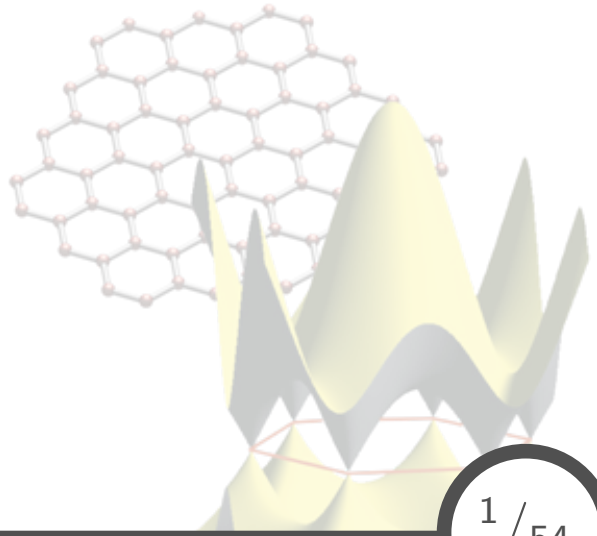
Contenido

7. Semiconductores



Contenido: Tema 07

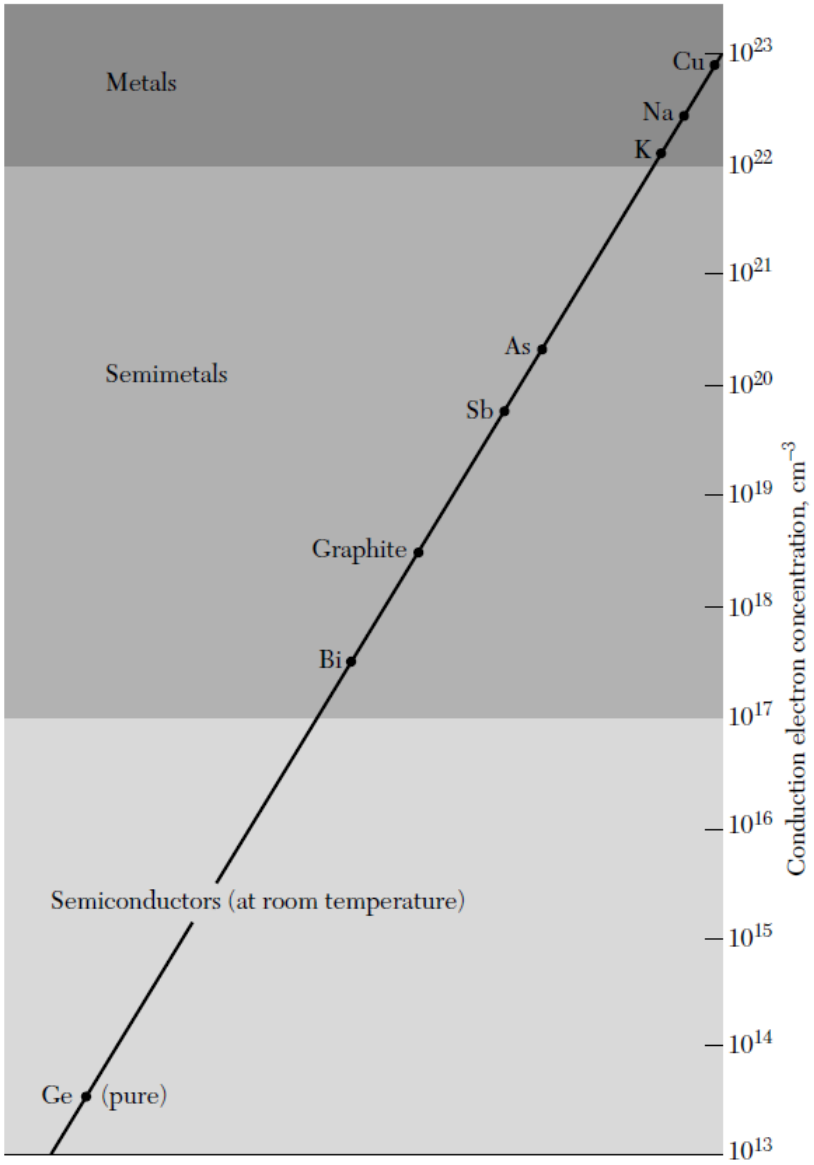
7. Semiconductores
7.1 Fundamentos, definiciones, y caracterización de la brecha de energía
7.2 Ecuaciones de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva
7.3 Semiconductores intrínsecos y portadores de carga
7.4 Semiconductores extrínsecos (dopaje), estados donores (tipo n) y aceptores (tipo p)

Contenido: Tema 07

7. Semiconductores
7.1 Fundamentos, definiciones, y caracterización de la brecha de energía
7.2 Ecuaciones de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva
7.3 Semiconductores intrínsecos y portadores de carga
7.4 Semiconductores extrínsecos (dopaje), estados donores (tipo n) y aceptores (tipo p)

Definición y caracterización de la brecha de energía

Fundamentos

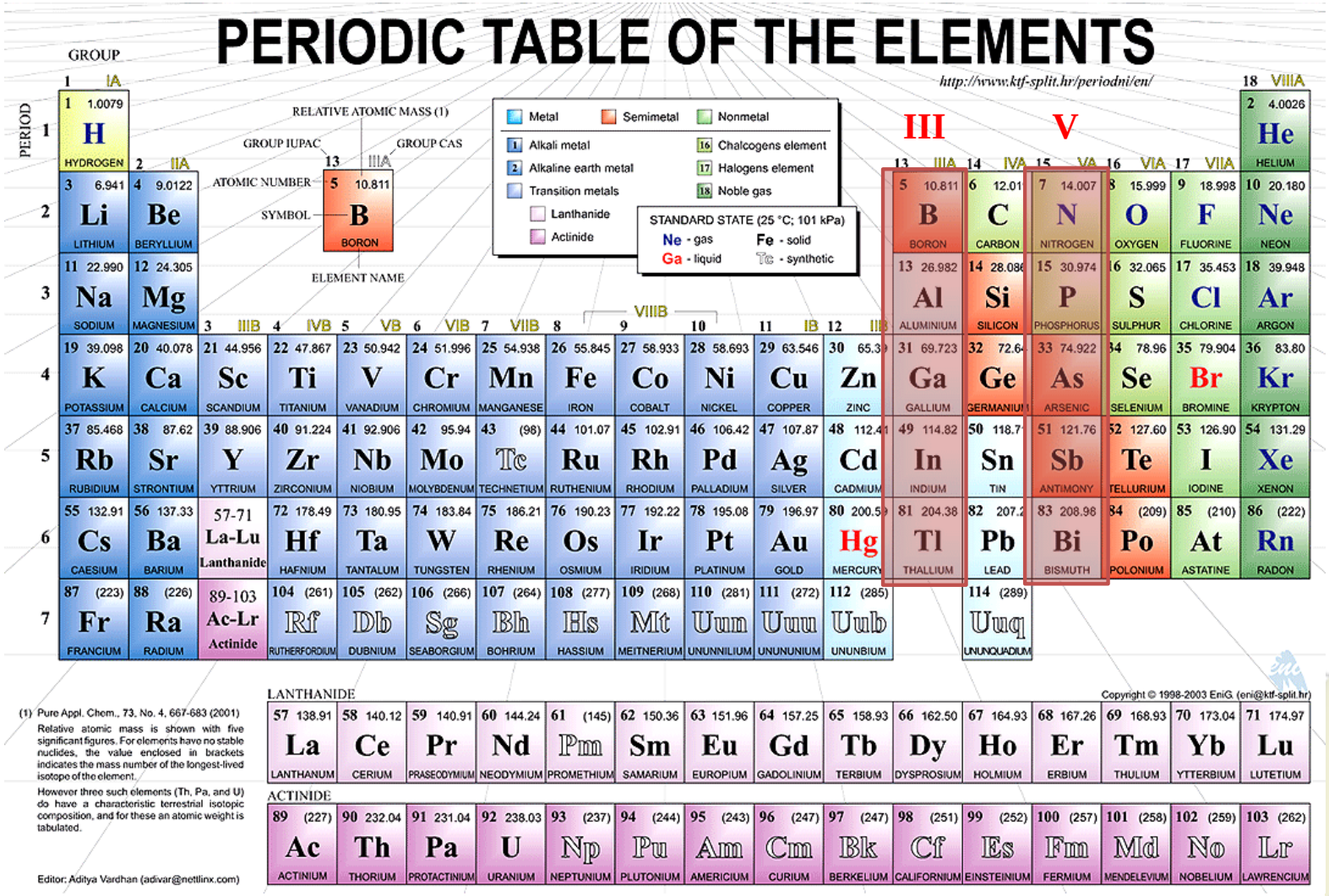


Semiconductores

- Posee una **resistividad** a temp. ambiente en el rango de 10^{-12} a 10^{9} ohm-cm, fuertemente dependiente de la temperatura.
- A 0 K, un monocristal perfecto y puro tendrá comp. de **aislante** (res: 10^{14} ohm-cm).
- Los compuestos semiconductores de fórmula química AB tienen la siguiente nomenclatura:
  - **III-V**: A elemento trivalente y B pentavalente.
  - **II-VI**: A elemento divalente y B hexavalente.
  - **IV-IV**: ambos elementos son cuadrivalentes.

Definición y caracterización de la brecha de energía

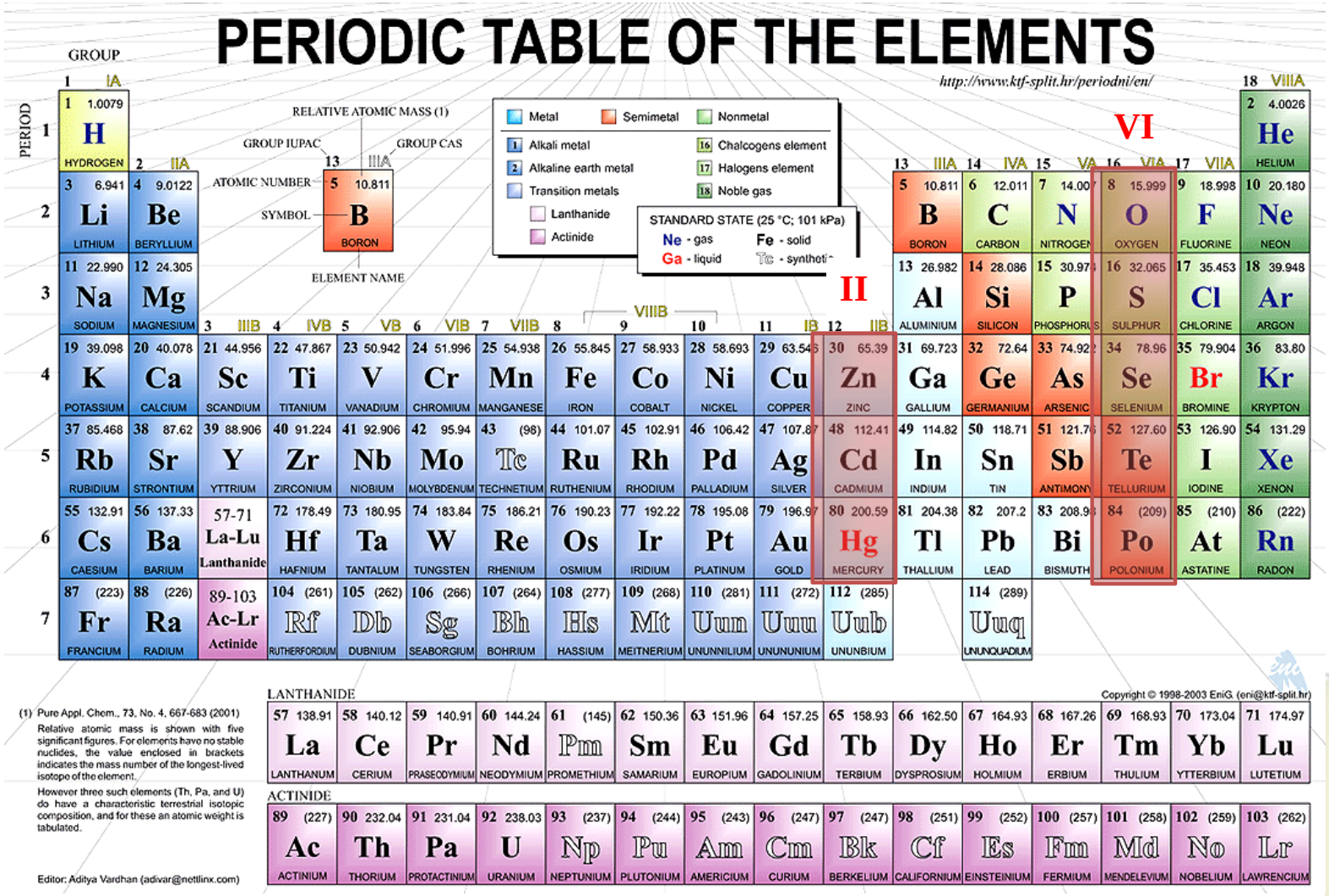
Nomenclatura



Ejemplos de compuestos **III-V** son InSb, GaAs.

Definición y caracterización de la brecha de energía

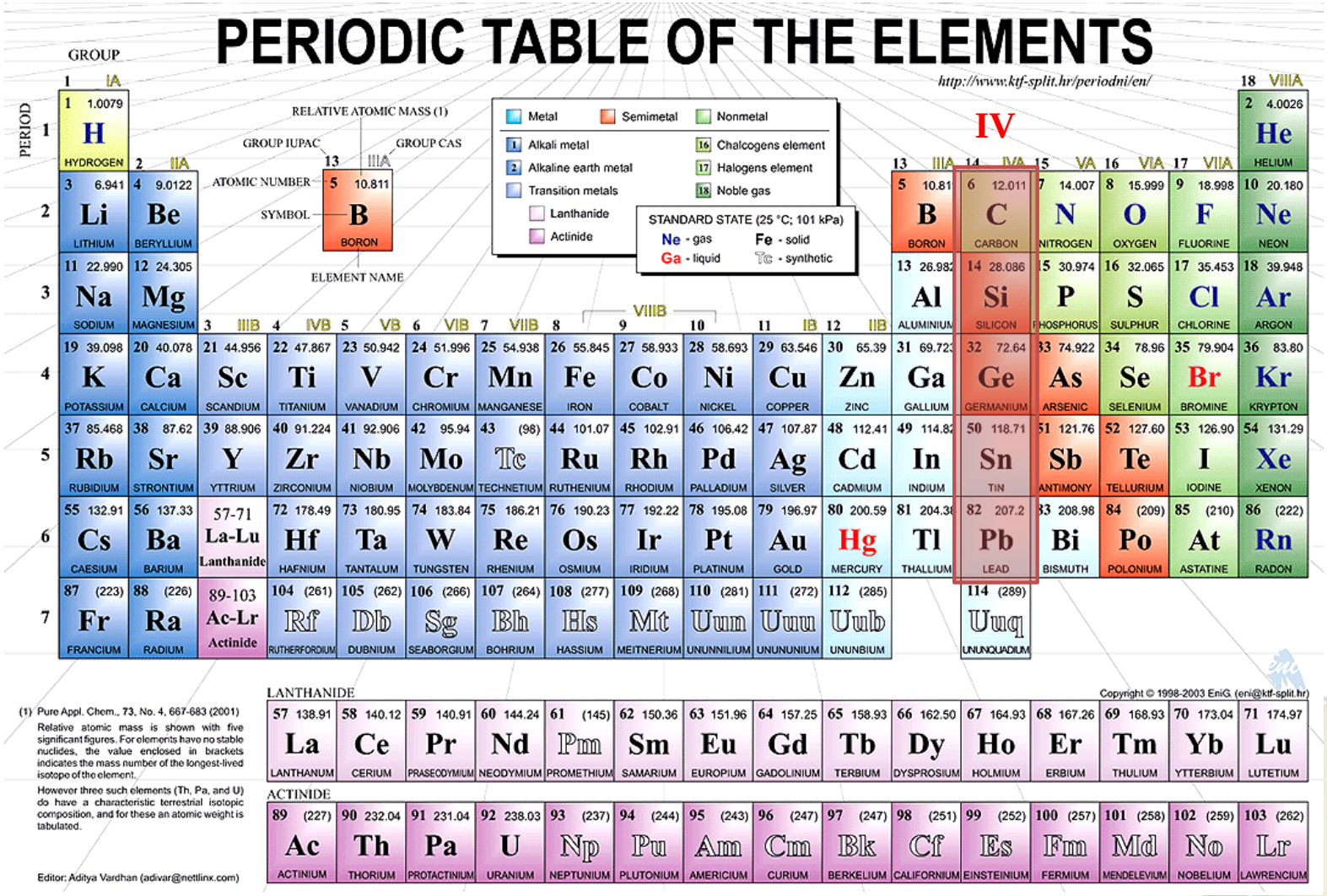
Nomenclatura



Ejemplos de compuestos **II-VI** son ZnS, CdS.

