

Semiconduttori

nota

I semiconduttori sono stati trattati durante le ultime tre lezioni del corso io sono stato assente.

Dunque quello che scrivo qui non è una sbobinatura.

All'inizio di ogni sezione scriverò la fonte.

La fonte principale è il testo (Bassani) e le note del corso scritte dal prof

- Introduzione

(Bassani, Cap 11, pag 308)

Già dal primo '800 era chiaro che esistono alcuni solidi che sono cattivi conduttori, cioè caratteristiche cioè intermedie tra conduttori ed isolanti.

La loro conduttività $10^{-5} \div 10^4$ m, contro valori tipici di 10^{-8} m per un metallo e 10^{10} m per un isolante.

Una caratteristica peculiare è che la resistività dei semiconduttori diminuisce anziché aumentare all'aumentare della temperatura.

Semiconduttori sono quei solidi che allo zero assoluto hanno la banda di valenza completamente piena e la banda di conduzione completamente vuota, ma hanno una larghezza della gap tra queste due bande abbastanza piccola.

Quando la temperatura sale, quando kT diventa dell'ordine dell'energia della gap E_g , la banda di valenza comincia a spopolarsi e la banda di conduzione si popola.

Questi elettroni in banda di conduzione e le buche rimaste in banda di valenza si comportano come gli elettroni o le buche nei metalli : conducono la corrente, il calore, e contribuiscono al calore specifico.

Tuttavia in questo caso la densità dei portatori e la loro mobilità è influenzata dalla temperatura.

I semiconduttori più studiati sono cristalli di elementi del gruppo IV (silicio, germanio) e i composti con un elemento del gruppo II e un elemento del gruppo V.

- **Le densità di portatori**

(Note Iadonisi)

- metalli -

Ricordiamo che il potenziale chimico ha una sua definizione in meccanica statistica :

«il potenziale chimico è l'energia necessaria a far variare di un'unità il numero di particelle del sistema mantenendo costante l'entropia»

(vedi appunti di Meccanica Statistica).

Tuttavia, quello che interessa a noi, è il ruolo che esso gioca nella distribuzione di Fermi-Dirac. La distribuzione di Fermi-Dirac è

$$f_0(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}$$

ed esprime la probabilità con cui è occupato un certo stato in funzione della sua energia, e dipende dalla temperatura.

Questa funzione solo allo zero assoluto è un gradino, mentre a temperature non nulle ha delle coda che si smorzano all'.

Vediamo che in questa distribuzione compare il potenziale chimico.

Allo zero assoluto questo coincide con l'**energia di Fermi**, che è l'energia dove c'è il gradino, e che dunque fa da valore di separazione tra gli stati occupati (con certezza) e gli stati liberi (con certezza).

Invece per temperature non nulle il potenziale chimico μ è una funzione della temperatura, e ha il ruolo di «energia al di sotto della quale la probabilità di occupazione è maggiore di 1 e al di sopra della quale la probabilità di occupazione è minore di 1».

Richiamiamo brevemente il calcolo del potenziale chimico per i metalli (vedi).

Usando il **modello di elettrone quasi libero** partiamo dalla **relazione di dispersione** per particelle libere

$$(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Dalla relazione di dispersione si ricava la «densità degli stati rispetto all'energia, (per unità di volume)» $g(E)$ (vedi)

(nota mia : questo è un calcolo fatto un sacco di volte : la prima volta io l'ho visto per il modello di Thomas-Fermi a 'Struttura')

Con questa densità di stati si può scrivere un'espressione per il «numero di elettroni (per unità di volume) all'equilibrio termodinamico» n che è ottenuto integrando su tutta l'energia la densità degli stati rispetto all'energia (per unità di volume) $g(E)$ moltiplicata per la funzione di distribuzione di Fermi-Dirac $f(E)$ (densità di stati occupati rispetto all'energia) :

$$n = \int_0^\infty g(E) f(E) dE$$

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty E^{1/2} \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} dE$$

e questa relazione (in cui compaiono tutte grandezze 'note') fornisce implicitamente un'espressione per il potenziale chimico μ .

Quando abbiamo studiato l'argomento nel caso dei metalli abbiamo calcolato questo integrale, facendo comparire la derivata della distribuzione di Fermi tramite un'integrazione per parti, e

sfruttandone poi le proprietà (quasi ovunque nulla tranne in una piccola regione larga $K T$ e centrata su μ) per poter fare uno sviluppo in serie (vedi).

Comunque è possibile un **calcolo diretto**.

Infatti questo integrale rientra in una categoria di integrali del tipo

$$F_j(x_0) = \int_0^{\infty} \frac{x^j}{e^{x-x_0} + 1} dx$$

detti *integrali di Dirac*, che svolgono un ruolo importante nel calcolo delle proprietà di un gas di elettroni o lacune nei semiconduttori.

Dallo studio di questi integrali si trovano in generale i seguenti risultati approssimati (forme asintotiche) :

$$F_j(x_0) = (j+1) e^{x_0} \quad \text{se } x_0 < -2$$

$$F_j(x_0) = \frac{x_0^{j+1}}{j+1} \left[1 + \frac{2^j(j+1)}{6 x_0^2} + \dots \right] \quad \text{se } x_0 \gg 1$$

(forme asintotiche dell'integrale di Dirac).

Utilizzando questi risultati per calcolare il nostro integrale si ha :

$$n = \frac{1}{2^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (K T)^{3/2} \frac{2}{3} \left[1 + \frac{2}{8} \left(\frac{K T}{\mu} \right)^2 \right]$$

$$n = \frac{1}{3^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \mu^{3/2} \left[1 + \frac{2}{8} \left(\frac{K T}{\mu} \right)^2 \right]$$

(queste formule le ho copiate direttamente dagli appunti del prof, ma credo che ci siano dei pasticci!)

da cui

$$\mu^{3/2} = 3^2 \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{3/2} n \left[1 + \frac{2}{8} \left(\frac{K T}{\mu} \right)^2 \right]^{-1}$$

e quindi :

per $T = 0$

$$\mu = \frac{\hbar^2}{2m} (3^2 n)^{2/3}$$

per $T \neq 0$

$$\mu \approx \mu_F \left[1 + \frac{2}{8} \left(\frac{kT}{\mu_F} \right)^2 \right]^{-2/3}$$

$$\mu \approx \mu_F \left[1 + \frac{2}{12} \left(\frac{kT}{\mu_F} \right)^2 \right]$$

(qua ci stanno degli errori, quanto meno nel segno che compare in parentesi!).

- semiconduttori -

Per studiare i semiconduttori facciamo dei calcoli analoghi, per esprimere quello che chiameremo «numero (o densità) di *portatori di carica* per unità di volume».

Nel caso dei semiconduttori però bisogna **considerare** almeno **due bande separate** : la banda di valenza, più bassa in energia, e la banda di conduzione, più alta in energia, separate dalla gap E_g di energia proibita.

Esprimiamo dunque le due densità di elettroni in banda di conduzione e di lacune in banda di valenza, utilizzando due diverse densità di stati e integrando sui rispettivi intervalli di energia :

$$n_c = \int_{\epsilon_c^-}^{\epsilon_c^+} g_c(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$$

$$p_v = \int_{\epsilon_v^-}^{\epsilon_v^+} g_v(\epsilon) [1 - f(\epsilon)] d\epsilon$$

dove :

ϵ_c^- è il minimo della banda di conduzione

ϵ_c^+ è la larghezza della banda di conduzione

$g_c(\epsilon)$ è la densità in energia (per unità di volume) degli elettroni in banda di conduzione

ϵ_v^- è il massimo della banda di valenza

ϵ_v^+ è la larghezza della banda di valenza

$g_v(\epsilon)$ è la densità in energia (per unità di volume) delle lacune in banda di valenza.

Consideriamo adesso il **potenziale chimico**.

A $T=0$ la banda di valenza è completamente piena e la banda di conduzione è completamente vuota, e dunque il potenziale chimico (energia di Fermi) si deve trovare da qualche parte nella gap di energia proibita, a causa della sua definizione di «valore di separazione' tra le energie degli stati occupati e quelle degli stati vuoti».

Anticipiamo che per i semiconduttori drogati si hanno degli stati elettronici discreti (stati di impurezza) con energia nella gap, che possono essere occupati o no. Comunque la banda di conduzione è vuota. Dunque il potenziale chimico (energia di Fermi) si deve comunque trovare tra lo stato occupato più alto in energia e il minimo della banda di conduzione.

