

Elettronica dello Stato Solido

Lezione 12: Concentrazione di portatori all'equilibrio



Daniele Ielmini

DEIB – Politecnico di Milano

daniele.ielmini@polimi.it

Outline

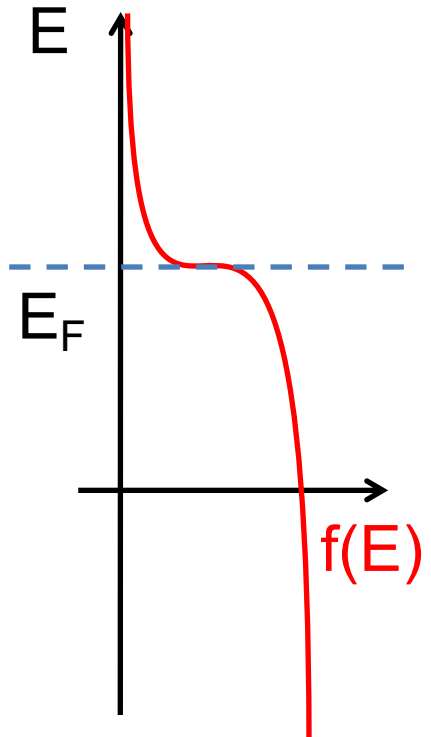
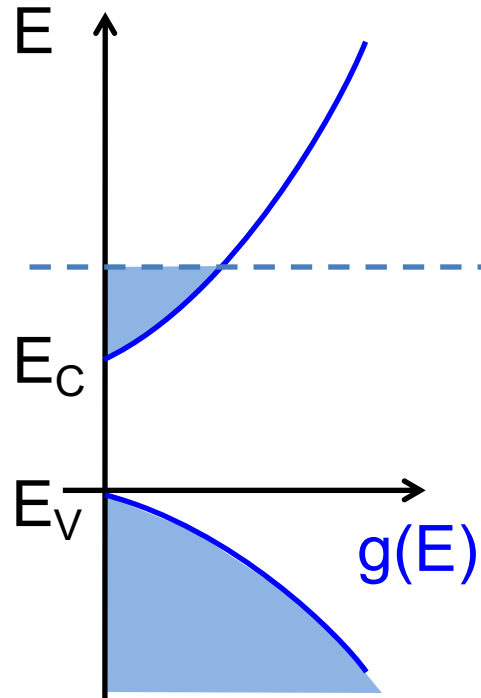
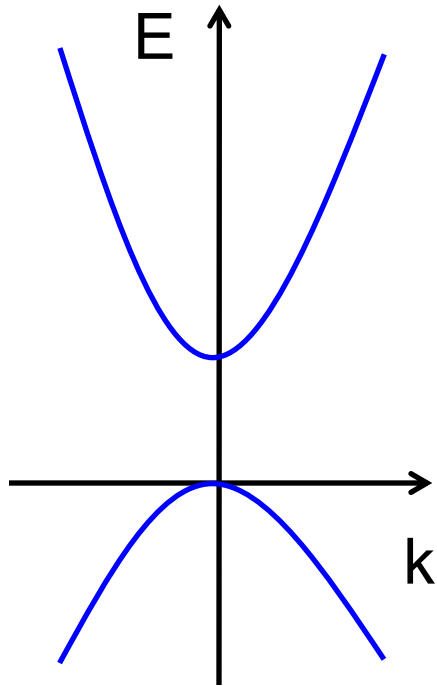
- Introduzione
- Concentrazione di portatori nei metalli
 - Effetto fotoelettrico
 - Effetto termoionico
- Concentrazione di portatori nei semiconduttori
 - Semiconduttori intrinseci
 - Semiconduttori estrinseci
- Conclusioni

Introduzione

- Per calcolare la densità di corrente di elettroni $j = -qnv$ nei semiconduttori/metalli abbiamo bisogno di:
 - Velocità $v = \mu F$
 - Densità di portatori n che partecipano al trasporto $\rightarrow$ banda di conduzione
- La densità di portatori si ottiene come prodotto di densità di stati per probabilità di occupazione, da integrare sull'energia

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

Metalli



Metalli

- Densità di stati: $g_c(E) = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E - E_c}$
- Statistica di occupazione: $f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$
- Concentrazione:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g(E)f(E)dE = \int_{E_c}^{\infty} \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E - E_c} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE$$

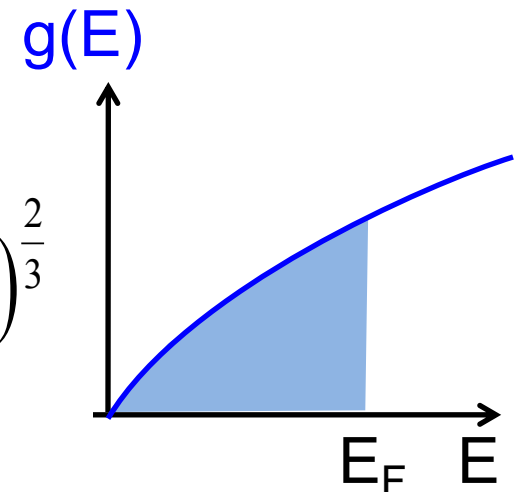
Livello di Fermi a $T = 0$ K

- Approssimiamo la f_{FD} ad un gradino, quindi:

$$n = \int_0^{E_F} \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} dE$$

- Dove abbiamo posto $E_C = 0$ e abbiamo integrato fino a E_F . Quindi:

$$n = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} E_F^{3/2} \quad \Rightarrow \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m_n^*} (3n\pi^2)^{2/3}$$

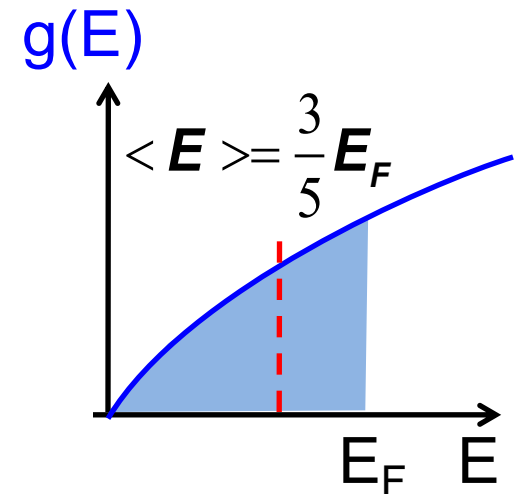


Energia media a $T = 0$ K

- L'energia media del gas di elettroni si ottiene da:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{n} \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE \approx \frac{1}{n} \int_0^{E_F} \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{\frac{3}{2}} dE$$

$$= \frac{1}{\frac{(2m_n^*)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} E_F^{\frac{3}{2}}} \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{5} E_F^{\frac{5}{2}} = \frac{3}{5} E_F$$

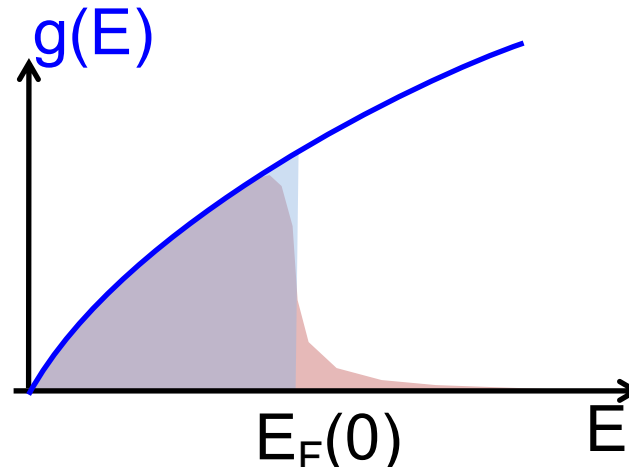


Livello di Fermi a $T > 0$ K

- A $T > 0$ K, l'integrale (non analitico) dà un altro risultato:

$$E_F = E_F(0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F(0)} \right)^2 \right]$$

- La correzione è trascurabile, ed è dovuta al maggiore peso della coda della distribuzione per alte energie $\rightarrow$ devo diminuire E_F per allocare la stessa n



Livello di Fermi a $T > 0$ K

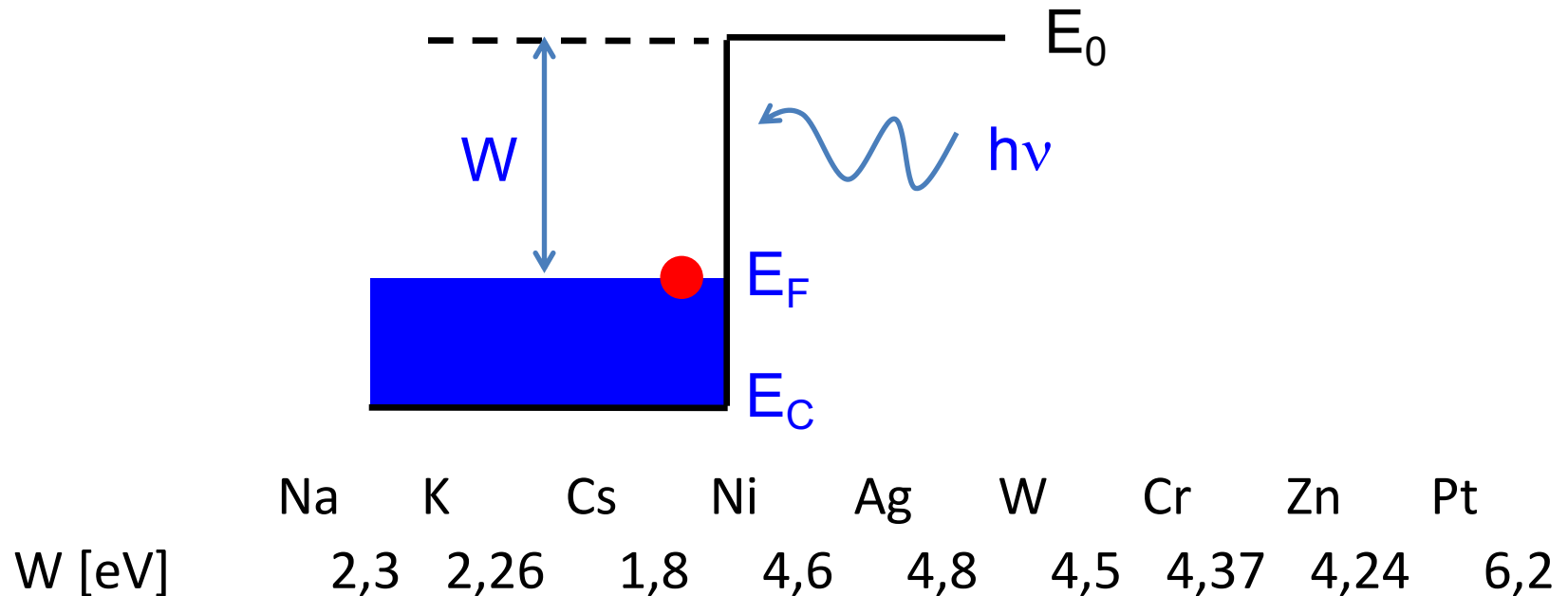
	n [cm ⁻³]	$E_f(0)$ [eV]	$E_f(300)$ [eV]
Li	4,60E+22	4,6926	4,6925
Na	2,50E+22	3,1251	3,1250
K	1,30E+22	2,0209	2,0206
Rb	1,10E+22	1,8079	1,8076
Cs	8,50E+21	1,5224	1,5220
Cu	8,50E+22	7,0662	7,0662
Ag	5,80E+22	5,4768	5,4767
Au	5,90E+22	5,5396	5,5395

- Nota: è stata usata $m^*=m_0$, questo sarebbe accettabile solo per i metalli alcalini:

	Li	Na	K	Rb	Cs
m^*/m_0	1,4	0,98	0,94	0,87	0,83

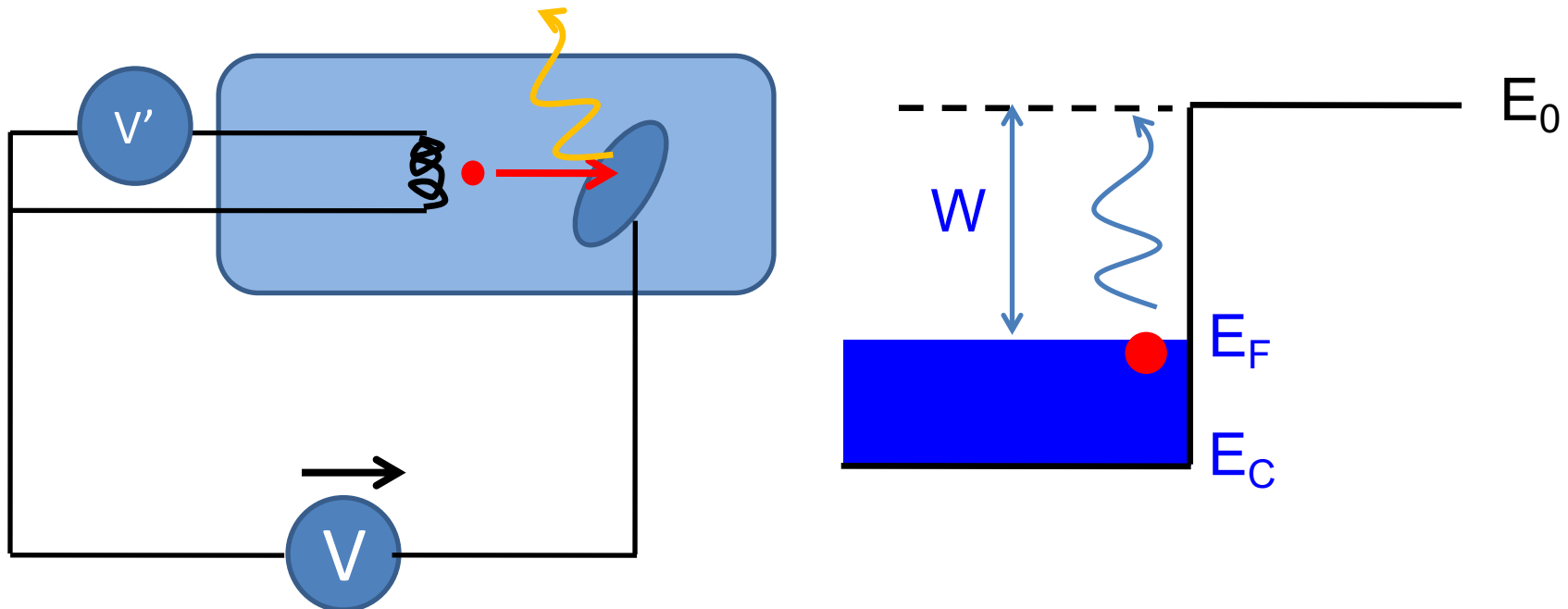
Effetto fotoelettrico rivisitato

- Nell'effetto fotoelettrico avevamo introdotto la funzione lavoro W , uguale all'energia minima per estrarre l'elettrone dal metallo. Qual è il suo significato fisico? $W = E_0 - E_F$