Definición y caracterización de la brecha de energía

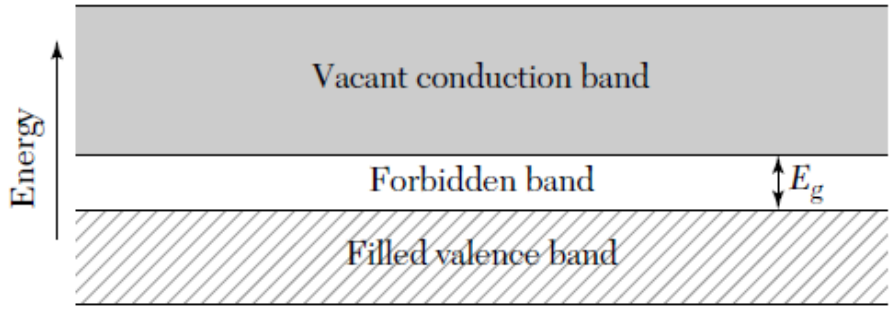
Nomenclatura



Ejemplos de compuestos **IV-IV** es SiC, mientras que los monovalentes **IV** se les conoce como tipo **diamante**: Si, Ge.

Definición y caracterización de la brecha de energía

Brecha de energía (band-gap)

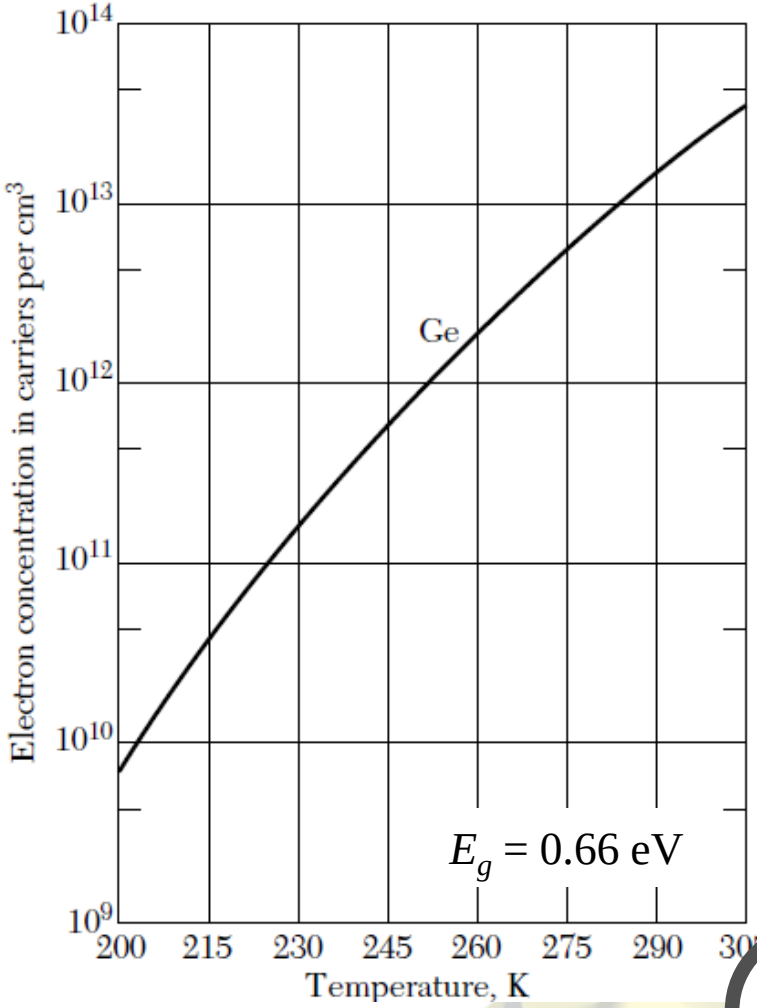


La **conductividad intrínseca** (sin impurezas) a 0 K es nula, debido a que los estados de **valencia** están ocupados, y los de **conducción** desocupados, separados por una **brecha de energía**, definida como:

$$E_g = E_c - E_v,$$

siendo la conductividad controlada fuertemente por la razón E_g/k_BT.

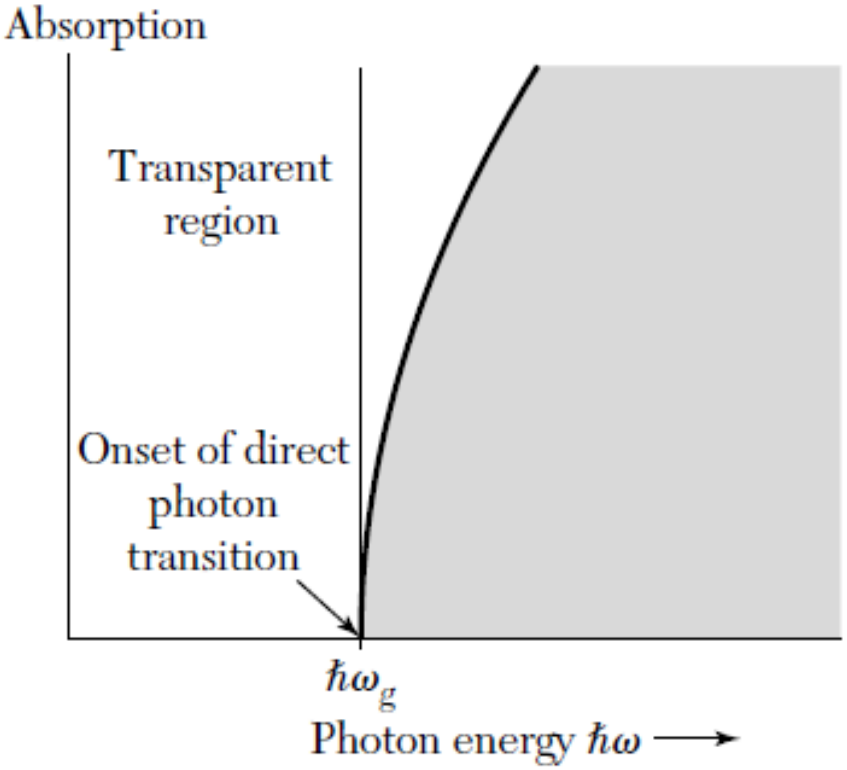
A altas T, los e^- son excitados térmicamente de la banda de valencia, a la de conducción.

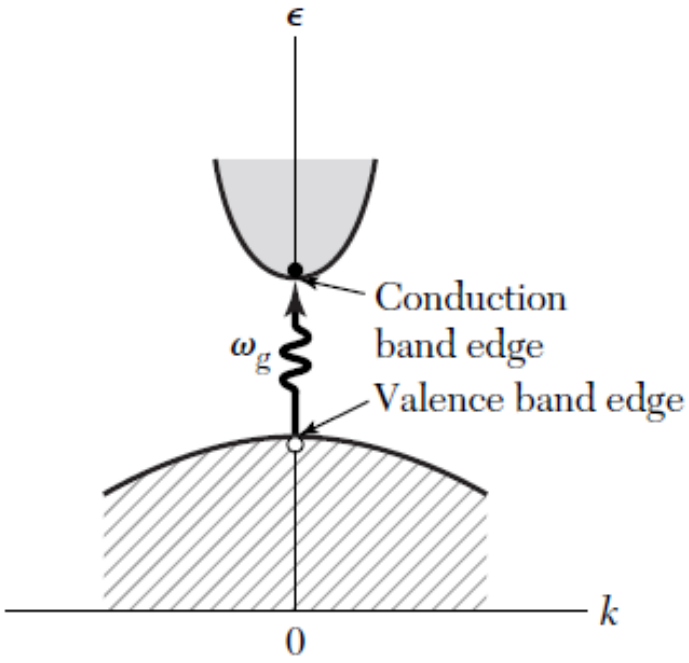


Definición y caracterización de la brecha de energía

Brecha de energía (band-gap): clasificación

Band-gap directo





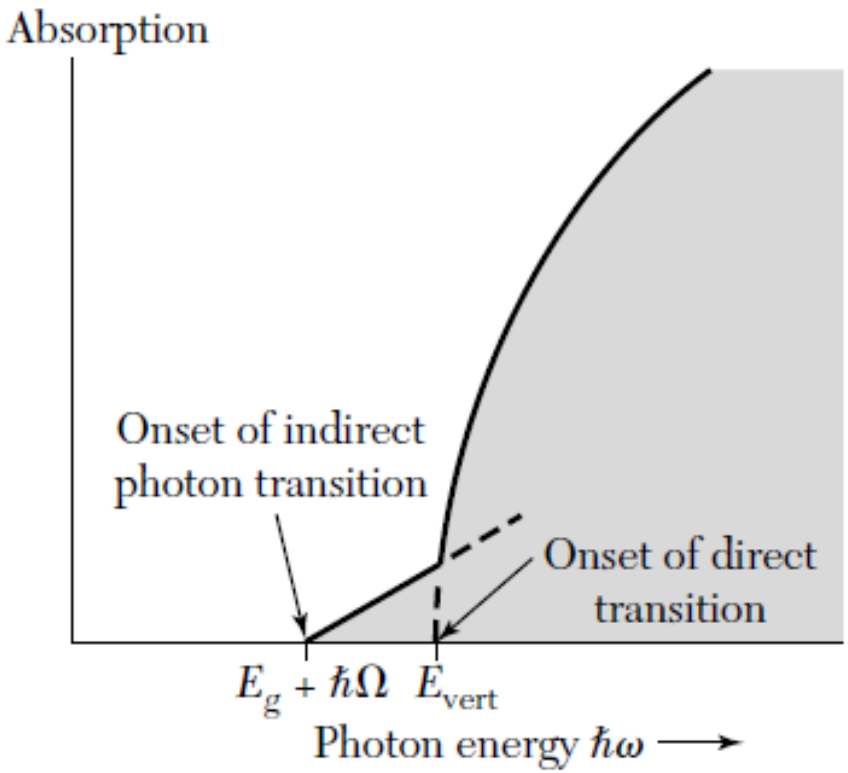
En mediciones de **absorción óptica**, la frontera de absorción contínua a una frecuencia ω_g mide el **band gap** $E_g = \hbar\omega_g$.

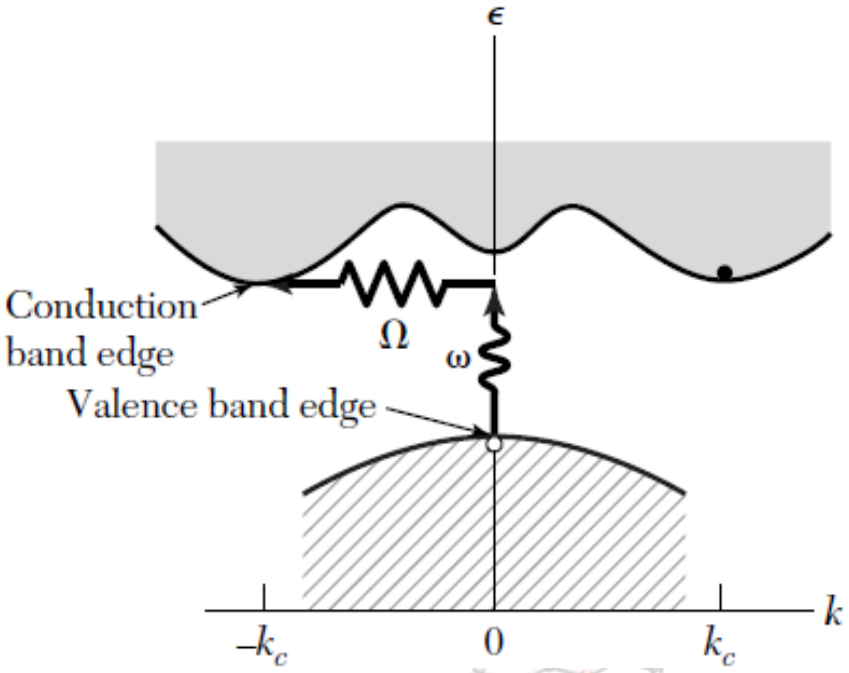
En este proceso, un fotón es absorbido por el cristal con la creación de un **par electrón-hueco**, con el mismo $\mathbf{k}$.

Definición y caracterización de la brecha de energía

Brecha de energía (band-gap): clasificación

Band-gap indirecto





- El band gap involucra un par electrón-hueco **separados** por un vector de onda $\mathbf{k}_c$ apreciable.
- Se requiere de la creación de un **fonón** $\Omega_{\mathbf{K}}$ para mantener la conservación de vector de onda,

$$\mathbf{k}_{photon} = \mathbf{k}_c + \mathbf{K} \approx 0 \quad \& \quad \hbar\omega_g = E_g + \hbar\Omega,$$

Definición y caracterización de la brecha de energía

Brecha de energía (band-gap): ejemplos

Crystal	Gap	E_g, eV 0 K	E_g, eV 300 K	Crystal	Gap	E_g, eV 0 K	E_g, eV 300 K
Diamond	i	5.4		SiC(hex)	i	3.0	—
Si	i	1.17	1.11	Tc	d	0.33	—
Ge	i	0.744	0.66	HgTe[a]	d	−0.30	
αSn	d	0.00	0.00	PbS	d	0.286	0.34–0.37
InSb	d	0.23	0.17	PbSe	i	0.165	0.27
InAs	d	0.43	0.36	PbTe	i	0.190	0.29
InP	d	1.42	1.27	CdS	d	2.582	2.42
GaP	i	2.32	2.25	CdSe	d	1.840	1.74
GaAs	d	1.52	1.43	CdTe	d	1.607	1.44
GaSb	d	0.81	0.68	SnTe	d	0.3	0.18
AlSb	i	1.65	1.6	Cu_2O	d	2.172	—

i=band gap indirecto, d= band gap directo.

Contenido: Tema 07

7. Semiconductores
7.1 Fundamentos, definiciones, y caracterización de la brecha de energía
7.2 Ecuaciones de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva
7.3 Semiconductores intrínsecos y portadores de carga
7.4 Semiconductores extrínsecos (dopaje), estados donores (tipo n) y aceptores (tipo p)

Ecs. de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva

Ecuación de movimiento

Consideremos el mov. de electrones en precencia de un campo aplicado, cuyas funciones de onda tienen un vector de onda $\mathbf{k}$ determinado.

La **velocidad de grupo** es,

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad \forall \quad \omega = \frac{\epsilon}{\hbar},$$

$$v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{d\epsilon}{dk} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{v} = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\epsilon(\mathbf{k}),$$

en donde $\epsilon(\mathbf{k})$ es la **estructura de bandas** del sistema.

