

INSTITUTO DE FÍSICA

FÍSICA DE SEMICONDUCTORES

Curso 2023

Práctico III – Aproximación de Masa Efectiva y Defectos.

Fecha de Entrega: 19 de Mayo de 2023. ¹

Parte A: Resonancia Ciclotrón:

Ejercicio N° 1 – Masa Efectiva Isotrópica:

En el modelo semiclásico, el movimiento de un electrón en una banda de conducción isotrópica de masa efectiva m^* , en presencia de un campo eléctrico de microondas $\vec{E} = E_0 \exp(i\omega t) \hat{e}_x$ (amplitud E_0 y pulsación ω) y un campo magnético constante $\vec{B} = B \hat{e}_z$, incluyendo una fuerza disipativa de tipo Drude (con constante de tiempo τ), la ecuación de movimiento se escribe como:

$$m^* \left(\frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{\vec{v}}{\tau} \right) = -e \left(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B} \right)$$

- a) Demuestre que la conductividad longitudinal, que da la densidad de corriente paralela al campo eléctrico externo aplicado, será:

$$\sigma_{xx} = \frac{ne^2\tau}{m^*} \left[\frac{1+i\omega\tau}{1+\tau^2(\omega_c^2 - \omega^2) + 2i\omega\tau} \right]$$

donde n es la concentración de electrones y $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ es la frecuencia de ciclotrón.

- b) Verifique que la potencia media disipada se podrá escribir como dos Lorentzianas centradas en $\omega = \omega_c$ de ancho completo a media altura $2/\tau$.
- c) Grafique esta potencia espectralmente (tanto para campo magnético constante variando la frecuencia del campo eléctrico de microondas, o a frecuencia fija variando el campo magnético B) para $\omega^*\tau = 0.5, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0$ y 5.0 (donde ω^* será la frecuencia que no se varía en cada caso).
- d) Concluya que los experimentos de resonancia ciclotrón deben realizarse a bajas temperaturas e iluminando la muestra. ¿Por qué?

¹ - Los ejercicios marcados con asterisco (*) son de entrega obligatoria. Los marcados con (o) se consideran opcionales en el sentido de que requieren desarrollos analíticos que pueden asumirse conocidos.

Ejercicio N° 2 (*) – Resonancia Ciclotrón en Semiconductores Indirectos:

En el caso de bandas anisotrópicas, el movimiento del electrón en un cristal perfectamente monocristalino, ante un campo eléctrico de microondas externo y un campo magnético constante, acoplará todas las componentes de la velocidad. Trabajando a temperaturas suficientemente bajas, y suponiendo el campo de microondas suficientemente pequeño (tal que solo imponga al electrón su frecuencia de oscilación) pueden despreciarse la fuerza de Drude y el campo eléctrico. De esta forma las resonancias ciclotrón pueden hallarse de la ecuación secular dada por:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -e \left(\frac{\overleftrightarrow{1}}{\mathbf{M}} \right) \cdot (\vec{v} \wedge \vec{B})$$

donde $\left(\frac{\overleftrightarrow{1}}{\mathbf{M}} \right)$ es el tensor (inverso) de masa efectiva.

- a) En sus direcciones principales (que llamaremos x, y y z) el tensor de masa efectiva será diagonal, con valores principales de masas efectivas m_1, m_2 y m_3 , respectivamente. En presencia de un campo magnético constante de dirección arbitraria $\vec{B} = B(\alpha \hat{e}_x + \beta \hat{e}_y + \gamma \hat{e}_z)$, demuestre que la frecuencia de resonancia ciclotrón puede escribirse $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ donde ahora m^* es la denominada masa ciltcotrón y estará dada por:

$$m^* = \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{m_1 \alpha^2 + m_2 \beta^2 + m_3 \gamma^2}}$$

- b) De aquí en adelante considere un campo magnético ubicado en el plano (110) de un cristal monocristalino con estructura diamante, que forma un ángulo θ con el eje [001]. Reescriba la masa efectiva de ciclotrón en función de θ en los casos que:
- i. Las direcciones principales del tensor masa efectiva sean paralelas a los ejes cristalinos.
 - ii. Las direcciones de los ejes principales sean paralelas a los ejes $\pm [111], \pm [11\bar{1}], \pm [1\bar{1}1], \pm [\bar{1}11]$.

- c) Las figuras de la derecha muestran las equipotenciales de energía cerca de los mínimos de las bandas de conducción en Ge y Si. En Ge ellos se dan a lo largo de las direcciones $\langle 111 \rangle$, mientras que en Si se dan a lo largo

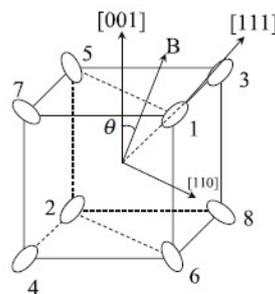


Fig. 2.8. Many-valley structure of the conduction bands in Ge

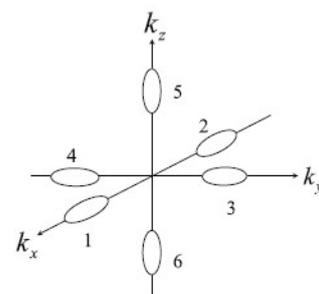
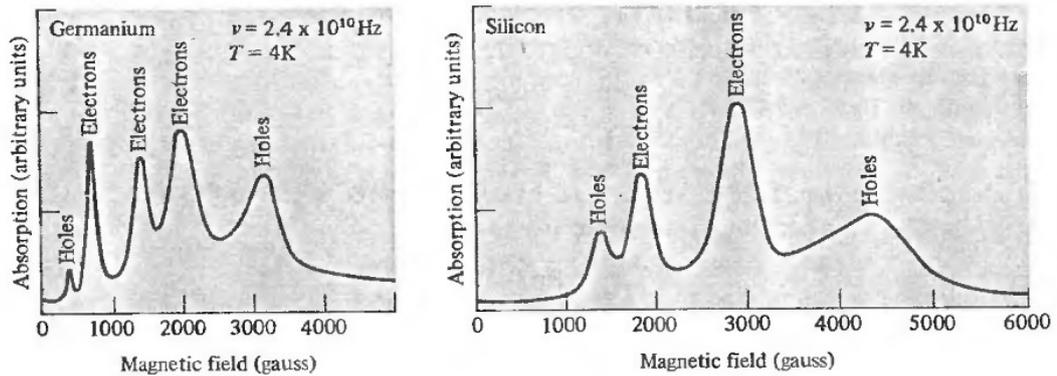


Fig. 2.9. Many-valley structure of the conduction bands in Si

de las direcciones $\langle 100 \rangle$. En ambos casos se tienen simetría de revolución en torno a los ejes correspondientes, por lo que dos masas efectivas principales (m_T , masa transversal) serán iguales, mientras que aquella a lo largo del eje de revolución (m_L , masa longitudinal) será diferente. Aplicando los resultados de la parte anterior en este caso encuentre cuántas resonancias esperaría encontrar en cada caso (Ge y Si), para esa configuración del campo magnético.