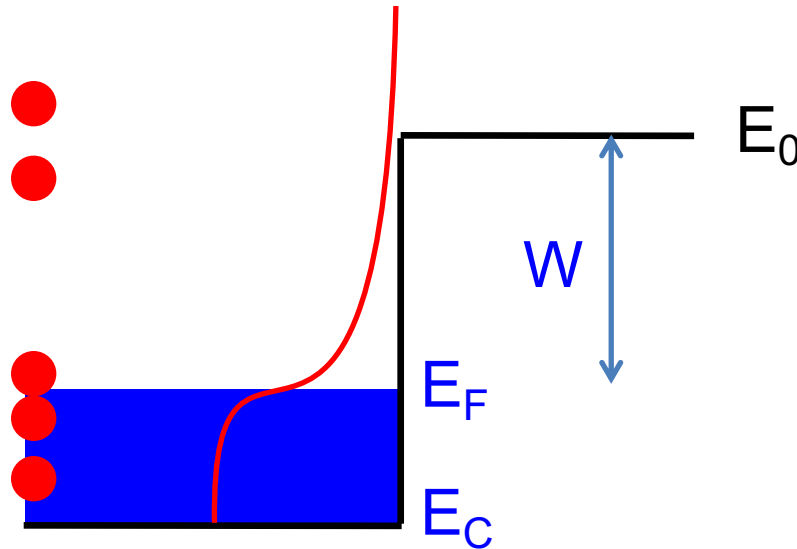
Effetto termoionico

- In alcuni esperimenti (e.g. Brehmsstrahlung) si usano filamenti caldi per emettere elettroni
→ effetto termoionico = evaporazione di elettroni dal metallo ad alta temperatura



Corrente termoionica

- È calcolabile analiticamente con alcune approssimazioni: studiamo la corrente di elettroni che incidono su una certa superficie normale all'asse z , con energia superiore a W :



$$\mathbf{j} = -q n \mathbf{v} = -q \int 2 \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \mathbf{f}(\vec{k}) \mathbf{v}_z(\vec{k}) \quad \text{con } d^3 \vec{k} = dk_x dk_y dk_z$$

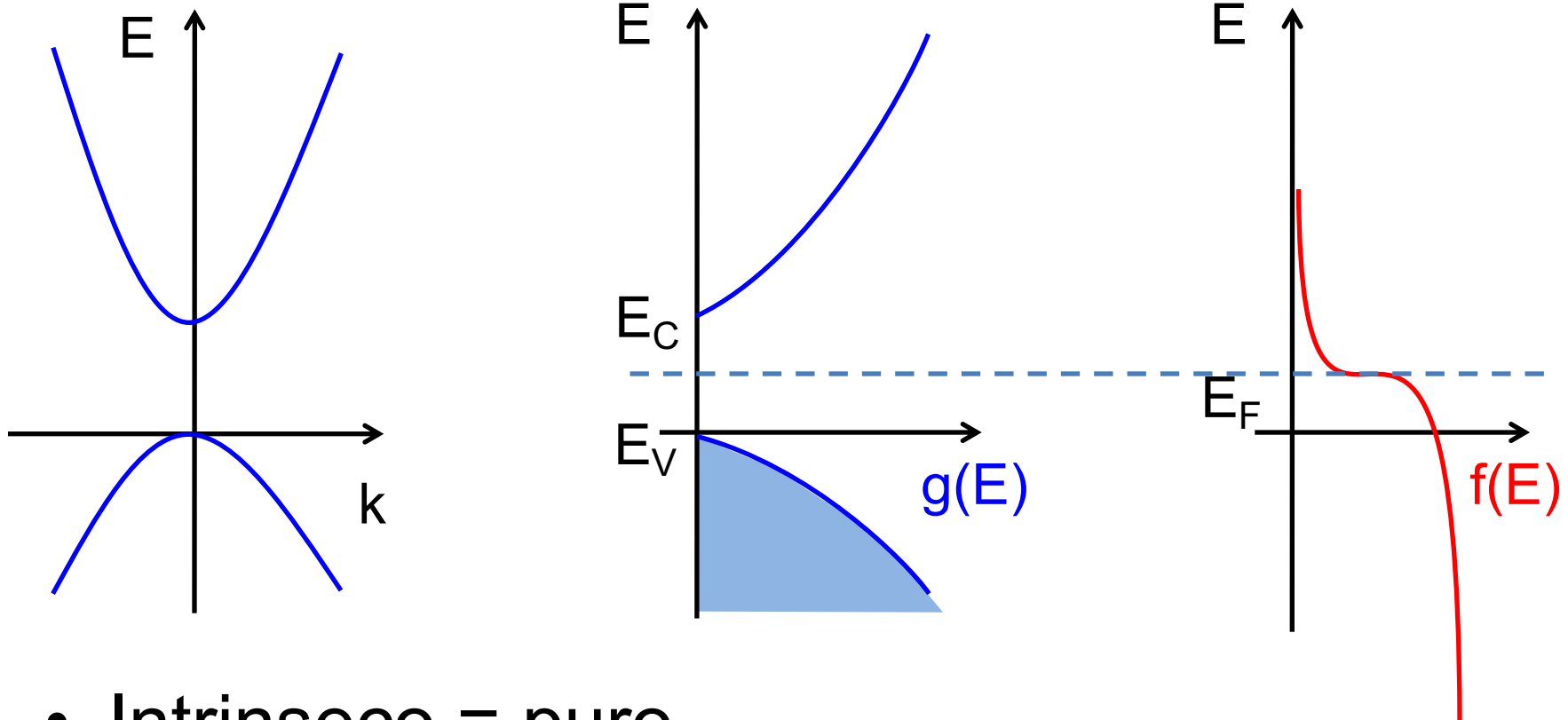
Legge di Richardson-Dushman

$$\begin{aligned}
 j &= -qn v = -2q \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} f(\vec{k}) v_z(\vec{k}) = -2q \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} f(\vec{k}) \frac{1}{\hbar} \frac{dE_z}{dk_z} \\
 &= -2q \int \frac{d^2 \vec{k}_{//}}{\hbar (2\pi)^3} \int_{E_0}^{\infty} dk_z \frac{1}{1 + e^{\frac{E_z + E_{//} - E_F}{kT}}} \frac{dE_z}{dk_z} = -2q \int \frac{d^2 \vec{k}_{//}}{\hbar (2\pi)^3} \int_{E_0}^{\infty} dE_z \frac{1}{1 + e^{\frac{E_z - (E_F - E_{//})}{kT}}} = \\
 &= -2q kT \int \frac{d^2 \vec{k}_{//}}{\hbar (2\pi)^3} \log \left(1 + e^{-\frac{E_0 - (E_F - E_{//})}{kT}} \right) = -\frac{4\pi kT q}{\hbar (2\pi)^3} \int_0^{\infty} k_{//} dk_{//} \log \left(1 + e^{-\frac{W + E_{//}}{kT}} \right) = \\
 &= -\frac{4\pi m^* kT q}{\hbar^3 (2\pi)^3} \int_0^{\infty} dE_{//} \log \left(1 + e^{-\frac{W + E_{//}}{kT}} \right) \approx -\frac{4\pi m^* kT q}{\hbar^3 (2\pi)^3} \int_0^{\infty} dE_{//} e^{-\frac{W + E_{//}}{kT}} \\
 &= -\frac{4\pi m^* q (kT)^2}{\hbar^3 (2\pi)^3} e^{-\frac{W}{kT}}
 \end{aligned}$$

Outline

- Introduzione
- Concentrazione di portatori nei metalli
 - Effetto fotoelettrico
 - Effetto termoionico
- Concentrazione di portatori nei semiconduttori
 - Semiconduttori intrinseci
 - Semiconduttori estrinseci
- Conclusioni

Semiconduttori



- Intrinseco = puro
- Estrinseco = addizionato con impurezze (droganti)
- La differenza sta nella posizione di E_F

Concentrazione n in BC

- Densità di stati in BC: $g_c(E) = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E - E_c}$
- Statistica di occupazione: $f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$
- Concentrazione:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g(E) f(E) dE = \int_{E_c}^{\infty} \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E - E_c} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE$$

Appr. Maxwell-Boltzmann

- Per $E_C > E_F + 3kT$ la distribuzione di Fermi può essere approssimata a quella di Maxwell-Boltzmann:

$$\begin{aligned}
 n &\approx \int_{E_C}^{\infty} \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_C} e^{-\frac{E - E_F}{kT}} dE = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} \int_{E_C}^{\infty} \sqrt{E - E_C} e^{-\frac{E - E_C}{kT}} dE \\
 &= \frac{(2m_n^* kT)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} \int_0^{\infty} \sqrt{x} e^{-x} dx = \frac{1}{4\hbar^3} \left(\frac{2m_n^* kT}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} (*)
 \end{aligned}$$

- N_C = densità effettiva di stati in banda di conduzione

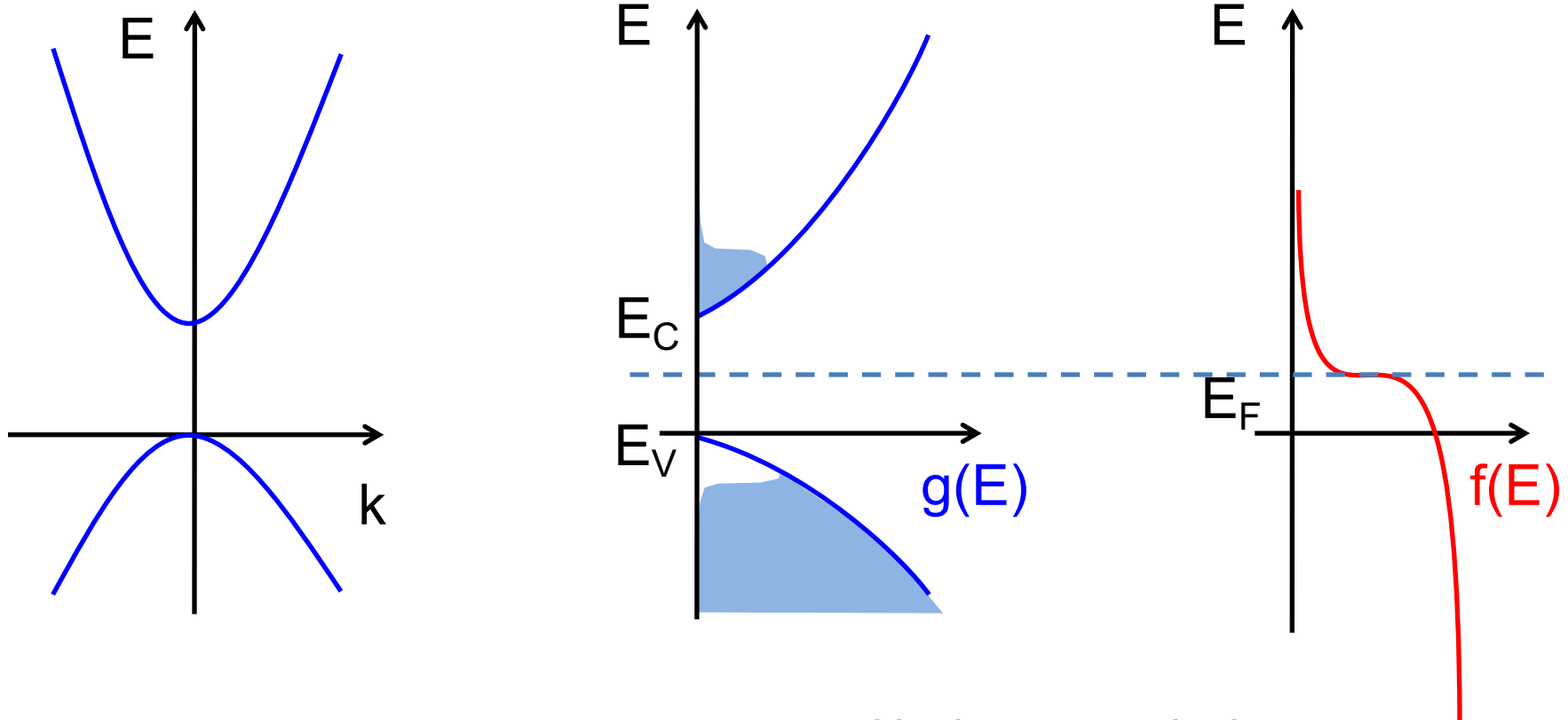
$$(*) \int_0^{\infty} \sqrt{x} e^{-x} dx = \int_0^{\infty} t e^{-t^2} dt^2 = - \int_0^{\infty} t dt e^{-t^2} = - \left[t e^{-t^2} \right]_0^{\infty} + \int_0^{\infty} e^{-t^2} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Concentrazione p in BV

$$\begin{aligned} p &= \int_{-\infty}^{E_V} g(E)(1-f(E))dE = \int_{-\infty}^{E_V} \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E_V - E} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE \\ &\approx \int_{-\infty}^{E_V} \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E_V - E} e^{\frac{E-E_F}{kT}} dE = \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} e^{\frac{E_V-E_F}{kT}} \int_{-\infty}^{E_V} \sqrt{E_V - E} e^{\frac{E-E_V}{kT}} dE \\ &= \frac{(2m_p^*kT)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} e^{\frac{E_V-E_F}{kT}} \int_0^{\infty} \sqrt{x} e^{-x} dx = \frac{1}{4\hbar^3} \left(\frac{2m_p^*kT}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_V-E_F}{kT}} = N_V e^{\frac{E_V-E_F}{kT}} \end{aligned}$$

- N_V = densità effettiva di stati in banda di valenza
- Approssimazione valida solo per $E_V < E_F - 3kT \rightarrow$ livello di Fermi sufficientemente distante dal bordo banda

Semiconduttori intrinseci (puri)



- Il prodotto della coda di $f(E)$ per $g(E)$ dà una distribuzione $n(E)$ in banda di conduzione
- Il prodotto della coda di $1-f(E)$ per $g(E)$ dà una distribuzione $p(E)$ in banda di valenza

Livello intrinseco

- Livello intrinseco = E_i = livello di Fermi E_F nel semiconduttore intrinseco (la posizione di E_F cambia nel semiconduttore drogato)

$$n = p = n_i \rightarrow N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} = N_v e^{\frac{E_v - E_F}{kT}}$$

$$e^{\frac{2E_i}{kT}} = \frac{N_v}{N_c} e^{\frac{E_c + E_v}{kT}} \rightarrow E_i = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{kT}{2} \log \frac{N_v}{N_c}$$

$$E_i = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3kT}{4} \log \frac{m_p^*}{m_n^*}$$