Calculando el trabajo realizado por un e^- en precencia de un campo aplicado $\mathbf{E}$ en un intervalo de tiempo δt,

$$\delta\epsilon = F\delta x = -(eE)(v_g\delta t).$$

Ahora,

$$\delta\epsilon = \frac{d\epsilon}{dk}\delta k = \hbar v_g \delta k,$$

comparando resultados,

$$\Rightarrow \quad \hbar\frac{dk}{dt} = -eE,$$

lo cual, expresando en términos de fuerza, queda como:

$$\hbar\frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F}.$$

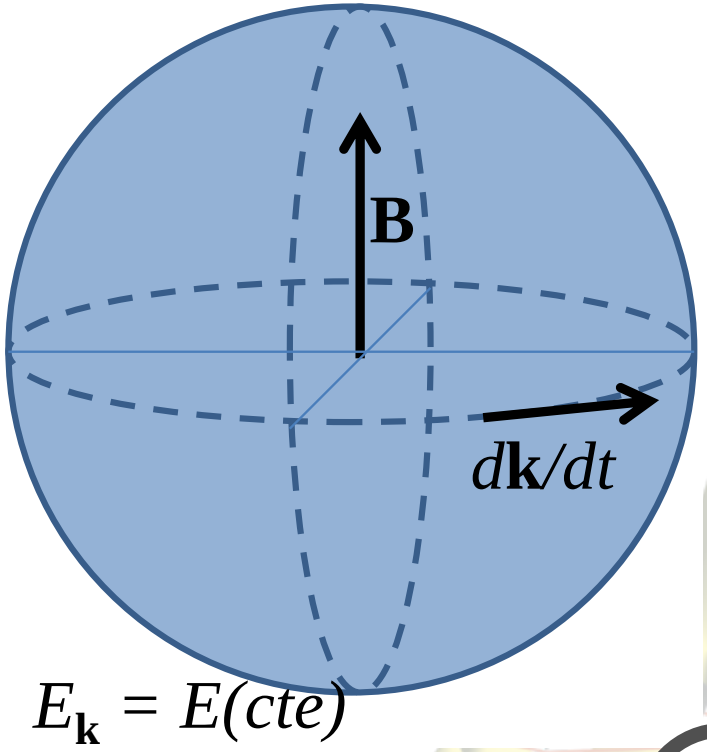
Ecs. de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva

Ecuación de movimiento

La expresión anterior aplica aún en casos cuando se tiene $\mathbf{B}$ [1] aplicado: **fuerza de Lorentz**,

$$\hbar\frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F} = -e\mathbf{v}\times\mathbf{B} \quad \rightarrow \quad \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar^2}\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon(\mathbf{k})\times\mathbf{B} \quad \forall \quad \mathbf{v} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon(\mathbf{k}).$$

- El e^- se mueve en el esp. $\mathbf{k}$ en dirección $\perp$ a $\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon(\mathbf{k})$ $\therefore$ se mueve en una superficie de **energía constante**.
- $|\mathbf{k}_B| = \text{cte} \quad \forall \quad \mathbf{k}_B = \mathbf{k}\cdot\mathbf{B}$.
- El movimiento en $\mathbf{k}$ es en un plano **normal** a $\mathbf{B}$, donde la órbita está definida por la **intersección** de este plano con la superficie de energía cte.



[1] siempre y cuando el campo aplicado no destruya la estructura de bandas

Ecs. de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva

Portadores de carga: huecos

Huecos: Orbitales **vacantes** en una banda **llena**.

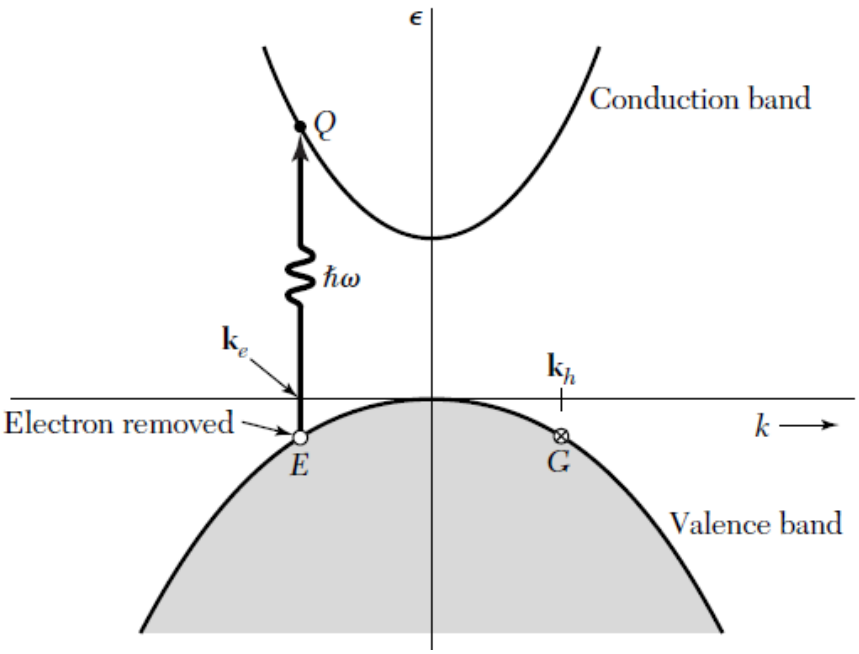
Vector de onda

El vector de onda total de una banda llena es cero,

$$\sum \mathbf{k} = 0,$$

Si un e^- se pierde de un orbital a un vector $\mathbf{k}_e \Rightarrow$ el vector de onda total ahora es $-\mathbf{k}_e$, atribuyéndolo a un hueco,

$$\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e.$$



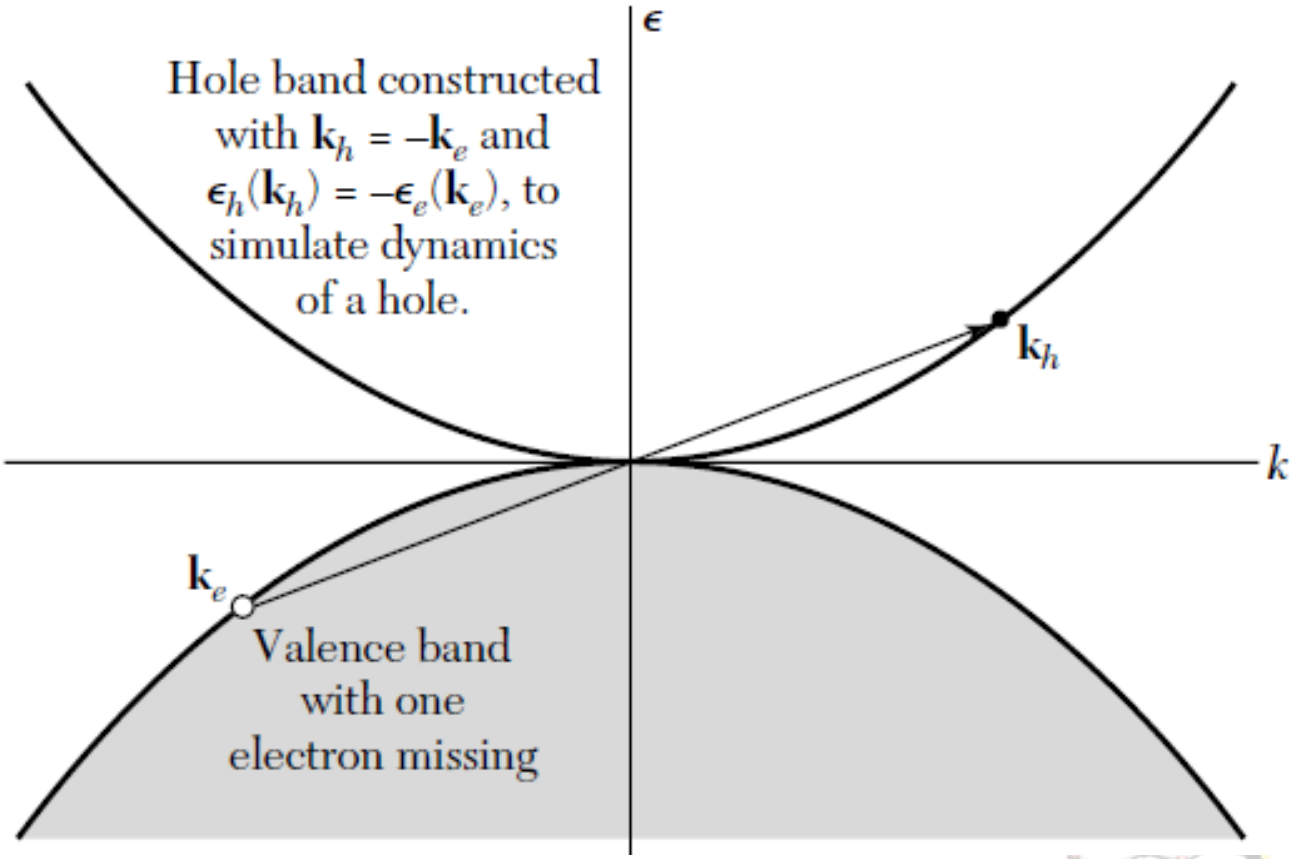
El **hueco** es una descripción alterna de una banda con un electrón menos.

El vector de onda total después de un proceso de **absorción** de un fotón y **creación** de un par electrón-hueco es **inalterado**.

Ecs. de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva

Portadores de carga: huecos

Energía



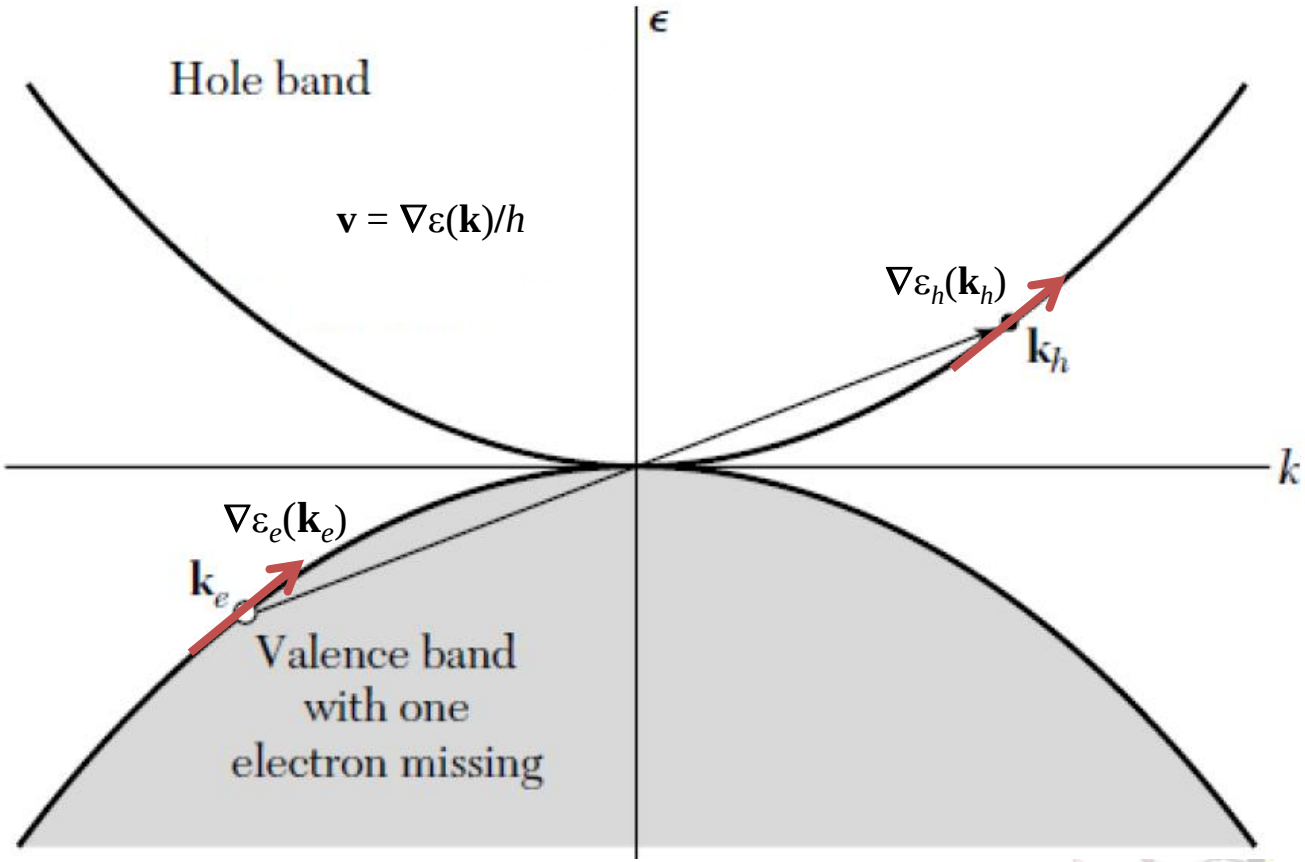
Teniendo en cuenta la simetría de **inversión** de la estructura de bandas,

$$\begin{aligned} \epsilon_e(\mathbf{k}_e) &= \epsilon_e(-\mathbf{k}_e) = -\epsilon_h(-\mathbf{k}_e) = -\epsilon_h(\mathbf{k}_h), \\ \Rightarrow \quad \epsilon_h(\mathbf{k}_h) &= -\epsilon_e(\mathbf{k}_e). \end{aligned}$$

Ecs. de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva

Portadores de carga: huecos

Velocidad



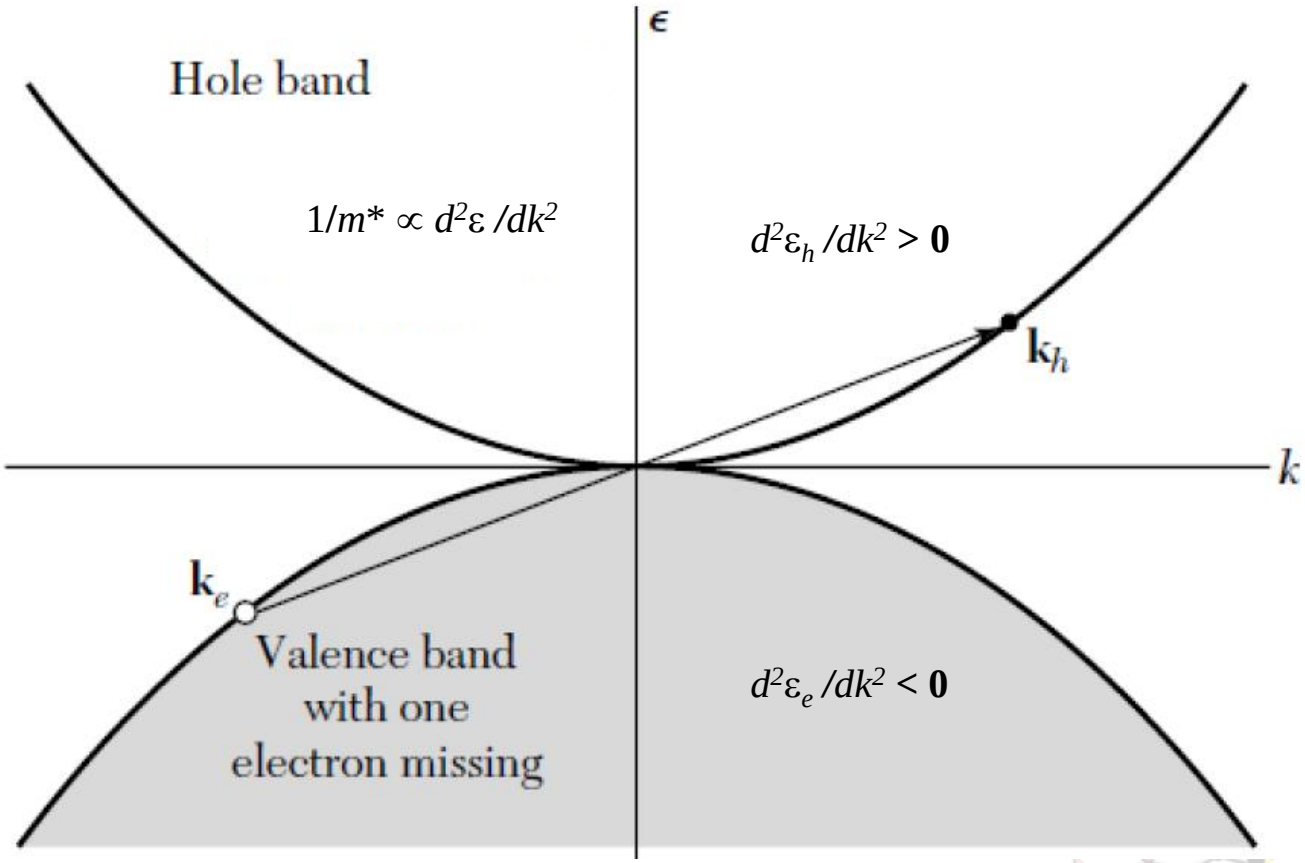
Calculando el gradiente para el electrón y hueco,

$$\begin{aligned} \nabla\epsilon_e(\mathbf{k}_e) &= \nabla\epsilon_h(\mathbf{k}_h), \\ \Rightarrow \quad \mathbf{v}_h(\mathbf{k}_h) &= \mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e). \end{aligned}$$