La peculiarità dei semiconduttori sta nel fatto che la gap di energia è stretta (~ 1 eV). Dunque innalzando la temperatura il potenziale chimico si sposta, si formano 'le code' nella distribuzione di Fermi, e la banda di conduzione si popola, permettendo un flusso di corrente. Ci accingiamo a studiare questi effetti.

Nei conti che seguono assumeremo sempre che :

a) μ sta nella gap di energia

b) $\frac{E_c - \mu}{kT} \gg 1$; $\frac{|\mu - E_v|}{kT} \gg 1$ (queste due ipotesi servono solo a semplificare i conti)

inoltre si ha, anche per temperature molto elevate

c) $\frac{E_c}{kT} \gg 1$; $\frac{E_v}{kT} \gg 1$

e quest'ultima condizione comporta che gli stati elettronici vicini al massimo della banda di conduzione e gli stati elettronici vicini al minimo della banda di valenza (per capirsi, gli stati che nelle due bande stanno dal lato opposto della gap) contribuiscono poco agli integrali.

Infatti nello studio dei metalli abbiamo più volte osservato che la gran parte delle energie per cui la funzione di Fermi è diversa da 0 o da 1 si trovano in un intervallo centrato attorno a μ e di larghezza dell'ordine di kT , e dunque gli stati in questione, trovandosi ad una distanza in energia (approssimativa) di E_c e E_v da μ rispettivamente, si trovano 'nelle code' della funzione di Fermi, dove c'è piccola probabilità di trovare uno stato elettronico (nella banda di valenza, a E_v da μ) o uno 'stato di buca' (nella banda di conduzione, a E_c da μ) occupato.

Ma i valori delle energie per cui la funzione di Fermi è diversa da 1 o da 0 sono quelli che contribuiscono rispettivamente di meno ai due integrali.

Grazie a questa osservazione possiamo estendere i **limiti di integrazione**, e scrivere in **forma approssimata** :

$$n_c = \int_{E_c}^{\infty} g_c(E) f(E) dE$$

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

Bisogna tenere conto del valore del potenziale chimico μ rispetto al minimo della banda di

conduzione e al massimo delle banda di valenza.

Di solito il valore di μ cade nella gap di energia :

$$E_c > \mu > E_v$$

e dunque nelle bande ricadono solo le code della distribuzione di Fermi. In questo caso possiamo dire che il numero di elettroni in banda di conduzione e di lacune in banda di valenza è sempre molto piccolo rispetto al numero di Avogadro.

Tuttavia, se consideriamo un semiconduttore drogato, può succedere che il numero di elettroni in banda di conduzione o il numero di lacune in banda di valenza (a seconda del tipo di drogaggio 'accettorico' o 'donorico'), sebbene sempre minore del numero di Avogadro, non sia così piccolo, spostando il potenziale chimico rispettivamente dopo il minimo della banda di conduzione o prima del massimo della banda di valenza (cioè all'interno delle bande) :

$$\mu > E_c$$

$$\mu < E_v$$

Comunque in entrambi i casi possiamo usare per le rispettive densità di stati l'espressione che abbiamo calcolato quando abbiamo studiato la teoria delle bande (vedi).

Ricordiamo che abbiamo fatto due conti diversi, a seconda che si utilizzasse il modello di elettrone quasi libero (in cui si considerava essenzialmente l'energia di particella libera) oppure il modello del "tight binding", in cui è possibile ottenere un'espressione esplicita della densità di stati solo in prossimità dei punti critici della 'forma di banda'.

Comunque, in entrambi i conti abbiamo ottenuto delle densità di energia che vanno come la radice quadrata dell'energia.

Scegliendo opportunamente lo zero dell'energia possiamo dunque scrivere le seguenti due densità di stati in energia (per unità di volume) :

$$g_c(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{1}{\hbar^2} m_c \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2}$$

$$g_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{1}{\hbar^2} m_v \right)^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$$

dove

$$m_c \equiv (m_1 m_2 m_3)^{1/3} \qquad m_v \equiv |m_1 m_2 m_3|^{1/3}$$

sono dette le 'masse efficaci medie' del minimo di banda di conduzione e del massimo di banda di valenza, dove gli m_i sono i valori principali del tensore di massa efficace.

Sostituendo queste densità negli integrali per le densità dei portatori si ha :

$$n_c = \frac{1}{2^2} \left(\frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\mu - \epsilon_c} \frac{1}{e^{\frac{\mu - \epsilon}{KT}} + 1} d\epsilon$$

$$= \frac{1}{2^2} \left(\frac{2m_c K T}{\hbar^2} \right)^{3/2} F_{1/2} \left(\frac{\mu - \epsilon_c}{K T} \right)$$

$$n_c = N_0(T) F_{1/2} \left(\frac{\mu - \epsilon_c}{K T} \right)$$

(densità degli elettroni)

dove compare il risultato generale degli integrali di Dirac (vedi) e dove abbiamo posto

$$N_0(T) = \frac{1}{2^2} \left(\frac{2 m_c K T}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

che numericamente è

$$N_0(T) \approx 3.3 \cdot 10^{18} \left(\bar{m}_c \frac{T}{100} \right)^{3/2} \text{ cm}^{-3}$$

e dove $\bar{m}_c = \frac{m_c}{m}$ è la massa efficace espressa 'in unità di massa elettronica'.

Se si ha $n_c \gg N_0$ vuol dire che il fattore $F_{1/2}(\mu - \epsilon_c / KT)$ è molto grande, e dunque deve essere $\mu \gg \epsilon_c$. In tal caso si deve usare il secondo tipo di soluzione dell'integrale di Dirac, e si ritrova il risultato del caso dei metalli :

$$n_c = \frac{1}{3^2} \left[\frac{2 m_c (\mu - \epsilon_c)}{\hbar^2} \right]^{3/2} \text{ (densità } n_c \text{, per } n_c \gg N_0 \text{)}.$$

Se invece si ha $n_c \ll N_0$, per lo stesso motivo deve essere $\mu < \epsilon_c$, e dunque bisogna usare l'altro caso, ottenendo :

$$n_c = N_c e^{\frac{\mu - \epsilon_c}{KT}} \text{ (densità } n_c \text{, per } n_c \ll N_0 \text{)}$$

dove abbiamo posto

$$N_c(T) = 2 \left(\frac{m_c K T}{2 \hbar^2} \right)^{3/2}.$$

(domanda : poiché questa grandezza N_c verrà impiegata in seguito, qual'è il suo significato fisico?)

Si possono fare conti del tutto analghi per le lacune, ottenendo che :

$$p_v = P_0(T) F_{1/2} \left(\frac{v - \mu}{K T} \right) \quad (\text{densità delle lacune})$$

dove abbiamo posto

$$P_0(T) = \frac{1}{2^2} \left(\frac{2 m_v K T}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

$$P_0(T) \approx 3.3 \cdot 10^{18} \left(\bar{m}_v \frac{T}{100} \right)^{3/2} \text{ cm}^{-3}$$

dove questa volta $\bar{m}_v = \frac{m_v}{m}$ è la massa efficace calcolata presso il massimo della banda di valenza, espressa 'in unità di massa elettronica'.

Se si ha $p_v \gg P_0$ deve essere $\mu \ll v$, e in tal caso si deve usare il secondo caso della soluzione dell'integrale di Dirac, e si ritrova il risultato del caso dei metalli :

$$p_v = \frac{1}{3^2} \left[\frac{2 m_v (v - \mu)}{\hbar^2} \right]^{3/2}.$$

Se invece si ha $p_v \ll P_0$, per lo stesso motivo deve essere $\mu > v$, e dunque bisogna usare l'altro caso, ottenendo :

$$p_v = P_0 e^{\frac{v - \mu}{K T}}$$

dove abbiamo posto

$$P_0(T) = 2 \left(\frac{m_v K T}{2 \hbar^2} \right)^{3/2}.$$

Fin qui abbiamo calcolato le densità dei portatori.
Adesso cerchiamo informazioni riguardo al potenziale chimico.

Per fare questo dobbiamo distinguere il caso di semiconduttori intrinseci o drogati.

• **Semiconduttori intrinseci**

* calcolo del potenziale chimico

In questo caso per definizione si ha $n_c = p_v$ e chiamiamo questo valore della densità n_i .