- E_i = mezzo gap, a parte una piccola correzione:

Ge	-3,68E-03 eV
Si	-3,17E-03 eV
GaAs	1,75E-02 eV

Concentrazione intrinseca

- Semiconduttori intrinseci:

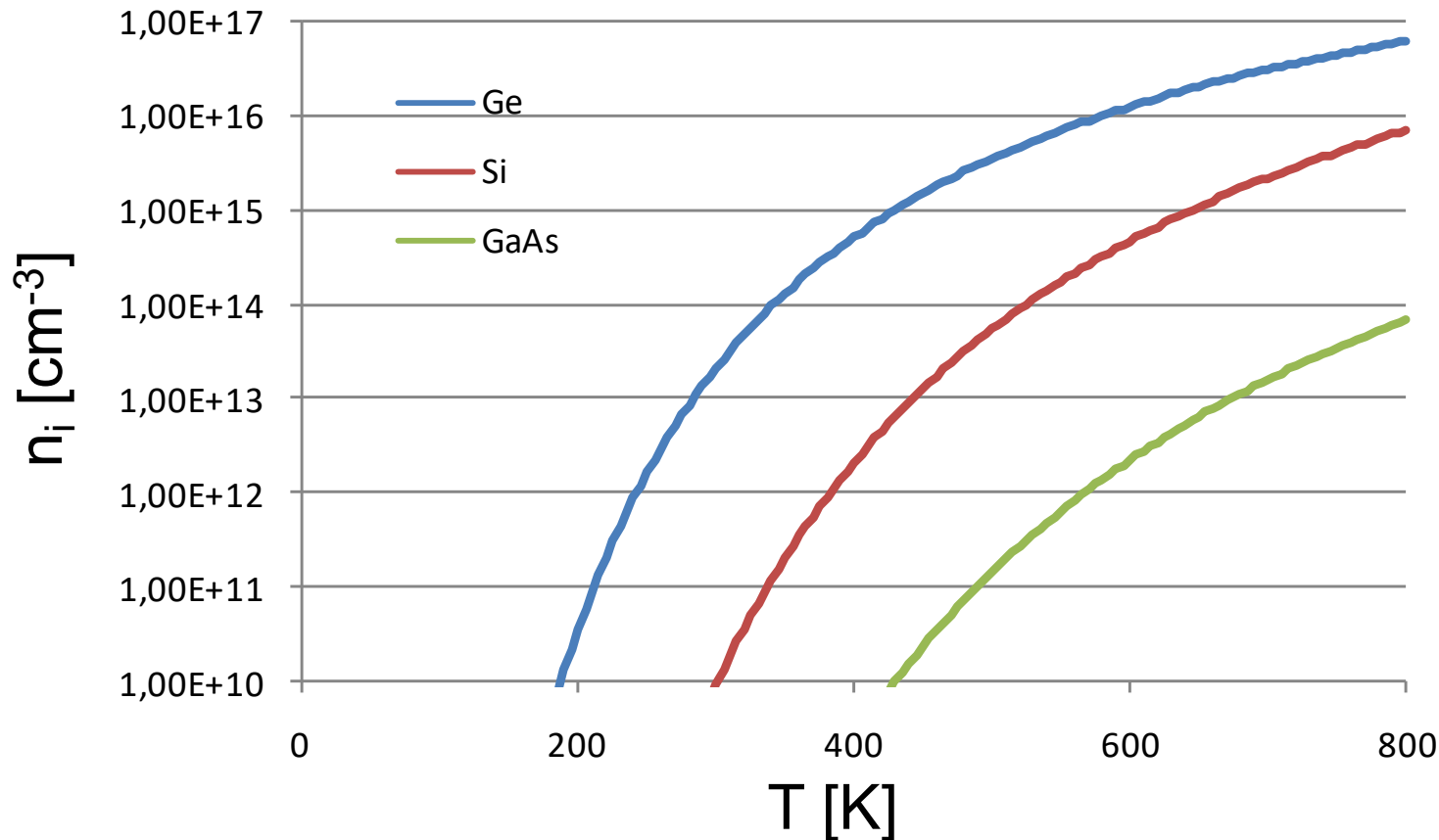
$$n = n_i \rightarrow N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} = n_i$$

$$p = n_i \rightarrow N_V e^{\frac{E_V - E_F}{kT}} = n_i$$

$$n_i^2 = N_C N_V e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} e^{\frac{E_V - E_F}{kT}} = N_C N_V e^{-\frac{E_C - E_V}{kT}} \rightarrow n_i = (N_C N_V)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E_G}{2kT}}$$

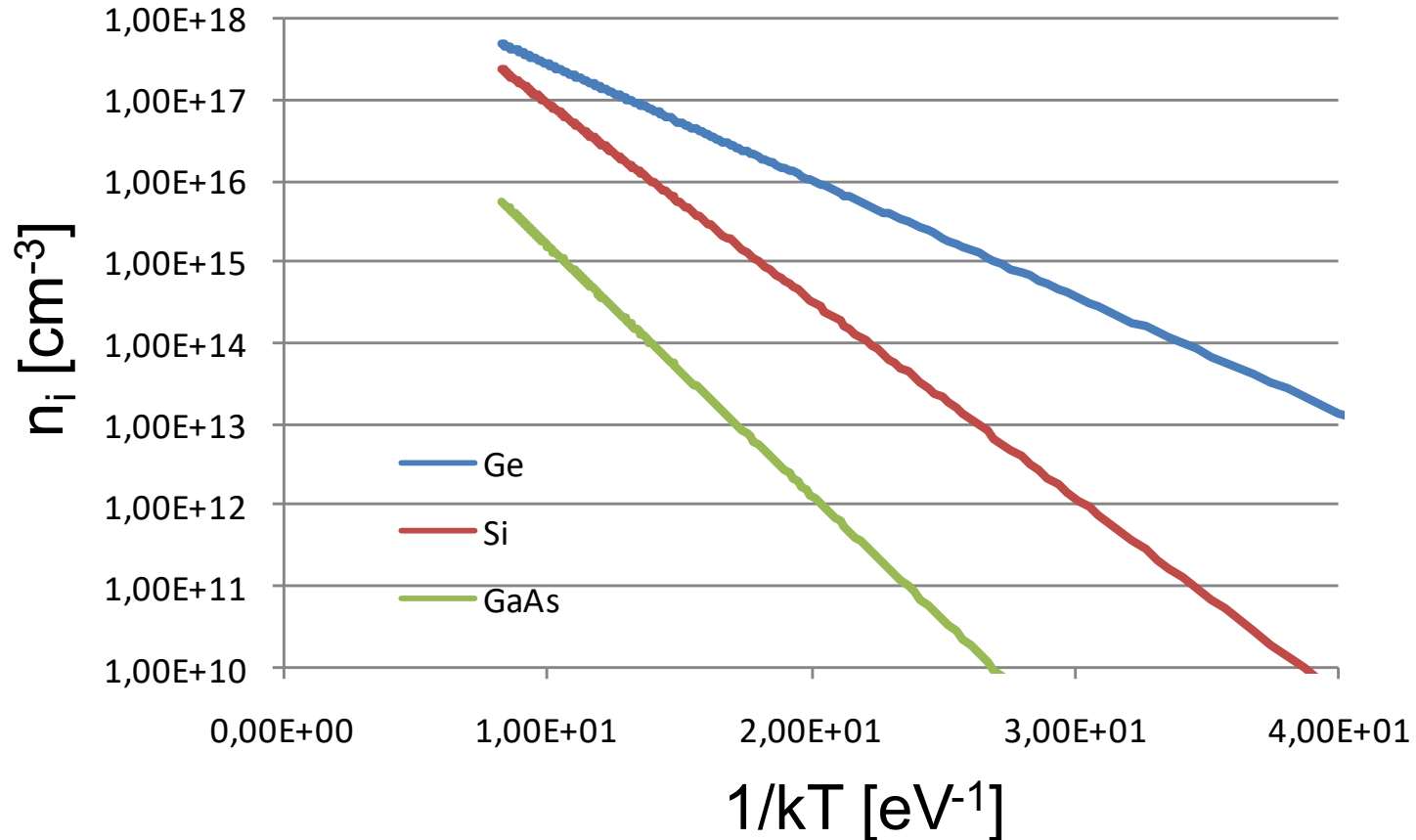
	N_C [cm ⁻³]	N_V [cm ⁻³]	E_G [eV]	n_i [cm ⁻³]
Ge	1,03E+19	5,35E+18	0,66	2,15E+13
Si	3,22E+19	1,83E+19	1,12	9,68E+09
GaAs	4,21E+17	9,52E+18	1,42	2,42E+06

Dipendenza dalla temperatura



- Maggiore è T , maggiori sono le code di f ed $1-f$ sui margini delle bande $\rightarrow$ maggiore n_i
- È il risultato di una maggiore generazione termica = promozione di elettroni da BV a BC

Grafico di Arrhenius



$$n_i = (N_c N_v)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E_G}{2kT}} \rightarrow \log n_i = \frac{1}{2} \log N_c N_v - \frac{E_G}{2kT}$$

Concentrazioni da n_i

- Le relazioni
$$n = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}$$
$$p = N_V e^{-\frac{E_V - E_F}{kT}}$$

Sono ricavate per un generico semiconduttore intrinseco o estrinseco. Note le espressioni:

$$n_i = N_C e^{-\frac{E_C - E_i}{kT}}$$

$$n_i = N_V e^{-\frac{E_V - E_i}{kT}}$$

Posso ricavare n e p in funzione di n_i :

$$n = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} = N_C e^{-\frac{E_C - E_i}{kT}} e^{-\frac{E_i - E_F}{kT}} = n_i e^{-\frac{E_i - E_F}{kT}}$$

$$p = N_V e^{-\frac{E_V - E_F}{kT}} = N_V e^{-\frac{E_V - E_i}{kT}} e^{-\frac{E_i - E_F}{kT}} = n_i e^{-\frac{E_i - E_F}{kT}}$$

Legge di azione di massa

- Le relazioni

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}}$$
$$p = N_v e^{-\frac{E_v - E_F}{kT}}$$

Sono ricavate per un generico semiconduttore intrinseco o estrinseco. Il prodotto np è dato da:

$$np = N_c N_v e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} e^{-\frac{E_v - E_F}{kT}} = N_c N_v e^{-\frac{E_c - E_v}{kT}} = n_i^2$$

ed è indipendente da $E_F \rightarrow$ validità generale per semiconduttori. Definisce la *legge di azione di massa* che permette di ricavare agevolmente una concentrazione di portatore nota l'altra (e.g. $p = n_i^2/n$)

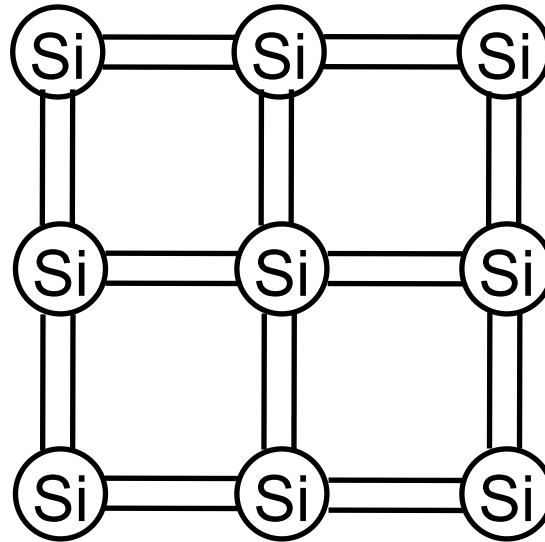
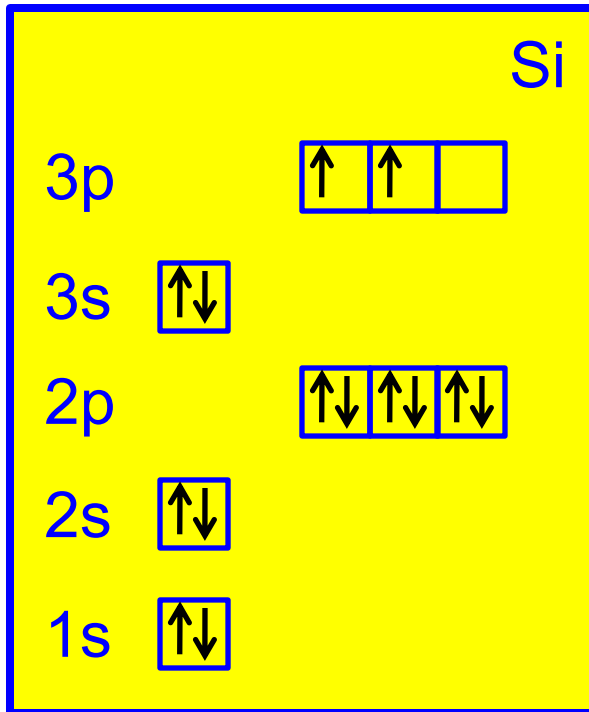
Interpretazione

- La legge di azione di massa è nota in chimica: in ogni reazione $A + B \rightarrow C + D$, le concentrazioni di reagenti/prodotti all'equilibrio sono disciplinate da una costante di equilibrio, ad esempio:
 $[A][B][C]^{-1}[D]^{-1} = \text{costante}$
- Nel nostro caso abbiamo $e^- + h^+ \rightarrow 0$, quindi $np = \text{costante} = n_i^2$

Semiconduttori estrinseci

- Estrinseco = impuro, drogato
- Introduzione di impurezze: popola la banda di conduzione o di valenza a seconda del tipo di drogante, donore o accettore
- Il livello di Fermi si sposta dal livello intrinseco per assecondare lo sbilanciamento delle concentrazioni