Ecs. de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva

Portadores de carga: huecos

Masa efectiva



La **masa efectiva** es inversamente prop. a la curvatura de la banda,

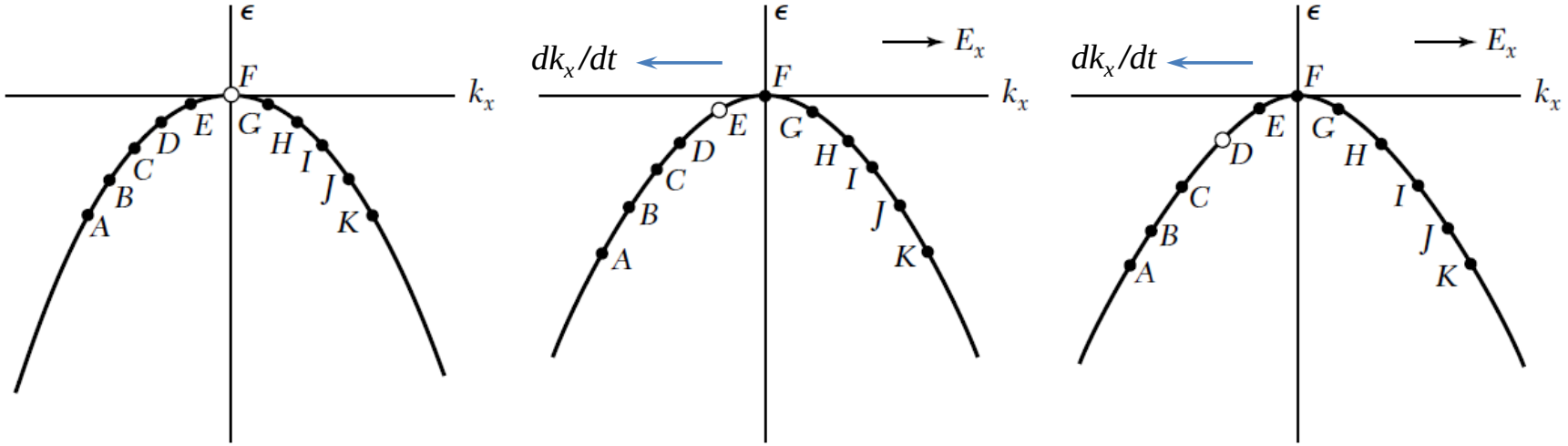
$$(m^*)^{-1} \propto d^2\epsilon/dk^2 \quad \text{donde:} \quad d^2\epsilon_e/dk^2 < 0 \;\; \& \;\; d^2\epsilon_h/dk^2 > 0,$$

$$\Rightarrow \quad m_h^* \quad = \quad -m_e^*.$$

Ecs. de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva

Portadores de carga: huecos

Ecuación de movimiento



La **ec. de movimiento** de e^- en precencia de campos electromagéticos viene dada por,

$$\hbar d\mathbf{k}_e/dt = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B}),$$

para el caso de huecos tenemos:

$$\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e \quad \& \quad \mathbf{v}_h = \mathbf{v}_e \quad \Rightarrow \quad \hbar d\mathbf{k}_h/dt = e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B}),$$

es decir, la ec. de movimiento de un hueco es la de una parícula con **carga positiva** e^+.

Ecs. de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva

Masa efectiva

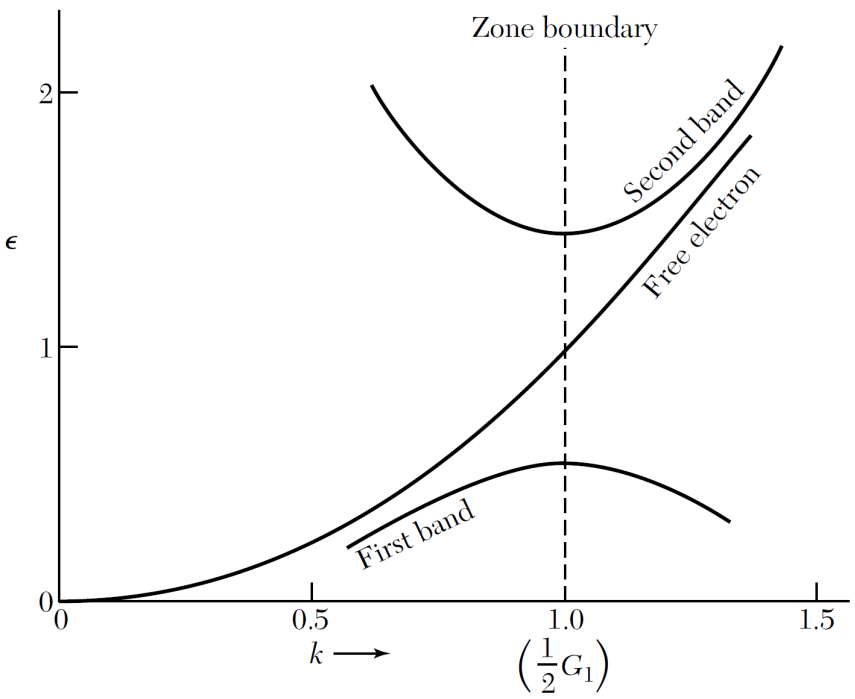
De la relación de dispersión tipo **electrón libre**,

$$\epsilon(k) = (\hbar^2/2m)k^2,$$

se observa que el coef. $\hbar^2/2m$ se relaciona con la **curvatura** de la banda, por tanto el factor físico $1/m$ del sistema la determina.

Para sist. bajo un **potencial periódico**, la est. de bandas muestra un gap en la frontera de la zona, siendo su expresión alrededor de tal punto como:

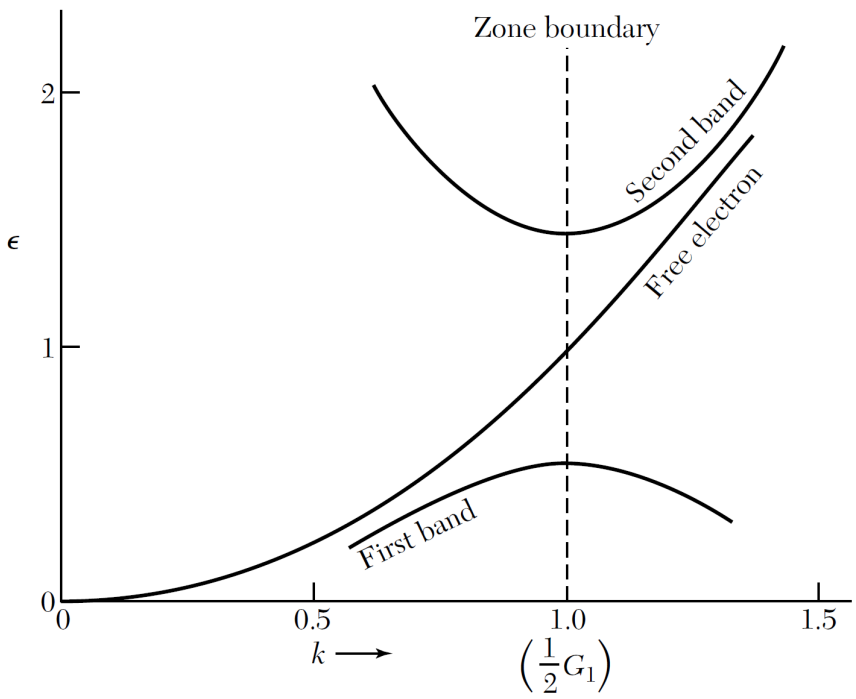
$$\epsilon_\pm(k) = \epsilon_\pm - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(1 \mp \frac{2\lambda}{U}\right).$$



- $k = K - G/2$, coord. relativa a la frontera de la zona.
- $\lambda = \hbar^2 (G/2)^2 / 2m$,
- $U > 0 \rightarrow$ pot. de interacción,
- $\epsilon_\pm \rightarrow$ energía en la frontera.

Ecs. de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva

Masa efectiva



La expresión para la banda de **conducción**, viene dada por:

$$\epsilon_c(k) = \epsilon_c - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(1 - \frac{2\lambda}{U}\right),$$

$$\Rightarrow \quad \epsilon_c(k) = \epsilon_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*},$$

mientras que para la de **valencia**,

$$\epsilon_v(k) = \epsilon_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(1 + \frac{2\lambda}{U}\right)$$

$$\Rightarrow \quad \epsilon_v(k) = \epsilon_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*},$$

en donde se ha definido,

$$\frac{m_e^*}{m} = \frac{1}{2\lambda/U - 1},$$

$$\frac{m_h^*}{m} = \frac{1}{2\lambda/U + 1},$$

$\epsilon_c \rightarrow$ **mínimo** b. de conducción,

$\epsilon_v \rightarrow$ **máximo** banda de valencia

Ecs. de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva

Masa efectiva

El resultado anterior para la descripción de las bandas de conducción y valencia,

$$\epsilon_c(k) = \epsilon_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*},$$
$$\epsilon_h(k) = \epsilon_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*},$$

muestra claramente que los huecos presentan una masa **negativa** cerca del borde de la banda.

La **masa relativa** involucra que un electrón en un potencial periódico es **acelerado**, relativo a la red, en un EMF aplicado.

De la velocidad de grupo, se tiene:

$$v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{d\epsilon}{dk} \rightarrow \frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2\epsilon}{dkdt},$$
$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2\epsilon}{dk^2}\frac{dk}{dt},$$

utilizando la exp. de la fuerza,

$$F = \hbar\frac{dk}{dt} \rightarrow \frac{dv_g}{dt} = \frac{F}{\hbar^2}\frac{d^2\epsilon}{dk^2}$$
$$\therefore \quad F = \left(\frac{\hbar^2}{d^2\epsilon/dk^2}\right)\frac{dv_g}{dt},$$

definiendo a la **masa efectiva**,

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2\epsilon/dk^2} \rightarrow \frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\epsilon}{d}$$

Ecs. de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva

Masa efectiva

En semiconductores de band gap directo, la banda de conducción tiene una dispersión tipo,

$$\epsilon_c = E_g + \hbar^2 k^2 / 2m_e,$$

mientras que las bandas de valencia son **triplemente** degeneradas,

- **heavy holes**,

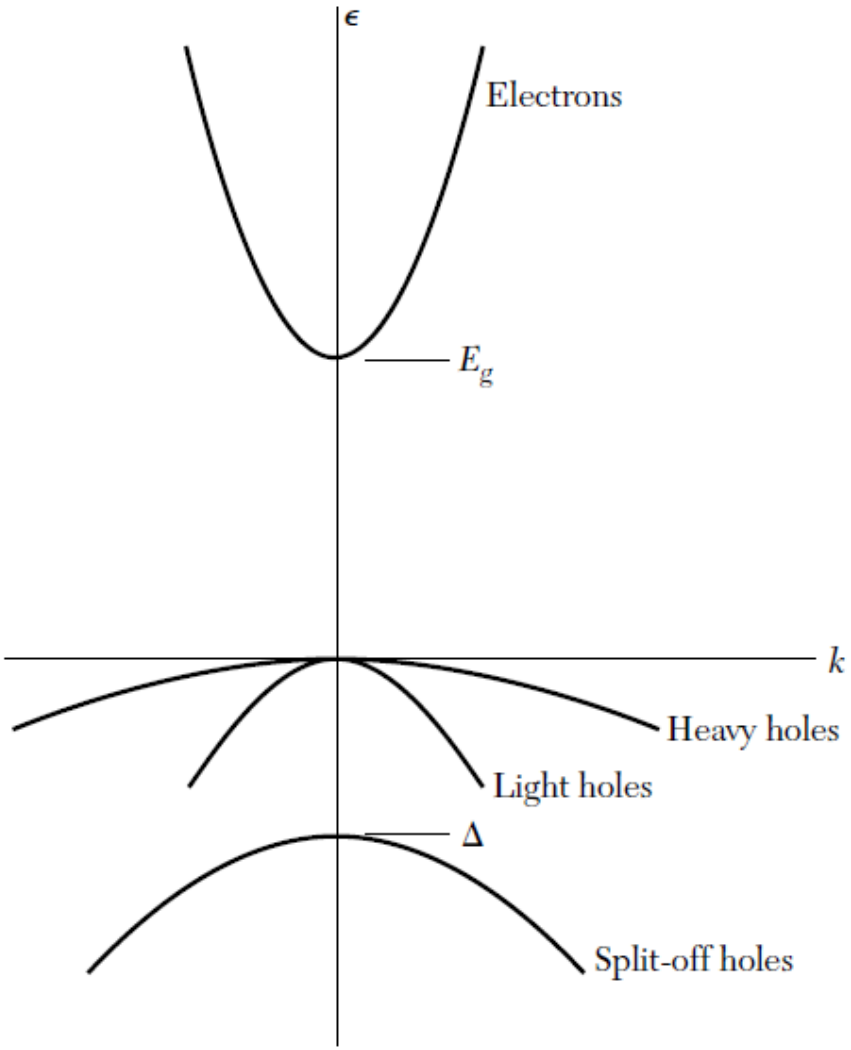
$$\epsilon_v(hh) \approx -\hbar^2 k^2 / 2m_{hh},$$

- **light holes**,

$$\epsilon_v(hh) \approx -\hbar^2 k^2 / 2m_{lh},$$

- **split-off holes** (SO-int.).

$$\epsilon_v(soh) \approx -\Delta - \hbar^2 k^2 / 2m_{soh}.$$



Contenido: Tema 07

7. Semiconductores
7.1 Fundamentos, definiciones, y caracterización de la brecha de energía
7.2 Ecuaciones de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva
7.3 Semiconductores intrínsecos y portadores de carga
7.4 Semiconductores extrínsecos (dopaje), estados donores (tipo n) y aceptores (tipo p)

Semiconductores intrínsecos y portadores de carga

Conductividad

La **conductividad** se define como,

$$\sigma = |e|\mu \;\; \forall \;\; \mu = -(-e)\tau/m^*,$$

en donde μ es la **movilidad** de portadores de carga y τ el **tiempo de relajación**.

Electrones

$$\begin{aligned} \sigma &= |e|\mu_n, \\ \mu_n &= -(-e)\tau/m_n^* > 0. \end{aligned}$$

Huecos

$$\begin{aligned} \sigma &= |e|\mu_p, \\ \mu_p &= -(+e)\tau/(-m_p^*) > 0. \end{aligned}$$

Es decir, ambos tipos de portadores de carga contribuyen con el mismo signo al flujo de corriente,

$$\sigma = |e|\left(n\mu_n + p\mu_p\right),$$

donde n y p son las **concentraciones** de **electrones** y **huecos**, respectivamente, las cuales deben de calcularse para conocer la conductividad.

Semiconductores intrínsecos y portadores de carga

Conductividad

Semiconductores intrínsecos

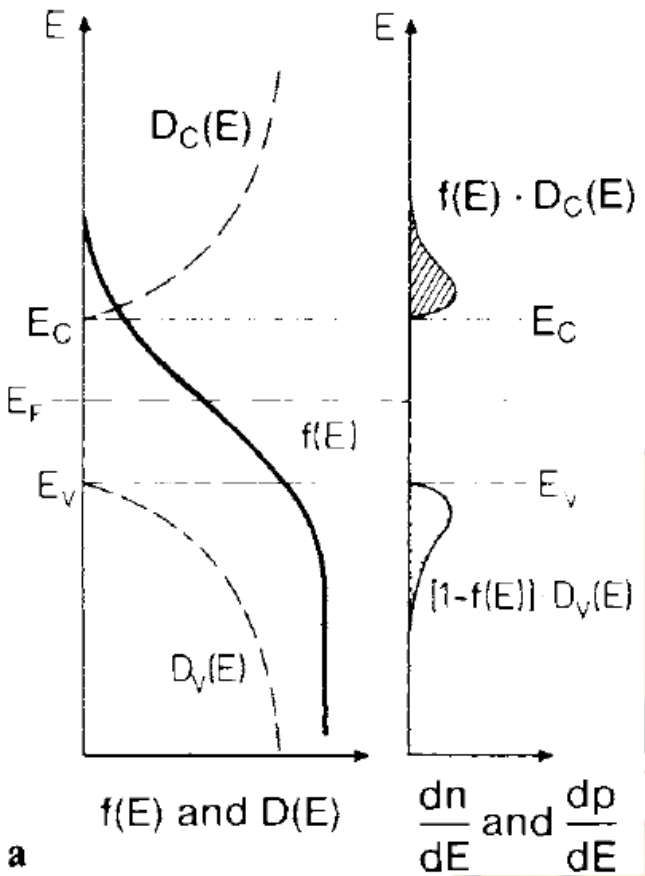
Sistemas en los cuales excitaciones electrónicas desde una banda de valencia a una banda de conducción dan lugar a la creación de un par **electrón-hueco**.