NOTA: Considere como caso particular $\theta = 60^\circ$ para Ge y $\theta = 30^\circ$ para Si .

- d) En las figuras que se muestran a continuación se presentan resultados de resonancia ciclotrón para las configuraciones estudiadas anteriormente. En ambos casos la frecuencia del campo eléctrico es de 24 GHz. En el caso del Ge (figura de la izquierda) el campo magnético, que se encuentra en el plano (110), forma 60° con el eje [001]. Para el caso del Si (figura de la derecha), ese ángulo es 30° . Estime a partir de las posiciones de los picos indicados como electrónicos en estas figuras, las masas longitudinales y transversales del Ge y el Si recordando que 1 Tesla = 10000 Gauss (o sea, las resonancias relevantes para el Si se encuentran aproximadamente en 0.18 y 0.29 T). La resonancia ciclotrón para un electrón libre a la frecuencia de 24 GHz es de aproximadamente 0.86 T.



- e) Con los valores hallados anteriormente, grafique numéricamente como dependerían las masas ciclotrón de esas figuras con el ángulo θ entre el campo magnético y la dirección [001]. ¿Sería posible observar el mismo número de picos en Si que en Ge? ¿Cómo?
- f) Evalúe las masas efectivas correspondientes a los otros picos (huecos pesados y huecos livianos) que aparecen en las figuras anteriores.

Parte B: Aproximación de Masa Efectiva:

Ejercicio N° 3 (*) – Funciones de Wannier:

Las funciones de Wannier (de una determinada banda de energía, de índice n) se define a partir de las funciones de Bloch como:

$$w_n(\vec{r}, \vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}) \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

en donde $\psi_{n,\mathbf{k}}(\vec{\mathbf{r}})$ es la función de Bloch de la banda n , N es el número de celdas del cristal, y $\vec{\mathbf{R}}$ es un punto de la red directa $\vec{\mathbf{T}}$ del cristal, en el cual se calcula la función de Wannier.

- a) Observando que la definición anterior es básicamente una transformada discreta de Fourier, invierta esa relación para demostrar que las funciones de Bloch pueden obtenerse a partir de las de Wannier como:

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{\mathbf{R}}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \vec{\mathbf{R}}) w_n(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{R}})$$

donde la suma anterior debe realizarse en todos los puntos de la red directa $\vec{\mathbf{T}}$ del cristal.

NOTA: Si las funciones de Bloch son un conjunto completo, la relación anterior permite concluir que las funciones de Wannier $w_n(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{R}})$ en todos los puntos de la red $\vec{\mathbf{T}}$ del cristal forman otro conjunto completo. Además, la relación anterior permite considerar las funciones de Wannier como generalización del método de enlace firme: estas funciones ya no son necesariamente combinación lineal de orbitales atómicos aunque pueden tener su misma naturaleza.

- b) Estudiando qué sucede cuando se desplazan ambos vectores $\vec{\mathbf{r}}$ y $\vec{\mathbf{R}}$ en un mismo vector $\vec{\mathbf{S}}$ (que, por la definición de la función de Wannier, también debe ser un punto de la red $\vec{\mathbf{T}}$ del cristal; para que se puedan desplazar simultáneamente ambos vectores) muestre que:

$$w_n(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{R}}) = w_n(\vec{\mathbf{r}} + \vec{\mathbf{S}}, \vec{\mathbf{R}} + \vec{\mathbf{S}}).$$

Concluya que la función de Wannier no puede depender de $\vec{\mathbf{r}}$ y $\vec{\mathbf{R}}$ en forma independiente sino que solo depende de la distancia entre ambos:

$$w_n(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{R}}) = w_n(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{R}})$$

- c) **(Ashcroft & Mermin 10.3)** A partir de la ortonormalidad de las funciones de Bloch demuestre que las funciones de Wannier también son ortonormales (en torno a puntos diferentes de la red $\vec{\mathbf{R}}$ y $\vec{\mathbf{R}'}$, o bandas diferentes de energía n y n'):

$$\int d\vec{\mathbf{r}} w_n(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{R}}) w_{n'}(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{R}'}) = \delta_{n,n'} \delta_{\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{R}'}}$$

donde la integral debe hacerse en todo el volumen del cristal V .

NOTA: Esta propiedad de ortonormalidad hace que las funciones sean frecuentemente de mayor uso que los orbitales atómicos centrados sobre puntos diferentes de la red, porque estos últimos no son generalmente ortogonales.

- d) La utilidad de las funciones de Wannier es que, a diferencia de las funciones de Bloch (que se extienden a en todo el cristal), las primeras están altamente localizadas (es decir, presentan picos) alrededor de las posiciones de la red $\vec{\mathbf{R}}$ en torno a las que se calculan. Por lo tanto, a diferencia de las funciones de Bloch, son más apropiadas para el estudio de fenómenos localizados. Para verificar este argumento considere que, de acuerdo al método k.p, las funciones de Bloch pueden aproximarse de la siguiente forma:

$$\psi_{n\vec{\mathbf{k}}}(\vec{\mathbf{r}}) = \exp(i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}}) u_{n\vec{\mathbf{k}}}(\vec{\mathbf{r}}) \cong \exp(i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}}) u_{n0}(\vec{\mathbf{r}})$$

es decir, la dependencia en el vector de onda $\vec{\mathbf{k}}$, puede limitarse a la parte de onda plana de la función de Bloch $\exp(i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}})$ ya que la parte orbital puede aproximarse por la correspondiente al centro de zona ($\vec{\mathbf{k}} = 0$). Verifique que bajo esta aproximación:

$$w_n(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{R}}) \cong \frac{V}{\sqrt{N}} u_{n,0}(\vec{\mathbf{r}}) \delta(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{R}})$$

NOTA: De esta forma, se puede interpretar que así como las funciones de Bloch son autovectores del operador traslación según un vector de la red $\hat{\mathbf{T}}_{\vec{\mathbf{R}}}$, con autovalor $\exp(i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{R}})$, las funciones de Wannier son autovectores de un operador posición en la red, $\hat{\mathbf{R}}_{\vec{\mathbf{T}}}$, con autovalor $\vec{\mathbf{R}} = \vec{\mathbf{T}}$ (punto de la red cristalina respecto al cual la función de Wannier está siendo calculada). Este argumento se estudia en profundidad en el Ejercicio N° 4.

