

INSTITUTO DE FÍSICA

FÍSICA DE SEMICONDUCTORES

Curso 2023

Práctico IV – Fenómenos de Transporte y otros temas.

Fecha de Entrega: 22 de Junio de 2023. ¹

Parte A: Efecto Hall.

Ejercicio N° 1 – Semiconductor con un solo tipo de portador:

Considere un semiconductor con un solo tipo de portadores de carga q y concentración n . En el modelo de Drude, incluyendo una fuerza Langevin $\vec{F}_d = -\frac{m^*}{\tau}\vec{v}$, siendo m^* la masa efectiva y τ un tiempo característico del proceso disipativo, considere el movimiento de estos portadores en presencia de un campo eléctrico arbitrario \vec{E} y un campo magnético $\vec{B} = B\vec{e}_z$, ambos uniformes y constantes.

a) Escribiendo la velocidad \vec{v} de los portadores en función de la densidad de corriente \vec{J} : $\vec{v} = \frac{1}{nq}\vec{J}$, encuentre el tensor de resistividad eléctrica $\vec{\rho}$ ($\vec{E} = \vec{\rho}\vec{J}$), e invirtiéndolo obtenga el tensor de conductividad eléctrica ($\vec{J} = \vec{\sigma}\vec{E}$).

b) Suponiendo el campo eléctrico \vec{E} y la densidad de corriente \vec{J} perpendiculares al campo magnético, demuestre que el ángulo θ (ángulo Hall) que forman entre sí está dado por:

$$\operatorname{tg}\theta = \frac{q}{|q|}\mu B$$

donde μ es la movilidad de los portadores.

c) Considere ahora una geometría de barra larga con sección rectangular, cuyo eje está dirigido en la dirección \vec{e}_x , de forma que la corriente solo puede circular en esta dirección. Encuentre:

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.

- i. La conductividad longitudinal σ definida por el cociente entre las componentes longitudinales de la densidad de corriente y el campo eléctrico: $J_x = \sigma E_x$.
- ii. Verifique que la conductividad anterior no presenta efectos de magnetorresistencia (dependencia de la conductividad con el campo magnético).
- iii. Encuentre el campo eléctrico transversal E_y y el coeficiente Hall R_H definido por:

$$R_H = \frac{E_y}{J_x B}$$

- d) En el caso que R_H sea positivo la conducción es debida a huecos. Para una barra de 2 cm de largo, 0.2 x 0.2 cm, un campo magnético $B = 0.1$ T y una corriente de 10 mA se mide una caída de potencial a través de la barra de 4.15 V y 0.21 mV transversalmente. Calcule el ángulo Hall, la movilidad, la conductividad y la densidad de portadores de este semiconductor.

Ejercicio N° 2 – Semiconductor con dos tipos de portadores:

Considere un semiconductor con dos tipos de portadores de carga. Las cargas, concentraciones y movilidades de cada tipo son q_1, n_1, μ_1 y q_2, n_2, μ_2 , respectivamente. Las cargas de los portadores, si bien pueden tener signos diferentes, tienen (en módulo) el mismo valor que la carga del electrón.

- a) A partir de los resultados del Ejercicio N° 1, escriba el tensor conductividad eléctrica.

NOTA: Puede ser útil dejar los resultados en función de los ángulos hall para cada tipo i (con $i = 1$ o 2) de carga:

$$\theta_i \approx \text{tg} \theta_i = \frac{q_i}{|q_i|} \mu_i B \ll 1.$$

- b) Para la geometría de la barra larga de la parte c) del Ejercicio N° 1, calcule en este caso la conductividad longitudinal σ y el coeficiente Hall R_H , en la aproximación de que los ángulos Hall sean pequeños. Aproxime hasta segundo orden en los mismos.
- c) Comparando con los resultados del Ejercicio N° 1 verifique que en este caso aparece magnetorresistencia que es siempre positiva (aumento de la resistencia con el campo magnético).
- d) En el caso de un semiconductor intrínseco (portadores de carga opuesta e iguales concentraciones) encuentre como queda el coeficiente Hall y verifique que:
- i. El signo del dicho coeficiente estará dado por el tipo de portador que tenga mayor movilidad.
 - ii. Este coeficiente solo será nulo si ambas movilidades son iguales. En este caso aún se tienen conductividades y magnetorresistencia no nulas.

