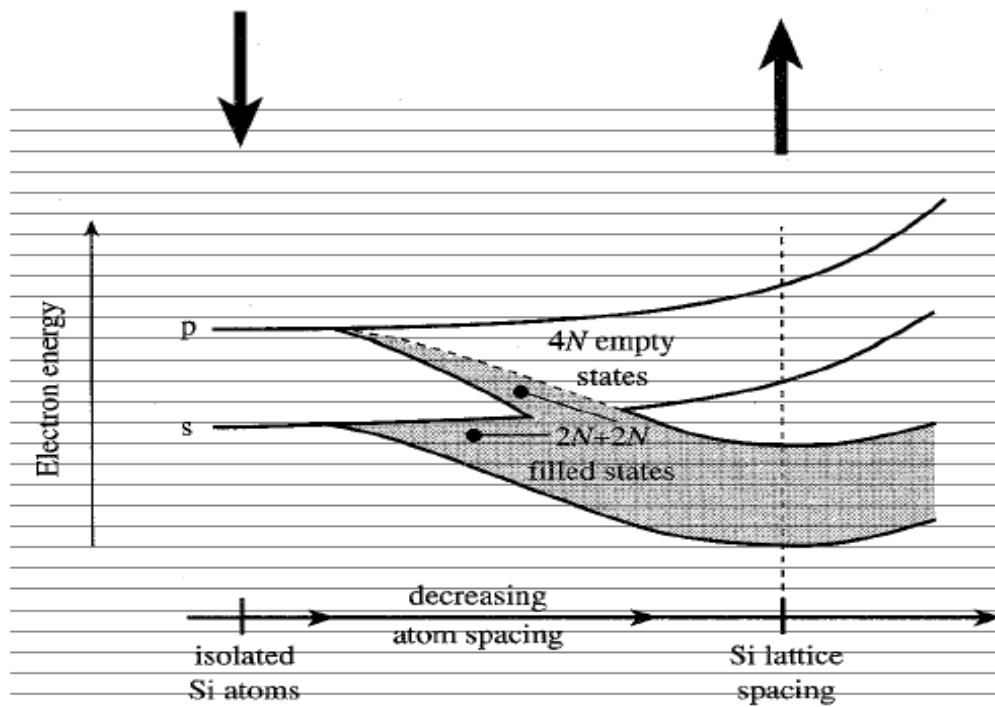
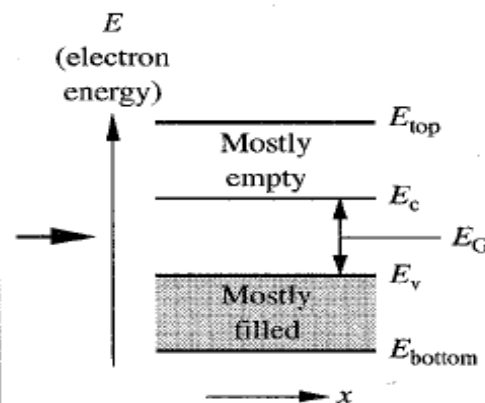
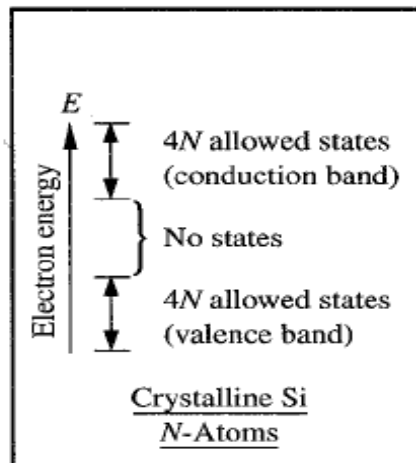
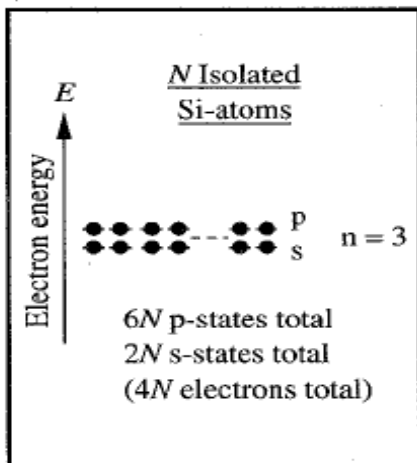


# Formazione delle bande di energia



# Calcolo formale: Equazione di Schrödinger

- L'equazione di Schrödinger è una relazione matematica che descrive il comportamento ondulatorio di una particella (elettrone)

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} \Psi = 0$$

- $E$  è l'energia totale,  $V$  l'energia potenziale,  $m$  la massa della particella
- ▽  $\Psi$  è la funzione d'onda dell'elettrone
- ▽  $\Psi\Psi^*dx$  è la probabilità di trovare l'elettrone nell'intervallo spaziale  $dx$ .