Calculando la concentración de portadores de carga,

$$n = \int_{\epsilon_c}^{\infty} D_c(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon,$$

$$p = \int_{-\infty}^{\epsilon_v} D_v(\epsilon) \left[1 - f(\epsilon, T)\right] d\epsilon.$$

en donde $D_c(\epsilon)$ y $D_v(\epsilon)$ son las DOS de las bandas de **conducción** y de **valencia**, respectivamente.

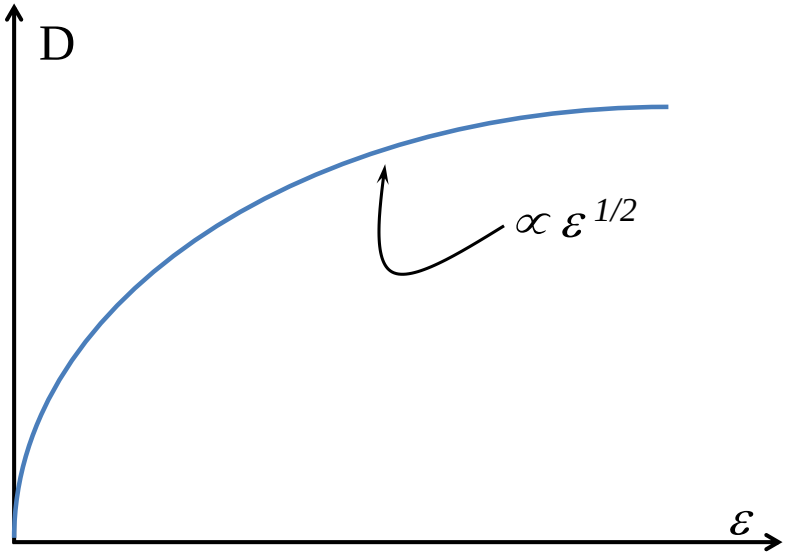


Semiconductores intrínsecos y portadores de carga

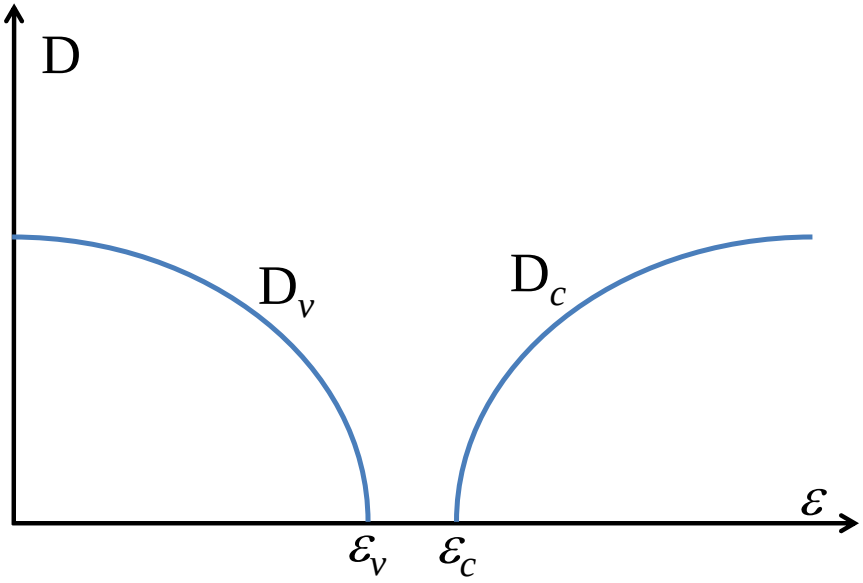
Portadores de carga

En la aproximación parabólica ($m^* =$ cte.) se tiene que,

$$D(\epsilon) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}\epsilon^{1/2}.$$



Para el caso de la banda de conducción y de valencia se tiene,



$$D_c(\epsilon) = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}(\epsilon - \epsilon_c)^{1/2},$$

$$D_v(\epsilon) = \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}(\epsilon_v - \epsilon)^{1/2},$$

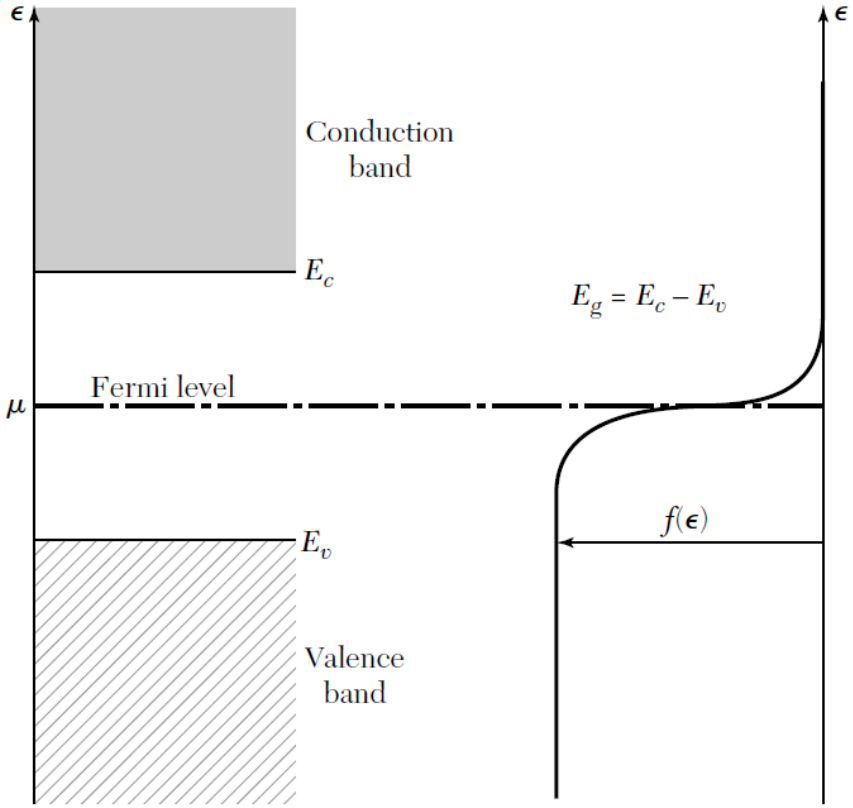
donde: $D(\epsilon) = 0 \;\; \forall \;\; \epsilon_v < \epsilon < \epsilon_c.$

Semiconductores intrínsecos y portadores de carga

Portadores de carga

Dado que el *width* de la función de distribución de Fermi $(2k_BT)$ es **mucho menor** que el band gap típico (1 eV), entonces se puede aproximar $f(\epsilon, T)$,

$$
\begin{aligned}
f(\epsilon, T) &= \frac{1}{\exp\left[(\epsilon - \epsilon_F)/k_BT\right] + 1}, \\
&\approx \exp\left[-\frac{\epsilon - \epsilon_F}{k_BT}\right] \ll 1, \\
\forall \quad & \epsilon - \epsilon_F \gg 2k_BT.
\end{aligned}
$$



Siendo también,

$$
\begin{aligned}
1 - f(\epsilon, T) &= 1 - \frac{1}{\exp\left[(\epsilon - \epsilon_F)/k_BT\right] + 1} = \frac{1}{1 + \exp\left[-(\epsilon - \epsilon_F)/k_BT\right]} \\
&\approx \exp\left[\frac{\epsilon - \epsilon_F}{k_BT}\right].
\end{aligned}
$$

Semiconductores intrínsecos y portadores de carga

Portadores de carga: electrones

Para el caso de **electrones**, tenemos:

$$
\begin{aligned}
n &= \int_{\epsilon_c}^{\infty} D_c(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon \\
\forall \qquad & D_c(\epsilon) = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}(\epsilon - \epsilon_c)^{1/2} \quad \& \quad f(\epsilon, T) \approx \exp\left[-\frac{\epsilon - \epsilon_F}{k_B T}\right], \\
\Rightarrow \quad n &= \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} e^{\epsilon_F/k_B T} \int_{\epsilon_c}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_c)^{1/2} e^{-\epsilon/k_B T} d\epsilon,
\end{aligned}
$$

realizando el siguiente cambio de variable: $x_c = (\epsilon - \epsilon_c)/k_B T$, se tiene,

$$
\begin{aligned}
n &= \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}(k_B T)^{3/2} \exp\left[-\frac{\epsilon_c - \epsilon_F}{k_B T}\right] \int_0^{\infty} x_c^{1/2} e^{-x_c} dx_c, \\
\therefore \quad n &= 2\left(\frac{m_n^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\epsilon_c - \epsilon_F}{k_B T}\right]^{2} \quad \forall \quad \epsilon_c > \epsilon_F.
\end{aligned}
$$

[2] Integral de Gauss: $\int_0^{\infty} x_c^{1/2} e^{-x_c} dx_c = \sqrt{\pi}/2$.

Semiconductores intrínsecos y portadores de carga

Portadores de carga: electrones

Para **huecos**, de manera similar:

$$
\begin{aligned}
p &= \int_{-\infty}^{\epsilon_v} D_v(\epsilon)\left[1 - f(\epsilon, T)\right] d\epsilon \\
\forall \qquad & D_v(\epsilon) = \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}\left(\epsilon_v - \epsilon\right)^{1/2} \quad \& \quad 1 - f(\epsilon, T) \approx \exp\left[\frac{\epsilon - \epsilon_F}{k_B T}\right] \\
\Rightarrow \; p &= \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} e^{\epsilon_F/k_B T} \int_{\epsilon_c}^{\infty} \left(\epsilon_v - \epsilon\right)^{1/2} e^{-\epsilon/k_B T} d\epsilon,
\end{aligned}
$$

proponiendo, de igual manera, un cambio de variable: $x_v = \left(\epsilon_v - \epsilon\right)/k_B T$,

$$
\begin{aligned}
p &= \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}\left(k_B T\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\epsilon_F - \epsilon_v}{k_B T}\right] \int_0^{\infty} x_v^{1/2} e^{-x_v} dx_v, \\
\therefore \; p &= 2\left(\frac{m_p^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\epsilon_F - \epsilon_v}{k_B T}\right] \quad \forall \quad \epsilon_v < \epsilon_F.
\end{aligned}
$$

Semiconductores intrínsecos y portadores de carga

Portadores de carga: electrones

De los resultados para la concentración de portadores de carga,

$$
\begin{aligned}
n &= 2\left(\frac{m_n^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\epsilon_c - \epsilon_F}{k_B T}\right], \\
p &= 2\left(\frac{m_p^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\epsilon_F - \epsilon_v}{k_B T}\right],
\end{aligned}
$$

se observa que tanto en n como en p es necesario conocer ϵ_F,sin embargo, si calculamos el producto np:

$$
np = 4\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^3 \left(m_n^* m_p^*\right)^{3/2} e^{\epsilon_g/k_B T} \quad \forall \quad \epsilon_g = \epsilon_c - \epsilon_v,
$$

se obtiene una función **independiente** del nivel de Fermi.

Además, se observa que al ser el semiconductor caracterizado por ϵ_g, m_n^*, y m_p^*, se puede conocer la **variación** de np en función de T.

Semiconductores intrínsecos y portadores de carga

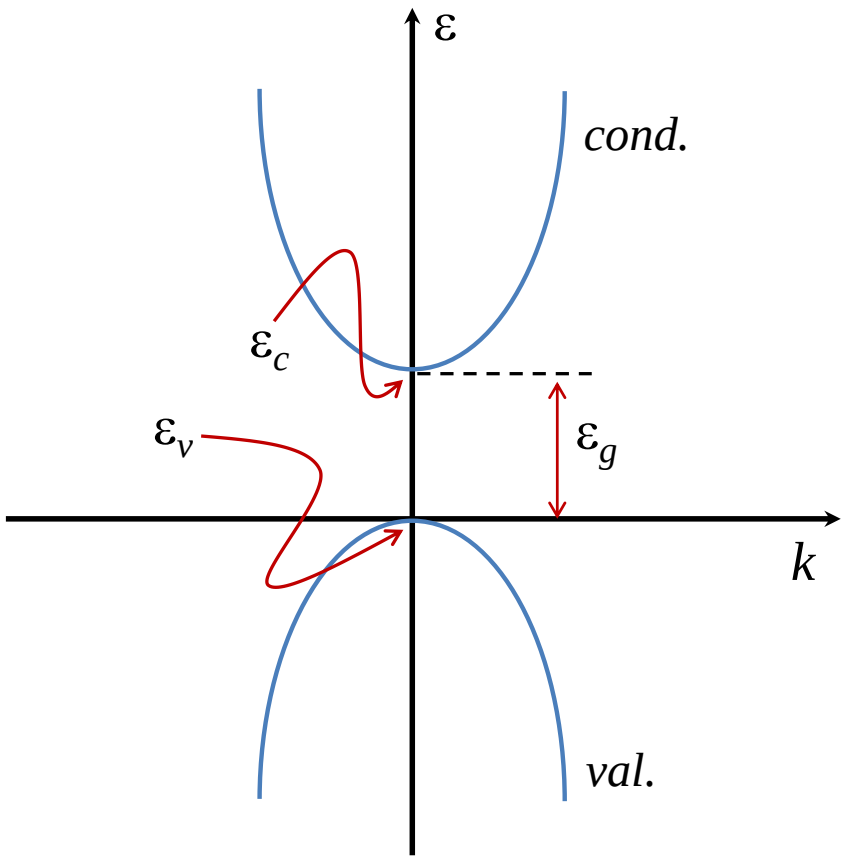
Nivel de Fermi

Para el caso de semiconductores **intrínsecos**, $n = p$, debido a que los electrones excitados se originan de la banda de valencia,

$$n_i = p_i = 2\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \times \left(m_n^* m_p^*\right)^{3/4} e^{\epsilon_g/2k_B T}.$$

Si se conoce n_i, p_i, es posible calcular ϵ_F a una temp. dada, tal que se mantenga la **neutralidad de carga** ($n_i = p_i$),

$$\epsilon_F = \frac{\epsilon_g}{2} + \frac{3k_B T}{4}\ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right).$$



Cuando las bandas de cond. y val. son **idénticas** $\Rightarrow m_p^* = m_n^*$:

$$\therefore \quad \epsilon_F = \epsilon_g/2.$$

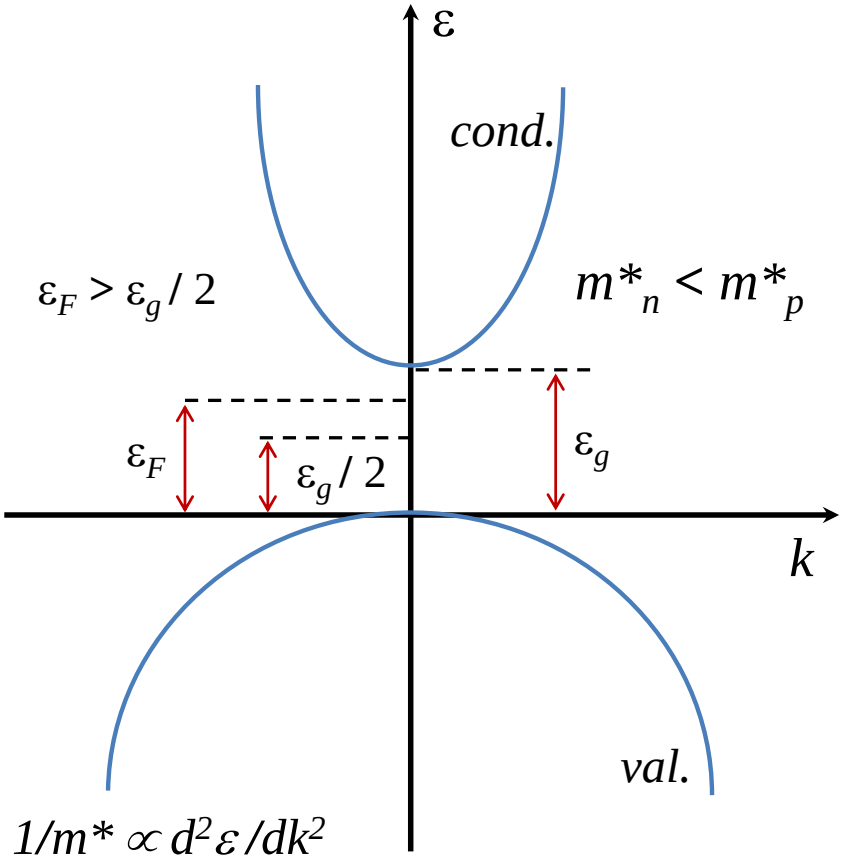
Semiconductores intrínsecos y portadores de carga