- e) Discuta que sucederá con los portadores en la superficie transversal del material.

Parte B: Doblamiento de las Bandas.

Ejercicio N° 3 – Potencial en una Distribución Superficial de Carga:

Considere un semiconductor que termina abruptamente en una interface superficial. Los estados superficiales (defectos en forma general) contribuyen con estados en la banda prohibida de energías, los cuáles supondremos completamente ionizados. Esto genera una distribución superficial de carga $\rho(z)$, siendo z la dirección perpendicular a la interface.

- Si se modela la región superficial como una densidad de carga uniforme ρ_0 , de ancho d ; halle el potencial electrostático $\phi(z)$ que aparece si el sistema se encuentra en equilibrio. Relacione la diferencia de potencial entre el interior del semiconductor y la superficie con el ancho de esta y los demás parámetros relevantes del sistema.
- Considere una superficie expuesta al aire de GaAs tipo n a 300 K (en el que el número de portadores excitados es 10^{18} cm^{-3}). El nivel de Fermi en la superficie se curva 1 eV respecto al borde de la banda de conducción. Escriba las ecuaciones que determinan la forma del potencial $\phi(z)$ sin suponer que la densidad de carga sea uniforme. Haga aproximaciones razonables para la temperatura T (en caso sea necesario).
- (Opcional) Resuelva las ecuaciones numéricamente y grafique $\phi(z)$. Estudie como se modificarían las ecuaciones en distintos límites de temperatura.

Parte C: Movilidad.

Ejercicio N° 3 – Movilidad por impurezas:

Considere una impureza como centro dispersor de electrones de conducción. Supondremos que el potencial de dispersión puede modelarse por un potencial de Yukawa, que escribiremos como:

$$V(r) = -\frac{Z|q|}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{e^{-\frac{r}{L_D}}}{r}$$

donde $Z|q|$ es la carga de la impureza, ϵ_0 es la permitividad del vacío y ϵ es la permitividad relativa del material, r es la distancia de la partícula medida desde el centro dispersor (coordenadas esféricas) y L_D es la *longitud de Debye* que tiene en cuenta una longitud efectiva de acción la impureza debido al efecto de apantallamiento por otras cargas presentes en el semiconductor.

Suponiendo que la densidad (volumétrica) de centros dispersores es N , la sección eficaz de la colisión $\sigma_c = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin\theta d\theta$ siendo θ el ángulo que la partícula es deflectada

por la colisión, y v su velocidad (en módulo) mucho antes de la colisión; podemos afirmar que la tasa de colisiones (número de choques por unidad de tiempo) será:

$$\frac{1}{\tau_c} = N\sigma_e v$$

donde τ_c es una constante de tiempo involucrada en el proceso dispersivo.

La teoría de perturbaciones aplicada al problema dispersivo nos dice que:

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{Vm^*}{2\pi\hbar^2} |H_{k'k}| \right)^2$$

donde $V = N^{-1}$ es el volumen correspondiente a cada impureza, m^* es la masa efectiva y $H_{k'k}$ el elemento de matriz del potencial perturbativo en una colisión elástica que desvía el electrón incidente según \mathbf{k} a una dirección \mathbf{k}' , ambos de módulo k .

- a) Halle $H_{k'k}$ para el potencial de Yukawa (Coulomb con apantallamiento) y verifique que la dependencia en θ y k es del tipo:

$$H_{k'k} \propto \frac{1}{\left[2k \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \right]^2 + L_D^{-2}}$$

- b) En esta colisión, y a los efectos de hallar la movilidad cuántica de los electrones, se debe calcular la constante de tiempo y la sección eficaz de transferencia de momento, τ_m y σ_m (que se relacionan de la misma forma que τ_c y σ_c) donde esta última está definida como:

$$\sigma_m = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta)(1 - \cos\theta) \operatorname{sen}\theta d\theta$$

Calcule σ_m y estudie bajo que hipótesis puede suponerse proporcional a $E^{3/2}$, donde E es la energía de la partícula incidente.²

- c) Teniendo en cuenta que un semiconductor no degenerado, en que la distribución de portadores excitados de Fermi-Dirac, puede aproximarse por una distribución de Maxwell Boltzmann, exprese $\langle \tau_m \rangle$ el promedio estadístico de τ_m en forma integral. Vincule la movilidad electrónica con este promedio e intente calcular la integral involucrada.³
- d) (Opcional) Para un semiconductor de constante dieléctrica relativa 16; dopado con 10^{16} cm^{-3} donadores simples, calcule la movilidad entre 30 y 300 K, asumiendo una masa efectiva de 0.15 (relativa a la del electrón libre).