Ejercicio N° 4 – Función Envelope.

Considere una función de onda que puede expandirse en funciones de Bloch:

$$\psi(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{n,\vec{\mathbf{k}}} A_n(\vec{\mathbf{k}}) \psi_{n,\vec{\mathbf{k}}}(\vec{\mathbf{r}})$$

$A_n(\vec{\mathbf{k}})$ es el coeficiente de la expansión correspondiente a la función de Bloch $\psi_{n,\mathbf{k}}(\vec{\mathbf{r}})$ de la banda n y vector de onda $\vec{\mathbf{k}}$ (zona reducida). La parte a del Ejercicio N° 3 permite afirmar que esta función también podrá expandirse en funciones de Wannier $w_n(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{R}})$:

$$\psi(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{n,\vec{\mathbf{R}}} F_n(\vec{\mathbf{R}}) w_n(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{R}})$$

siendo $F_n(\vec{\mathbf{R}})$ la función envelope.

- Demuestre que la función envelope y los coeficientes $A_n(\vec{\mathbf{k}})$ se vinculan entre sí por la transformada discreta de Fourier (y su inversa). ¿En qué condiciones la función envelope será una función suave de la posición?
- Si se define un operador vector de la red $\vec{\mathbf{R}}_{op}$ a través de su acción sobre las funciones de Wannier:

$$\vec{\mathbf{R}}_{op} w_n(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{R}}_i) = \vec{\mathbf{R}}_i w_n(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{R}}_i)$$

demuestre que la acción de este operador sobre una función arbitraria se podrá calcular a partir de la expansión en funciones de Bloch como:

$$\vec{\mathbf{R}}_{op} \psi(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{n,\vec{\mathbf{k}}} i \nabla_{\vec{\mathbf{k}}} A_n(\vec{\mathbf{k}}) \psi_{n,\mathbf{k}}(\vec{\mathbf{r}})$$

SUGERENCIA: Como el vector de onda está definido en la primer zona de Brillouin las funciones $A_n(\vec{\mathbf{k}})$ (así como las funciones de Bloch) deben considerarse periódicas en el espacio recíproco, con la periodicidad de la red recíproca.

- Si, recíprocamente, se define un operador vector de onda $\vec{\mathbf{k}}_{op}$ a través de su acción sobre las funciones de Bloch:

$$\vec{\mathbf{k}}_{op} \psi_{n,\mathbf{k}}(\vec{\mathbf{r}}) = \vec{\mathbf{k}} \psi_{n,\mathbf{k}}(\vec{\mathbf{r}})$$

demuestre que la acción de este operador sobre una función arbitraria se podrá calcular por su acción sobre la función envelope:

$$\vec{\mathbf{k}}_{op} \psi(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{n,\vec{\mathbf{R}}} \left[-i \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} F_n(\vec{\mathbf{R}}) \right] w_n(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{R}})$$

SUGERENCIA: Como exigimos las funciones de Bloch tengan la periodicidad del cristal (condiciones de borde de Born-von Karman) la función envelope también deberá tenerla.

- d) La función envelope permite generalizar las funciones de Bloch para estudiar problemas localizados en un cristal (por ejemplo: defectos, efectos de superficies, efectos nanoscópicos). Por definición la función de Bloch es el producto de dos funciones periódicas $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})u_{n\vec{k}}(\vec{r})$: $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ con el período rápido

de la red directa, una onda plana de vector de onda \vec{k} , que como está en la 1^{er} zona de Brillouin es suave en comparación al período de la red. Considere una generalización en que se construye una función de onda $\psi(\vec{r}) = F(\vec{r})u_{n\vec{k}}(\vec{r})$

donde $F(\vec{r})$ es una función suave en la posición (no necesariamente periódica), es decir, no varía mucho de una celda a otra del cristal. Verifique que en estas condiciones $\psi(\vec{r})$ se puede expandir en las funciones de Wannier de la banda n siendo los coeficientes la función F (envelope) evaluada en los puntos de la red directa.

Ejercicio N° 5 (*) – Ecuación de Onda de Función Envelope.

Considere un cristal de hamiltoniano cristalino H_0 , cuyas bandas de energía están dadas por la relaciones de dispersión $\varepsilon_n(\vec{k})$, en donde además existe un hamiltoniano perturbativo suave $H_1(\vec{r})$ (por ejemplo: defectos, potencial externo, modulación nanométrica). Sean ε los autovalores de energía del hamiltoniano total $H_0 + H_1$ y $\psi(\vec{r})$ la función de onda correspondiente.

- a) Expandiendo $\psi(\vec{r})$ en funciones de Wannier (ver Ejercicio N° 3) escriba la ecuación que verificará la función envelope $F_n(\vec{R})$ (ver Ejercicio N° 4). Deje expresado el resultado en función de los elementos de matriz (definidos para ambos H_0 y H_1):

$$h_{0,1ij}^{mn} \equiv h_{0,1}^{mn}(\vec{R}_j - \vec{R}_i) \equiv \int d\vec{r} w_m^*(\vec{r} - \vec{R}_j) H_{0,1} w_n(\vec{r} - \vec{R}_i)$$

- b) Demuestre que:

- i. Si $H_1(\vec{\mathbf{r}})$ varía suficientemente suave: $h_{ij}^{mn} \cong H_1(\vec{\mathbf{R}}_i) \delta_{ij} \delta_{nm}$.
- ii. Recordando que $\epsilon_n(\vec{\mathbf{k}}) = \int d\vec{\mathbf{r}} \psi_{n,\vec{\mathbf{k}}}^*(\vec{\mathbf{r}}) H_0 \psi_{n,\vec{\mathbf{k}}}(\vec{\mathbf{r}})$, donde $\psi_{n,\vec{\mathbf{k}}}(\vec{\mathbf{r}})$ son las funciones de Bloch, convenientemente normalizadas, demuestre que:

$$\epsilon_n(\vec{\mathbf{k}}) = \sum_{\vec{\mathbf{R}}_j} \exp(-i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{R}}_j) h_0^{mn}(\vec{\mathbf{R}}_j)$$

- c) Recordando que el operador traslación puede escribirse formalmente como: $F(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{R}}_j) = \exp(-\vec{\mathbf{R}}_j \cdot \nabla) F(\vec{\mathbf{r}})$, utilice los resultados de la parte b para deducir de la ecuación de la parte a que la función envelope verifica la ecuación de la aproximación de masa efectiva:

$$\epsilon_n(-i\nabla) F_n(\vec{\mathbf{r}}) + H_1(\vec{\mathbf{r}}) F_n(\vec{\mathbf{r}}) = \epsilon F_n(\vec{\mathbf{r}})$$

SUGERENCIA: El resultado puede obtenerse más fácilmente limitando la expansión de $\psi(\vec{\mathbf{r}})$ en funciones de Wannier de una única banda.