Se imponiamo l'uguaglianza delle espressioni delle densità di portatori appena calcolate (vedi e vedi) si ha

$$N_0 F_{1/2} \left(\frac{\mu_i - \epsilon_c}{K T} \right) = P_0 F_{1/2} \left(\frac{\epsilon_v - \mu_i}{K T} \right),$$

questa relazione permette di **calcolare il 'potenziale chimico per semiconduttore intrinseco' μ_i** .

Per fare questo occorre esplicitare la formula generale della soluzione dell'integrale di Dirac, e dunque bisogna stabilire in quale dei due casi ci si trova.

Se si ha $\epsilon_v < \mu_i < \epsilon_c$ la $x_0 = \frac{\mu_i - \epsilon_c}{K T}$ o $x_0 = \frac{\epsilon_v - \mu_i}{K T}$ che compare nell'integrale di Dirac è una quantità negativa e dunque dobbiamo usare il secondo caso. Sostituendo si ha :

$$N_c e^{\frac{\mu_i - \epsilon_c}{K T}} = P_v e^{\frac{\epsilon_v - \mu_i}{K T}}$$

da cui

$$\frac{N_c}{P_v} = e^{\frac{\epsilon_v + \epsilon_c - 2\mu_i}{K T}}$$

$$\ln \frac{N_c}{P_v} = \frac{\epsilon_v + \epsilon_c - 2\mu_i}{K T}$$

e, sostituendo le espressioni di N_c e P_v

$$\ln \frac{2 \left(\frac{m_c K T}{2 \hbar^2} \right)^{3/2}}{2 \left(\frac{m_v K T}{2 \hbar^2} \right)^{3/2}} = \frac{\epsilon_v + \epsilon_c - 2\mu_i}{K T}$$

$$\epsilon_v + \epsilon_c - 2\mu_i = K T \ln \left(\frac{m_c K T}{2 \hbar^2} \frac{2 \hbar^2}{m_v K T} \right)^{3/2}$$

$$-2\mu_i = -\frac{E_c + E_v}{2} + K T \frac{3}{2} \ln \frac{m_c}{m_v}$$

$$\mu_i = \frac{E_c + E_v}{2} - \frac{3}{4} K T \ln \frac{m_c}{m_v} \quad (\text{potenziale chimico per semiconduttori intrinseci}).$$

Per la maggior parte dei semiconduttori si ha $m_v > m_c$, e dunque il logaritmo è negativo, il termine con la temperatura è positivo, e quindi μ_i cresce al crescere della temperatura. Ricordiamo che per semiconduttori intrinseci il potenziale chimico allo zero assoluto (energi ad Fermi) si trova al centro della gap.

* calcolo della densità dei portatori

Riguardo alla densità di portatori, se scriviamo $n_i^2 = n_c n_v$ usando una volta l'espressione per gli elettroni e una volta quella per le lacune, si ha

$$n_i^2 = N_c e^{\frac{\mu_i - E_c}{K T}} P_v e^{\frac{E_v - \mu_i}{K T}}$$

$$n_i = (N_c P_v)^{1/2} e^{\frac{E_v - E_c}{2 K T}}$$

$$n_i = (N_c P_v)^{1/2} e^{-\frac{E_g}{2 K T}} \quad (\text{densità di portatori per semiconduttori intrinseci})$$

dove abbiamo posto $E_g = E_c - E_v$ (larghezza della gap).

* studio delle masse efficaci medie

Se esplicitiamo N_c e P_v nella formula per n_i si ha :

$$n_i = \left[2 \left(\frac{m_c K T}{2 \hbar^2} \right)^{3/2} 2 \left(\frac{m_v K T}{2 \hbar^2} \right)^{3/2} \right]^{1/2} e^{-\frac{E_g}{2 K T}}.$$

Facciamo adesso dei passaggi che ci porteranno ad una forma utile per studiare il prodotto delle masse efficaci medie :

$$n_i = 2 \left[(m_c m_v)^{3/2} \left(\frac{K T}{2 \hbar^2} \right)^3 \right]^{1/2} e^{-\frac{E_g}{2 K T}}$$

$$n_i = 2 (m_c m_v)^{3/4} \left(\frac{K T}{2 \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_g}{2 K T}}$$

$$n_i = 2 \left[\frac{(m_c m_v)^{1/2} K}{2 \hbar^2} \right]^{3/2} T^{3/2} e^{-\frac{E_g}{2 K T}}$$

$$\frac{n_i}{T^{3/2}} = 2 \left[\frac{(m_c m_v)^{1/2} K}{2 \hbar^2} \right]^{3/2} e^{-\frac{E_g}{2 K T}}$$

$$\ln \frac{n_i}{T^{3/2}} = \ln \left\{ 2 \left[\frac{(m_c m_v)^{1/2} K}{2 \hbar^2} \right]^{3/2} \right\} - \frac{E_g}{2 K T}$$

$$\ln \frac{n_i}{T^{3/2}} = - \frac{E_g}{2 K} \frac{1}{T} + \ln \left\{ 2 \left[\frac{(m_c m_v)^{1/2} K}{2 \hbar^2} \right]^{3/2} \right\}$$

A questo punto potremmo fare un grafico della quantità $\ln \frac{n_i}{T^{3/2}}$ in funzione della quantità $\frac{1}{T}$: se assumiamo che E_g non dipende dalla temperatura il grafico dovrebbe essere una retta, e per il valore $\frac{1}{T} = 0$ potremmo studiare il termine noto, che contiene il prodotto delle masse efficaci medie che ci interessa.

Invece dai risultati sperimentali si evince che E_g dipende dalla temperatura!

Assumendo che la dipendenza sia lineare :

$$E_g(T) = E_{g0} - T$$

e dunque, sostituendo nella formula :

$$\ln \frac{n_i}{T^{3/2}} = - \frac{E_{g0} - T}{2 K} \frac{1}{T} + \ln \left\{ 2 \left[\frac{(m_c m_v)^{1/2} K}{2 \hbar^2} \right]^{3/2} \right\}$$

$$\ln \frac{n_i}{T^{3/2}} = - \frac{E_{g0}}{2 K} \frac{1}{T} + \frac{1}{2 K} + \ln \left\{ 2 \left[\frac{(m_c m_v)^{1/2} K}{2 \hbar^2} \right]^{3/2} \right\}$$

$$\ln \frac{n_i}{T^{3/2}} = - \frac{E_{g0}}{2K} \frac{1}{T} + \ln \left\{ 2 \left[\frac{(m_c m_v)^{1/2} K}{2 \hbar^2} \right]^{3/2} e^{-\frac{E_{g0}}{2K}} \right\}$$

e dunque comunque il grafico della quantità $\ln \frac{n_i}{T^{3/2}}$ in funzione della quantità $\frac{1}{T}$ è una retta, il cui coefficiente angolare ci fornisce informazioni sulla larghezza della gap allo zero assoluto e il cui termine noto ci fornisce informazioni sul prodotto delle masse efficaci medie.

• Semiconduttori estrinseci

Nel caso dei semiconduttori drogati non possiamo utilizzare la relazione che eguaglia le due densità dei portatori di carica.

Dunque usiamo un altro approccio : scriviamo il prodotto delle densità di portatori, usando le espressioni scritte all'inizio con gli integrali di Dirac :

$$n_c p_v = N_0(T) F_{1/2} \left(\frac{\mu - \epsilon_c}{K T} \right) P_0(T) F_{1/2} \left(\frac{\epsilon_v - \mu}{K T} \right)$$

facciamo ora in modo di far comparire la densità di portatori calcolata per i semiconduttori intrinseci n_i .

Per fare questo ricordiamo che per i semiconduttori intrinseci il prodotto delle densità di portatori ha la stessa forma, pur di assegnare al potenziale chimico il giusto valore μ_i ; inoltre, nel caso intrinseco si ha $n_c p_v = n_i^2$.

Dunque nel caso intrinseco possiamo scrivere

$$n_i^2 = N_0(T) P_0(T) F_{1/2} \left(\frac{\mu_i - \epsilon_c}{K T} \right) F_{1/2} \left(\frac{\epsilon_v - \mu_i}{K T} \right).$$

Dunque dividendo questa espressione per $F_{1/2} \left(\frac{\mu_i - \epsilon_c}{K T} \right) F_{1/2} \left(\frac{\epsilon_v - \mu_i}{K T} \right)$ e moltiplicandola per

$F_{1/2} \left(\frac{\mu - \epsilon_c}{K T} \right) F_{1/2} \left(\frac{\epsilon_v - \mu}{K T} \right)$ riotteniamo l'espressione del prodotto delle densità nel caso generale.