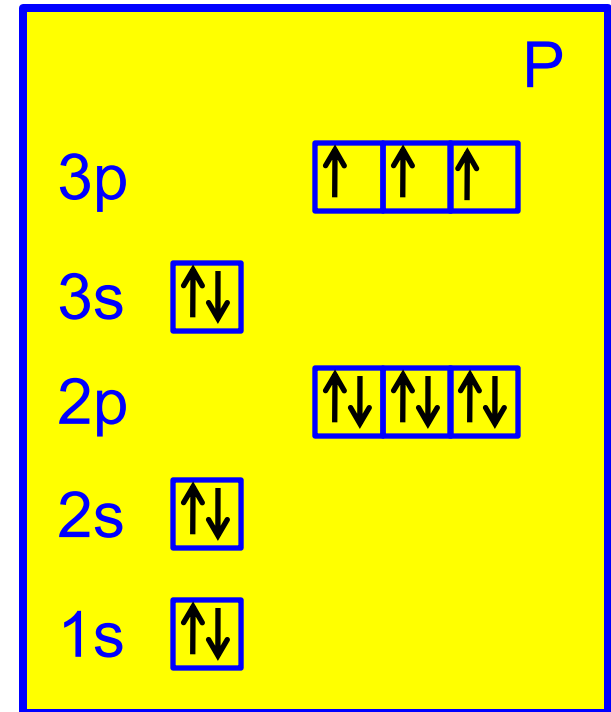
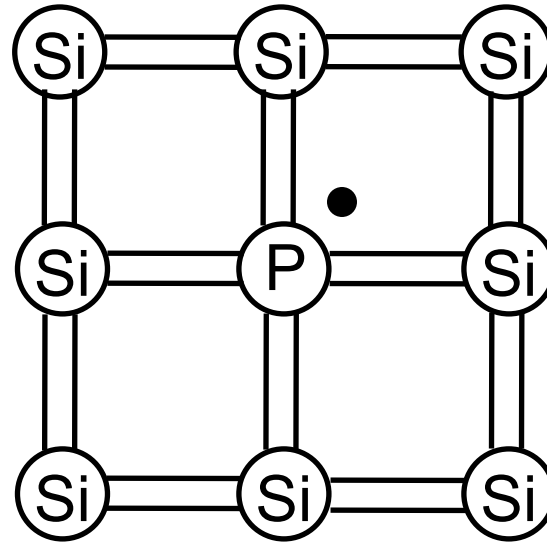
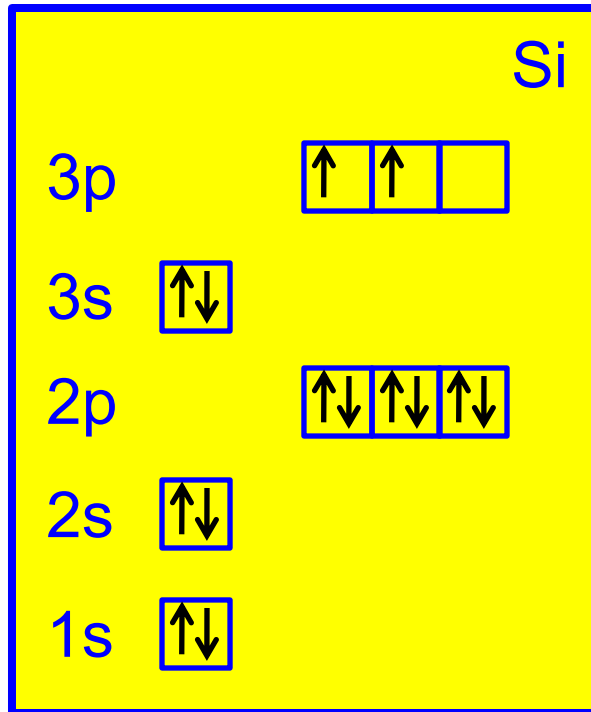
Esempio: Si intrinseco



⊙Si = atomo di silicio

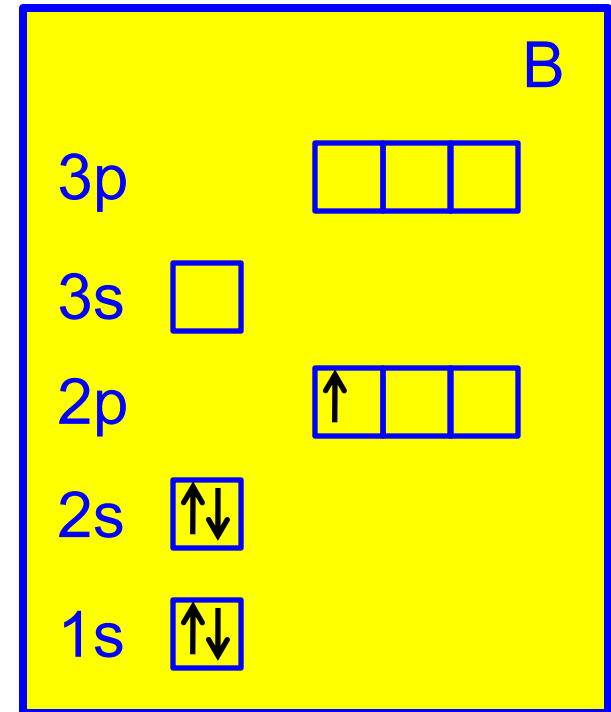
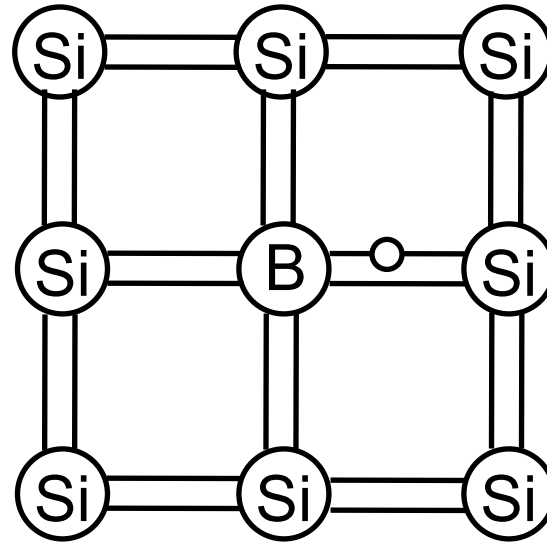
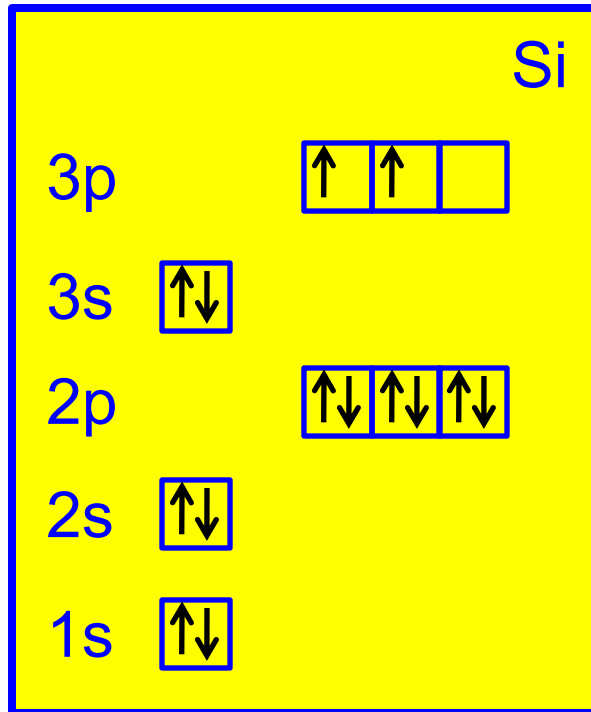
— = legame Si-Si ad opera di un elettrone di valenza

Si drogato n



- Di 5 elettroni di valenza del P, 4 vengono spesi per formare i 4 legami della coordinazione tetraedrica, mentre il quinto viene lasciato libero di vagare nel cristallo → P è drogante donore

Si drogato p



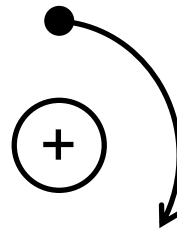
- Il B dispone di soli 3 elettroni di valenza: rimane 1 stato di valenza (legame) non riempito da elettrone = lacuna, libera di vagare nel cristallo muovendosi in BV $\rightarrow$ B è drogante accettore

Neutralità

- Con l'aggiunta di donori, la concentrazione di elettroni in banda di conduzione aumenta, mentre quella di lacune diminuisce a causa della ricombinazione (vale $np=n_i^2$)
- Il semiconduttore drogato è neutro, e.g. nel caso di donori l'elettrone in eccesso si bilancia con la carica fissa positiva del donore ionizzato ($n=N_D^+$)
- Idem per l'accettore: la carica della lacuna aggiunta si bilancia con la carica fissa negativa dell'accettore ionizzato ($p=N_A^-$)
- L'elettrone non rimane legato al donore: l'energia di legame è talmente esigua che a temperatura ambiente quasi tutti i donori sono ionizzati

Interazione elettrone – donore

- L'elettrone interagisce con lo ione positivo del donore come un elettrone con il protone in un atomo d'idrogeno
- Modello: equilibrio di forze su un'orbita circolare



- Principio di indeterminazione $\begin{cases} \frac{mv^2}{R} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{q^2}{R^2} \\ pR = mvR = \hbar \end{cases}$
- Dal sistema si ottiene $R = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{mq^2} = a_0 \frac{\epsilon_r}{m_c^* / m_0}$ con $a_0 = \text{raggio di Bohr} = 0.53 \text{ \AA}$
- Adottando $m = m_c^* = 0.26m_0$ (massa efficace di conduzione nel Si) e $\epsilon_r = 11.7$ (costante dielettrica relativa in Si) si ottiene $R = 2.4 \text{ nm}$

Energia di legame

- L'energia di legame si ottiene da:

$$\begin{cases} E = K + U = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{q^2}{R} = -\frac{1}{8\pi\epsilon} \frac{q^2}{R} \\ R = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{mq^2} \end{cases}$$

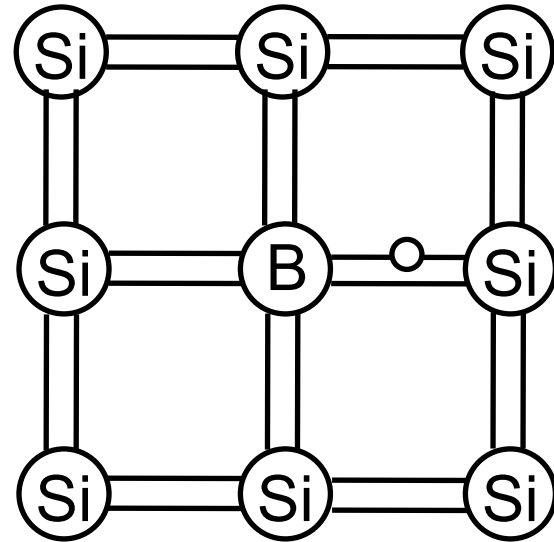
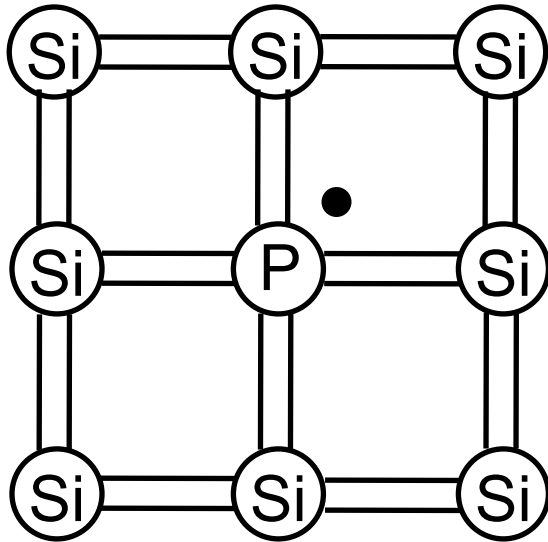
- Da cui:

$$E = -\frac{mq^4}{2(4\pi\epsilon\hbar)^2} = \frac{m_c^* / m_0}{\epsilon_r^2} Ry$$

- Dove $Ry = -13.6 \text{ eV}$ = energia di legame dell'elettrone nell'atomo d'idrogeno $\rightarrow E = 25.8 \text{ meV}$ per il silicio
- Per confronto, i valori misurati in eV per donori ($E_C - E_D$) e accettori ($E_A - E_V$) in Si sono:

Li	Sb	P	As	B	Al	Ga	In
0,033	0,039	0,045	0,054	0,045	0,067	0,072	0,16

Ionizzazione del drogante

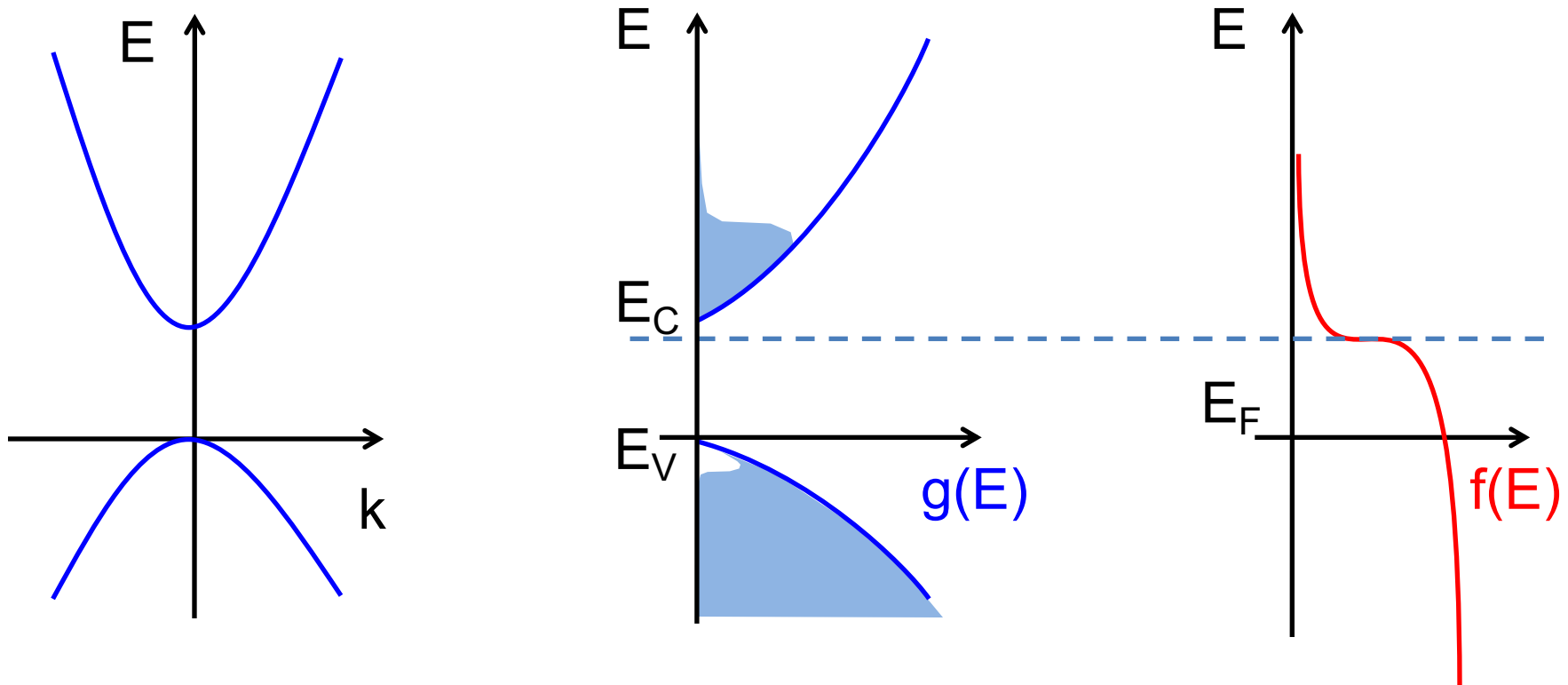


- A temperatura ambiente il drogante è in massima parte ionizzato
- Più avanti calcoleremo la frazione non ionizzata di drogante