# Equazione di Schrödinger

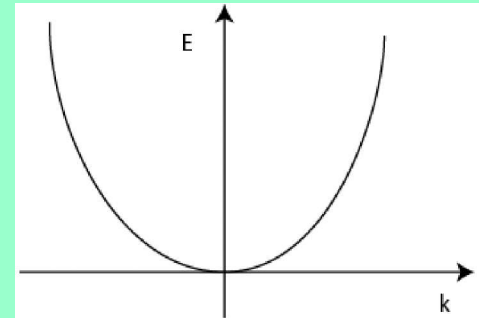
- per trovare la relazione esistente tra l'energia ed il momento degli elettroni in un semiconduttore occorre risolvere l'eq. di Schrödinger (EqSc)
- elettrone libero  
(nessuna interazione con ioni reticolo  $\Rightarrow V=0$  in EqSc)

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad \text{con } k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{e } p = \frac{h}{\lambda}$$

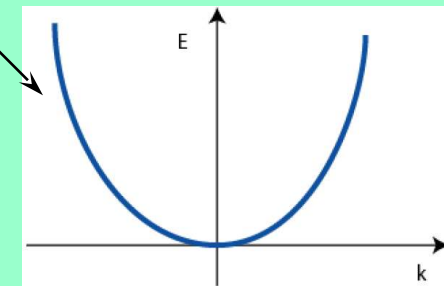
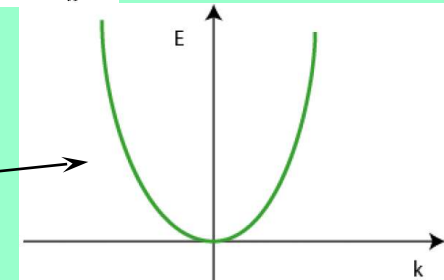
( $p$  momento dell'elettrone)

$$p = \hbar k \Rightarrow E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\frac{d^2 E}{dp^2} = \frac{1}{m} \Rightarrow m = m_e^* = \left( \frac{d^2 E}{dp^2} \right)^{-1} \quad \text{massa efficace}$$

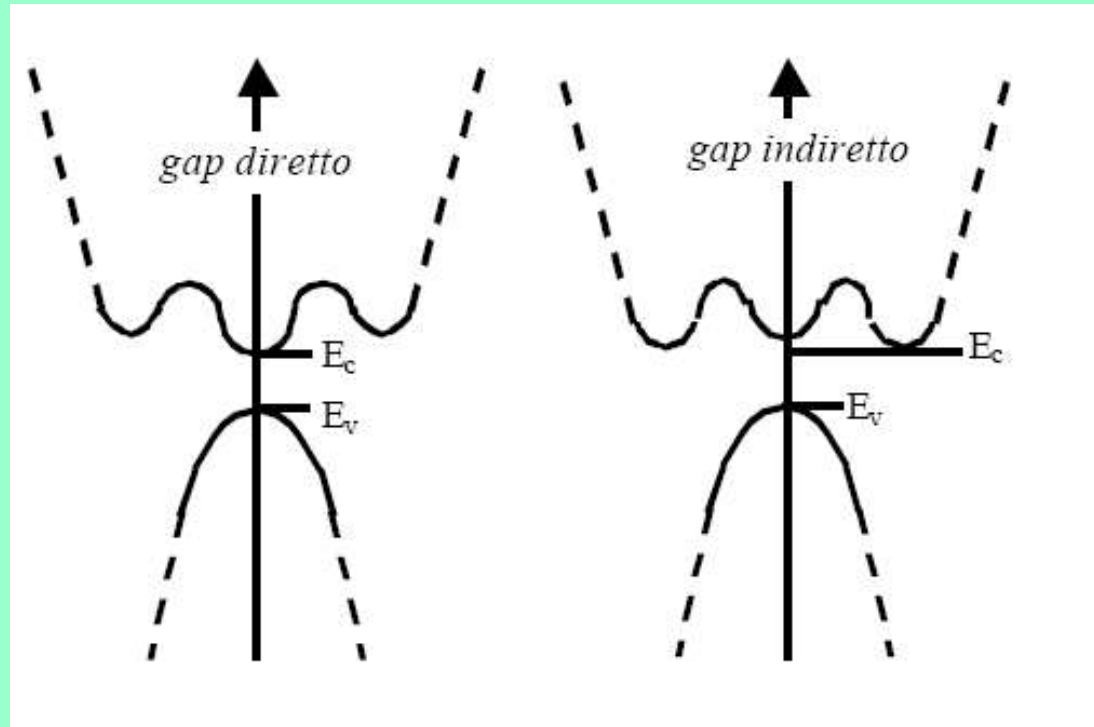
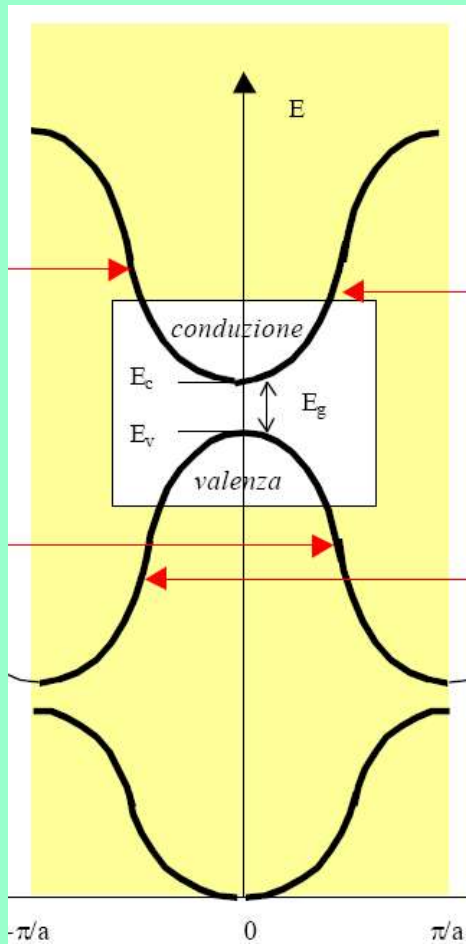