Ejercicio N° 6 – Estado Dador en Bandas Anisotrópicas.

Considere un electrón moviéndose en torno a un estado dador (potencial coulombiano de carga $+e$ y apantallamiento dieléctrico de constante ϵ) en las cercanías de una banda de conducción anisotrópica, cuya relación de dispersión es:

$$\epsilon_n(\vec{\mathbf{k}}) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{m_T} + \frac{k_z^2}{m_L} \right)$$

donde m_T (m_L) es la masa transversal (longitudinal). Asuma $m_T < m_L$.

- a) Escriba la ecuación de masa efectiva para los estados dadores correspondientes, dejándola expresada en coordenadas cilíndricas.
- b) Para hallar el estado fundamental de esta ecuación use el método variacional, partiendo de la función de estado de prueba:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2 b}} \exp\left(-\sqrt{\frac{r^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}}\right)$$

donde r y z corresponden a las coordenadas cilíndricas y $a > b$.

- i. Interprete si esta desigualdad es (o no) coherente con que $m_T < m_L$.
- ii. (o) Calcule el valor esperado del Hamiltoniano en este estado verificando que puede escribirse como:

$$\varepsilon = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m_T} \left\{ -\frac{[2(1-\rho^2)+\gamma]}{3a^2(1-\rho^2)} + \frac{2\text{arcsen}\rho}{\rho a a_T} \right\}$$

donde $\rho = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a}$, $\gamma = \frac{m_T}{m_L}$ y a_T es el radio de Bohr transversal (calculado usando la masa efectiva transversal m_T y la constante dieléctrica ϵ).

SUGERENCIA: La integral correspondiente se puede realizar utilizando las coordenadas u y v definidas por $r = a u \cos v$ y $z = b u \sin v$.

c) Verifique que el valor a que minimiza la energía anterior es:

$$a = -\frac{\rho[2(1-\rho^2)+\gamma]}{3(1-\rho^2)\text{arcsen}\rho} a_T$$

d) Calcule la energía correspondiente a dicho mínimo dejándola expresada en función de la energía de ligación transversal: $E_T = -\frac{\hbar^2}{2m_T a_T}$.

e) Encuentre (numéricamente) el valor de ρ que minimiza dicha función para un valor dado de $\gamma < 1$. Realice las gráficas $\rho(\gamma)$ y $\varepsilon(\gamma)$ resultantes.

f) Utilice los parámetros de masa efectiva y constante dieléctrica para Ge y Si que aparecen en la siguiente tabla para estimar:

- i. El radio de Bohr transversal a_T .
- ii. La energía de ligación transversal E_T .
- iii. Las extensión de la función de onda a y b .
- iv. La energía de ligación del estado dador.

	m_T/m_0	m_L/m_0	ϵ
Ge	0.082	1.58	16
Si	0.019	0.98	11.9

Parte C: Defectos:

Ejercicio N° 7 (*) – Estados Hidrogenoides:

Busque alguna tabla que contenga datos experimentales de masas efectivas, constantes dieléctricas y constante de red de semiconductores y calcule, utilizando el modelo de impurezas hidrogenoides, las siguientes cantidades:

- a) Energías de ligación de estados dadores y aceptores.
- b) Radio de Bohr de electrones y huecos ligados a estos estados.

- c) Radio de Bohr del excitón (electrón de conducción orbitando en torno a un hueco libre en el interior del semiconductor).
- d) Comparando los valores calculados en la partes b y c anteriores con las constantes de red estime el número de celdas de las excitaciones fundamentales correspondientes. ¿En qué caso se espera que el modelo hidrogenoide de los mejores resultados?
- e) Busque para qué semiconductores se tendrán los valores extremos (máximos y mínimos) de todas las cantidades calculadas anteriormente.

SUGERENCIA: Para orientar la búsqueda muévase a lo largo de las filas o las columnas de la tabla periódica.

Ejercicio N° 8 (*) – Termodinámica de Defectos Intrínsecos:

En condiciones normales (presión y temperatura controlables) un sólido estará en aquella configuración que minimice la energía libre de Gibbs G , que puede calcularse a partir de la entalpía H como $G = H - TS$, donde T y S son la temperatura absoluta y la entropía. Llamémosle G_0 (H_0) a la energía libre (entalpía) del cristal perfecto. La formación de un estado de defectos intrínsecos (vacancias V o defectos intersticiales I) puede modelarse por el cambio de un átomo desde el estado que ocupa en la red hacia la superficie del sólido (para una vacancia V) o desde la superficie a un sitio intersticial (para un defecto intersticial I). La formación de uno de estos defectos involucra una energía libre de formación del defecto $G_f = H_f - TS_f$, donde H_f (S_f) es la entalpía (aumento de entropía) de formación de *un* defecto. Si existen n defectos con una concentración de los mismos suficientemente baja (es decir $n \ll N$, con N el número total de sitios posibles), de forma que no haya interacción entre ellos, la variación de energía libre total será nG_f . Pero además existe una entropía del desorden S_d generada por todas las configuraciones posibles de tener n defectos en N sitios. Así la entropía de un cristal con n defectos (de un único tipo V o I) será: $G = G_0 + nG_f - TS_d$.

- a) Recordando que $S_d = k_B \ln W$ donde el número de configuraciones posibles W está dado por $\frac{N!}{n!(N-n)!}$ encuentre $S_d(n,T)$.
- b) Encuentre la fracción de defectos n/N que minimiza la energía libre y verifique que sigue una ley de Arrhenius con energía de activación G_f .

NOTA: Se denomina ley de Arrhenius a una cantidad cuyo logaritmo depende linealmente con el inverso de la temperatura absoluta. La energía de activación es la pendiente (negativa) del logaritmo contra $1/k_B T$.