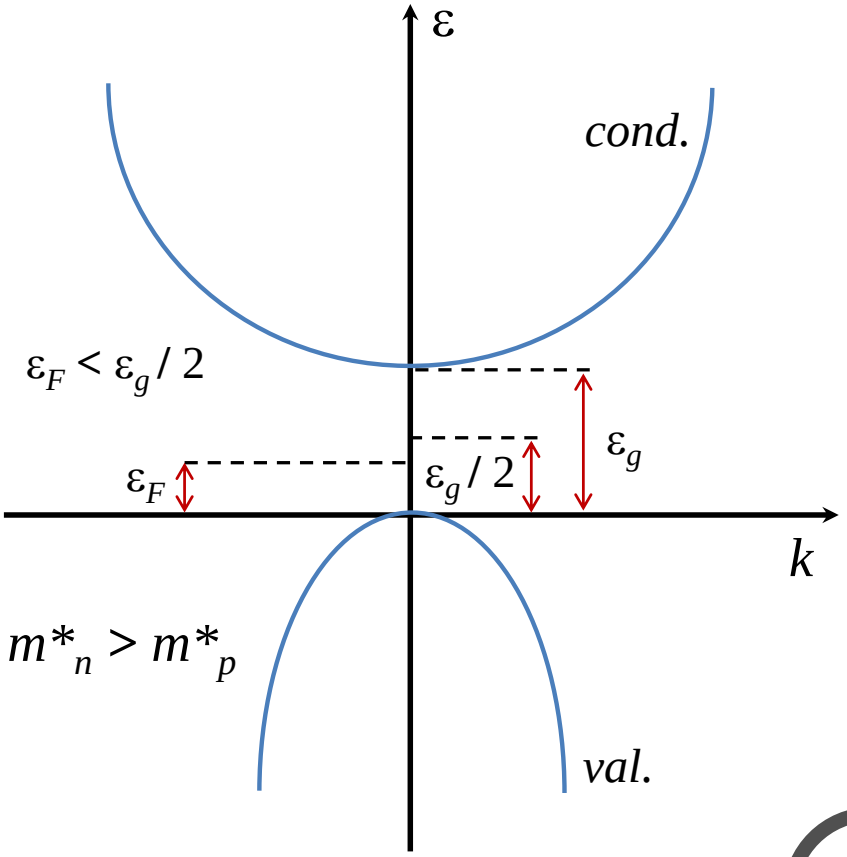
Nivel de Fermi

Para bandas diferentes ($m_p^* \neq m_n^*$), ϵ_F tenderá a alguna banda,

$$\epsilon_F = \epsilon_g/2 + (3k_BT/4)\ln\left(m_p^*/m_n^*\right).$$

dependiendo de la relación entre las **masas efectivas**.





Semiconductores intrínsecos y portadores de carga

Movilidad

Ya con el cálculo de las **concentraciones** de portadores de carga, es posible calcular la conductividad,

$$\sigma = |e|\,(n\mu_n + p\mu_p) \quad \forall \quad \mu = e\tau/m^*,$$

donde los efectos de la temperatura vendrán de los factores n y p:

$$n, p \propto \exp\left[-\epsilon_g/2k_BT\right].$$

Movilidad

Crystal	Electrons	Holes	Crystal	Electrons	Holes
Diamond	1800	1200	GaAs	8000	300
Si	1350	480	GaSb	5000	1000
Ge	3600	1800	PbS	550	600
InSb	800	450	PbSe	1020	930
InAs	30000	450	PbTe	2500	1000
InP	4500	100	AgCl	50	—
AlAs	280	—	KBr (100 K)	100	—
AlSb	900	400	SiC	100	10–20
					$\mathbf{cm^2/V\text{-}s}$

Contenido: Tema 07

7. Semiconductores
7.1 Fundamentos, definiciones, y caracterización de la brecha de energía
7.2 Ecuaciones de movimiento de electrones y huecos, masa efectiva
7.3 Semiconductores intrínsecos y portadores de carga
7.4 Semiconductores extrínsecos (dopaje), estados donores (tipo n) y aceptores (tipo p)

Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Dopaje de semiconductores

Portadores de carga en GaAs (300K),

- Concentración **intrínseca**: $n_i = 5 \times 10^7$ cm^{-3},
- **Dopaje residual** (muestra pura): $n_e = 10^{16}$ cm^{-3}.

Semiconductores extrínsecos

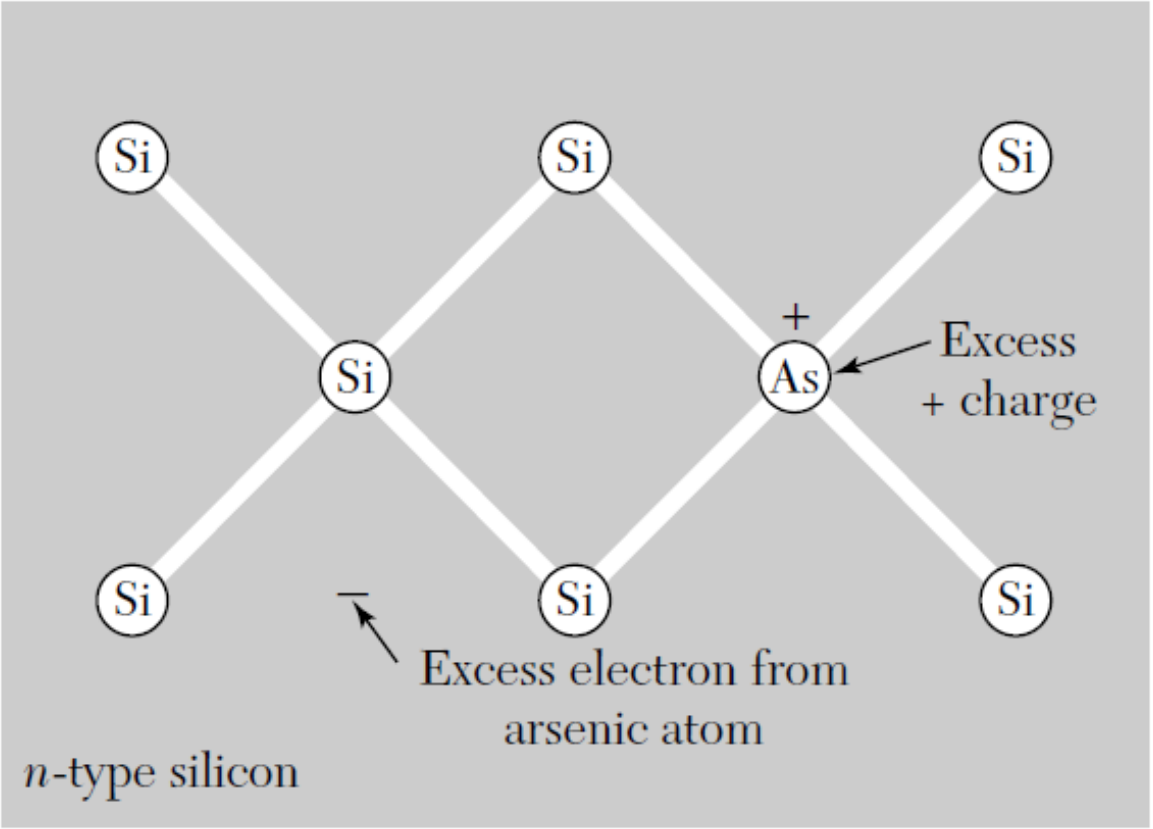
Sistemas en los cuales las **impurezas** electricamente activas incrementan la concentración de electrones o huecos libres, **donando** electrones a la banda de conducción, o huecos a la banda de valencia.

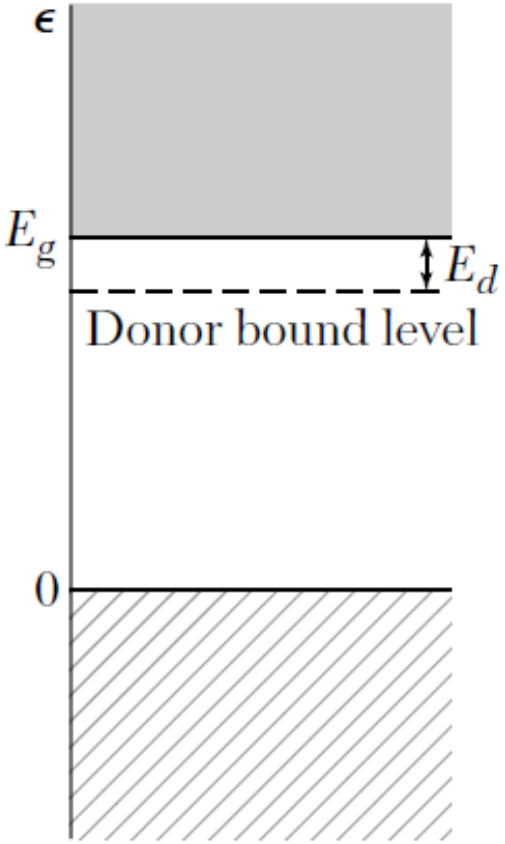
Impurezas

- **Donores**: otorgan un electrón adicional a la nube electrónica, el cual está débilmente ligado al ión donador. Estos sistemas generan un dopaje tipo n.
- **Aceptores**: ganan un electrón de la banda de valencia, dejando en los enlaces existentes un hueco. Generan un dopaje tipo p.

Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Dopaje de semiconductores: donores





- Si(4): matriz; As(5): impureza **donora**.
- El electrón adicional disociado (pseudo-libre) será excitado desde la impureza hasta la banda de **conducción** del sistema.

Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Dopaje de semiconductores: donores

La impureza **donora** se puede considerar como un centro **hidrogenoide**, en el cual la atracción Coulómbica entre electrones de valencia y de core es apantallada por los Si en la vecindad.

Estimando la **energía de ionización** ϵ_D de la impureza donora, mediante el espectro de H:

$$\epsilon_n^H = \frac{e^4 m_e}{2\left(4\pi\epsilon_0\hbar^2\right)^2}\frac{1}{n^2},$$

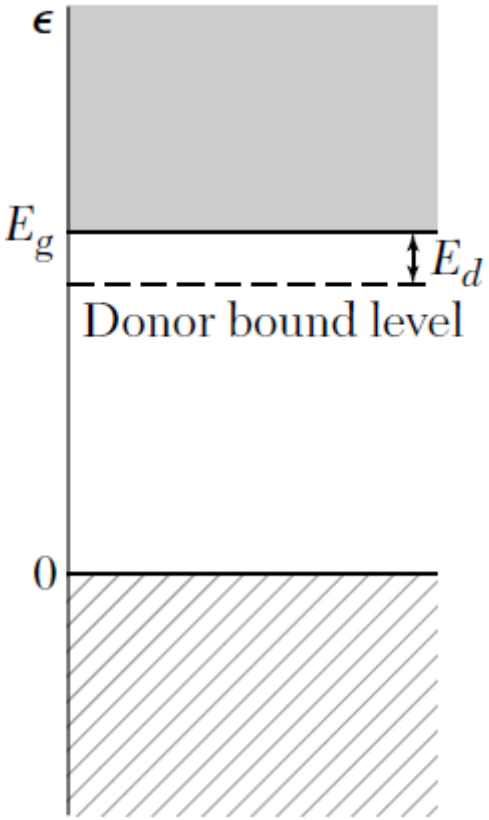
Para el caso del **Si** como host:

$$m_e \to m_n^* = 0.3m_e \;\;\&\;\; \epsilon_0 \to \epsilon_0\epsilon_{Si},$$

para el est. base $(n = 1)$,

$$\epsilon_D = \frac{e^4 \cdot 0.3m_e}{2\left(4\pi\epsilon_0\epsilon_{Si}\hbar^2\right)^2} \approx 30\text{meV},$$

donde el estado base **donor** ϵ_D se localiza a 30 meV por debajo de ϵ_c.



Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

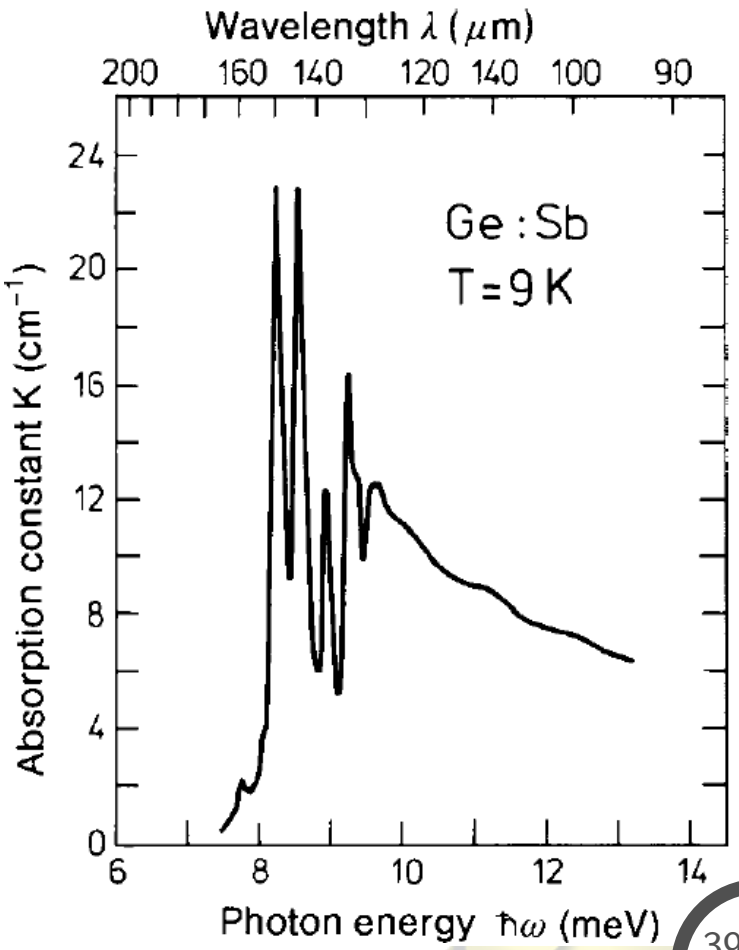
Dopaje de semiconductores: donores

	P	As	Sb
Si	45.	49.	39.
Ge	12.0	12.7	9.6

Del modelo de átomo **hidrogenoide** se obtendrán ϵ_D **idénticas** (para el mismo host) no importando la naturaleza de la impureza, lo cual no concuerda con datos experimentales.

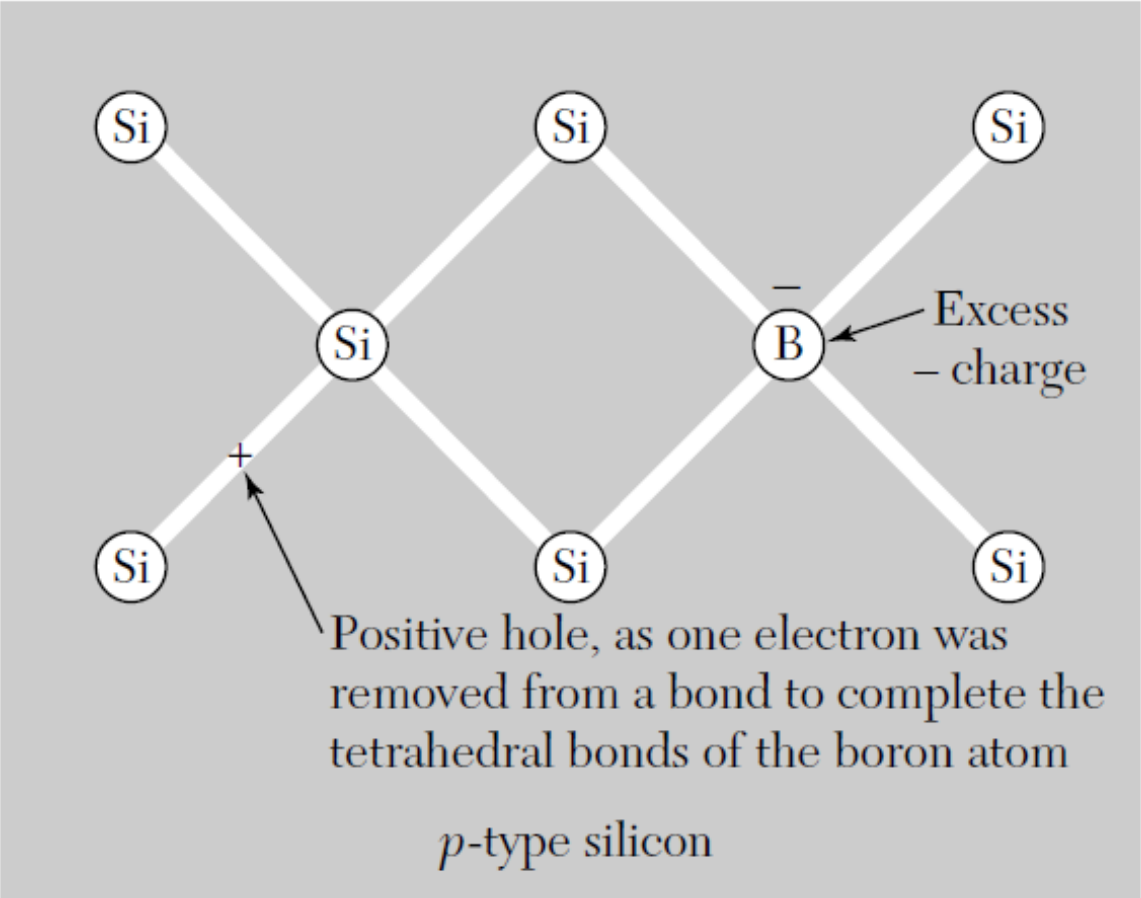
Las dif. vienen de considerar el apantallamiento del host a la impureza mediante la **cte. dieléctrica**, dando sólo una idea del órden de magnitud de ϵ_D.