² - El resultado puede expresarse en función de un parámetro auxiliar $\beta = 2 k L_D$; proporcional a la velocidad de la partícula incidente

³ - Las aproximaciones involucradas suelen denominarse de Brooks-Herring y Conwell-Weisskopf.

Ejercicio N° 4 (*) – Dependencia de la Movilidad con la Temperatura.

- a) Demuestre que para un semiconductor no-degenerado en una banda completamente parabólica (de masa efectiva m^*) el tiempo característico de Drude, que aparece en la movilidad, puede calcularse como el valor medio del tiempo de relajación $\tau(E)$ (de la ecuación de transporte de Boltzmann, suponiendo la aproximación de tiempo de relajación, y que la tasa de dispersión depende de la energía E en lugar del momento cristalino) con una densidad de probabilidad que está dada por:

$$P(E) \propto E^{3/2} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$$

- b) ¿Cómo se modifica el resultado anterior en el caso de un semiconductor altamente degenerado?
- c) Suponga que a través de cálculos directos a partir de las tasas de transición se demuestra que el tiempo de relajación $\tau(E)$ tiene una dependencia potencial tanto en la energía E como en la temperatura T . Es decir: $\tau(E) \propto T^m E^n$. Demuestre entonces que, en un semiconductor no degenerado, la movilidad tendrá una dependencia en la temperatura de la forma T^{m+n} . ¿Cómo sería esta dependencia en el caso degenerado?
- d) Los dos procesos dispersivos más importantes en la mayoría de los semiconductores suelen ser la dispersión por impurezas y por fonones (acústicos que originan un potencial de deformación). Las dependencias de $\tau(E)$ correspondientes son como las de la parte c) anterior con $m = 0$, $n = 3/2$ para dispersión por impurezas y $m = -1$, $n = -1/2$ para fonones. Si las constantes de proporcionalidad respectivas son A y B , demuestre que existe una temperatura que maximiza la movilidad y calcúlela en función de esas constantes.
- e) Si el número de impurezas ionizadas aumenta:
- ¿Qué pasaría con la constante A ? ¿Aumenta o disminuye?
 - ¿Qué sucede con la movilidad máxima y la temperatura en que esta se da?

Parte D: Recombinación de Portadores.**Ejercicio N° 5 – Excitación y Relajación:**

Considere un semiconductor intrínseco; que inicialmente se encuentra en equilibrio a una temperatura T . Se generan portadores durante un intervalo de tiempo inicial, de forma que la tasa de generación de portadores por unidad de volumen depende del tiempo t como:

$$G(t) = A \exp\left(-\frac{t^2}{2(\Delta t)^2}\right)$$

donde $G(t)$ es el número de portadores excitados (desde la banda de valencia a la de conducción) por unidad de volumen y por unidad de tiempo, A es una constante y Δt es el ancho del “pulso” temporal que genera la excitación.

Asuma que los portadores están sometidos a un proceso de recombinación directa (aniquilación electrón-hueco) cuya tasa de recombinación está dada por:

$$R(t) = \frac{n(t) - n_0}{\tau}$$

donde $R(t)$ es el número de portadores que se recombinan por unidad de volumen por unidad de tiempo, $n(t)$ es la densidad volumétrica de portadores en el instante t , y n_0 es la densidad volumétrica inicial y τ el tiempo característico del proceso de recombinación.

Halle la dependencia temporal de la densidad volumétrica de portadores haciendo aproximaciones razonables si se supone que el pulso de excitación es muy corto comparado con la constante de tiempo de recombinación ($\tau \gg \Delta t$).