pesante  
leggera



- relazione parabolica tra energia e momento

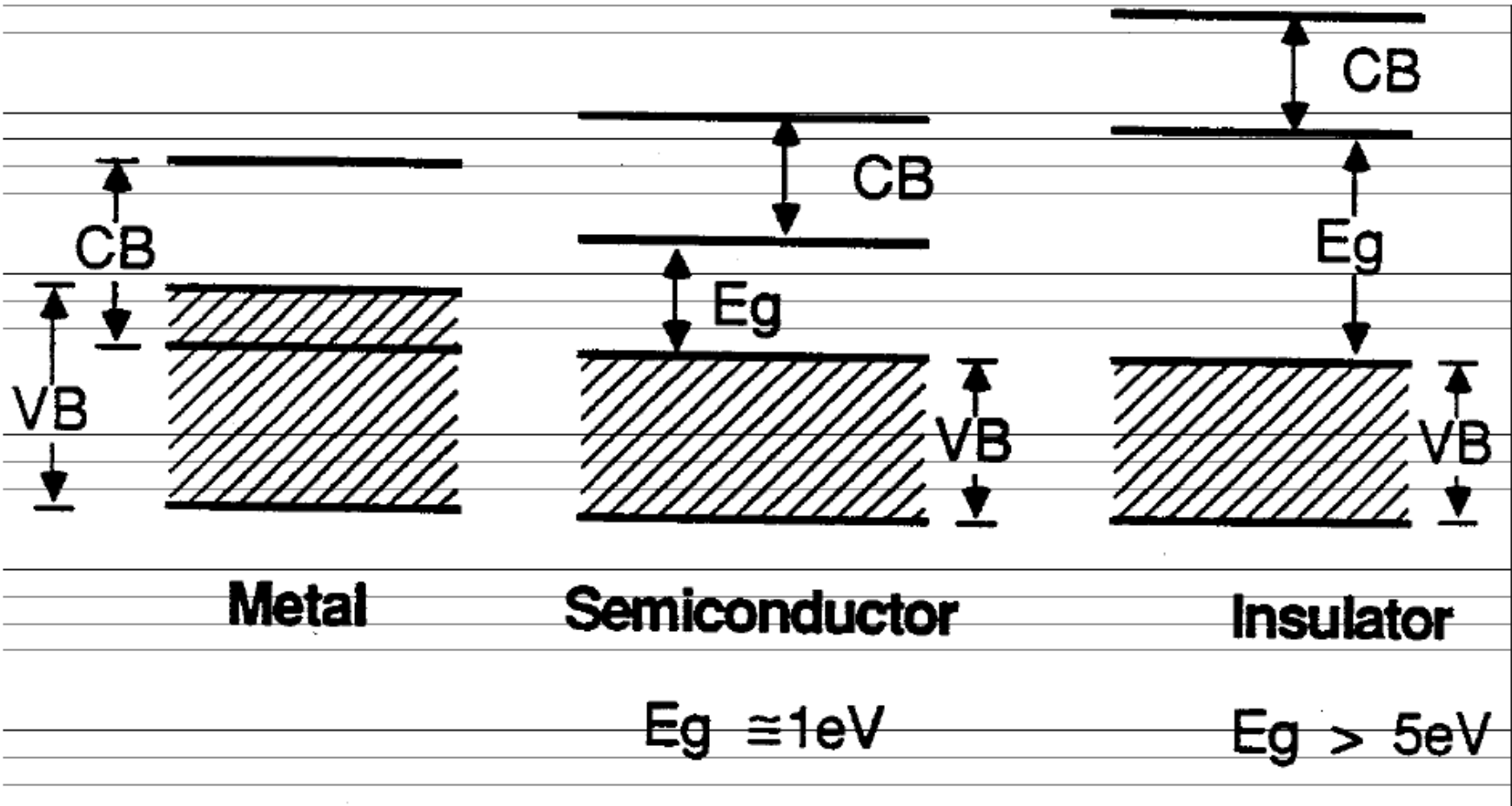
# Struttura a bande



**GaS**

**Si**

# Tipiche strutture a bande di energia a 0° K



# Gap di energia per il Silicio cristallino

- a temperatura ambiente (RT) l'ampiezza della banda proibita per il Si è **1.12 eV**

- in generale 
$$E_g(T) = 1.17 - \frac{4.73 \times 10^{-4} \times T^2}{T + 636}$$
 con  
con T in gradi Kelvin  
ed  $E_g$  in eV

- Il coefficiente di temperatura  $dE_g/dT$  è negativo, cioè l'ampiezza della banda proibita diminuisce al crescere della temperatura.

# Silicio in equilibrio termico: Concentrazione di portatori intrinseci

- Per predire, quantitativamente, il numero di elettroni (e lacune) liberi in un semiconduttore, occorre conoscere:
  2. La densità di stati permessi nella banda di energia
  3. La probabilità che questi stati siano occupati

# Densità degli stati

- $g_c(E)dE$  è la densità degli stati nella banda di conduzione compresa tra  $E$  e  $E+dE$
- analogamente  $g_v(E)dE$  è la densità di stati nella banda di valenza tra  $E$  e  $E+dE$
- dalla meccanica quantistica

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

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

- $m_n, m_p$  = massa efficace di elettroni e lacune
- $E_c, E_v$  = limite di banda di conduzione e valenza



# Probabilità di occupazione: distribuzione di Fermi-Dirac

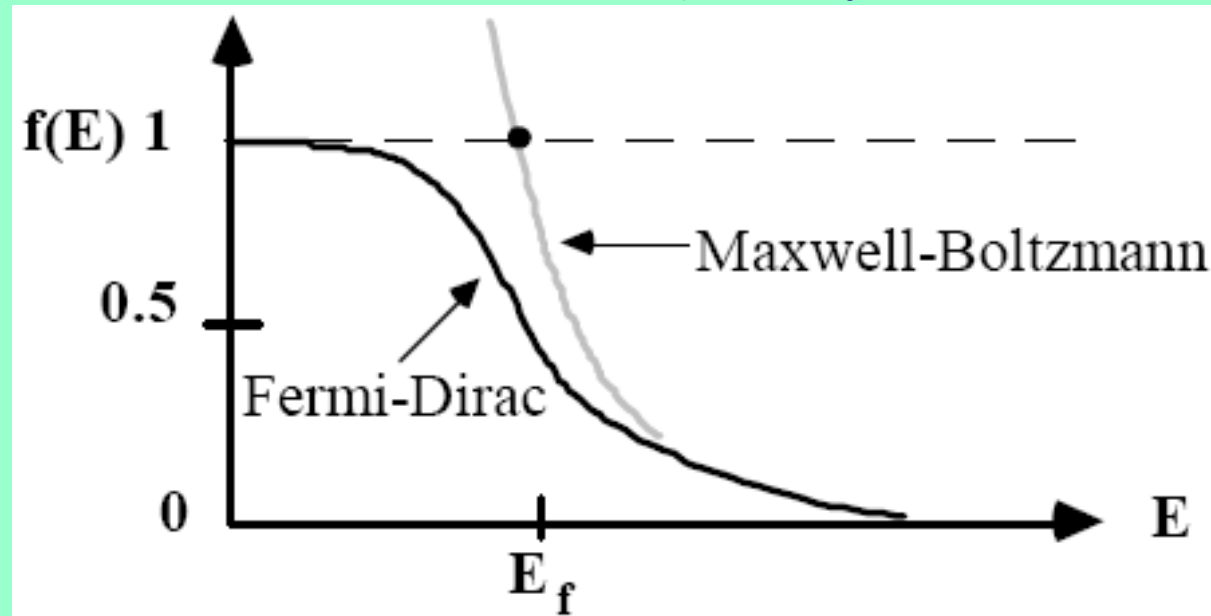
- La probabilità che uno stato di energia sia occupato da un elettrone è descritta dalla distribuzione di Fermi-Dirac