Ejercicio N° 9 (*) – Estados Superficiales:

Considere el caso simplificado del modelo de Kronig-Penney (ver Ejercicio N° 11) cuando la altura del potencial V_0 es infinitamente alto, pero de ancho despreciable, de forma que el área $\Delta = bV_0$ se mantiene constante:

a) Halle cómo se modifica la ecuación planteada en el enunciado del Ejercicio N° 11.²

a) Estudie las nuevas relaciones de dispersión en función del parámetro

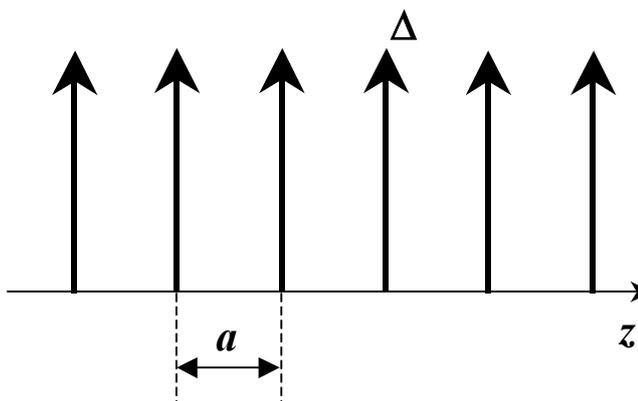
$$P = \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{a\Delta}{2}$$

denominado “Potencia de dispersión de un solo pico de potencial”, en los siguientes límites:

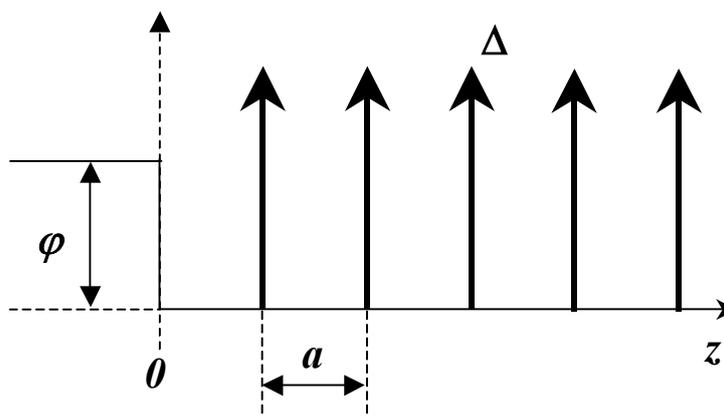
i. $P \ll 1$.

ii. $P \rightarrow \infty$.

iii. $P \gg 1$ (pero no infinito).



b) (o) Demuestre que en los bordes de las zonas de Brillouin las relaciones de dispersión tienen extremos relativos (a ambos lados del borde).



c) Considere ahora que el cristal lineal de las partes anteriores comienza en $z = 0$.

Es decir, existe una barrera de alto finito ϕ , pero que se extiende hacia $z = -\infty$, indefinidamente.

i. Asumiendo una solución de onda evanescente³ en $z < 0$, demuestre que las condiciones de borde en $z = 0$, de esta onda con la solución de la ecuación de Schroedinger de la parte anterior conduce a:

$$\frac{2P}{Q^2} \alpha a \cot g(\alpha a) = 1 - \left(\frac{2P}{Q^2}\right) \sqrt{Q^2 - (\alpha a)^2}$$

con P y α los definidos anteriormente y $Q = \frac{2m^* a^2 \phi}{\hbar^2}$.

² - Realice la aproximación directamente en dicha ecuación; o en forma opcional, verifique el resultado resolviendo la ecuación de Schroedinger para las ondas de Bloch en un potencial periódico de barreras infinitas de ancho infinitesimal (peine de δ de Dirac la figura), imponiendo las condiciones de borde adecuadas a este problema.

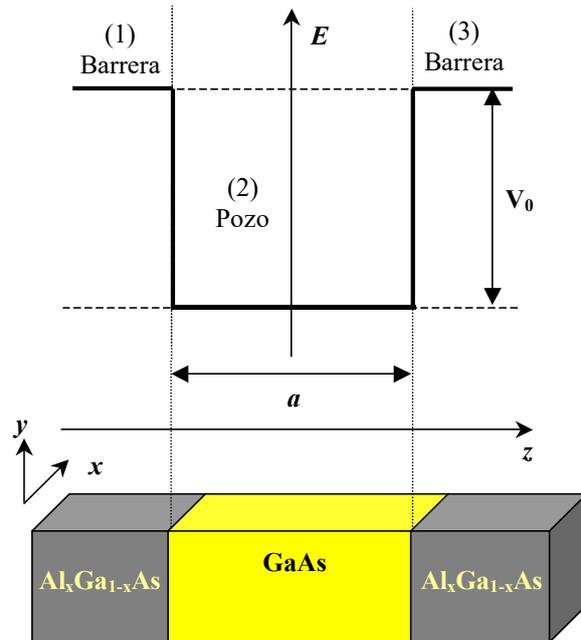
³ - Del tipo $\exp(\gamma z)$.

- ii. Encuentre y grafique soluciones para estas relaciones en los dos gaps de menos energía para $P = 7.2$ y $Q = 6$ y 12 , respectivamente.

Parte D: Aproximación de Masa Efectiva en Heteroestructuras:

Ejercicio N° 10: Pozo Cuántico (“Quantum Well”)

Considere una heteroestructura de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, que consiste en una capa de GaAs entre dos secciones semi-infinitas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Debido a los diferentes gaps de energía de GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($E_g^{[\text{GaAs}]} < E_g^{[\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}]}(x)$), los electrones de conducción se encuentran “confinados” en la región del GaAs. Le llamamos z a la dirección perpendicular a la interface entre los materiales. En esa dirección z los portadores se encuentran en un pozo de potencial simétrico, de barrera finita, como el de la figura. Llamémosle a al ancho espacial del pozo y V_0 al alto de la barrera de potencial. En las direcciones perpendiculares a z los portadores se mueven libremente.



- a) En la aproximación de masa efectiva el movimiento del electrón en la banda de conducción está gobernado por la ecuación de Schrödinger de estado estacionario:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \Psi + V\Psi = E\Psi$$

donde m^* es la masa efectiva de los electrones, supuesta la misma en ambos materiales, \hbar la constante de Planck, $V(z)$ es el potencial en que el electrón en estudio se mueve y E la energía total del mismo.

Demuestre que, debido a que el potencial de confinamiento (de la figura) solamente depende de z , la ecuación anterior es de variables separables y su solución puede escribirse como:

$$\Psi = \phi(x, y) \psi(z)$$

siendo $\phi(x, y)$ una onda plana bidimensional:

$$\phi(x, y) \propto \exp[\pm i(k_x x + k_y y)]$$

y $\psi(z)$ verifica una ecuación diferencial de pozo de potencial finito unidimensional:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + V(z)\psi = E_0 \psi$$

donde:

$$E_0 = E - \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2)$$

o sea, E_0 es la energía total en el caso que $k_x = k_y = 0$.