In sostanza possiamo scrivere

$$n_c p_v = n_i^2 \frac{F_{1/2} \left(\frac{\mu - \epsilon_c}{K T} \right) F_{1/2} \left(\frac{\epsilon_v - \mu}{K T} \right)}{F_{1/2} \left(\frac{\mu_i - \epsilon_c}{K T} \right) F_{1/2} \left(\frac{\epsilon_v - \mu_i}{K T} \right)}.$$

Ora, numericamente è possibile dimostrare che il rapporto che compare è una quantità minore di 1, e dunque si ha :

$$n_c p_v = n_i^2.$$

Adesso sostituiamo le soluzioni dell'integrale di Dirac, nelle due forme asintotiche (supponendo che si possano usare) e esplicitiamo le formule :

Nel caso in cui $\mu > \epsilon_c$ o $\mu < \epsilon_v$ si ha la prima forma asintotica (nell'ipotesi che si possa utilizzare la forma asintotica, cioè che sia $x_0 = \frac{\mu - \epsilon_c}{KT} \ll -2$) e cioè :

$$n_c p_v = n_i^2 \frac{4}{3\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\mu - \epsilon_v - E_g}{KT}} \left(\frac{\mu - \epsilon_c}{KT} \right)^{3/2}.$$

Se invece si ha $\epsilon_v < \mu < \epsilon_c$, usando ancora la forma asintotica (nell'altro limite) si ha :

$$n_c p_v = n_i^2 \quad (\text{legge di azione di massa}).$$

Vediamo che in entrambi i casi il prodotto delle due popolazioni non supera mai n_i^2 , e questo è valido praticamente in tutti i casi (indipendentemente dalla posizione e dal numero degli 'stati di impurezza', vedi oltre).

Se siamo in questo secondo regime asintotico, ponendo

$$n \equiv n_c - p_v \quad (\text{parametro di estrinsecità})$$

possiamo esprimere le popolazioni dei portatori di carica nelle due bande in rapporto con la popolazione nel caso intrinseco (uguale per le due bande) :

$$\frac{n_c}{n_i} = \frac{\sqrt{\left(\frac{n}{n_i}\right)^2 + 4} + \frac{n}{n_i}}{2}$$

$$\frac{p_v}{n_i} = \frac{\sqrt{\left(\frac{n}{n_i}\right)^2 + 4} - \frac{n}{n_i}}{2}.$$

Si vede che se il rapporto n/n_i è molto minore di 1 si ritrova il regime intrinseco, mentre se è molto maggiore di 1 si ha :

$$\frac{n_c}{n_i} \approx \frac{n}{n_i} \quad ; \quad \frac{p_v}{n_i} \approx \frac{n_i}{n}.$$

Poiché la popolazione n_i dipende fortemente dalla temperatura può darsi che, per un fissato drogaggio, che ad alta temperatura si ha il regime intrinseco ($(n/n_i) \ll 1$), mentre a basse temperature si ha il regime estrinseco ($(n/n_i) \gg 1$).

• Stati donori e stati accettori

(Bassani, § 11.3.1, pag 318; integrazioni prese dagli appunti del professore)

- Modello semplice -

Se nel semiconduttore che consideriamo sono presenti delle impurezze (drogaggio) queste impurezze possono avere degli stati legati, e questi 'stati di impurezza' influiscono sulla densità dei portatori.

In generale un'impurezza è un atomo con valenza diversa da quelli del resto del reticolo, e dunque è un atomo non neutro. Infatti un'impurezza o ha un elettrone in più, che 'viene iniettato' nell'insieme di elettroni di conduzione, 'lasciando' dunque l'impurezza carica positivamente (**impurezza donorica**), o al contrario è un atomo con un elettrone in meno, che viene 'acquisito' per legarsi (valenza) rendendo l'atomo carico negativamente (**impurezza accettoria**). Dunque l'interazione dell'impurezza con gli elettroni o con le buche è di tipo coulombiano. (quest'ultimo capoverso è mio)

Comunque possiamo dire che l'interazione degli atomi (ioni) della specie 'dominante' del materiale è descritta globalmente con l'energia di banda, e a questa si sovrappone l'interazione con l'impurezza che comunque è di tipo diverso.

L'interazione della singola impurezza con un elettrone o con una buca avrà in generale uno spettro discreto (stati legati).

Dunque in generale si avranno dei livelli discreti che si aggiungono allo spettro 'continuo' (in realtà non lo è) delle varie bande (almeno le due di valenza e di conduzione).

E' dunque essenziale studiare questi livelli energetici discreti, e in particolare conoscerne la posizione in energia, rispetto al massimo della banda di valenza e al minimo della banda di conduzione.

Un primo modello consiste nel considerare il potenziale dell'impurezza come un potenziale coulombiano, che va dunque come $1/r$, dove la carica è l'eccesso o difetto di elettroni $Z' e^2$ descritto prima, e in cui compaia una 'costante dielettrica' che tenga conto dell'effetto di schermo dovuto alla *polarizzazione del cristallo* (?) :

$$U_{\text{imp}} = -\frac{Z' e^2}{r} \quad (\text{potenziale dell'impurezza}).$$

In questo schema ogni elettrone, che se gli assegnamo come massa la massa efficace si comporta come una particella libera rispetto all'interazione con il resto del reticolo, rispetto all'interazione con l'impurezza risente semplicemente di un potenziale di atomo idrogenoide.

A sostegno di questa ipotesi diciamo anche che la funzione d'onda dell'elettrone in uno di questi 'stati di impurezza' ha un raggio medio che è molto maggiore del parametro reticolare.

Gli autovalori sono dunque del tipo 'atomo idrogenoide' (vedi), e in particolare, nel caso delle impurezze di tipo **donorico** si ha :

$$E_n = E_g - \frac{m_c e^4 Z'^2}{2^2 \hbar^2 n^2}$$

o, usando la costante di Rydberg

$$E_n = E_g - \left(\frac{m_c}{m} \right) \frac{1}{2} \frac{R_y Z'^2}{n^2}$$

dove abbiamo preso come origine dell'energia il massimo della banda di valenza (dunque il secondo termine dice la distanza (verso il basso) dal minimo della banda di conduzione).

Il raggio di bohr è dato da :

$$a_B = \frac{\hbar^2}{m_c e^2}$$

La costante dielettrica nei semiconduttori più comuni è dell'ordine di 10, mentre il rapporto tra le masse m^*/m varia tra 1 e 0.1, per cui complessivamente i livelli discreti sono inferiori a 10^{-1} eV (il prof dice 10^{-2} eV).

Le funzioni d'onda di questi autostati dell'energia sono formati da una sovrapposizione di stati di Bloch vicini al minimo della banda di conduzione, e tutta questa approssimazione è detta *approssimazione della massa efficace*.

Nel caso di impurezze di tipo **accettorico** il potenziale di cui risente l'elettrone 'extra' è repulsivo, ma la massa nei pressi del massimo della banda di valenza è negativa, e dunque a situazione è del tutto equivalente alla precedente, portando a espressioni per i livelli di energia e del raggio di Bohr del tutto uguali alle due precedenti, pur di sostituire alla massa efficace calcolata nei pressi del minimo della banda di conduzione quella calcolata nei pressi del massimo della banda di valenza, posta in valore assoluto :

$$E_n = \frac{|m_v| e^4 Z'^2}{2^2 \hbar^2 n^2}$$

che dunque è la distanza (verso l'alto) dal massimo della banda di valenza, e

$$a_B = \frac{\hbar^2}{m_v e^2}$$

Modifiche alle energie degli stati di impurezza rispetto a queste previste che discendono dalle approssimazioni dette, dipendono dalla deviazione, a piccole distanze, del potenziale di impurezza dal potenziale coulombiano (chemical shift).

Inoltre altre alterazioni possono essere dovute alla presenza di più minimi (o rispettivamente più massimi) nella banda di conduzione (o rispettivamente di valenza) ad energie uguali o molto vicine.

Se il potenziale dell'impurezza è troppo forte (cosa che succede soprattutto nel caso di impurezze interstiziali, più che nel caso di impurezze sostituzionali) non si può più applicare l'approssimazione della massa efficace, e si dice che lo stato di impurezza è uno *stato profondo*, e la sua energia dipende dalle caratteristiche di tutta la banda di valenza e di conduzione.