$$f_D(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_f)/kT}}$$

- essendo  $E_f$  il livello di energia per cui  $f_D(E_f) = 0.5$  (probabilità di occupazione pari al 50%)
- per  $E \gg E_f$   $f_D(E)$  tende alla statistica di Maxwell-Boltzmann

$$f_D(E) \gg e^{-(E - E_f)/kT} = f_M(E)$$

# Probabilità di occupazione: distribuzione di Fermi-Dirac

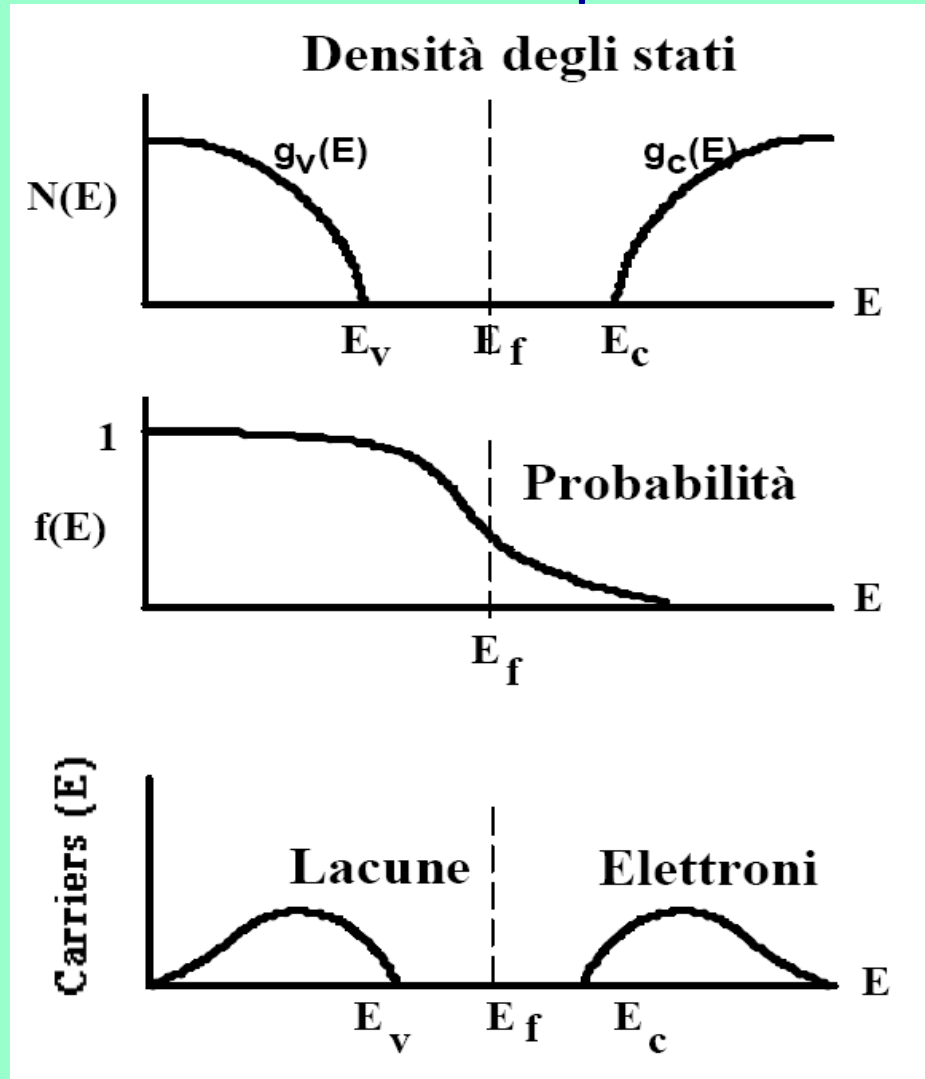


$$f_M(E) = e^{-\frac{(E - E_f)}{kT}}$$

- questa approssimazione è valida per semiconduttori non-degeneri. Quando un semiconduttore è degenero, cioè quando gli atomi droganti introdotti sono in concentrazione così elevata da interagire tra di loro, va usata  $f_D$ .