NOTA: Las partes que siguen, desde la b) hasta la f) inclusive, solo involucran el cálculo de E_0 y corresponden a las soluciones del pozo de potencial unidimensional de la Mecánica Cuántica. Por esa razón este fue el primer dispositivo cuántico que se obtuvo experimentalmente.

b) (o) Demuestre que existen dos tipos de soluciones para la ecuación del pozo de potencial finito, cuya existencia está dada por las condiciones:

$$k_1 = k_2 \operatorname{tg} \left(\frac{k_2 a}{2} \right)$$

$$-k_1 = k_2 \operatorname{cot} g \left(\frac{k_2 a}{2} \right)$$

siendo:

$$k_1 \equiv \sqrt{\frac{2m^*(V_0 - E_0)}{\hbar^2}}$$

$$k_2 \equiv \sqrt{\frac{2m^* E_0}{\hbar^2}}$$

c) Estudiando gráficamente el primer par de ecuaciones anteriores) en función de k_2 y $\alpha \equiv 2m^* \left(\frac{a}{\hbar} \right)^2 V_0$ como parámetro, demuestre que:

- i. Existe un número finito de soluciones.
- ii. Si $\alpha \rightarrow \infty$ las soluciones se acercan a las del pozo infinito:

$$E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2} n^2 \quad \text{con } n = 1, 2, \dots \quad (1)$$

Interprete físicamente los dos casos en que se da este límite.

- iii. Existe un valor crítico α_{crit} , tal que si $\alpha < \alpha_{\text{crit}}$ existirá una única solución.
- iv. Halle en forma aproximada y grafique la energía de la solución para $\alpha \rightarrow 0$.

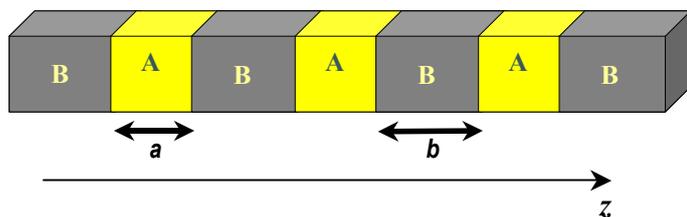
d) Calcule α_{crit} , y el ancho crítico del pozo de potencial a_{crit} en los siguientes casos:

- i. masa del electrón $m^* = 0.067 m_0$, con $m_0 = 9.10956 \times 10^{-31}$ kg y $V_0 = 0.347$ eV (corresponde a un pozo de GaAs/AlGaAs con una concentración de Al del 45 % y un “band offset” de 62%).
 - ii. un pozo de $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ en $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$ ($m^* = 0.045 m_0$, $V_0 = 0.5$ eV).
- e) Realice numéricamente el cálculo de los niveles de energía para pozos de ancho $a = 50, 100$ y 150 \AA para los casos i y ii anteriores.
- f) Estudie cómo se modifica el resultado de las partes a), b) (y discuta cualitativamente su influencia en las partes siguientes), si la masa efectiva en las barreras m_B^* es diferente que la masa efectiva en el pozo m_P^* .⁴ Como referencia para la discusión considere:
- i. el pozo de GaAs en $\text{Al}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}$ en el que $m_B^* \approx 2 m_P^*$.
 - ii. el caso inverso en que $m_B^* \approx \frac{1}{2} m_P^*$.
- g) Asumiendo de aquí en más un pozo de potencial infinito ($V_0 \rightarrow \infty$), grafique la dependencia de la energía total E en función del módulo del vector de onda en el plano del Pozo Cuántico $k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. Para ello utilice la última ecuación de la parte a) y considere solamente los cuatro niveles de menor energía E_0 asociados al pozo de potencial.
- Interprete estos resultados como la aparición de “subbandas” de energía asociadas a cada estado confinado en el pozo de potencial.
- h) Considerando que las dimensiones laterales del pozo de potencial son $L_x, L_y \gg a$; calcule y grafique la densidad de estados de las subbandas halladas en la parte anterior, en función de la energía total del electrón E .

NOTA: Tenga en cuenta que la condición $a \ll L_x, L_y$ nos permite considerar el problema como bidimensional.

Ejercicio N° 11 (o): Modelo de Kronig-Penney en SuperRedes.

Considere las condiciones de borde en una SuperRed semiconductora, teniendo en cuenta el Modelo de Kronig-Penney para un pozo de potencial periódico unidimensional cuadrado.⁵ Estas condiciones



⁴ - Tenga en cuenta que, además de que cada región tendrá su propia ecuación, las condiciones de continuidad en la interface están dadas por la continuidad de la función de onda Ψ en la interface; y la continuidad del flujo de probabilidad: $\vec{j} = \frac{\hbar}{2m^*i} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$.

⁵ - Se estudiará solamente el movimiento de los electrones en la dirección perpendicular a las interfaces entre los materiales A y B de la figura. Se despreciará el movimiento de los electrones en las direcciones transversales (en los planos de las interfaces).

pueden escribirse como:

$$-\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} \text{sen}(\alpha a) \text{sen}(\beta b) + \text{cos}(\alpha a) \text{cos}(\beta b) = \text{cos}(k(a+b)) \quad 6$$

donde:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2}}; \quad \beta = \sqrt{\frac{2m^* (E - V_0)}{\hbar^2}}$$

E son los niveles de energía permitidos;

V_0 es la altura de la barrera de potencial, originada en la diferencia entre los gaps de energía en el material;

m^* es la masa efectiva de los electrones que se mueven en dicha SuperRed (considerada la misma en uno y otro material);

a es el ancho de los pozos y b el de las barreras;

k es el número de onda del electrón de Bloch (asociado a la denominada cantidad de movimiento del cristal $\hbar k$, donde \hbar es la constante de Planck);

b) Demuestre que las relaciones de dispersión $E(k)$ se pueden hallar resolviendo la ecuación inversa:

$$k = \frac{1}{a+b} \arccos(z(E))$$

con:

$$z(E) = \sqrt{\left[1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \text{sen}^2 \left(\sqrt{\frac{2m^* (E - V_0)}{\hbar^2}} b \right) \right]} \cos \left(\sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2}} a + \delta \right);$$

$$\text{tg} \delta = \frac{(\alpha^2 + \beta^2)}{2\alpha\beta} \text{tg}(\beta b).$$

c) Trabajando en función de las cantidades normalizadas:

$$\varepsilon = \frac{E}{V_0}, \quad u = k(a+b), \quad v = \frac{2m^* V_0 a^2}{\hbar^2}, \quad r = \frac{b}{a} \quad (2)$$

realice numéricamente el cálculo de las denominadas “minibandas” de energía, $\varepsilon(u)$, graficando los resultados en el esquema de *zona reducida*. Aplique el cálculo a los casos particulares:

i. $v = 144, r = 0.1.$

ii. $V_0 = 0.4 \text{ eV}, a = b = 30 \text{ \AA}, m^* = m_0 = 9.10956 \times 10^{-31} \text{ kg}.$

⁶ - Esta ecuación es estrictamente válida para $E > V_0$. En otro caso deberían hacerse las sustituciones $\beta = i \gamma$ (con γ real), y $\text{sen } ix = i \text{sh} x$, $\text{cos } ix = \text{ch } x$.