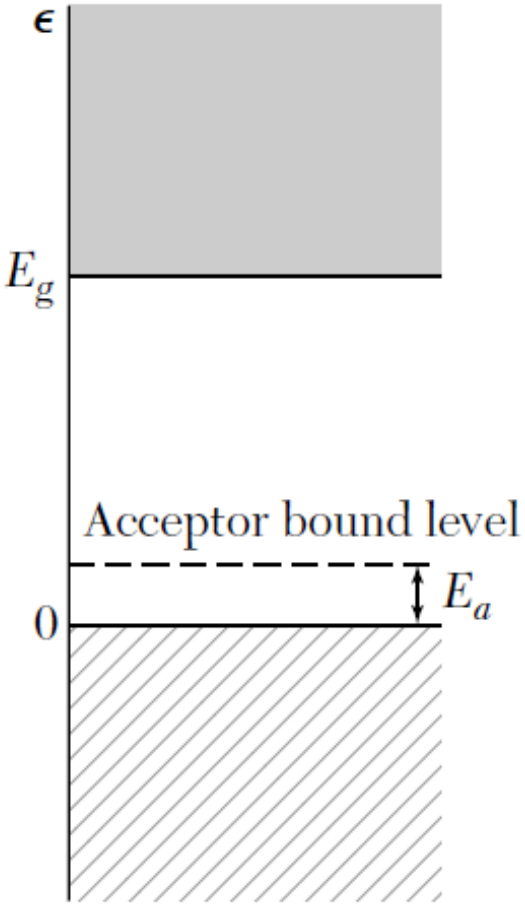
El **nivel donor** se mide de espectros de absorción óptica, en donde se observa la señal del est. base y mayores.



Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Dopaje de semiconductores: aceptores





- Si(4): matriz; B(3): impureza **aceptora**.
- El enlace tetragonal de la impureza acepta un elect. de la banda de **valencia**, dejando un hueco, el cual está disponible para participar en la conducción.

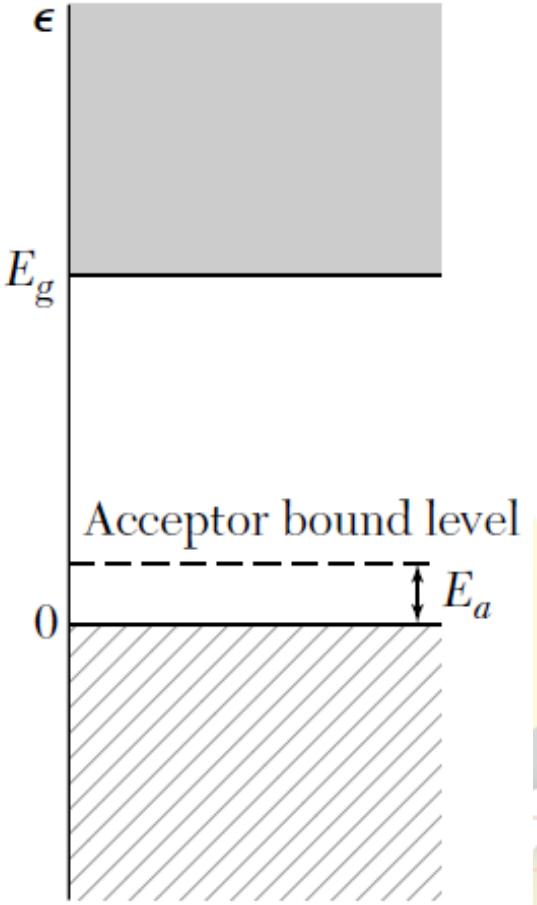
Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Dopaje de semiconductores: aceptores

	B	Al	Ga	In
Si	45.	57.	65.	157.
Ge	10.4	10.2	10.8	11.2

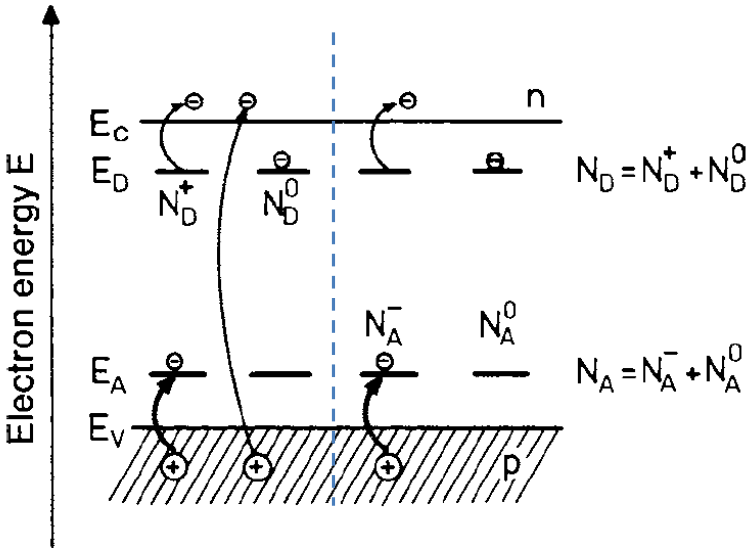
Las energías de ionización **aceptora** ϵ_a pueden ser calculadas con la aprox. de átomo hidrogenoide, dando energías muy similares a los casos de impurezas donoras.

Las diferencias observadas en ϵ_a respecto al experimento provienen en gran medida de la **degeneración** de las bandas de valencia.



Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Concentración de portadores de carga



Electrón en la b. de conducción

- Banda de **valencia**, dejando un hueco.
- Ionización de una impureza **donora**, dejando un ión positivo.

Hueco en la b. de valencia

- Correspondiente a un e^- en la banda de **conducción**.
- De una impureza **aceptora**, ionizada negativamente.

Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Concentración de portadores de carga

En el caso de semiconductores extrínsecos, las ocupaciones de las bandas de **conducción** y de **valencia** se siguen expresando como,

$$n = n_0 \exp\left[-\frac{\epsilon_c - \epsilon_F}{k_B T}\right] \quad \forall \quad n_0 = 2\left(\frac{m_n^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2},$$

$$p = p_0 \exp\left[-\frac{\epsilon_F - \epsilon_v}{k_B T}\right] \quad \forall \quad p_0 = 2\left(\frac{m_p^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2},$$

siendo que la **ley de atracción de las masas** se sigue cumpliendo,

$$np = 4\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^3 \left(m_n^* m_p^*\right)^{3/2} e^{\epsilon_g/k_B T} \quad \forall \quad \epsilon_g = \epsilon_c - \epsilon_v.$$

Sin embargo, la **condición de neutralidad** debe tomar en cuenta la **carga de las impurezas**,

Donores : $N_D = N_D^0 + N_D^+$,

Aceptores : $N_A = N_A^0 + N_A^-$,

donde,

- N_D^0, N_A^0: concentración de **neutrales**,
- N_D^+, N_A^-: concentración de **ionizados**.

Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Concentración de portadores de carga

En un semiconductor **homogéneo** la densidad de carga **negativa total** debe compensar en la misma proporción la correspondiente **positiva total**,

$$n + N_A^- = p + N_D^+ \quad \forall \quad N_D = N_D^0 + N_D^+ \quad \& \quad N_A = N_A^0 + N_A^-,$$

En el caso de que las impurezas donoras y aceptoras no se afecten mutuamente, la ocupación de donores por electrones (n_D) y la ocupación de aceptores por huecos (p_A) viene dada por,

$$n_D = N_D^0 = \frac{N_D}{1 + \exp\left[(\epsilon_D - \epsilon_F)/k_B T\right]},$$

$$p_A = N_A^0 = \frac{N_A}{1 + \exp\left[(\epsilon_F - \epsilon_A)/k_B T\right]}.$$

Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Concentración de portadores de carga

Considerando un semiconductor **tipo-n puro**, en donde solamente donores están disponibles, se tiene:

$$
\begin{aligned}
n &= n_0 \exp\left[-\frac{\epsilon_c - \epsilon_F}{k_B T}\right], \\
N_D &= N_D^0 + N_D^+, \\
N_D^0 &= \frac{N_D}{1 + \exp\left[(\epsilon_D - \epsilon_F)/k_B T\right]},
\end{aligned}
$$

en donde los e^- **libres** en la banda de conducción se originan puramente de **donores** o desde la **banda de valencia**,

$$n + N_A^- = p + N_D^+ \;\rightarrow\; n = p + N_D^+.$$

Tomando en cuenta que la contribución principal a la cond. proviene de los **donores ionizados**,

$$N_D^+ \gg n_i \;\; (np = n_i^2) \;\;\rightarrow\;\; n \approx N_D^+,$$

por tanto,

$$
\begin{aligned}
n &\approx N_D - N_D^0, \\
&\approx \frac{N_D}{1 + \exp\left[(\epsilon_F - \epsilon_D)/k_B T\right]}.
\end{aligned}
$$

Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Concentración de portadores de carga

Por otro lado, de la relación de n con el nivel de Fermi ϵ_F, obtenemos,

$$n = n_0 \exp\left[-\frac{\epsilon_c - \epsilon_F}{k_B T}\right] = n_0 \exp\left[-\frac{\epsilon_F - \epsilon_D}{k_B T}\right] \exp\left[-\frac{\epsilon_D - \epsilon_c}{k_B T}\right]$$

$$\therefore \quad \frac{n}{n_0} \exp\left[-\frac{\epsilon_c - \epsilon_D}{k_B T}\right] = \exp\left[-\frac{\epsilon_F - \epsilon_D}{k_B T}\right],$$

Sustituyendo lo anterior de la expresión obtenida para n,

$$n \approx \frac{N_D}{1 + \exp\left[(\epsilon_F - \epsilon_D)/k_B T\right]},$$

$$\Rightarrow \quad n \approx \frac{N_D}{1 + (n/n_0) e^{\epsilon_d / k_B T}} \quad \forall \quad \epsilon_d = \epsilon_c - \epsilon_D,$$

en donde ϵ_d representa la separación del nivel **donor**, ϵ_D, respecto al fondo de la banda de **conducción**, ϵ_c.

Expresando la eq. anterior en forma cuadrática,

$$n \approx \frac{N_D}{1+(n/n_0)e^{\epsilon_d/k_BT}},$$

$$\frac{n^2}{n_0}e^{\epsilon_d/k_BT} + n \approx N_D,$$

resolviendo, se obtiene:

$$n \approx \frac{2N_D}{1+\left[1+4\frac{N_D}{n_0}e^{\epsilon_d/k_BT}\right]^{1/2}}.$$

Analicemos diferentes casos límites para la relación entre ϵ_d y la temperatura.

I) Temp. bajas ($k_BT \ll \epsilon_d$)

$$\begin{aligned} n &\approx \frac{2N_D}{1+\left[1+4\frac{N_D}{n_0}e^{\epsilon_d/k_BT}\right]^{1/2}}, \\ &\approx \frac{2N_D}{1+\left(4\frac{N_D}{n_0}\right)^{1/2}e^{\epsilon_d/2k_BT}}, \\ &\approx (N_Dn_0)^{1/2}\,e^{-\epsilon_d/2k_BT}, \end{aligned}$$

en este límite existen muchas impurezas donoras que **no se ionizan**, por lo que se conoce como el **rango congelado**.

II) Temp. altas ($k_B T \gg \epsilon_d$)

$$
\begin{aligned}
n &\approx \frac{2N_D}{1+\left[1+4\frac{N_D}{n_0}e^{\epsilon_d/k_BT}\right]^{1/2}}, \\
&\approx \frac{N_D}{1+\frac{N_D}{n_0}e^{\epsilon_d/k_BT}}, \\
&\approx N_D\left[1-\frac{N_D}{n_0}e^{\epsilon_d/k_BT}\right], \\
&\approx N_D,
\end{aligned}
$$

la concentración de elec. donores ha alcanzado su **máximo**, por tanto **todas** las impurezas se ionizan, por ello se habla del **rango de saturación.**

III) Temp. muy altas

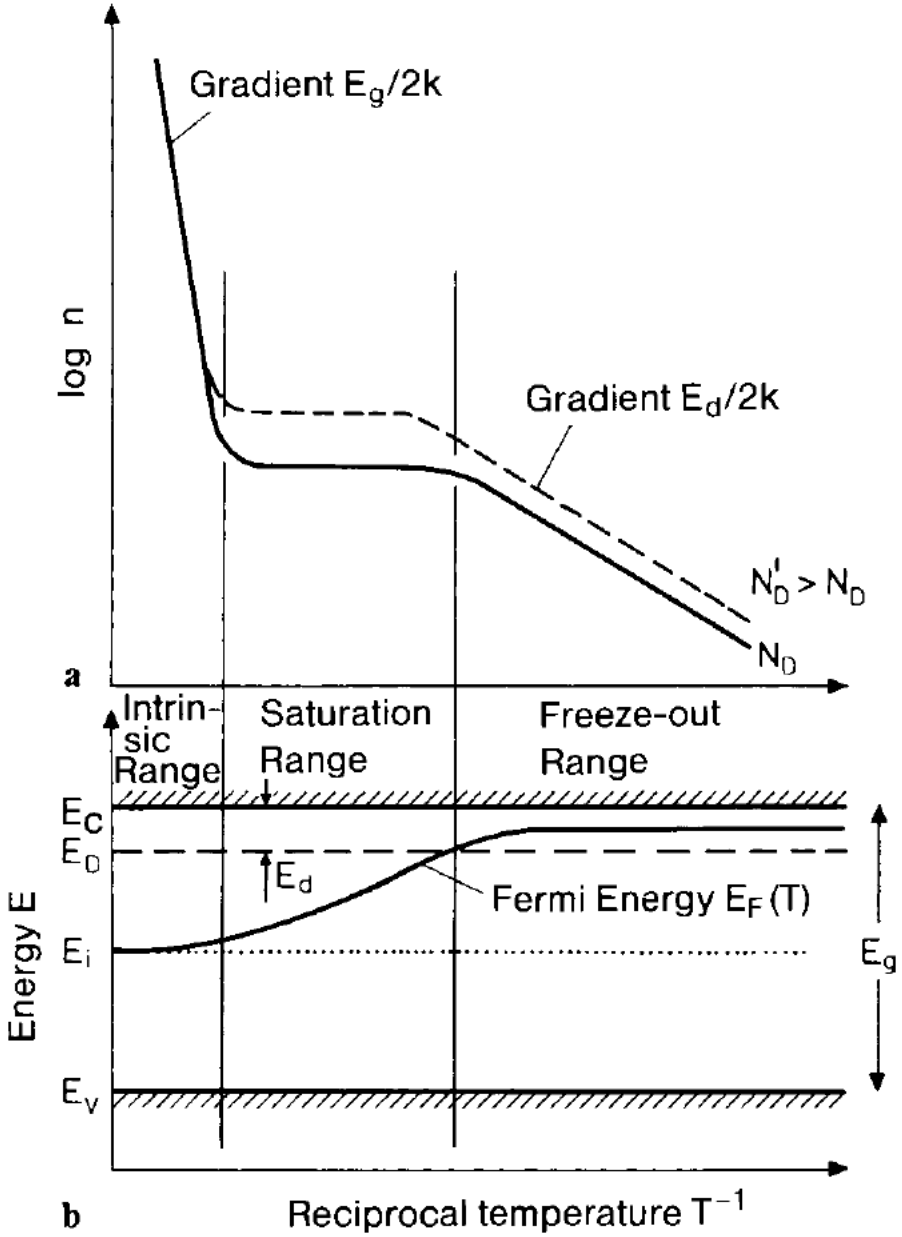
Para temperaturas extremadamente altas, ahora los elect. excitados desde la banda de **valencia** (por sobre ϵ_g), eventualmente sobrepasan la densidad elect. de los e^- **donores**,