Concentrazione portatori

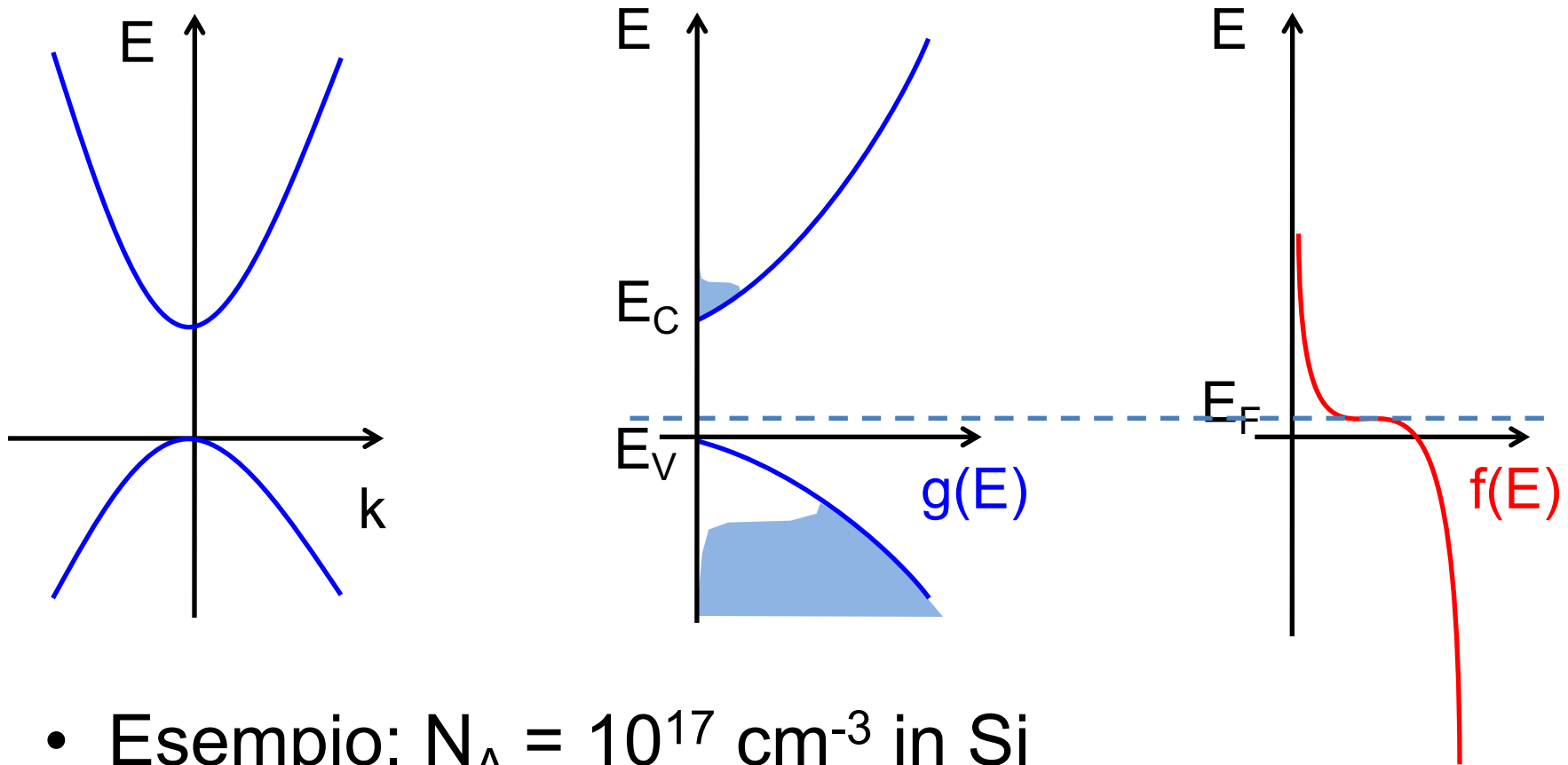
- Semiconduttore drogato n:
 - $n=N_D$ (drogante quasi interamente ionizzato)
 - $p=n_i^2/n=n_i^2/N_D \ll n$
 - Livello di Fermi
$$\begin{aligned} n &= n_i e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} \rightarrow E_F = E_i + kT \log \frac{n}{n_i} \\ p &= n_i e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} \rightarrow E_F = E_i + kT \log \frac{n_i}{p} \end{aligned}$$
- Semiconduttore drogato p:
 - $p=N_A$
 - $n=n_i^2/p=n_i^2/N_A \ll p$
 - E_F è calcolato come sopra
- Per la validità dell'approssimazione MB è necessario che $E_V + 3kT < E_F < E_C - 3kT$ (semiconduttori non degeneri)

Semiconduttore drogato n



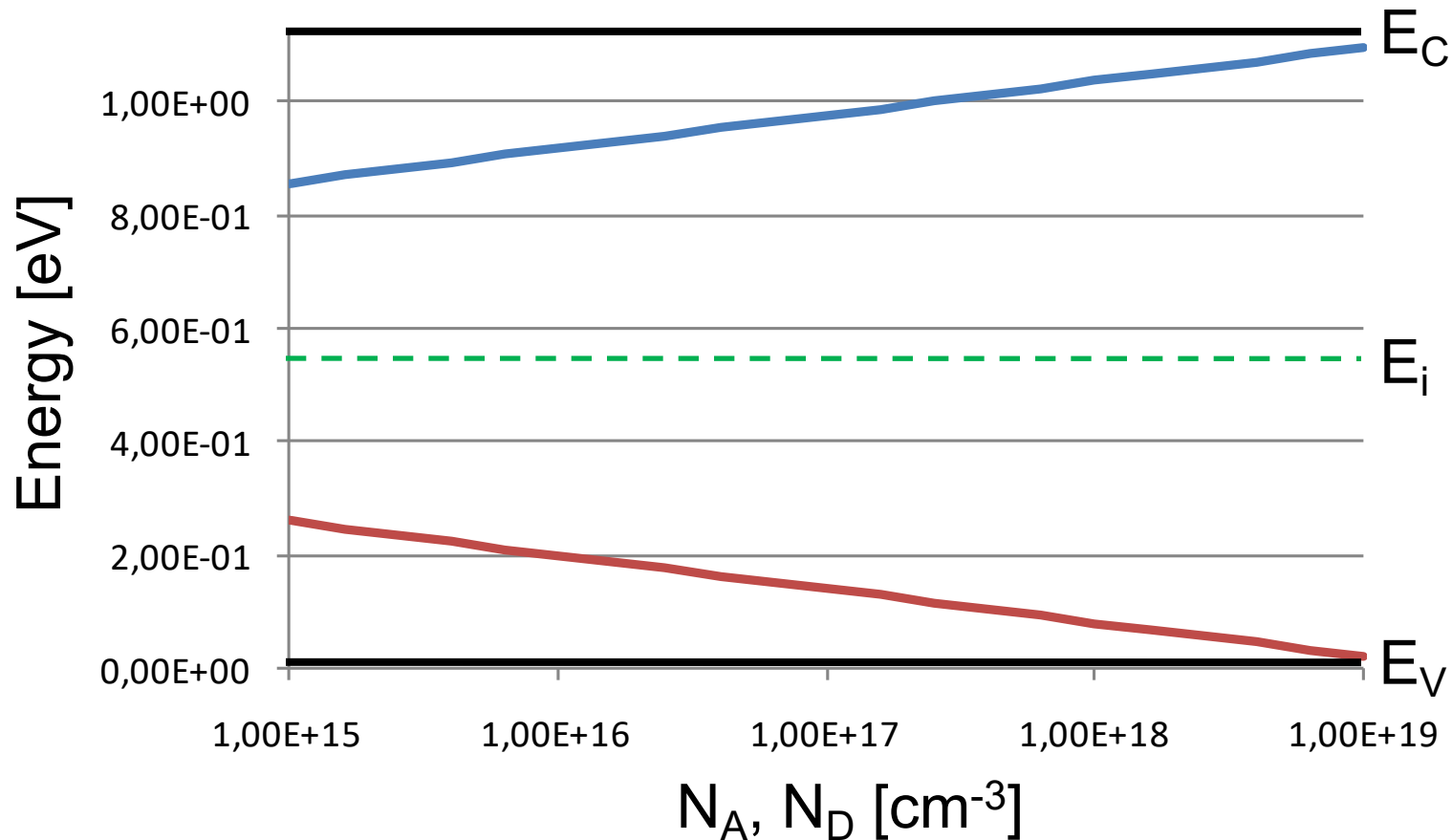
- Esempio: $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ in Si
- $p = n_i^2/N_D \approx 10^2 \text{ cm}^{-3}$
- $E_F = E_i + kT \log N_D/n_i = E_i + 0.48 \text{ eV} \approx 1.04 \text{ eV}$

Semiconduttore drogato p



- Esempio: $N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ in Si
- $n = n_i^2/N_A \approx 10^3 \text{ cm}^{-3}$
- $E_F = E_i - kT \log N_A/n_i = E_i - 0.42 \text{ eV} \approx 0.14 \text{ eV}$

Andamento di E_F

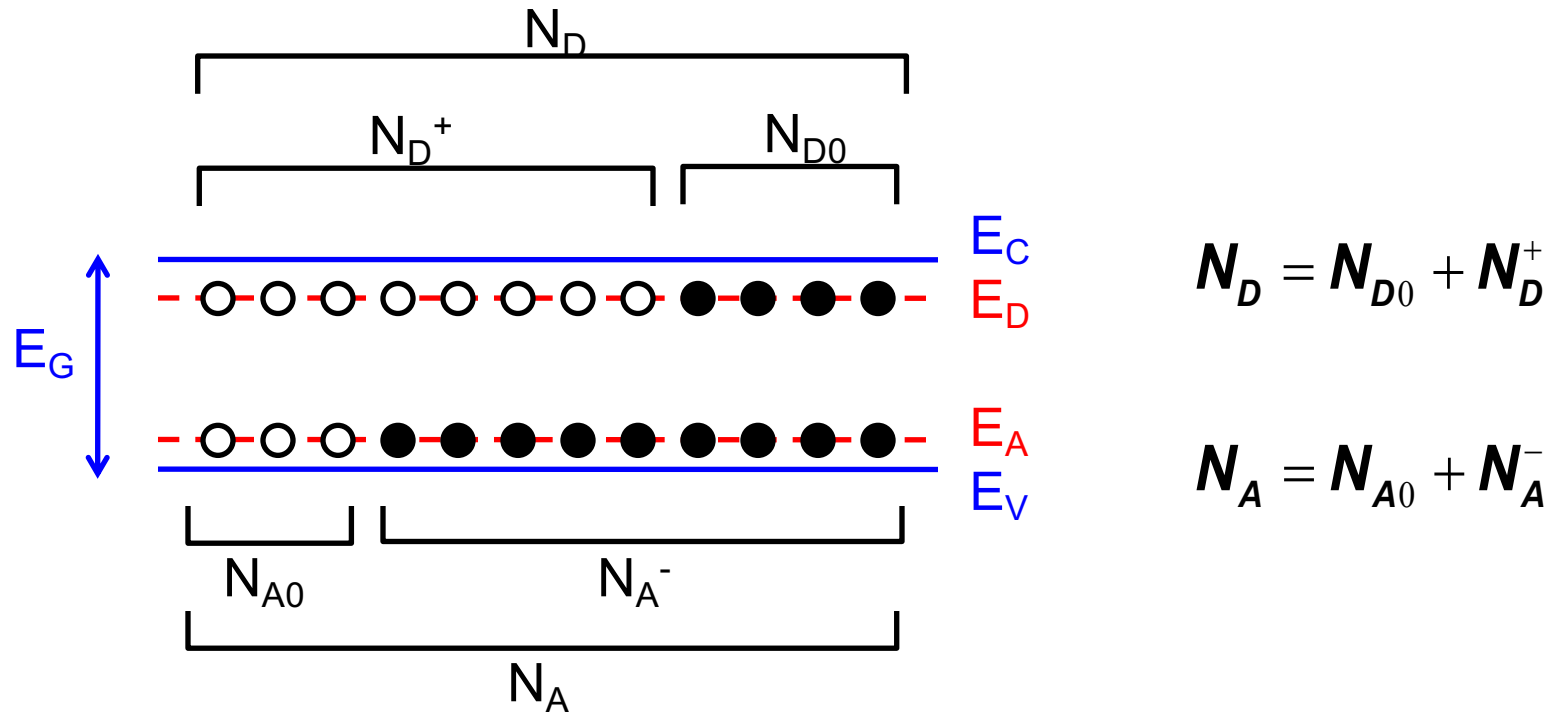


- Nota: non è sempre verificato $E_C > E_F + 3kT$ e $E_V < E_F - 3kT$, necessarie per applicare l'approssimazione di Maxwell-Boltzmann

Ionizzazione del drogante

- Le energie di legame dell'elettrone al donore e della lacuna all'accettore sono dell'ordine di 20-70 meV $\rightarrow$ quasi totale ionizzazione a temperatura ambiente
- Più precisamente come si calcola la probabilità di ionizzazione, e.g. alle basse temperature?
- Necessario confrontare la probabilità di occupazione dello stato donore/accettore rispetto a quella (f_{FD}) in banda di conduzione/valenza

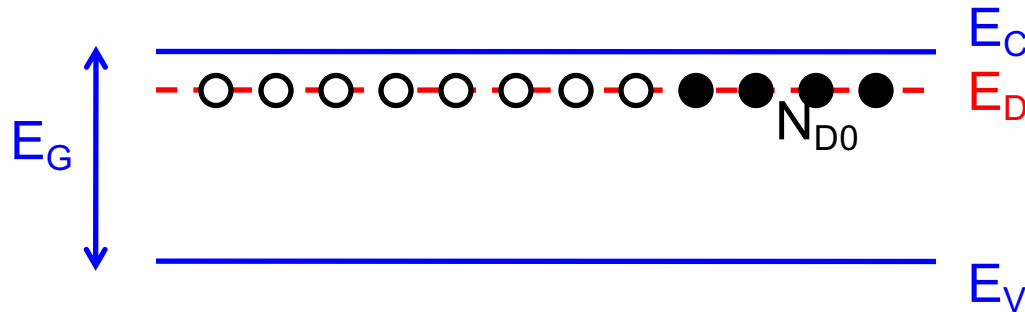
Stati donori e accettori



- N_D = concentrazione di atomi donori
- N_{D0} = c. a. d. neutri = elettroni in stato donore
- N_D^+ = c. a. d. ionizzati
- N_A = concentrazione di atomi accettori
- N_{A0} = c. a. a. neutri = lacune in stato accettore
- N_A^- = c. a. a. ionizzati

Configurazioni di elettroni in donori

- In quanti modi si possono allocare N_{D0} elettroni in N_D stati?