# Concentrazione portatori

- Calcoliamo la concentrazione di portatori liberi:



# Concentrazione elettroni

- In definitiva la concentrazione di elettroni liberi in banda di conduzione è data da:

$$\begin{aligned} n &= \int_{E_c}^{E_{\text{sup}}} g_c(E) f_D(E) dE \cong \int_0^{\infty} g_c(E) f_M(E) dE = \\ &= 2 \left( \frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{-(E_c - E_f)/kT} = N_C e^{-(E_c - E_f)/kT} \\ N_C &= \left( \frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{3/2} = \textit{densità efficace degli stati} \\ &\hspace{15em} \textit{in banda di conduzione} \\ &= 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3} \textit{ per Si a } 25 \text{ }^\circ\text{C} \end{aligned}$$

# Concentrazione lacune

- Analogamente la concentrazione di lacune libere in banda di valenza è data da:

$$p = \int_{E_{\text{inf}}}^{E_v} g_v(E) f_D(E) dE \cong \int_{-\infty}^{E_v} g_v(E) f_M(E) dE =$$

$$= 2 \left( \frac{2\pi m_p kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{-(E_f - E_v)/kT} = N_V e^{-(E_f - E_v)/kT}$$

$$N_V = \left( \frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{3/2} = \textit{densità efficace degli stati}$$

*in banda di valenza*

$$= 1.04 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3} \textit{ per Si a } 25 \text{ }^\circ\text{C}$$

# Concentrazione intrinseca di portatori

➤ Il tasso di eccitazione di elettroni in banda di conduzione (e cioè il tasso di generazione di una coppia e-h) è funzione della temperatura:

$$G = f_1(T)$$

➤ Il tasso di ricombinazione e-h è funzione della temperatura e della concentrazione di e ed h :

$$R = n p f_2(T)$$

➤ in equilibrio (condizioni stazionarie)

$$G = R \Rightarrow np = \frac{f_1(T)}{f_2(T)} = n_i p_i$$

$n_i = p_i =$  concentrazione intrinseca di elettroni (la cune)

$$n_i^2 = np = N_C e^{-(E_C - E_f)/kT} N_V e^{-(E_f - E_V)/kT}$$

$$= N_C N_V e^{-(E_C - E_V)/kT} =$$

$$= N_C N_V e^{-E_g/kT}$$

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_g/2kT}$$

# Legge dell'azione di massa

- in equilibrio (condizioni stazionarie)

$$G = R \quad \Rightarrow \quad np = \frac{f_1(T)}{f_2(T)} = n_i p_i$$

$n_i = p_i =$  concentrazione intrinseca di elettroni (la cune)

$$n_i^2 = np = N_C e^{-(E_C - E_f)/kT} N_V e^{-(E_f - E_V)/kT}$$

$$= N_C N_V e^{-(E_C - E_V)/kT} =$$

$$= N_C N_V e^{-E_g/kT}$$

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_g/2kT}$$

# Legge dell'azione di massa

- $n_i$  è funzione di  $T$  ed  $E_g$ . Sostituendo l'espressione di  $E_g$

$$n_i = 3.87 \times 10^{16} T^{3/2} e^{-(1.21 - \Delta E_g)/2kT}$$

essendo  $\Delta E_g = 7.1 \times 10^{-10} \sqrt{n_i/T}$

per il Si  $E_g = 1.21 \text{ eV}$  a  $T = 0^\circ \text{K}$

$$n_i \approx 1.45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3} \text{ per Si a } T = 25^\circ \text{C}$$

- $n_i$  è il parametro che determina le condizioni operative di un materiale semiconduttore (cioè il drogaggio deve essere  $\gg n_i$ )



# Livello di Fermi intrinseco

- dovendo essere  $n_i = n = p$  sulla base delle relazioni

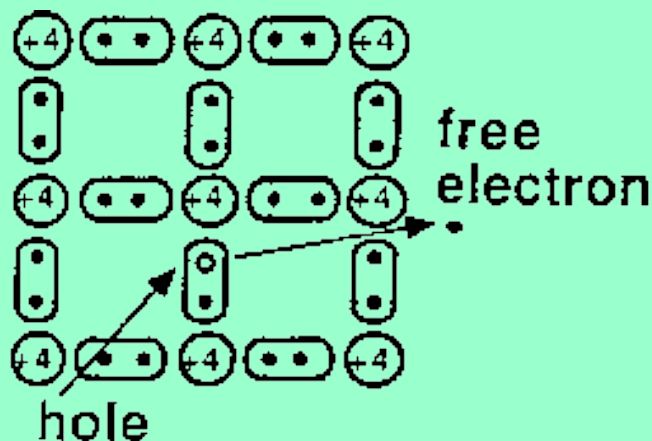
$$n = N_C e^{-(E_c - E_i)/kT} \quad \text{con} \quad N_C = \left( \frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

$$p = N_V e^{-(E_i - E_v)/kT} \quad \text{con} \quad N_V = \left( \frac{2\pi m_p kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

$$E_i = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \left( \frac{m_p}{m_n} \right) \approx \frac{E_c + E_v}{2}$$