- iii. (o) Estudie las características de la estructura de bandas resultante para diferentes relaciones entre los parámetros.
- d) De la ecuación de partida, demuestre analíticamente que cuando $E \gg V_0$ las relaciones de dispersión se aproximan a los de la partícula libre $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$.

Parte E: Estadística de Portadores en Semiconductores:

Ejercicio N° 12 – Semiconductores degenerados.

Utilizando la estadística de Fermi-Dirac para la ocupación de los estados en las bandas energía de los semiconductores:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

donde $f(E)$ es la probabilidad de que el estado de energía E en consideración se encuentre ocupado, $\mu = E_F$ es el potencial químico o Energía de Fermi, k_B es la constante de Boltzmann y T es la temperatura del semiconductor (supuesto en equilibrio a esta temperatura).

Siendo $q = -e$ la carga del electrón; E_c (E_v) la energía del mínimo (máximo) de las bandas de conducción (valencia) y m_c^* (m_v^*) las masas efectivas de electrones de conducción (huecos), y $E_G = E_c - E_v$ la energía del gap:

- a) (o) Demuestre que las densidades de estados (por unidad de volumen) en una y otra banda pueden escribirse como:

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

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

- b) Demuestre que cuando el nivel de Fermi E_F verifica la siguiente aproximación:

$$1 \ll \frac{E_F - E_c}{k_B T}$$

la *densidad de electrones de conducción* (por unidad de volumen) n_0 , puede escribirse como:

$$n_0 = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E_F - E_c)^{3/2}$$

NOTA: En este caso, en que el nivel de Fermi se encuentra varias veces la energía térmica en el interior de la banda de conducción el semiconductor se dice que es *altamente degenerado*.

- c) Deduzca una relación similar para una banda de valencia degenerada, hallando la densidad de huecos (por unidad de volumen) p_0 y la condición que debe verificar el nivel de Fermi en ese caso.
- d) ¿Es posible que en un mismo semiconductor se encuentre simultáneamente un gas de electrones y un gas de huecos degenerados? ¿Cuándo se daría esta condición?

Ejercicio N° 13 – Semiconductores no-degenerados.

En un semiconductor *NO-degenerado* el nivel de Fermi se encuentra en el interior de la banda de energías prohibidas (y dista de los bordes de las bandas de conducción y de valencia más de $3 k_B T$).

- a) Para bandas parabólicas no degeneradas (salvo por la degeneración de spin⁷) con masas efectivas m_c^* (m_v^*) para electrones de conducción (huecos), en el centro de la zona de Brillouin, muestre que las densidades n_0 (p_0) de electrones en la banda de conducción (huecos), por unidad de volumen, pueden escribirse como:

$$n_0(T) = 2 \left(\frac{m_c^*}{2\pi\hbar^2} k_B T \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T} \right)$$

$$p_0(T) = 2 \left(\frac{m_v^*}{2\pi\hbar^2} k_B T \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_B T} \right)$$

- b) Deduzca como cambian estas relaciones en el caso de:
- Semiconductor indirecto con g bandas de conducción degeneradas (mínimos simétricamente equivalentes) elipsoidales (con masas efectivas m_x^* , m_y^* , m_z^* según las direcciones principales).
 - Bandas de huecos livianos y pesados degeneradas en el centro de la zona de Brillouin (con masas efectivas m_{lh}^* y m_{hh}^* , respectivamente).
- c) Volviendo al caso general de la parte a) considere el caso de un semiconductor *intrínseco* (no dopado) en equilibrio a temperatura T . Utilizando la neutralidad eléctrica demuestre que el nivel de Fermi vale:

$$E_{Fi} = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4}k_B T \ln\left(\frac{m_v^*}{m_c^*} \right).$$

- d) Discuta en qué caso el nivel de Fermi será independiente de la temperatura y discuta qué sucede en los casos $m_v^* > m_c^*$ o $m_v^* < m_c^*$. ¿Cuál es el origen de este comportamiento?
- e) Halle también las concentraciones de portadores de carga $n_i(T)$ (concentración intrínseca).
- f) Verifique que se cumple la denominada *ley de acción de masas*: $n_0 p_0 = n_i^2$.

⁷ - Aquí se usa el concepto de degeneración desde el punto de vista cuántica (estados únicos) mientras en el título del Ejercicio se refiere al punto de vista estadístico (gas de partículas clásico).

Ejercicio N° 14 – Semiconductores no-degenerados dopados.

Considere un semiconductor no-degenerado dopado, que contiene un número relativamente pequeño de impurezas dadoras o aceptoras. La neutralidad de carga ya no exige que las densidades volumétricas de portadores de electrones de conducción n y huecos p sean iguales. En este caso habrá un desequilibrio de concentraciones $\Delta n = n - p$.

- ¿En qué condiciones se seguirán verificando las ecuaciones de la parte a del Ejercicio N° 13?
- Verifique que en esas condiciones se sigue verificando la ley de acción de masas deducida en la parte f) del Ejercicio N° 13: $n p = n_i^2$, siendo $n_i(T)$ el mismo que fue calculado en la parte e) de dicho Ejercicio.
- Calcule las concentraciones n y p en función de Δn y n_i .
- La cantidad $\Delta n/n_i$ mide la importancia de las impurezas como fuente portadores. Verifique que esta cantidad puede escribirse como:

$$\frac{\Delta n}{n} = 2sh\left(\frac{E_F - E_{F_i}}{k_B T}\right)$$

siendo E_{F_i} el nivel de Fermi intrínseco (parte c, Ejercicio N° 13).

- Discuta en qué condiciones las impurezas dominarán las densidades de portadores libres y si se mantiene la validez de las ecuaciones utilizadas en la aproximación.

Ejercicio N° 15 – Semiconductores dopados extrínsecos.

Considere un semiconductor dopado, que contiene un número relativamente pequeño de impurezas dadoras y aceptoras. La densidad volumétrica de estas impurezas es N_d y N_a , respectivamente.