Parte F: Dependencia de la Energía del Gap con la Temperatura:

Ejercicio N° 6 (*) – Termodinámica de la Dependencia:

- a) Demuestre, utilizando las relaciones de Maxwell de la termodinámica, que la variación de la energía del gap E_g con la temperatura (en condiciones normales, es decir, presión P constante) puede escribirse como:

$$\left. \frac{\partial E_g}{\partial T} \right|_P = \left. \frac{\partial E_g}{\partial T} \right|_V - \frac{\alpha}{\beta} \left. \frac{\partial E_g}{\partial P} \right|_T$$

donde $\alpha = \left. \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial T} \right|_P$ es el coeficiente de expansión térmica y $\beta = -\left. \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \right|_T$ es la compresibilidad isoterma.

NOTA: El primer término suele interpretarse como de interacción electrón fonon y el segundo de expansión de la red.

- b) Analizando el signo de cada una de las cantidades que aparecen en la relación anterior concluya que (salvo en algunas condiciones anómalas que se dan en las sales de plomo) la energía del gap siempre decrece con la temperatura.

SUGERENCIA: El término de interacción fonon debe analizarse recordando que la energía del gap es básicamente el módulo de la componente de Fourier del pseudopotencial. Esta componente de Fourier se verá afectada por la temperatura (a volumen V constante) como la dependencia de la intensidad de los picos de difracción de rayos X con la temperatura. En este caso aparecerá un factor de Debye-Waller a la incertidumbre de la posición de los átomos debido a las vibraciones de la red suavizan el potencial. Para el término de expansión de la red se deberá apelar a la dependencia de los orbitales atómicos con la posición de equilibrio de los átomos como calculado por la hibridización sp^3 por el método tight-binding.

Ejercicio N° 7 (*) – Fórmula de Varshni:

Medidas experimentales realizadas sobre materiales semiconductores demuestran que la energía del gap decrece con el aumento de temperatura según la siguiente fórmula empírica

que fue propuesta por Varshni y reproduce los datos experimentales en la región de temperaturas T que van de 0 K a 400 K es:

$$\Delta E_g(T) = E_g(T) - E_g(0) = -\frac{aT^2}{T+b}$$

donde $\Delta E_g(T)$ es el corrimiento de la energía del gap $E_g(T)$ respecto a su valor $E_g(0)$ a 0 K; y las constantes a y b son dos parámetros de ajuste, ambos positivos y supuestos conocidos.

- a) Bosqueje la ecuación anterior suponiendo $b \ll T_0 = 300K$.
- b) Un modelo que justifica esta dependencia asume que el corrimiento $\Delta E_g(T)$ es debido a interacción entre estados electrónicos y vibraciones de la red (electrón-fonón), siendo la contribución de cada modo vibracional al corrimiento proporcional a la energía almacenada en dicho modo.
 - i. Calcule la dependencia funcional en T de $\Delta E_g(T)$ en este modelo en función de la constante de Boltzmann k_B , la energía media de los fonones $\hbar\Omega$ y una constante de proporcionalidad arbitraria.

NOTA: Asuma el modelo de Einstein para la relación de dispersión de los fonones y que el volumen V del material es constante.
 - ii. Calcule $\Delta E_g(T)$ en el límite $k_B T \gg \hbar\Omega$ (para este modelo) y compare con el límite $T \gg b$ de la fórmula de Varshni.
 - iii. Repita la comparación en el límite $T \rightarrow 0K$ discutiendo las similitudes y discrepancias.
- c) Estime como depende $\hbar\Omega$ con la masa isotópica de un cristal monoatómico de distintos isótopos de un mismo elemento (por ejemplo ^{70}Ge , ^{74}Ge y ^{76}Ge) y del resultado de la parte b deduzca qué influencia puede tener la masa isotópica en la energía del gap a muy bajas temperaturas.

NOTA: Se recuerda que la relación de dispersión de los fonones de un cristal monoatómico puede escribirse como:

$$\omega = \sqrt{\frac{4\gamma}{M}} \text{sen}\left(\frac{kc}{2}\right)$$

donde M es la masa del átomo isotópico y γ la constante de fuerza supuesta independiente de la masa y c la constante de red.