- Il primo in N_D modi, il secondo in $N_D - 1$, ... l'ultimo in $N_D - N_{D0} + 1$
- Posso mettere ogni elettrone con spin $\uparrow$ o $\downarrow$ (ma una volta messo, lo stato a spin opposto non conta più per repulsione coulombiana!)
- Indistinguibilità degli elettroni

$$\frac{N_D!}{(N_D - N_{D0})!}$$

$$\frac{2^{N_{D0}} N_D!}{(N_D - N_{D0})!}$$

$$W_D = \frac{2^{N_{D0}} N_D!}{N_{D0}! (N_D - N_{D0})!}$$

Massimo W_D

- W_D è da moltiplicare per W già ottenuto per gli stati in banda nella lezione 11. Calcolo il logaritmo di W_D (formula di Stirling):

$$\log W_D \approx N_{D0} \log 2 + N_D \log N_D - N_{D0} \log N_{D0} - (N_D - N_{D0}) \log (N_D - N_{D0})$$

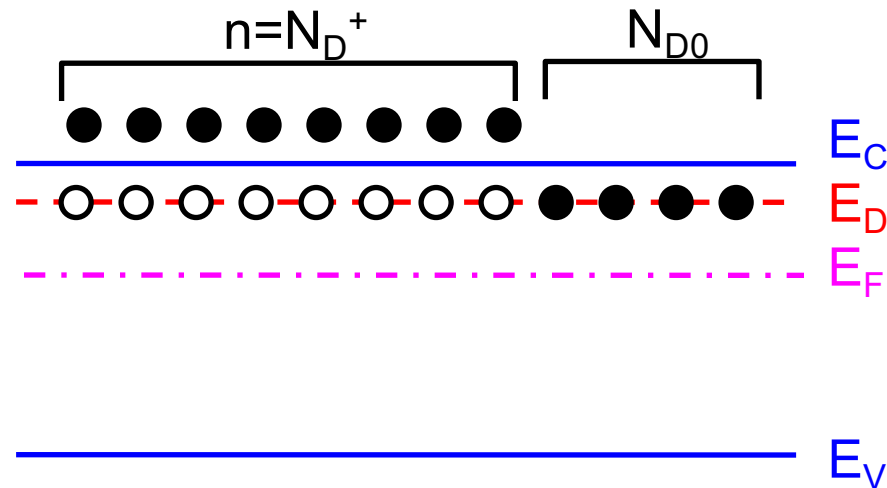
- Lo massimizzo con la tecnica dei moltiplicatori di Lagrange:

$$\left(\frac{\partial}{\partial N_{D0}} \log W_D - a - bE_D \right) \delta N_{D0} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial N_{D0}} \log W_D = \log 2 - \log N_{D0} + \log (N_D - N_{D0}) = a + bE_D$$

$$2 \frac{N_D - N_{D0}}{N_{D0}} = e^{a+bE_D} \rightarrow \frac{N_{D0}}{N_D} = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_D - E_F}{kT}} + 1}$$

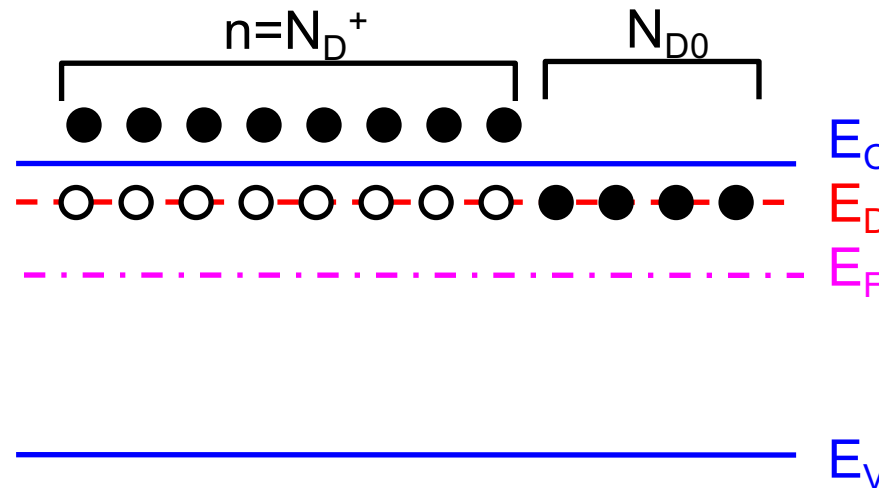
Appr. Maxwell-Boltzmann



- N_D elettroni si distribuiscono tra stati donori (N_{D0}) e banda di conduzione (n)
- Assumiamo che $E_D \gg E_F + 3kT$ (come anche E_C), allora vale (approssimazione MB):

$$N_{D0} = \frac{N_D}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_D - E_F}{kT}} + 1} \approx 2N_D e^{-\frac{E_D - E_F}{kT}}$$

Probabilità di non-ionizzazione



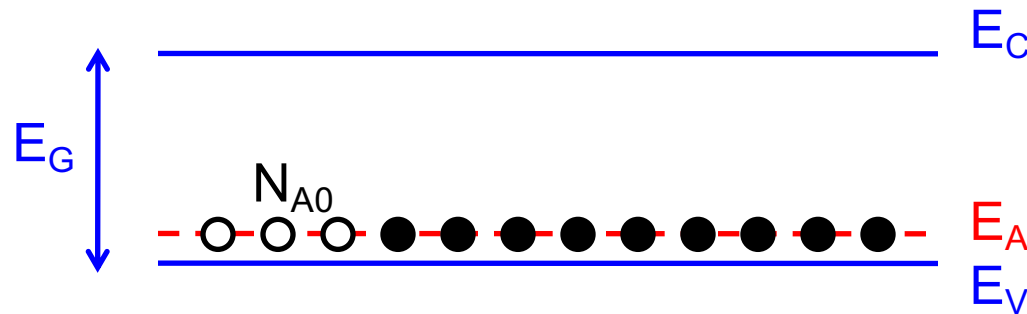
- Frazione di elettroni in stati donori:

$$\frac{N_{D0}}{N_{D0} + n} \approx \frac{2N_D e^{-\frac{E_D - E_F}{kT}}}{2N_D e^{-\frac{E_D - E_F}{kT}} + N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}} = \frac{1}{1 + \frac{N_C}{2N_D} e^{-\frac{E_C - E_D}{kT}}} =$$

- Drogaggi non degeneri $N_D \ll N_C$: $f_D \approx \frac{2N_D}{N_C} e^{-\frac{E_C - E_D}{kT}}$
- Esempio: $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $N_C = 3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,
 $E_C - E_D = 50 \text{ meV} \rightarrow f_D = 4.6 \times 10^{-2} \rightarrow n \approx N_D$

Configurazioni di lacune in accettori

- In quanti modi si possono allocare N_{A0} lacune in N_A stati?



- Il primo in N_A modi, il secondo in $N_A - 1$, ... l'ultimo in $N_A - N_{A0} + 1$ $\frac{N_A!}{(N_A - N_{A0})!}$
- Posso mettere ogni lacuna (i.e. togliere un elettrone) con spin $\uparrow$ o $\downarrow$
- In realtà gli stati da considerare sono 4 e non 2, perché ho due diverse masse della lacuna m_{lh}^* e m_{hh}^* e ciò dà luogo a due diversi livelli legati $\frac{4^{N_{A0}} N_A!}{(N_A - N_{A0})!}$

Configurazioni di lacune in accettori

- Indistinguibilità delle lacune $W_A = \frac{4^{N_{A0}} N_A!}{N_{A0}! (N_A - N_{A0})!}$
- Esprimo W_A in termini di N_A , N_A^- , ($N_{A0} = N_A - N_A^-$) per poter includere W_A nel numero di configurazioni elettroniche W (vedi lezione 11)

$$W_A = \frac{4^{N_A - N_A^-} N_A!}{(N_A - N_A^-)! N_A^-!}$$

Massimo W_A

- Calcolo il logaritmo di W_A (formula di Stirling):

$$\log W_A \approx (N_A - N_A^-) \log 4 + N_A \log N_A - N_A^- \log N_A^- - (N_A - N_A^-) \log (N_A - N_A^-)$$

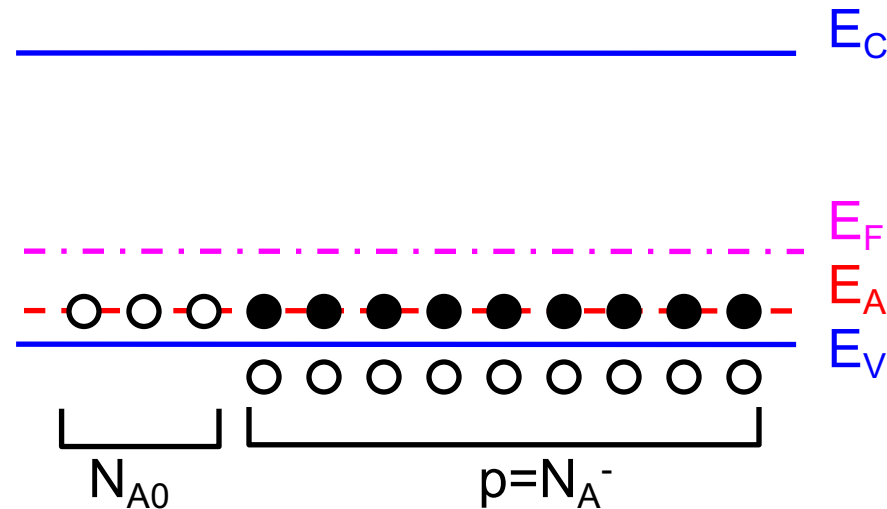
- Lo massimizzo con la tecnica dei moltiplicatori di Lagrange:

$$\left(\frac{\partial}{\partial N_A^-} \log W_A - a - bE_A \right) \delta N_A^- = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial N_A^-} \log W_A = -\log 4 - \log N_A^- + \log (N_A - N_A^-) = a + bE_A$$

$$\frac{N_A - N_A^-}{4N_A^-} = e^{a+bE_A} \rightarrow \frac{N_A^-}{N_A} = \frac{1}{4e^{\frac{E_A - E_F}{kT}} + 1}$$

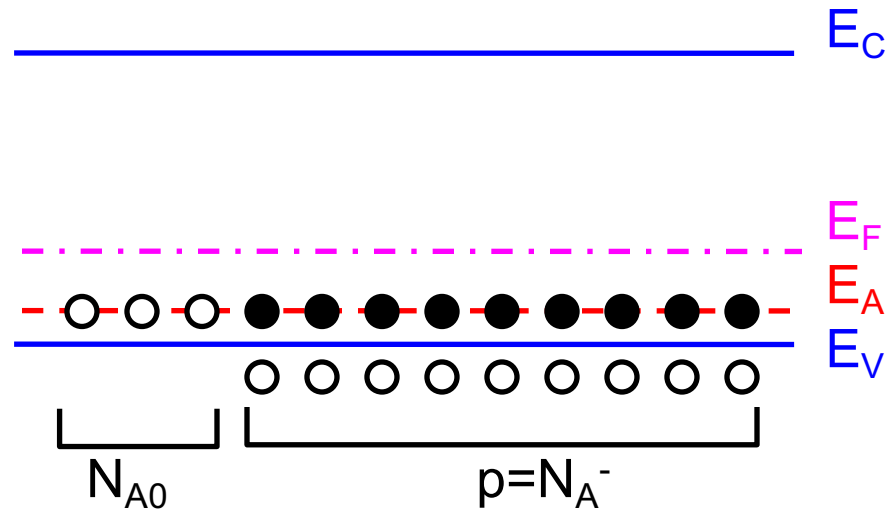
Appr. Maxwell-Boltzmann



- N_A lacune si distribuiscono tra stati accettori (N_{A0}) e banda di valenza (p)
- Assumiamo che $E_A \ll E_F - 3kT$ (come anche E_V), allora vale (approssimazione MB):

$$N_{A0} = \frac{N_A}{4e^{\frac{E_A - E_F}{kT}} + 1} \rightarrow N_{A0} = N_A \frac{4e^{\frac{E_A - E_F}{kT}}}{4e^{\frac{E_A - E_F}{kT}} + 1} \approx 4N_A e^{\frac{E_A - E_F}{kT}}$$

Probabilità di non-ionizzazione



- Frazione di lacune in stati accettori:

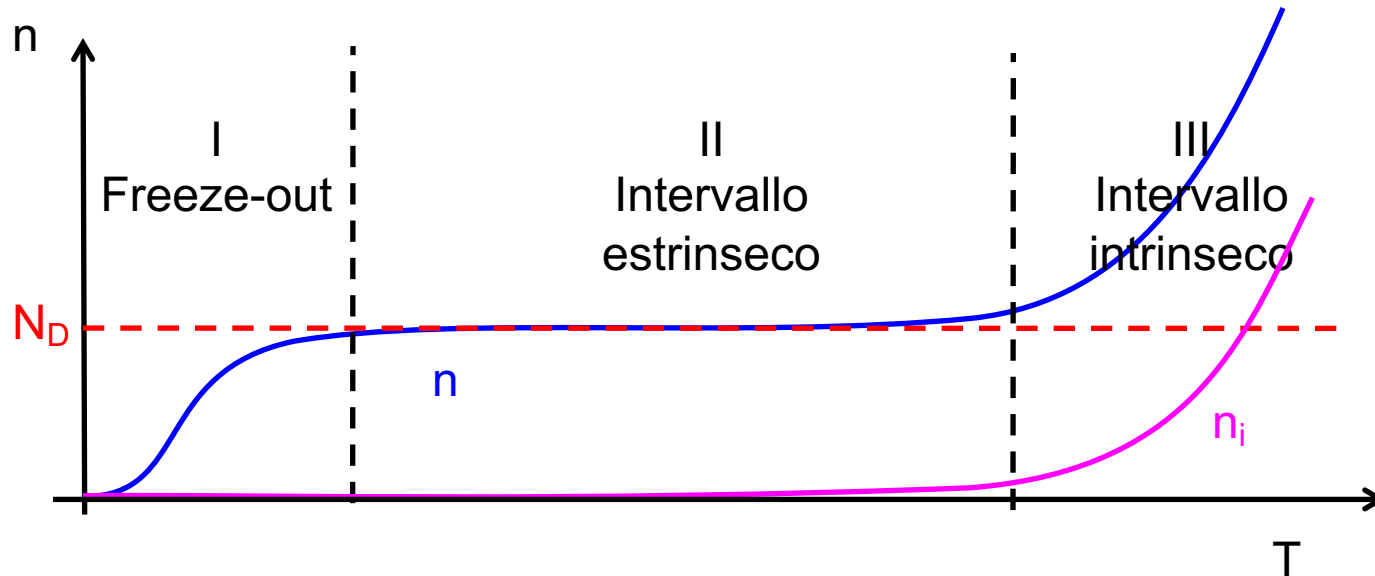
$$\frac{N_{A0}}{N_{A0} + p} \approx \frac{4N_A e^{\frac{E_A - E_F}{kT}}}{4N_A e^{\frac{E_A - E_F}{kT}} + N_V e^{\frac{E_V - E_F}{kT}}} = \frac{1}{1 + \frac{N_V}{4N_A} e^{\frac{E_V - E_A}{kT}}} =$$