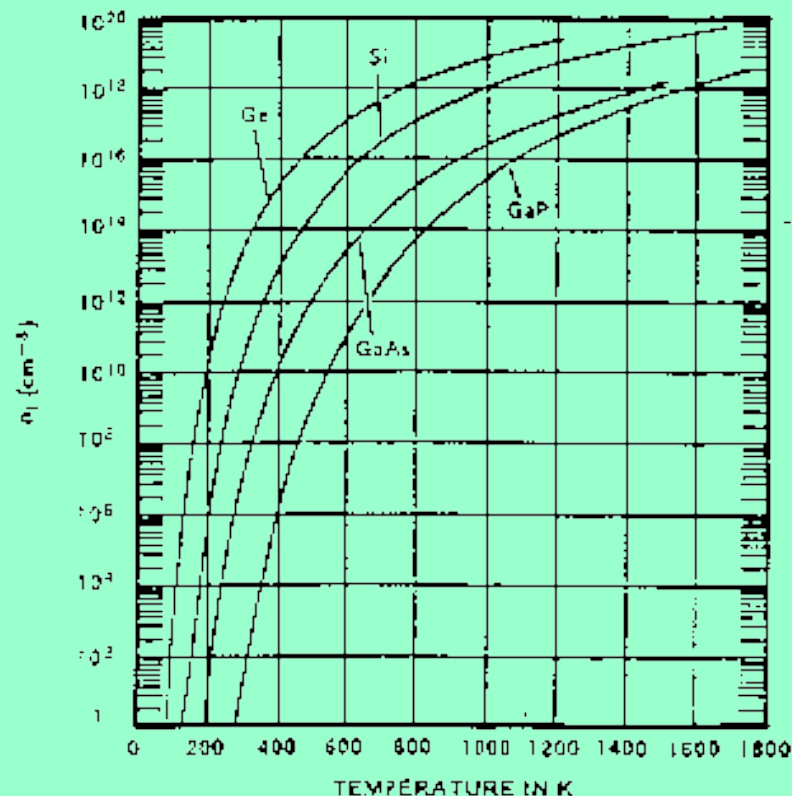
- $E_i$  rappresenta il valore assunto dal livello di Fermi  $E_f$  in un semiconduttore intrinseco (cioè non drogato)

# Silicio intrinseco (non-drogato)



Covalent (shared  $e^-$ ) bonds exist between Si atoms in a crystal. Since the  $e^-$  are loosely bound, some will be free at any  $T$ , creating hole electron pairs.

una lacuna (hole = mancanza di carica negativa) è assimilabile ad una carica positiva mobile !



$\text{Si}$ :

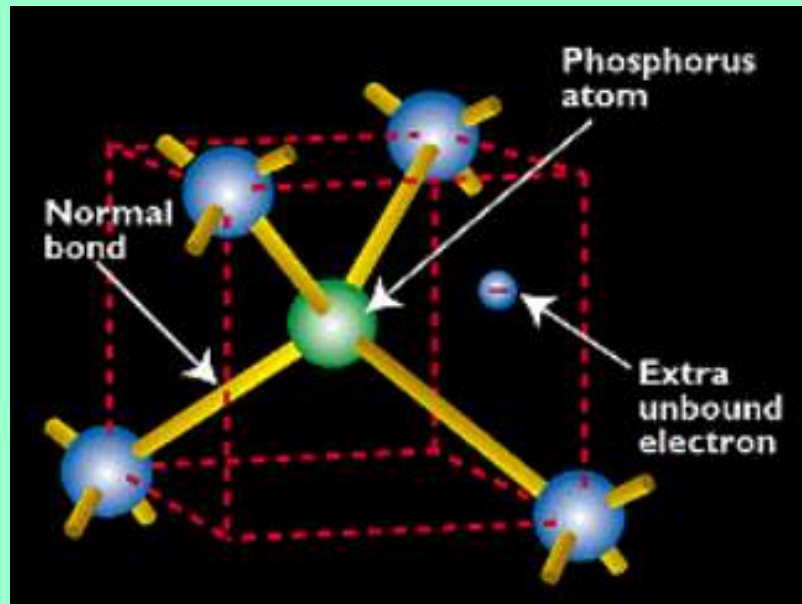
$$n_i = 3.9 \times 10^{16} T^{3/2} e^{-\frac{0.605\text{eV}}{kT}} / \text{cm}^3$$