- lo schermo dielettrico -

Nell'espressione del potenziale di impurezza abbiamo supposto che lo schermo dielettrico sia espresso da una costante. In realtà nel cristallo lo schermo dielettrico da cui è schermato un generico campo è una funzione che in generale dipende sia dalla posizione che dal tempo, anche se la dipendenza dal tempo può essere trascurata nel caso del potenziale di impurezza.

* la statistica degli stati di impurezza

La cosa essenziale da capire, per stabilire che tipo di distribuzione descrive l'occupazione degli stati di impurezza è se due elettroni di spin opposto possono occupare lo stesso stato di impurezza (stato legato).

Per fare questo facciamo delle ipotesi sul numero di stati di impurezza e sulla loro disposizione in energia.

Portiamo avanti lo studio nelle **ipotesi semplici** di impurezza donorica con un solo stato legato, capace di ospitare un solo elettrone.

Immaginiamo che questo stato legato non può essere occupato da due elettroni con spin opposto perché il termine di repulsione coulombiana è troppo grande (il prof dice: «è così grande da impedire la formazione dello stato legato», ma non capisco che intende con 'formazione dello stato legato' quello per il secondo elettrone? boh?).

In queste ipotesi si trova, usando l'insieme gran-canonic, che il rapporto tra le impurezze (donoriche) non ionizzate (cioè con 1 elettrone) e quelle ionizzate è

$$\frac{N_{d_n}}{N_d} = \frac{g_n e^{\frac{\mu - (e - d)}{KT}}}{g_i}$$

dove g_n è la degenerazione dello stato di impurezza (ad esempio se lo stato fosse occupabile da due elettroni con spin opposto sarebbe $g_n = 2$), e g_i è la degenerazione degli stati di banda (che è sempre 1).

Nell'espressione compare anche d , che rappresenta l'energia di legame dello stato di impurezza (nell'esempio è un'impurezza donorica) misurata a partire dal minimo della banda di conduzione.

Se chiamiamo con N_d il numero totale di impurezze donoriche ($N_d = N_{di} + N_{dn}$), dalla formula precedente si può ricavare il rapporto tra il numero di impurezze non ionizzate e il numero totale di impurezze.

Infatti si ha :

$$\frac{N_{d_n}}{N_d} = \frac{g_n}{g_i} e^{\frac{\mu - (e - d)}{KT}}$$

$$\frac{N_{d_i}}{N_{d_n}} = \frac{g_i}{g_n} e^{\frac{E_c - E_d - \mu}{kT}}$$

$$1 + \frac{N_{d_i}}{N_{d_n}} = 1 + \frac{g_i}{g_n} e^{\frac{E_c - E_d - \mu}{kT}}$$

$$\frac{N_{d_n}}{N_{d_n}} + \frac{N_{d_i}}{N_{d_n}} = 1 + \frac{g_i}{g_n} e^{\frac{E_c - E_d - \mu}{kT}}$$

$$\frac{N_{d_n} + N_{d_i}}{N_{d_n}} = 1 + \frac{g_i}{g_n} e^{\frac{E_c - E_d - \mu}{kT}}$$

$$\frac{N_d}{N_{d_n}} = 1 + \frac{g_i}{g_n} e^{\frac{E_c - E_d - \mu}{kT}}$$

$$\frac{N_{d_n}}{N_d} = \frac{1}{1 + \frac{g_i}{g_n} e^{\frac{E_c - E_d - \mu}{kT}}}$$

(in pratica abbiamo invertito, sommato un'unità e poi ri-invertito).

Questa formula esprime per definizione la probabilità che lo stato di impurezza (donorica) sia occupato da un elettrone (impurezza 'non ionizzata') :

$$P_e(d) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_c - E_d - \mu}{kT}}}$$

dove secondo il professore $\mu = 0.5$ (ma secondo me vale 1, vedi sopra).

Nel caso di impurezze accettriche, con conti analoghi si ottiene la seguente probabilità di occupazione dello stato accettrico con energia $E_v + E_a$ (dove dunque E_a è la distanza in energia dello stato accettrico dal massimo della banda di valenza) :

$$P_e(a) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_v + E_a - \mu}{kT}}}$$

ma a noi interessa di più il complemento a 1 di questa probabilità, che è la probabilità che l'impurezza accettrica si ionizzi, ovvero che una lacuna occupi questo 'stato di lacuna' :

$$P_h(a) = 1 - P_e(a)$$

$$P_h(a) = \frac{e^{\frac{v+a-\mu}{KT}}}{1 + e^{\frac{v+a-\mu}{KT}}}$$

$$P_h(a) = \frac{1}{\frac{1}{e^{\frac{v+a-\mu}{KT}}} + 1}$$

$$P_h(a) = \frac{1}{1 + \frac{1}{e^{\frac{\mu-(v+a)}{KT}}}}$$

* densità di portatori

All'equilibrio termodinamico la presenza degli stati di impurezza modifica il numero di portatori nelle bande.

Possiamo dire che la presenza degli stati di impurezza sposta il potenziale chimico. Tuttavia la legge di azione di massa rimane valida.

Per studiare il potenziale chimico μ possiamo impostare un'equazione che imponga la **neutralità elettrica del materiale**, imponendo che la differenza tra il numero di elettroni in banda di conduzione e il numero di lacune in banda di valenza sia uguale alla differenza tra gli stati donorici occupati da lacune e il numero di stati accettori occupati da elettroni :

$$n_c - p_v = N_d [1 - P_e(d)] - N_a P_e(a).$$

In altre parole (più fisicamente) questa relazione dice che gli elettroni che non stanno nè in banda di conduzione nè in banda di valenza devono stare negli stati di impurezza.

Infatti se il semiconduttore fosse intrinseco ci dovrebbero essere lo stesso numero di lacune in banda di conduzione e di elettroni in banda di valenza. Nel semiconduttore drogato la differenza è non nulla (membro di sinistra).

D'altra parte se moltiplichiamo il numero di livelli donorici per la probabilità che un livello donorico sia occupato da un elettrone ottengo il numero totale di elettroni presenti negli stati accettori. Il numero di lacune presenti negli stati donorici si ottiene in modo analogo, e se si fa la differenza si ottiene il numero totale di lacune 'scoperte' negli stati di impurezza (membro di destra), che deve essere uguale al numero di elettroni 'scoperti' presenti nelle bande (membro di sinistra).
(verificare questo discorso)

Se, più in generale, ci sono più specie accettriche e più specie donoriche possiamo scrivere la forma più generale

$$n_c - p_v = \sum_j N_{d_j} [1 - P_e(\epsilon_{d_j})] - \sum_k N_{a_k} P_e(\epsilon_{a_k})$$

dove abbiamo previsto delle somme sulle diverse specie.

Se adesso teniamo presenti le espressioni delle probabilità di occupazione :

$$P_e(\epsilon_d) = \frac{1}{1 + e^{\frac{\epsilon_d - \mu}{kT}}} \quad ; \quad P_e(\epsilon_a) = \frac{1}{1 + e^{\frac{\mu - \epsilon_a}{kT}}}$$

'si vede subito che' (:-) le probabilità di occupazione del membro di destra dell'equazione sono trascurabili se consideriamo rispettivamente stati di impurezza donorici o accettori con energie (ϵ_d, ϵ_a) tali che $\epsilon_d - \mu \ll 0$ o $\mu - \epsilon_a \gg 0$ rispettivamente.

In altre parole danno contributo stati di impurezza accettori o donorici che hanno energie che soddisfano la relazione

$$\mu - \epsilon_a \ll 0 \quad \epsilon_d - \mu \ll 0$$

Ma questo significa che alla parte destra dell'equazione contribuiscono solo gli stati di impurezza vicini al potenziale chimico.

Per risolvere l'equazione facciamo delle ipotesi semplificatrici :

- supponiamo che ci sia solo una specie donorica ed una accettoria
- supponiamo che il numero di stati donorici sia maggiore del numero di stati accettori :

$$N_d > N_a$$

- supponiamo che la gap sia abbastanza ampia, in modo che pochi elettroni riescano a passare in banda di conduzione, e dunque $p_v \approx 0$

- supponiamo che il livello accettoria sia molto più in basso del potenziale chimico :

$$\mu - \epsilon_a \ll 0$$

e dunque che $P_e(\epsilon_a) \approx 1$.