- Considerando que estas impurezas están completamente ionizadas, demuestre que el nivel de Fermi valdrá:

$$E_F = E_{F_i} + k_B T \operatorname{senh}^{-1}\left(\frac{N_d - N_a}{2n_i(T)}\right)$$

- Halle también las concentraciones de portadores de carga en este caso, asumiendo que estamos en la región *extrínseca*, en que el comportamiento del semiconductor está gobernado por la presencia de las impurezas y se aleja del caso intrínseco: $|N_d - N_a| \gg n_i(T)$, siendo esta la concentración de portadores intrínsecos hallada en el Ejercicio N° 13.⁸

Ejercicio N° 16 – Estadística de Estado Dador (Ashcroft & Mermin 28.4):

- Considere un estado de impureza dadora en que el mismo puede estar libre (ausencia de electrones), ocupado con un electrón u ocupado con dos electrones. La energía de la impureza con un electrón será E_d , mientras que la energía del sistema con dos electrones

⁸ - Estudie ambos casos: semiconductores tipo n y tipo p .

será $2 E_d + \Delta$, donde Δ representa la energía de la repulsión entre electrones. Considere que existen N_d impurezas por unidad de volumen. Utilice la estadística del ensemble gran canónico (o directamente el cálculo del valor esperado utilizando el factor de Gibbs para el cálculo de las probabilidades) para demostrar que la densidad volumétrica de electrones ligados a impurezas estará dada por:

$$n_d = N_d \frac{1 + \exp\left(-\frac{E_d - \mu + \Delta}{k_B T}\right)}{\frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_d - \mu}{k_B T}\right) + 1 + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{E_d - \mu + \Delta}{k_B T}\right)}$$

- b) Encuentre los límites de esta ecuación en los dos casos: Δ es muy grande o muy pequeño.
- c) Considere el caso de una impureza dadora con muchos niveles de orbitales electrónicos ligados. Cada orbital tiene una energía E_i . Asuma que la repulsión de Coulomb prohíbe más de un solo electrón estar ligado a la impureza. Encuentre la generalización del resultado de la parte a y cómo esto altera la estadística de portadores en semiconductores.

Ejercicio N° 17 – Estadística de portadores en semiconductor tipo *p*:

A temperaturas relativamente bajas, las impurezas no están completamente ionizadas. En ese caso, además de la dependencia térmica para las concentraciones de electrones libres y huecos, n y p , respectivamente, deben también tenerse en cuenta las ocupaciones de los estados de impurezas. De acuerdo a los resultados del Ejercicio N° 16 estas están gobernadas por estadísticas similares a las de Fermi-Dirac, pero en donde solo un único electrón puede ser excitado:

$$n_d \cong \frac{N_d}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_d - E_F}{k_B T}}} \quad p_a \cong \frac{N_a}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_F - E_a}{k_B T}}}$$

donde n_d (p_a) son las densidades (por unidad de volumen) de electrones (huecos) que ocupan los niveles de impurezas, con energías E_d (E_a); y N_d (N_a) son las concentraciones de impurezas dadoras (aceptoras) por unidad de volumen.

- a) Plantee el conjunto de ecuaciones que permite hallar el nivel de Fermi E_F y las concentraciones de portadores excitados (electrones de conducción y huecos).
- b) Suponiendo el semiconductor posee más estados aceptores que dadores ($N_a > N_d$), verifique que existen tres regímenes de funcionamiento:
 - i. A muy altas temperaturas el semiconductor se comporta como *intrínseco* en donde los portadores mayoritarios son los huecos con energía de activación $E_G/2$, donde $E_G = E_c - E_v$ es la energía del gap.
 - ii. A temperaturas intermedias existe un régimen de saturación donde todas las impurezas están ionizadas y esto gobierna la densidad de huecos libres.
 - iii. A bajas temperaturas existe un régimen de “congelamiento” (ver Ejercicio N° 18).

Ejercicio N° 18 (*) – Semiconductor a bajas temperaturas (Ashcroft & Mermin 28.6):

Considere un semiconductor dopado con N_d (N_a) concentraciones de impurezas dadoras (aceptoras) por unidad de volumen, donde $N_d > N_a$. Asuma que se verifican las condiciones de no-degeneración $E_c - E_F \gg k_B T$, $E_F - E_v \gg k_B T$ (ver Ejercicio N° 13) pero donde la temperatura es tan baja que $N_d - N_a \gg n_i$ (concentración intrínseca), y no necesariamente vale $E_d - E_F \gg k_B T$, $E_F - E_a \gg k_B T$.

- Muestre que en estas condiciones la densidad de huecos será despreciable frente a la densidad de electrones libres y la energía de Fermi estará dada por una ecuación de segundo grado en $\exp(E_F / k_B T)$.
- Muestre que a temperaturas por debajo del régimen de saturación la concentración de electrones libres tendrá una energía de activación $(E_c - E_d)/2$. Encuentre esa concentración.
- Muestre que si la temperatura cae aún más, hay una transición hacia un nuevo régimen en que la energía de activación es $E_c - E_d$. Encuentre la concentración correspondiente a este régimen.
- Deduzca los resultados análogos cuando $N_a > N_d$.

Ejercicio N° 19 (*) – Compensación en Substratos para Microelectrónica:

El sustrato de un dispositivo electrónico (sobre el que se crecen epitaxialmente dispositivos semiconductores) actúa como soporte térmico y mecánico. Para no influir en las propiedades eléctricas debe ser aislante, es decir, debe tener resistividad alta. El costo de este dispositivo disminuirá mucho si se pueden utilizar sustratos impuros (impurezas residuales en el proceso de fabricación). El control de su resistividad puede lograrse por el agregado de impurezas profundas (compensación).

Considere un cristal de GaAs con constante dieléctrica $\epsilon = 13$, energía del gap $E_G = E_c - E_v = 1.4$ eV, masa efectiva para electrones de conducción $m_c^* = 0.07 m_0$, movilidad electrónica $\mu_c = 8500$ cm²/Vs, masa efectiva de huecos $m_h^* = 0.5 m_0$, movilidad de huecos $\mu_h = 400$ cm²/Vs.

- ¿Cuál será la resistividad a $T = 300$ K de un cristal puro (intrínseco) de GaAs?
- Si no se consigue fabricar GaAs con menos impurezas que 10^{20} m⁻³, y se considera todas ellas introducen estados dadores:
 - ¿Cuál será la energía de ligación de estas impurezas?
 - ¿Cuál será la posición del nivel de Fermi a $T = 300$ K?
 - ¿Cuánto valdrá la resistividad de este material?
- Se introducen átomos de Cr en una densidad de 10^{23} m⁻³. Cada átomo de cromo tiene un electrón en exceso y contribuye con un estado profundo E_{Cr} en el centro del gap (0.7 eV por debajo del mínimo de la banda de conducción).
 - Muestre que la neutralidad eléctrica llevará a que el nivel de Fermi se encontrará cerca de E_{Cr} .
 - Calcule la resistividad en este caso.