- Drogaggi non degeneri $N_A \ll N_V$: $f_A \approx \frac{4N_A}{N_V} e^{-\frac{E_V - E_A}{kT}}$
- Verificare che anche in questo caso $p \approx N_A$

Dipendenza dalla temperatura

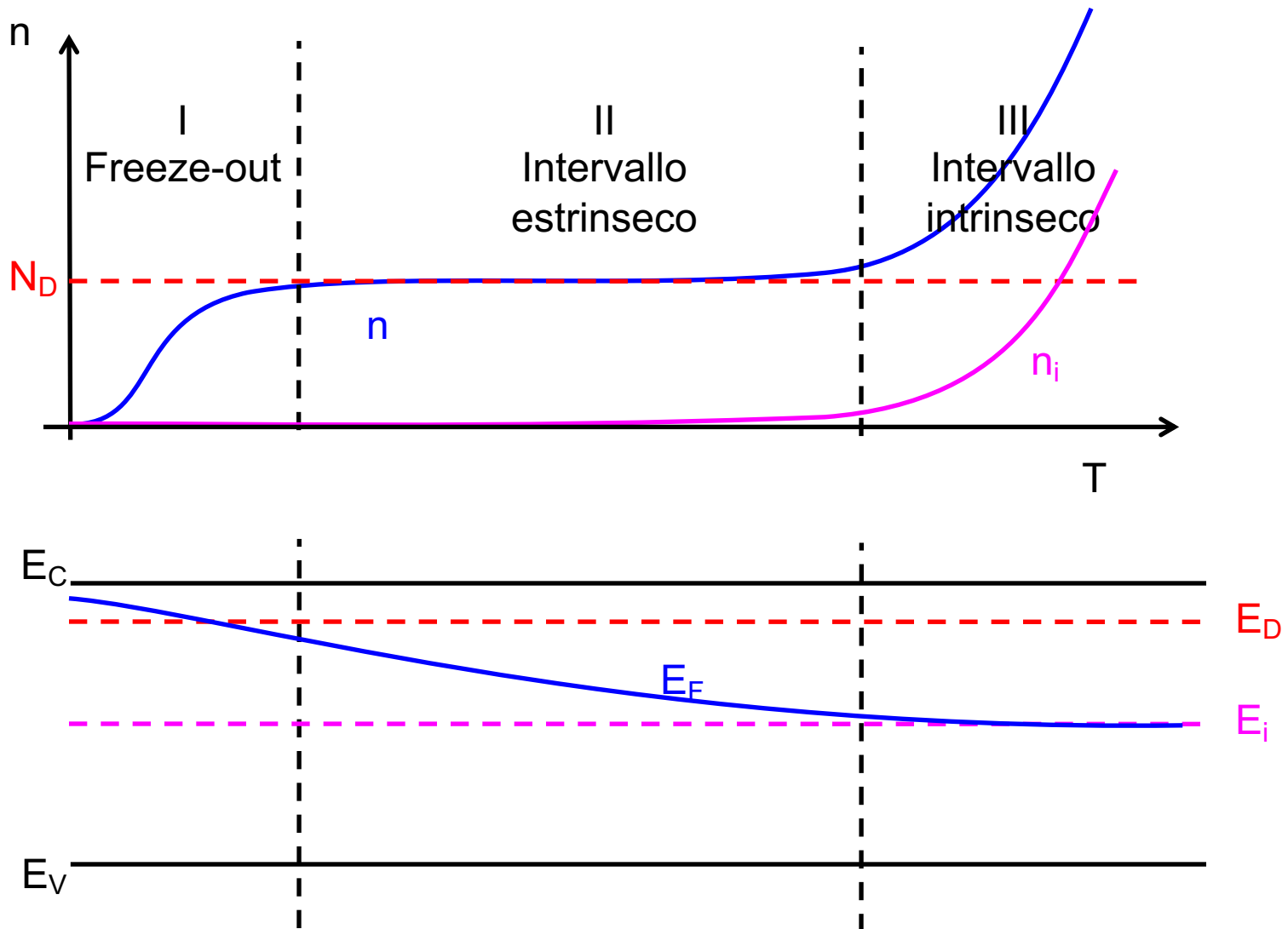
- Frazione non-ionizzata del donore: $f_D \approx \frac{2N_D}{N_C} e^{\frac{E_C - E_D}{kT}}$
- È data dal prodotto di un termine 'entropico' $2N_D/N_C \ll 1$ (descrive il numero di stati disponibili, quindi il disordine) e da uno 'energetico' $e^{\frac{E_C - E_D}{kT}} > 1$ (descrive l'energia per strappare l'elettrone dallo stato donore)
- All'aumentare della temperatura, il termine energetico pesa sempre meno $\rightarrow$ sempre maggiore ionizzazione
- Analogamente la probabilità di non ionizzazione dell'accettore $f_A \approx \frac{4N_A}{N_V} e^{-\frac{E_V - E_A}{kT}}$

Freeze-out e generazione termica

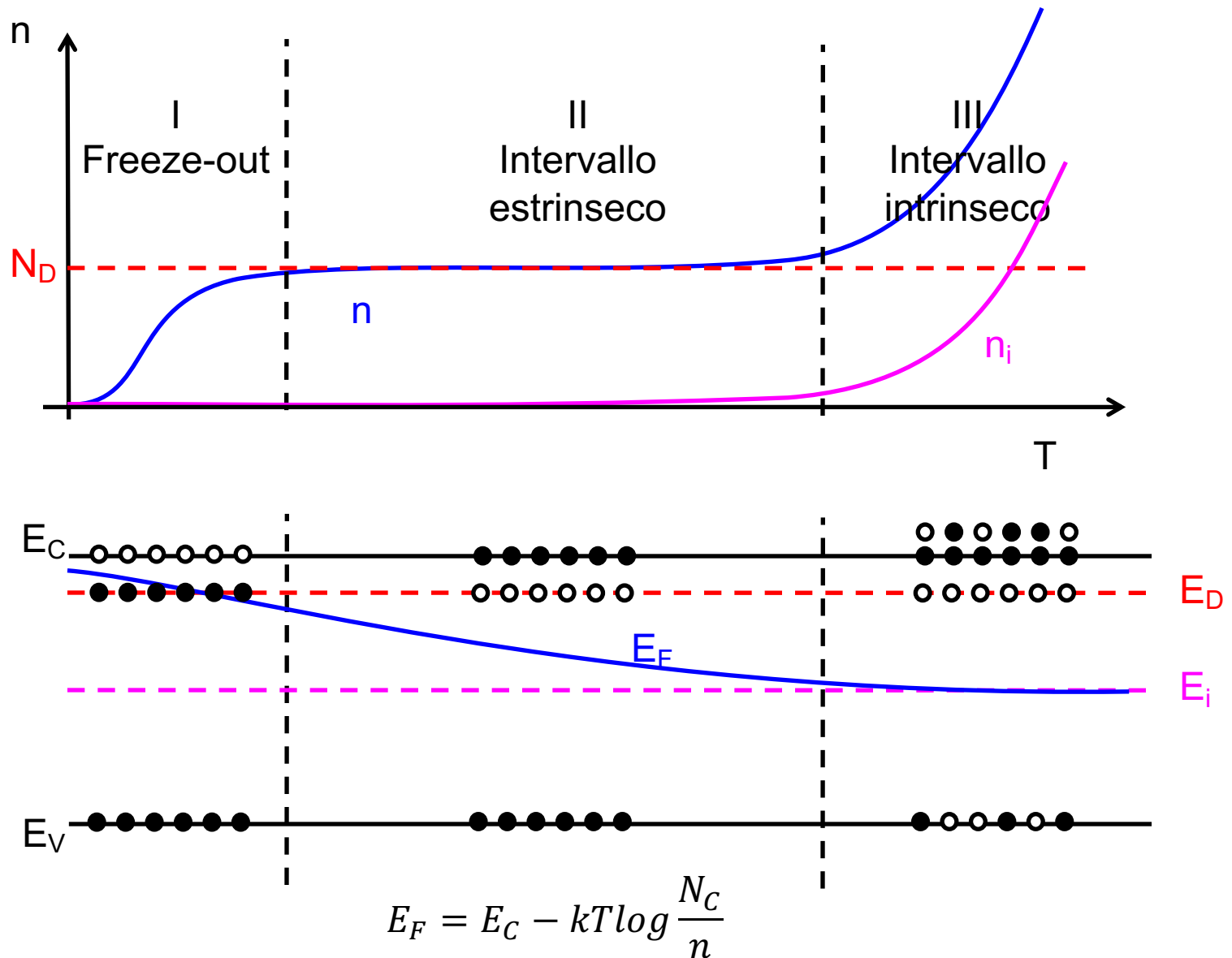


- I. Temperatura insufficiente alla ionizzazione, $n \ll N_D$
- II. Temperatura sufficiente alla quasi completa ionizzazione, $n \approx N_D \gg n_i(T)$
- III. Temperatura sufficiente alla generazione dalla banda di valenza $n = n_i \gg N_D$

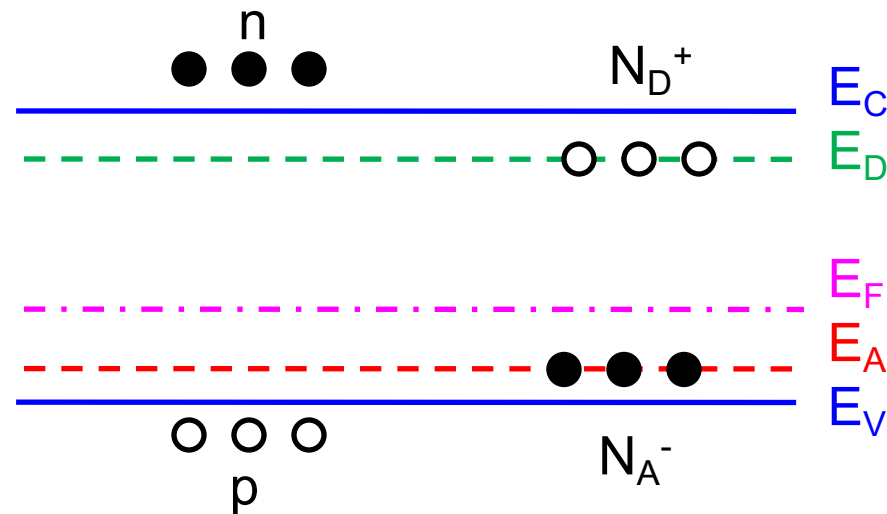
Dipendenza di E_F dalla temperatura



Popolamento degli stati

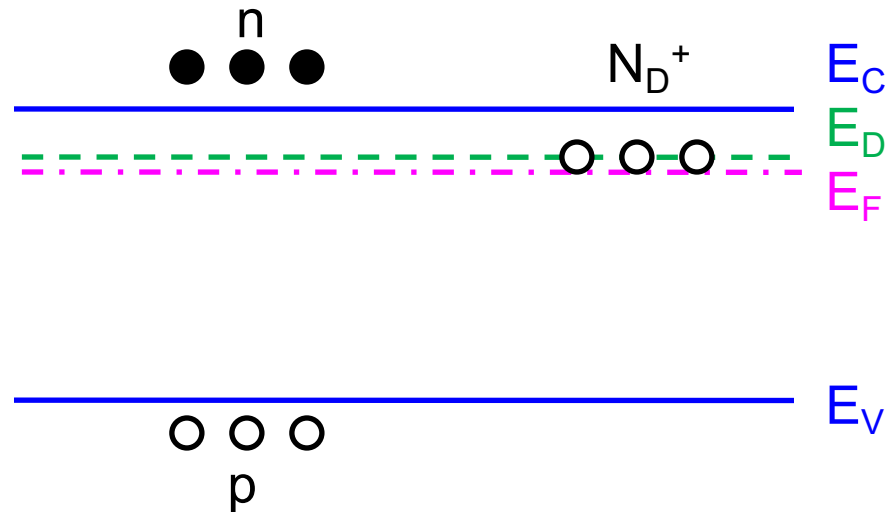


Densità di carica



- La carica locale è data dal bilancio dei portatori in banda e delle cariche spaziali:
- $\rho = q(p - n + N_D^+ - N_A^-)$
- Utile ad esempio per il calcolo della carica nella regione svuotata del diodo o nel canale del MOSFET
- Neutralità: $p - n + N_D^+ - N_A^- = 0$

Semiconduttore n, regione I e II



- $N_D \gg N_A \rightarrow$ trascuro N_A^- e p ai fini della carica
- Temperatura non troppo alta $\rightarrow n_i \ll N_D$
- Banda: $n \approx N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}$
- Donore ionizzato: $N_D^+ \approx N_D - \frac{N_D}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_D - E_F}{kT}} + 1} = \frac{N_D}{1 + 2e^{-\frac{E_D - E_F}{kT}}}$

Concentrazione in banda

- Per la neutralità si ha: $n = N_D^+ \rightarrow n = \frac{N_D}{1 + 2e^{\frac{E_D - E_F}{kT}}}$
- $n \approx N_c e^{\frac{E_c - E_F}{kT}} \rightarrow e^{\frac{E_F}{kT}} \approx \frac{n}{N_c} e^{\frac{E_c}{kT}}$
- Quindi: $n = \frac{N_D}{1 + 2 \frac{n}{N_c} e^{\frac{E_c - E_D}{kT}}} = \frac{N_D}{1 + \frac{n}{N'_c}}$ dove $N'_c = \frac{N_c}{2} e^{\frac{E_c - E_D}{kT}}$
- Allora: $n^2 + N'_c n - N'_c N_D = 0$

$$n = -\frac{N'_c}{2} + \sqrt{\left(\frac{N'_c}{2}\right)^2 + N'_c N_D} = \frac{N'_c}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4N_D}{N'_c}} - 1 \right)$$

- Essendo normalmente (regione II) $N'_c \gg N_D$, vale: $n \approx \frac{N'_c}{2} \left(1 + \frac{2N_D}{N'_c} - 1 \right) = N_D$

Livello di Fermi

- Il precedente risultato è più completo della probabilità di non ionizzazione f_D (il popolamento degli stati donori è trattato secondo Fermi, non approssimato secondo MB)
- Dalla concentrazione n si può ricavare E_F :

$$E_F = E_c + kT \log \frac{n}{N_c} = E_c + kT \log \left[\frac{N'_c}{2N_c} \left(\sqrt{1 + \frac{4N_D}{N'_c}} - 1 \right) \right]$$