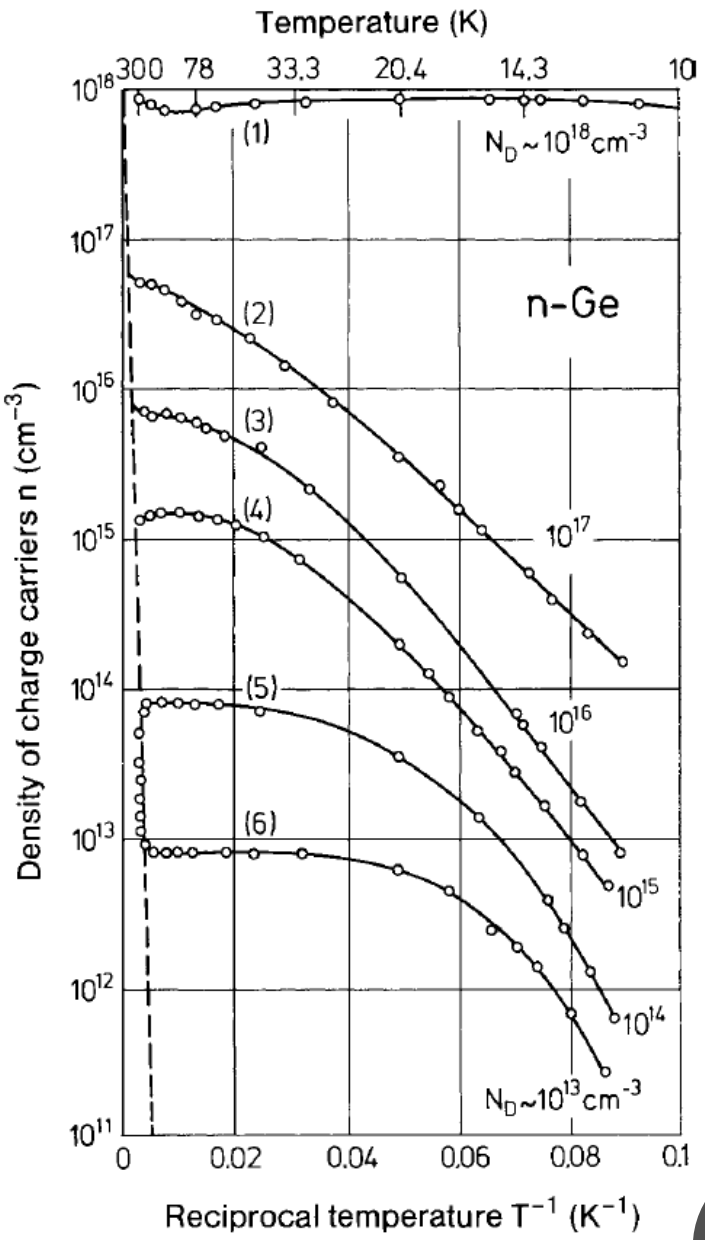
$$n_i \gg n_d.$$

En este rango el sist. dopado tipo-n se comporta como un semiconductor **intrínseco**, por tanto se le conoce como **región intrínseca**.

Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Concentración de portadores de carga





Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Conductividad

La **conductividad** de un semiconductor involucra a los electrones en la banda de **conducción** y a los huecos en la banda de **valencia**,

$$\sigma = |e| \left(n\mu_n + p\mu_p \right).$$

Para el caso de sem. **extrínsecos**, la movilidad se expresa como,

$$\mu_\alpha = -q_\alpha \frac{1}{m_\alpha^*} \frac{\langle \tau(\mathbf{k}) v^2(\mathbf{k}) \rangle}{\langle v^2(\mathbf{k}) \rangle},$$

en donde se aplica la aprox. de Boltzmann ($\epsilon_g \gg k_B T$), con:

$$\alpha = n \quad \rightarrow \quad q = -e, \quad m_\alpha^* = m_n^*,$$
$$\alpha = p \quad \rightarrow \quad q = e, \quad m_\alpha^* = -m_p^*.$$

Además,

$$v(\mathbf{k}) = \text{vel. de portadores de carga}$$
$$\tau(\mathbf{k}) = \text{tiempo de relajación.}$$

De las relaciones, se deduce para la **movilidad**,

$$\mu \propto \tau,$$

mientras que para el **tiempo de relajación**,

$$1/\tau \propto \Sigma \langle v \rangle,$$

donde Σ es la **secc. transversal** de electrones y huecos en un centro de dispersión determinado.

Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Conductividad

La velocidad $\langle v \rangle$ representa un promedio **térmico** de las velocidades de los portadores de carga,

$$\langle v \rangle \propto T^{1/2}.$$

Con las expresiones anteriores, se puede deducir una expresión cualitativa para la **movilidad**,

$$\mu \propto \tau \propto \frac{1}{\Sigma \langle v \rangle} \propto \frac{1}{\Sigma T^{1/2}}.$$

La **secc. transversal** Σ tiene una contribución **fonónica**, debido a la disp. por fonones acústicos $\omega_{\mathbf{q}}$ con amplitud $u_{\mathbf{q}}$,

en donde la energía viene dada por,

$$M\omega_{\mathbf{q}}^2 \left\langle u_{\mathbf{q}}^2 \right\rangle = k_B T,$$

por tanto, la secc. transversal fonónica viene siendo

$$\Sigma_{ph} \sim T.$$

Con la expresión anterior se puede obtener la dependencia en la temp. de la movilidad con dispersión de fonones,

$$\mu_{ph} \propto \frac{1}{T^{3/2}}.$$

Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Conductividad

Otra contribución a la secc. transversal es debido a la dispersión de portadores de carga por **donores o aceptores cargados** (defectos),

$$\Sigma_{def} = \langle v \rangle^{-4} \,,$$

lo anterior debido a la interacción Coulombiana entre los portadores y los defectos.

Se obtiene, por tanto, la expresión para el tiempo de relajación por **dispersión de defectos**,

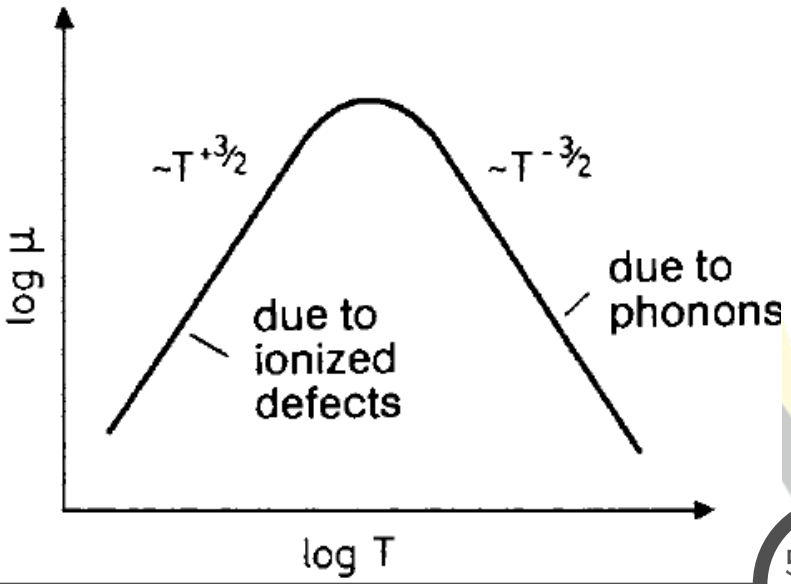
$$\tau_{def} \propto \frac{1}{\Sigma_{def} \langle v \rangle} \propto \frac{T^{3/2}}{N_{def}},$$

con la expresión anterior se obtiene la movilidad asociada,

$$\mu_{def} \propto T^{3/2}.$$

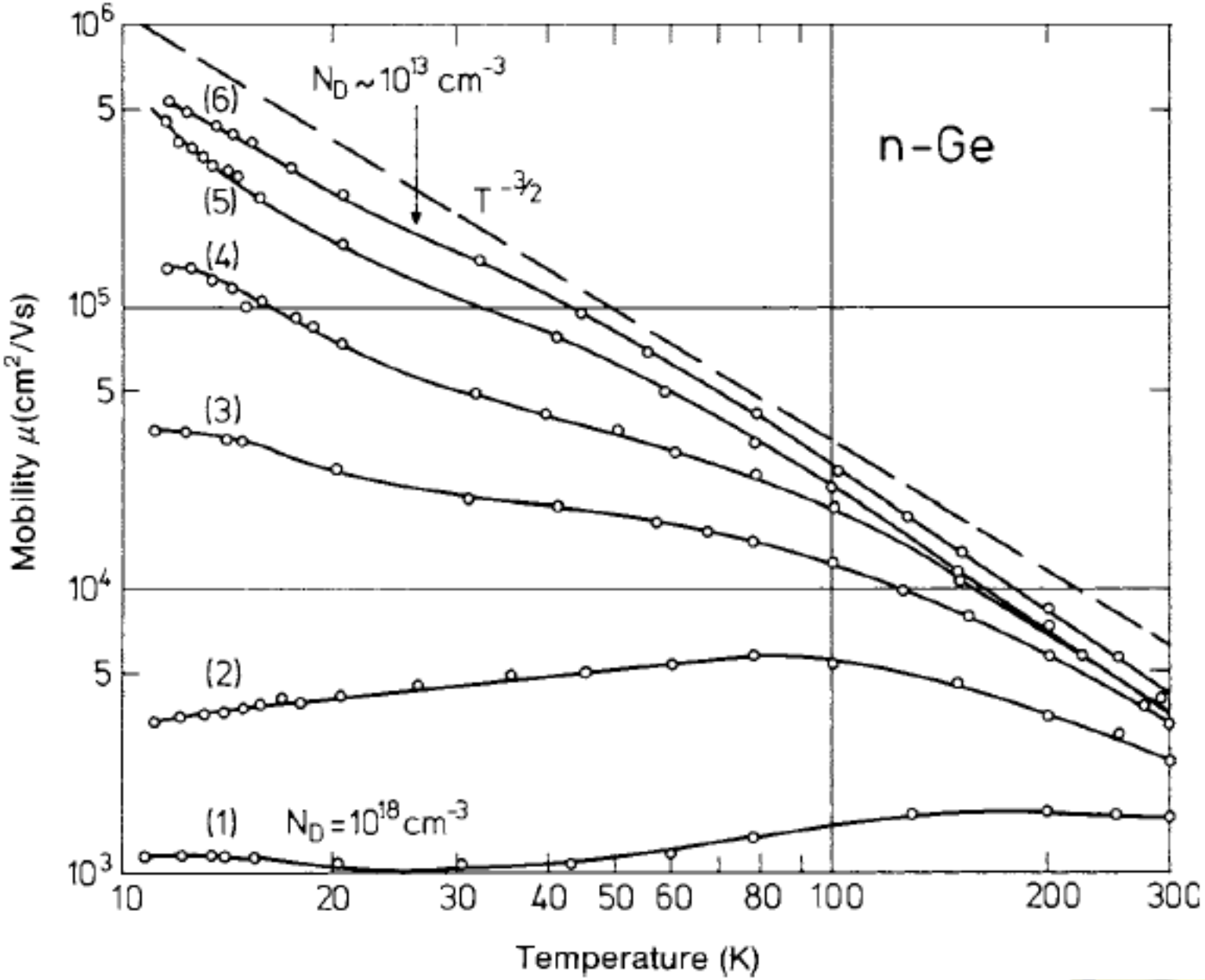
Por tanto, se obtiene la **movilidad total**,

$$1/\mu = 1/\mu_{ph} + 1/\mu_{def}.$$



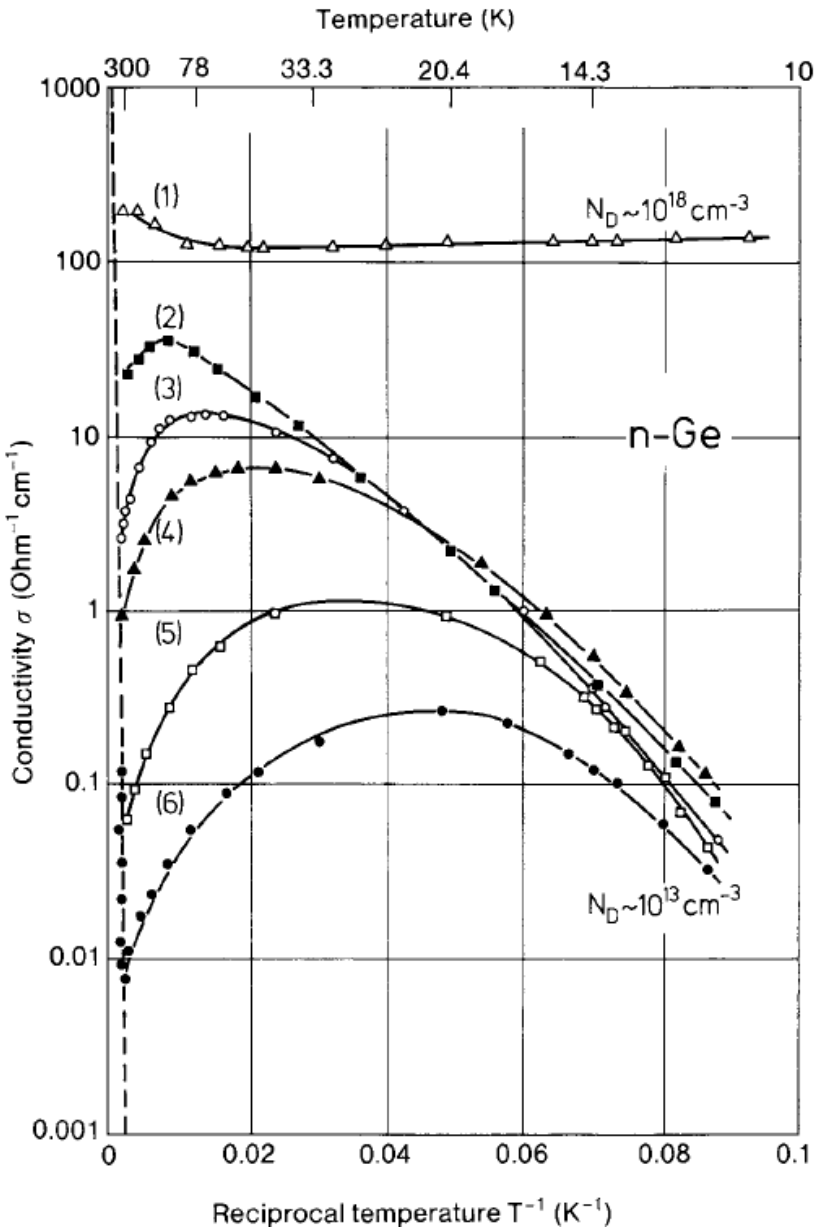
Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Conductividad



Semiconductores extrínsecos, estados donores y aceptores

Conductividad



- **R. Saturación**: temp. **intermedias**, con $n \sim$ cte., σ presenta un **máximo**,
- **R. Congelado**: temp. **bajas**,

$$\mu_{ph} \gg \mu_{def} \quad \Rightarrow \quad \mu \sim \mu_{def},$$

$\therefore$ σ será dominada por dispersiones vía **defectos cargados**.

- **R. Intrínseco**: temp. **altas**,

$$\mu_{ph} \ll \mu_{def} \quad \Rightarrow \quad \mu \sim \mu_{ph},$$

lo cual indica que σ será dominada por las dispersiones con origen **fonónico**.