In tali ipotesi l'equazione diventa :

$$n_c = N_d [1 - P_e(\epsilon_d)] - N_a$$

cioè

$$n_c = N_d - N_d P_e(\epsilon_d) - N_a$$

$$n_c = N_d - \frac{N_d}{1 + e^{\frac{c-d-\mu}{KT}}} - N_a$$

$$N_d - N_a - n_c = \frac{N_d}{1 + e^{\frac{c-d-\mu}{KT}}}$$

$$N_d - N_a - n_c = \frac{N_d}{1 + e^{\frac{c-\mu}{KT}} e^{-\frac{d}{KT}}}$$

A questo punto, nell'ipotesi $n_c \ll N_0$, possiamo considerare una delle due espressioni della densità di elettroni in banda di conduzione n_c , trovata con le 'soluzioni asintotiche' dell'integrale di Dirac (vedi) :

$$n_c = N_c e^{\frac{\mu-c}{KT}}$$

$$e^{\frac{c-\mu}{KT}} = \frac{N_c}{n_c}$$

sostituendola si ha :

$$N_d - N_a - n_c = \frac{N_d}{1 + \frac{N_c}{n_c} e^{-\frac{d}{KT}}}$$

$$N_d - N_a - n_c = \frac{n_c N_d}{n_c + N_c e^{-\frac{d}{KT}}}$$

$$n_c + N_c e^{-\frac{d}{KT}} = \frac{n_c N_d}{N_d - N_a - n_c}$$

$$N_c e^{-\frac{d}{KT}} = \frac{n_c N_d}{N_d - N_a - n_c} - n_c$$

$$N_c e^{-\frac{d}{KT}} = \frac{n_c N_d - n_c (N_d - N_a - n_c)}{N_d - N_a - n_c}$$

$$N_c e^{-\frac{d}{KT}} = \frac{n_c N_d - n_c N_d + n_c N_a + n_c^2}{N_d - N_a - n_c}$$

$$N_c e^{-\frac{d}{KT}} = \frac{n_c (N_a + n_c)}{N_d - N_a - n_c}$$

$$\frac{n_c (N_a + n_c)}{N_d - N_a - n_c} = N_c e^{-\frac{d}{KT}}$$

Questa è un'equazione di secondo grado in n_c , e risolvendola si ottiene l'andamento della popolazione di elettroni in banda di conduzione in funzione della temperatura T , e del numero totale di livelli di impurezza donorica N_d e di impurezza accettorica N_a .

Vediamo alcuni casi particolari in cui l'equazione diventa ancora più semplice.

a) Temperature molto basse

si ha $n_c \ll N_a < N_d$, e dunque

$$n_c = \frac{N_d - N_a - n_c}{N_a + n_c} N_c e^{-\frac{d}{KT}}$$

e, trascurando n_c al secondo membro

$$n_c \approx \frac{N_c (N_d - N_a)}{N_a} e^{-\frac{d}{KT}}$$

e, passando ai logaritmi

$$\ln n_c \approx \ln \left(\frac{N_c (N_d - N_a)}{N_a} \right) - \frac{d}{KT}$$

che dunque prevede un andamento lineare di $\ln n_c$ rispetto alla temperatura, con coefficiente angolare $-d/K$. Tuttavia l'andamento non è 'puramente' lineare, perché N_c dipende dalla temperatura.

b) Temperature intermedie

si ha $N_a \ll n_c \ll N_d$ e quindi possiamo trascurare anche N_d , ma non più n_c al denominatore, ottenendo (non ho fatto i conti...):

$$n_c \approx \left(N_c N_d \right)^{1/2} e^{-\frac{d}{2KT}}$$

e dunque in questo caso non si può proprio parlare di andamento lineare di $\ln n_c$ in T , perché la dipendenza di N_c da T questa volta non è trascurabile.

c) Numeri di impurezze accettriche e donriche dello stesso ordine

si ha $n_c \ll N_a \quad N_d$, e dunque, ad ogni temperatura

$$n_c \approx \frac{N_d - N_a}{1 + \frac{N_a}{N_c} e^{-\frac{d}{2KT}}}$$

d) Alte temperature

Se $n_c \ll N_c$, e per $\frac{d}{KT} \ll 1$, si ha $n_c \approx N_d - N_a$.

In tali condizioni, e ad alte temperature n_c è indipendente da T .

* potenziale chimico *

si ha

$$\mu = \mu_c + K T \ln \frac{n_c}{N_c}$$

Nel limite a basse temperature si ha (credo sostituendo l'espressione di n_c):

$$\mu = \mu_c - \mu_d + K T \ln \frac{(N_d - N_a)}{N_a}$$

mentre ad alte temperature

$$\mu = \mu_c + K T \ln \frac{N_d - N_a}{N_c}$$

Vediamo che, nell'ipotesi che $N_d \gg N_a$, nel primo caso (basse temperature) il potenziale chimico μ è una funzione crescente della temperatura, mentre nel secondo caso (alte temperature) è

decescente.

Concludiamo questo studio ricordando che lo abbiamo condotto nell'ipotesi che l'impurezza fosse donorica, avesse un solo stato legato, e che questo fosse tale da non poter contenere due elettroni di spin opposto ma solo uno.

Se queste ipotesi non sussistono, o se ci sono più di un tipo di impurezza, le cose si complicano, ma non succede niente di concettualmente nuovo.

• Trasporto di carica

(appunti del prof.)

La conduzione elettrica nei semiconduttori è influenzata da diversi fattori.

A differenza dei metalli, dove la conducibilità elettrica

$$= \frac{n e^2}{m}$$

è studiata cercando di determinare l'andamento del tempo caratteristico (tempo medio tra due urti elettrone-fonone) con la temperatura, nei semiconduttori si studiano le quantità

$$\mu_n = \frac{e^{col}_n}{m_c} \quad e \quad \mu_p = \frac{e^{col}_p}{m_v}$$

dette rispettivamente *mobilità degli elettroni* e *mobilità delle lacune*, dove compaiono due diversi tempi caratteristici delle collisioni, in quanto i meccanismi di urto per elettroni e lacune sono differenti.

Notiamo che in queste espressioni non compaiono le densità di portatori n_c e p_v , e questo è importante perché tali densità dipendono dalla temperatura.

Consideriamo due casi diversi.

caso a) Sia il numero dei portatori di carica molto grande, tanto da essere costretti ad usare la statistica di Fermi.

In questo caso possiamo utilizzare il fatto (dimostrato altrove negli appunti, ma non so dove) che se si ha la coesistenza di più meccanismi di urto, ognuno col suo tempo caratteristico $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \dots$, il tempo medio fra due urti è dato da

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \dots$$

e dunque possiamo considerare un unico tempo caratteristico medio per gli elettroni e per le lacune.

Inoltre, abbiamo già visto (a cosa si riferisce?) che solo gli elettroni che stanno in un guscio di spessore $\sim \lambda_D$ attorno all'energia μ sono coinvolti nel meccanismo di urto. Dunque possiamo concludere che c'è una sostanziale indipendenza dalla temperatura della velocità quadratica media degli elettroni.

Concludiamo in questo caso che, se il meccanismo collisionale è dovuto essenzialmente a fononi

acustici e/o impurezze ionizzate, si avrà una dipendenza delle mobilità μ_n e μ_p dalla temperatura, simile a quella vista per i metalli.

caso b) sia adesso il numero dei portatori piccolo, tale da soddisfare la statistica di Boltzmann. In tal caso si dimostra che la mobilità assume le seguenti espressioni nei seguenti casi :

i) se le collisioni sono dovute a fononi acustici si ha

$$\mu_n = \mu_p = B T^{-3/2}$$

ii) se le collisioni sono dovute a fononi ottici si ha

$$\mu_n = \mu_p = C$$

iii) se le collisioni sono dovute a impurezze (ionizzate) si ha

$$\mu_n = \mu_p = D T^{3/2}.$$

[...]sugli appunti a questo punto il prof tratta dell'effetto Hall nei semiconduttori, ma io lo salto [...]

* conduttività dovuta alle impurezze

Consideriamo un certo semiconduttore drogato, e immaginiamo di portare la temperatura a zero. Per quanto visto fin'ora ci aspetteremmo che la conducibilità vada a zero, perché gli elettroni 'in più' dovuti al drogaggio si situano negli stati legati dell'impurezza, e non vanno in banda di conduzione, mentre la banda di valenza è piena.

