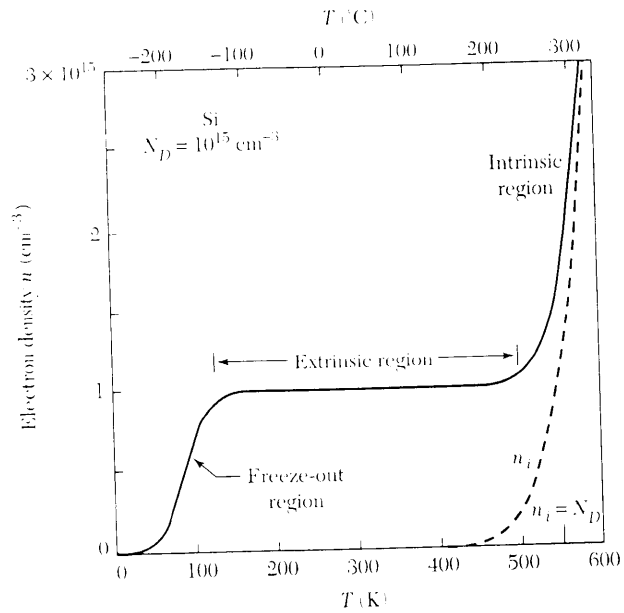
Generalmente $|N_D - N_A| \gg n_i$, entonces

$$n_n \simeq N_D - N_A \quad \text{si } N_D > N_A$$

$$p_p \simeq N_A - N_D \quad \text{si } N_A > N_D$$



■ Fermi level for Si and GaAs as a function of temperature and impurity concentration. The dependence of the bandgap on temperature is shown.⁹



■ Electron density as a function of temperature for a Si sample with a donor concentration of 10^{15} cm^{-3} .

Semiconductor degenerado

Cuando la concentración de dopaje llega a ser igual o mayor que la correspondiente densidad efectiva de estados, la aproximación

$$F(E) \simeq e^{-(E-E_F)/k_B T} \quad \text{para } (E-E_F) > 3k_B T$$

$$F(E) \simeq 1 - e^{-(E-E_F)/k_B T} \quad \text{para } (E-E_F) < 3k_B T$$

no es válida, y la densidad de electrones tiene que ser obtenida por integración numérica.

Para semiconductores tipo n o tipo p dopados fuertemente, E_F estará sobre E_c o bajo E_v .

Una alta concentración de impurezas causa una reducción del gap de banda.