- Analogamente per semiconduttore p si ricava la concentrazione di lacune:

- $$p = \frac{N'_v}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4N_A}{N'_v}} - 1 \right) \quad \text{con} \quad N'_v = \frac{N_v}{4} e^{\frac{E_v - E_A}{kT}}$$

Regione I

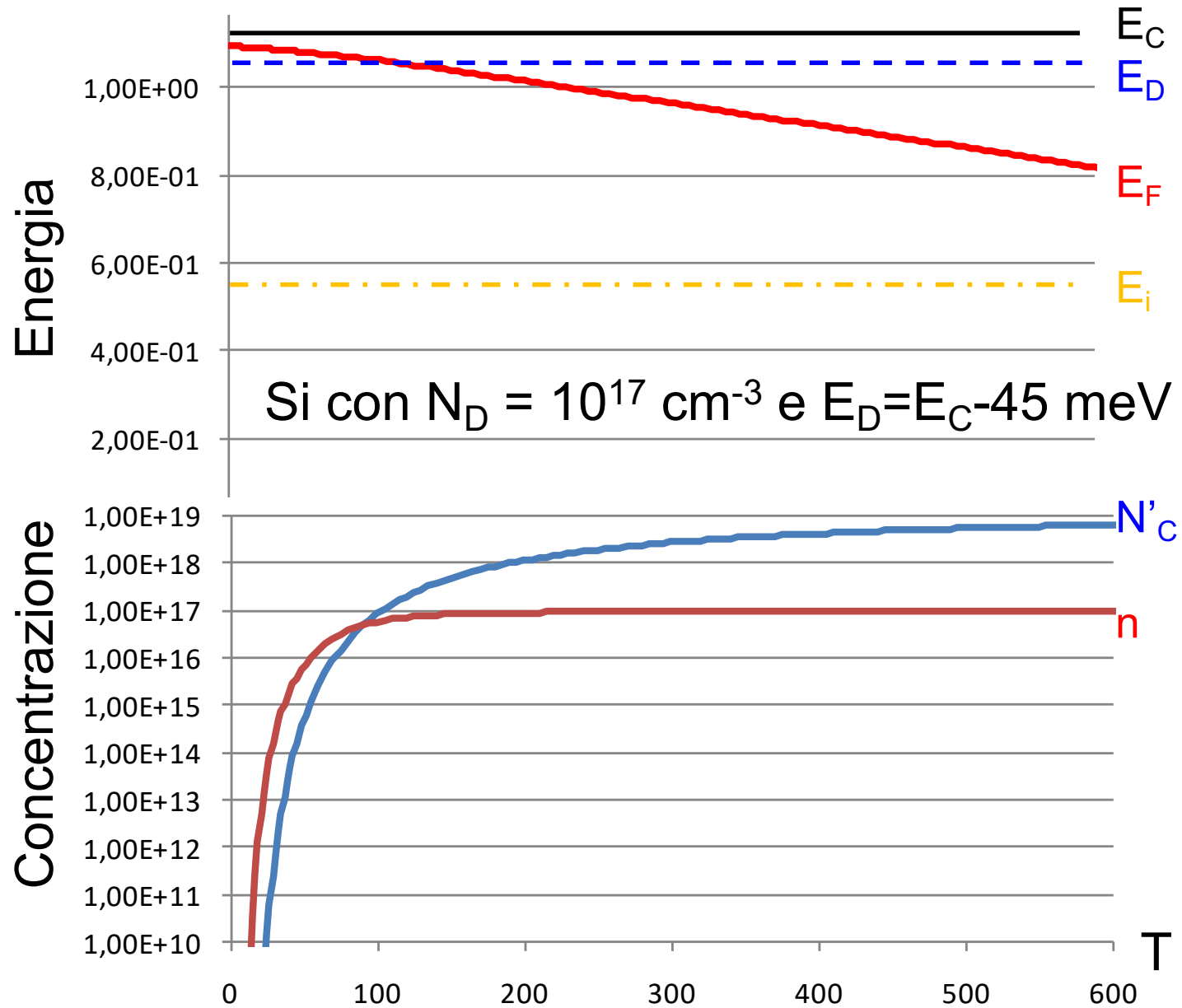
- Bassa $T \rightarrow N'_C \ll N_D$ $N'_C = \frac{N_C}{2} e^{-\frac{E_C - E_D}{kT}}$

- Quindi: $n = \frac{N'_C}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4N_D}{N'_C}} - 1 \right) \approx \sqrt{N'_C N_D} = \sqrt{\frac{N_C N_D}{2}} e^{-\frac{E_C - E_D}{2kT}}$
che tende a zero per $T \rightarrow 0$

- Livello di Fermi:

$$E_F = E_C + kT \log \frac{n}{N_C} \approx E_C + kT \log \sqrt{\frac{N_D}{2N_C}} e^{-\frac{E_C - E_D}{2kT}} = \frac{E_C + E_D}{2} + \frac{kT}{2} \log \frac{N_D}{2N_C}$$

Risultati



Semiconduttore n, intervallo II e III

- A temperature non troppo basse $N_A^- = N_A$, $N_D^+ = N_D$ (ionizzazione totale)
- Dalla neutralità si ottiene:

$$n - p + N_A^- - N_D^+ = n - \frac{n_i^2}{n} + N_A - N_D = 0$$

$$n^2 - (N_D - N_A)n - n_i^2 = 0$$

$$n = \frac{N_D - N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D - N_A}{2}\right)^2 + n_i^2}$$

$$p = \frac{n_i^2}{n} = \frac{N_A - N_D}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A - N_D}{2}\right)^2 + n_i^2}$$

Approssimazioni

- Semiconduttore n: $N_D \gg N_A$
- Estrinseco (II): $N_D \gg n_i$

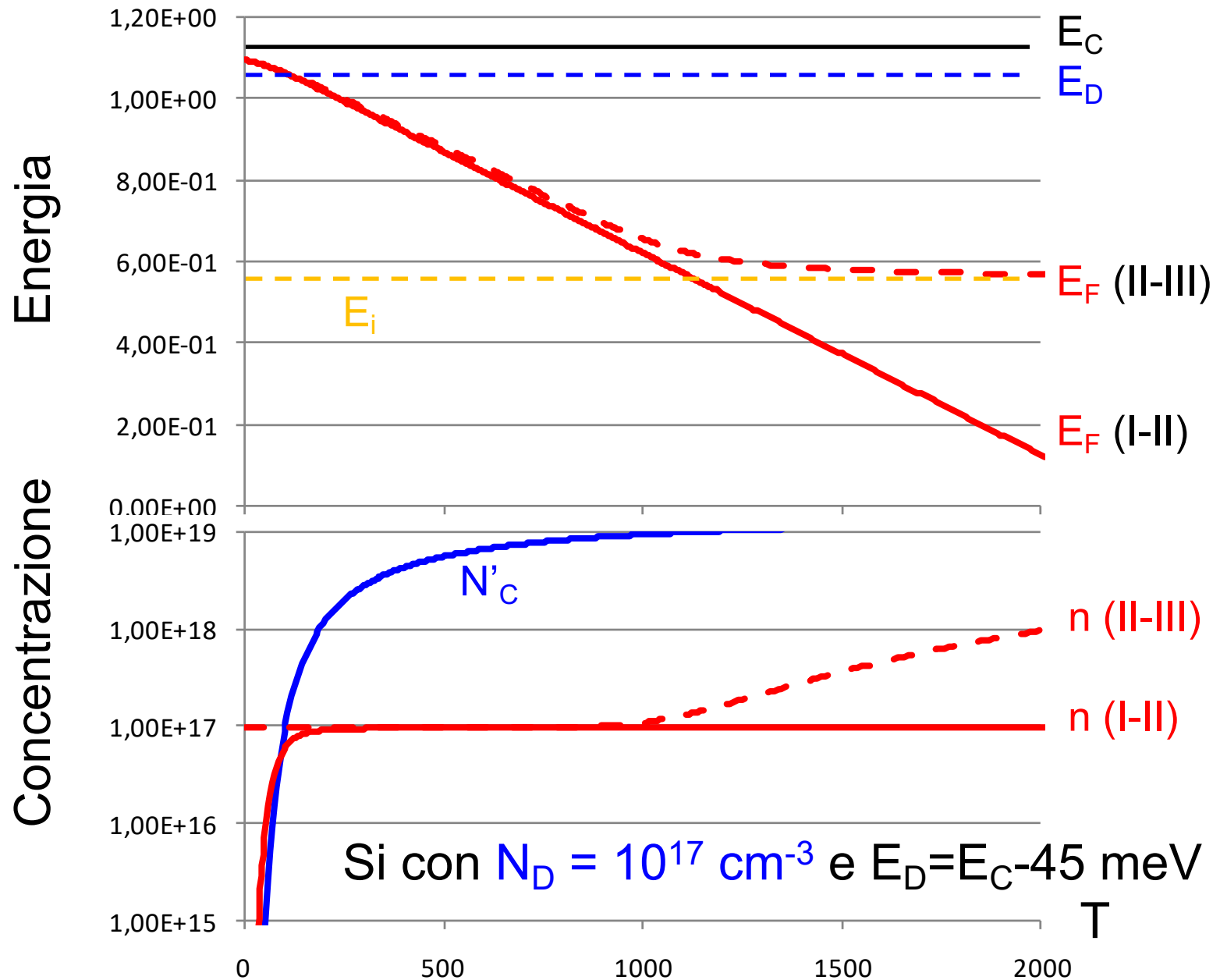
$$n = \frac{N_D}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D}{2}\right)^2 + n_i^2} \approx N_D$$

$$p = \frac{n_i^2}{n} = \frac{n_i^2}{N_D}$$
- Semiconduttore p: $N_A \gg N_D$
- Estrinseco (II) $N_A \gg n_i$

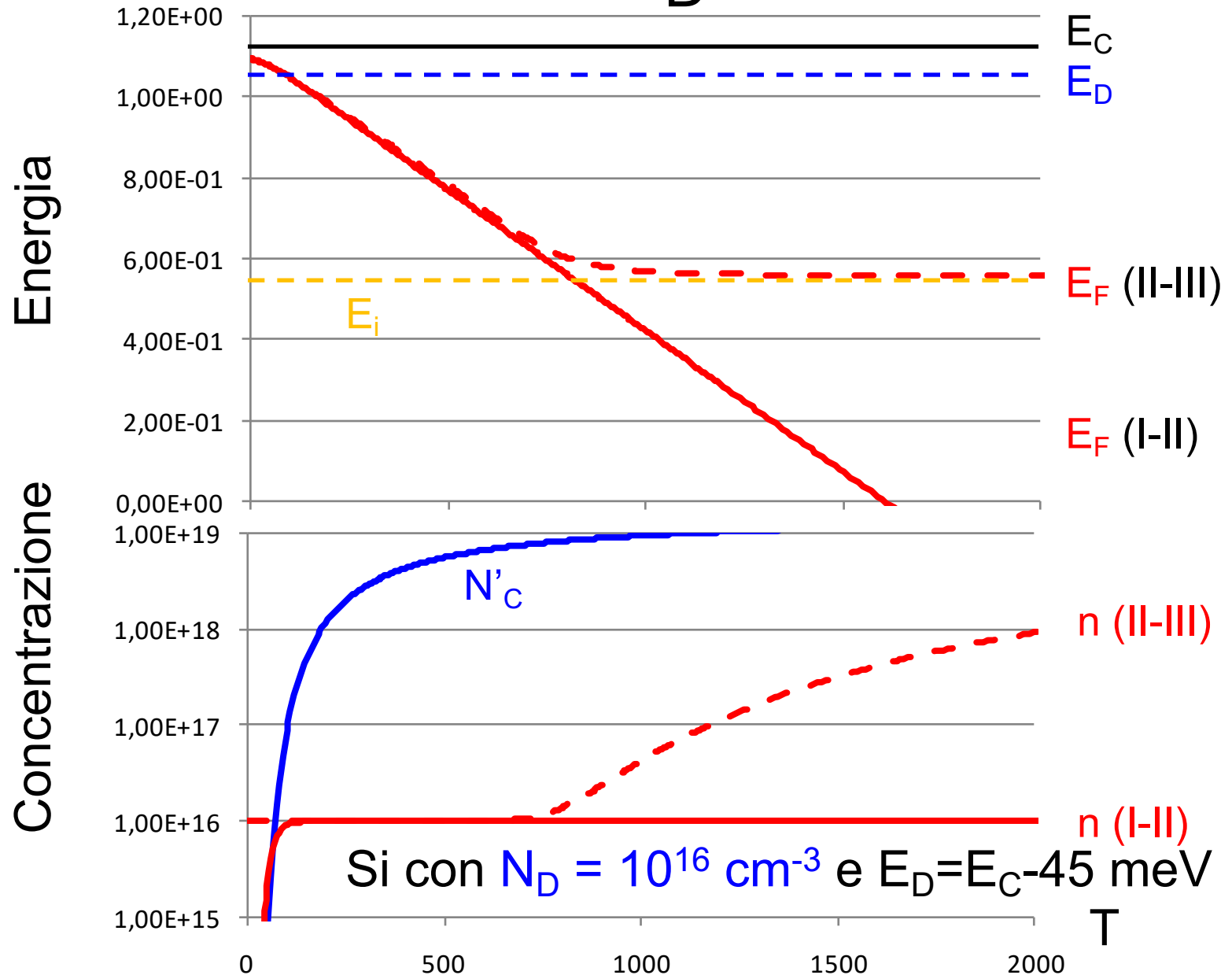
$$p = \frac{N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A}{2}\right)^2 + n_i^2} \approx N_A$$

$$n = \frac{n_i^2}{p} = \frac{n_i^2}{N_A}$$
- Intrinseco (III) $N_A \ll n_i, N_D \ll n_i$: $n = p = n_i$
- L'espressione completa va utilizzata solo per n_i confrontabile con $|N_D - N_A|$

Confronto formule I-II e II-III



Confronto con $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$



Nota

- I grafici precedenti non tengono in considerazione:
 - La dipendenza del gap dalla temperatura (riduzione di circa 0.15 eV da 0 a 600K)
 - Cambiamenti di fase del silicio (fusione a $1687\text{K} = 1414^{\circ}\text{C}$)

Conclusioni

- Densità di stati e distribuzione di Fermi permettono il calcolo della concentrazione di portatori in:
 - Metalli (E_F in banda di conduzione)
 - Semiconduttori (E_F nel gap)
 - Nota la temperatura e la concentrazione di droganti, è possibile ricavare le concentrazioni n e p ed il livello di Fermi, distinguendo tra regioni di freeze-out (I), estrinseca (II) ed intrinseca (III)