Tuttavia si vede che, se il raggio medio dello stato legato è maggiore della distanza media tra le impurezze, anche allo zero assoluto la conducibilità non è del tutto nulla!

(aggiunta mia : forse la cosa si può descrivere dicendo che se la distanza tra le impurezze è minore del raggio medio dello stato legato (stato di impurezza), è come se le impurezze formassero un 'sottoreticolo' compenetrato nel reticolo principale. In tal caso gli elettroni negli stati di impurezza si possono spostare lungo questo sottoreticolo...)

In particolare si vede che la conducibilità assume la forma :

$$= n_c e \mu_n + \frac{2}{3} e \frac{e^{-\frac{2}{KT}}}{KT} + \frac{3}{3} e \frac{e^{-\frac{3}{KT}}}{KT}$$

e dunque c'è un termine che non va a zero con la temperatura.

In generale aumentando il numero di impurezze diminuisce la distanza media tra le impurezze. Se diminuisce la distanza media tra le impurezze, diminuisce di conseguenza l'energia di legame tra l'elettrone e l'impurezza.

Ciò avviene perché l'interazione elettrone-impurezza è maggiormente schermata se aumenta il numero di elettroni liberi, provenienti dalle impurezze (ionizzate).

Inoltre il numero di elettroni liberi aumenta anche perché un'impurezza non ionizzata è più facilmente polarizzabile (?).

Dato un certo semiconduttore ed una certa impurezza, si osserva che esiste una densità di impurezza 'critica' N_c tale che per densità minori ($N_d < N_c$) l'energia di legame elettrone-impurezza è nulla, mentre per densità maggiori ($N_d > N_c$) tale energia varia secondo la legge :

$$\sigma_d = \sigma_{d0} \left[1 - \left(\frac{N_d}{N_c} \right)^{1/3} \right].$$

Dunque al crescere della densità di impurezze, e al diminuire della temperatura, la conducibilità diventa come quella di un metallo fatto tutto di impurezze, ed è sostanzialmente indipendente dalla temperatura.

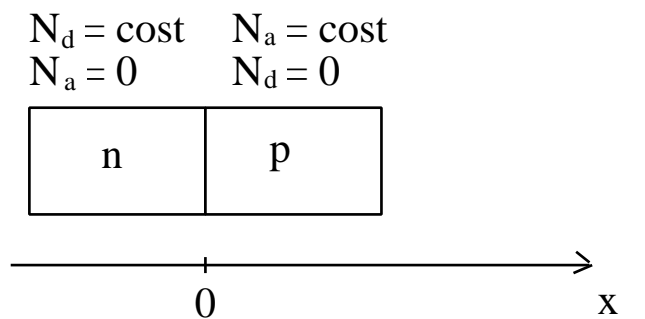
Riguardo al terzo termine, il prof dice solo che esso nasce perché in un semiconduttore drogato n e parzialmente compensato vi è una probabilità di transizione dell'elettrone da un'impurezza non ionizzata ad una ionizzata mediante "transizione per hopping". Ciò da origine ad un processo attivato termicamente.

• **Giunzioni**

(appunti prof.)

Consideriamo il caso di un semiconduttore drogato in maniera non omogenea.

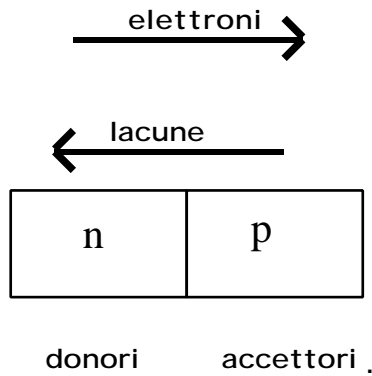
In particolare consideriamo un certo asse spaziale X, e supponiamo che a destra dell'origine ci sia una concentrazione costante di impurezze donoriche, e una concentrazione nulla di impurezze accettriche, e a sinistra dell'origine ci sia viceversa una densità costante di impurezze accettriche e una concentrazione nulla di impurezze donoriche :



Questo si può realizzare giustappponendo due semiconduttori drogati in maniera diversa, e dunque si parla di *giunzione* .

Se le due parti fossero separate, i valori del potenziale chimico sarebbero diversi : dalla parte donorica più alto e dalla parte accettrica più basso.

Dunque se le due parti sono in contatto, per ottenere l'equilibrio termodinamico deve succedere che degli elettroni migrino dalla parte donorica a quella accettrica, e (dunque) viceversa delle lacune migrino dalla parte accettrica a quella donorica :



Questa migrazione però comporta uno spostamento di carica : dal lato n ci sarà un surplus di lacune e dunque un accumulo di carica positiva, e dal lato p un accumulo di carica negativa. Questo crea un **campo elettrico**, localizzato nella regione di giunzione.

Il primo obiettivo che ci poniamo è di calcolare la funzione potenziale che si crea all'equilibrio termodinamico.

Facciamo l'ipotesi che $n_c \ll N_c$ e $p_v \ll N_v$ (densità dei portatori molto minore della densità di impurezze (o no?).

Inoltre facciamo l'ipotesi che il potenziale che cerchiamo sia una funzione lentamente variabile di x , abbastanza da poter utilizzare l'approssimazione quasiclassica per l'energia della particella (principio di corrispondenza, teorema di Ehrenfest).

In queste ipotesi possiamo utilizzare le forme asintotiche dell'integrale di Dirac ((?) credo, ma a questo punto devo chiarire il significato delle N_c e P_v), e dunque si ottiene :

$$n_c(x) = N_c(T) e^{-\frac{e \phi(x) - \mu}{kT}}$$

$$p_v(x) = P_v(T) e^{-\frac{\mu - e \phi(x)}{kT}}$$

Per le ipotesi fatte sul sistema le densità n_c e p_v soddisfano alle condizioni al contorno

$$\begin{cases} \lim_{x \rightarrow +} n_c(x) = N_d \\ \lim_{x \rightarrow -} p_v(x) = N_a \end{cases}$$

e dunque

$$\begin{cases} N_c(T) e^{-\frac{e \phi(+)}{kT}} = N_d \\ P_v(T) e^{-\frac{\mu - e \phi(-)}{kT}} = N_a \end{cases}$$

cioè stiamo dicendo che la migrazione della cariche, e dunque il campo che ne consegue, interessa solo una piccola zona attorno alla giunzione, e che all'equilibrio termodinamico tutte le impurezze accettriche e donoriche siano ionizzate (temperatura ambiente o più alta).

Se risolviamo le equazioni per le concentrazioni di portatori, utilizzando queste condizioni al contorno, otteniamo :

$$n_c(x) = N_d e^{-\frac{e[\phi(\infty) - e(x)]}{KT}}$$

$$p_v(x) = N_a e^{-\frac{e[e(x) - \phi(-\infty)]}{KT}}.$$

Inoltre si può calcolare anche la 'differenza di potenziale' :

$$e = e[\phi(\infty) - \phi(-\infty)]$$

$$e = E_g + KT \ln\left(\frac{N_d N_a}{N_c P_v}\right),$$

da cui si può approssimare

$$|e| \approx E_g.$$

Stabiliamo di chiamare d_p la distanza dall'origine (giunzione) alla quale nella regione dell'impurità donorica (sinistra) il potenziale ha praticamente raggiunto il valore asintotico $\phi(-\infty)$, e analogamente chiamiamo d_n la distanza a destra della giunzione in cui il potenziale ha raggiunto il valore $\phi(\infty)$.

In altre parole diciamo che la 'ddp' si osserva già nella regione finita $[-d_p, d_n]$.

Ciò posto, poiché $KT \ll e|e|$ si ha che n_c diventa trascurabile in un intervallo $x_n \ll d_p + d_n$, a partire da d_n , e analogamente p_v diventa trascurabile in un intervallo $x_p \ll d_p + d_n$, a partire da $-d_p$.

In definitiva le due densità di portatori sono nulle in tutta la zona $[-d_p, d_n]$, e per questo motivo questa zona è detta **zona di svuotamento**.

A questo punto possiamo scrivere un'espressione della densità di carica, e dunque risolvere l'equazione di Poisson e ricavare il potenziale.

La densità di carica in generale è data dalla densità dei portatori più la densità degli stati di impurezza (sempre se ho capito bene il significato delle N_x) :

$$\rho(x) = e[N_d(x) - N_a(x) - n_c(x) + p_v(x)]$$

Per le considerazioni appena fatte si ha

$$\begin{aligned} \phi(x) &= 0 && \text{per } x > d_n \\ \phi(x) &= e N_d x && \text{per } 0 < x < d_n \\ \phi(x) &= -e N_a x && \text{per } -d_p < x < 0 \\ \phi(x) &= 0 && \text{per } x < -d_p. \end{aligned}$$

E dunque, l'equazione di Poisson

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon_0} \rho(x)$$

può essere facilmente risolta nelle varie regioni, imponendo le due condizioni al contorno

$$\begin{cases} \lim_{x \rightarrow d_n} \phi(x) = 0 \\ \lim_{x \rightarrow -d_p} \phi(x) = 0 \end{cases}$$

e imponendo delle condizioni di raccordo, cioè che la derivata prima sia continua in d_n e in $-d_p$.

Si ha :

$$\begin{aligned} \phi(x) &= 0 && \text{per } x > d_n \\ \phi(x) &= \frac{q N_d}{2\epsilon_0} (x - d_n)^2 && \text{per } 0 < x < d_n \\ \phi(x) &= -\frac{q N_a}{2\epsilon_0} (x + d_p)^2 && \text{per } -d_p < x < 0 \\ \phi(x) &= 0 && \text{per } x < -d_p. \end{aligned}$$

Imponendo le ulteriori condizioni di raccordo nell'origine :

$$\phi(0^+) = \phi(0^-) \quad ; \quad \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{0^+} = \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{0^-}$$

si ottengono le seguenti relazioni per la ddp, le dimensioni della zona di svuotamento e le densità N_a e N_d (che ancora devo capire che sono...) :

$$V = \frac{q}{\epsilon_0} (N_d d_n^2 + N_a d_p^2)$$

$$N_d d_n = N_a d_p$$

e di conseguenza :

$$d_{n,p} = \left[\frac{\left(\frac{N_a}{N_d} \right) \pm 0}{(N_d + N_a) 2 e} \right]^{1/2} .$$

Il valore di d_n e d_p varia tra 10^2 e 10^4 Å.

* condizioni di non equilibrio

Fin'ora abbiamo studiato il sistema della giunzione all'equilibrio termodinamico.

Per raggiungere l'equilibrio termodinamico il potenziale chimico deve assumere lo stesso valore nelle due regioni, e per permettere questo si ha la migrazione di portatori e dunque la comparsa della regione di svuotamento.

Abbiamo già detto che l'accumulo di cariche 'migrate' crea un campo elettrico (e dunque la ddp).

Questo campo è tale da ostacolare il passaggio di portatori dalla zona in cui sono maggioritari alla zona in cui sono minoritari, e favorire il passaggio dei portatori dalla zona in cui sono minoritari alla zona in cui sono maggioritari.

In particolare gli elettroni sono ostacolati nel passare dalla zona **n** alla zona **p** e sono favoriti a passare dalla zona **p** alla zona **n**.

Viceversa le lacune sono ostacolate nel passare dalla zona **p** alla zona **n** e sono favoriti a passare dalla zona **n** alla zona **p**.

D'altra parte questo è coerente col fatto che all'equilibrio termodinamico le correnti di elettroni e lacune devono essere zero separatamente, in modo da evitare ulteriore accumulo di portatori nelle due zone.

Possiamo dire che l'accumulo di cariche man mano crea una barriera di potenziale sempre più alta, che limita sempre più il passaggio di altri portatori, fino a creare un equilibrio.

In altre parole si crea un equilibrio tra le forze elettriche e la tendenza dei portatori a diffondersi da "dove ce n'è di più" a "dove ce n'è di meno".

Studiamo adesso che succede se dall'esterno applichiamo una ddp che chiamiamo V .

In genere si usa una convenzione per cui la ddp esterna V è positiva se la zona **p** è ad un potenziale più alto di quello della zona **n**, e negativa se è il contrario.

Il potenziale extra esterno V altera le condizioni di equilibrio.

La 'barriera di potenziale', cioè la ddp totale che si crea tra le due zone della giunzione, per come è scelta la convenzione è :

$$v = -V.$$

Infatti per $V > 0$ la barriera si abbassa, e per $V < 0$ la barriera si alza.

Tenendo presente la relazione tra le dimensioni della zona di svuotamento e la barriera di potenziale si ha :

$$d_{n,p}(V) = d_{n,p}|_{V=0} \left(1 + \frac{V}{\phi_b} \right)^{1/2}.$$

Quest'ultima relazione significa che se la ddp esterna V è positiva la regione di svuotamento si restringe, mentre se $V < 0$ la regione di svuotamento si allarga, rispetto alle sue dimensioni quando non c'è ddp esterna.

Questo si può spiegare fisicamente dicendo che l'abbassamento della barriera di potenziale fa aumentare il flusso di portatori che migrano dalla zona in cui sono maggioritari alla zona in cui sono minoritari.

Invece il flusso di portatori che migrano dalla zona in cui sono minoritari alla zona in cui sono maggioritari non è modificato in prima approssimazione dalla variazione della barriera di potenziale, in quanto questo flusso dipende principalmente dai meccanismi con cui sono generati i portatori minoritari nelle rispettive regioni lontane dalla zona di svuotamento.

Vediamo di valutare le diverse correnti che sono generate da questi meccanismi.

Riguardo agli elettroni, la loro corrente totale è data dalla corrente di elettroni 'maggioritari', cioè che vanno dalla regione in cui sono maggioritari (la regione n , vero?) a quella in cui sono minoritari, che dipende dal potenziale esterno V , e dalla corrente di elettroni 'minoritari', che invece non è influenzata (in prima approssimazione) dalla ddp esterna :

$$j_e = e [J_e(V) - J_e^{\text{gen}}].$$

Ora, per un motivo che a quest'ora non ho la forza di capire (è la mezza) si ha che il numero di elettroni che riesce a superare la barriera dipende esponenzialmente dal potenziale esterno V (deve entrare qualcosa la distribuzione statistica, forse quella di Boltzmann), e dunque

$$j_e = e J_e^{\text{gen}} \left[e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right].$$

Per le lacune la cosa è del tutto analoga, e dunque la corrente totale è :

$$j = e (J_e^{\text{gen}} + J_h^{\text{gen}}) \left[e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right].$$

Questa funzione è la caratteristica voltamperometrica di una giunzione $p-n$.

Essa mostra che per 'polarizzazione diretta' (potenziale esterno positivo) la corrente cresce esponenzialmente, mentre per polarizzazione inversa (ddp esterna negativa) la corrente tende rapidamente ad un valore di saturazione, che dipende dalla corrente dei portatori minoritari, e che è molto piccolo.

•• appunti presi da A.F., che aveva un dubbio e glielo ha chiarito Cata.
 Problemi sulla formula (37) pag 10 degli appunti di lado.

tenere presente che non bisogna fare nessun integrale, ne tantomeno nessuna somma, perché si sta considerando un solo livello discreto.

I fatti salienti sono :

- si usa la distribuzione di Boltzmann, perché gli elettroni provenienti dal drogaggio sono molto minori del numero di Avogadro, e le temperature non sono prossime allo zero.
- nota che le impurezze ionizzate sono quelle che 'forniscono elettroni che vanno nella banda di valenza

INDICE

• Introduzione	1
• Le densità di portatori	1
- metalli -	1
integrali di Dirac	2
(forme asintotiche dell'integrale di Dirac)	2
- semiconduttori -	3
masse efficaci medie	6
(densità degli elettroni)	6
(densità n_c , per $n_c \gg N_0$)	7
(densità n_c , per $n_c \ll N_0$)	7
(densità delle lacune)	7
• Semiconduttori intrinseci	8
* calcolo del potenziale chimico	8
(potenziale chimico per semiconduttori intrinseci)	9
* calcolo della densità dei portatori	9
(densità di portatori per semiconduttori intrinseci)	10
* studio delle masse efficaci medie	10
• Semiconduttori estrinseci	11
(parametro di estrinsecità)	13
• Stati donori e stati accettori	13
(potenziale dell'impurezza)	14
approssimazione della massa efficace	15
* la statistica degli stati di impurezza	16
* densità di portatori	18
• Trasporto di carica	23
mobilità degli elettroni	24
mobilità delle lacune	24
* conduttività dovuta alle impurezze	25
• Giunzioni	26
zona di svuotamento	28
* condizioni di non equilibrio	30