$$n_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3} \text{ a RT}$$

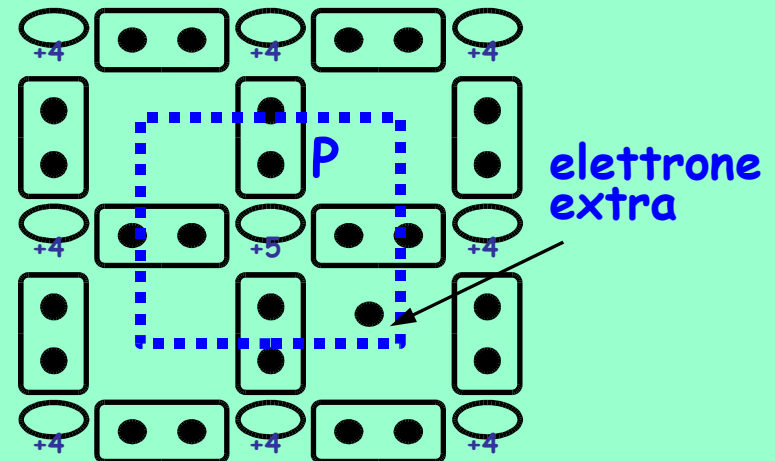
# Drogaggio di tipo n

Sostituendo un atomo di silicio con un atomo di elementi della V colonna del sistema periodico si crea un elettrone di conduzione.

Donori: P, As, Sb



rappresentazione 2D



Donore

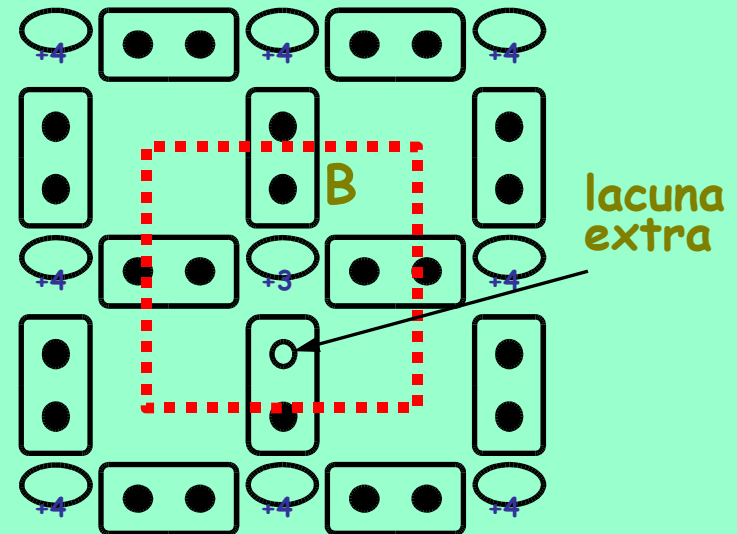
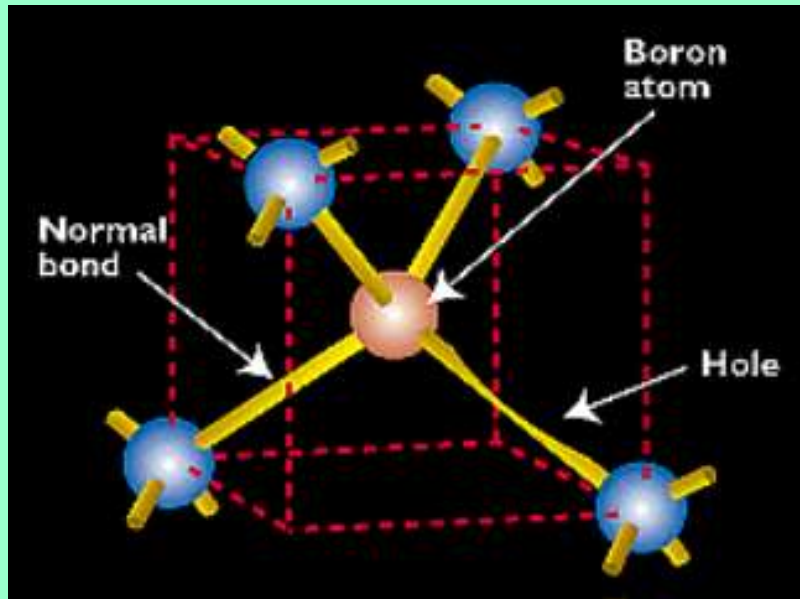
I droganti sono aggiunti per controllare le proprietà elettroniche del materiale. A temperatura ambiente (RT) tutti i donori sono ionizzati e cresce la conducibilità elettrica. Concentrazioni tipiche vanno da  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  a  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ .

# Drogaggio di tipo p

Sostituendo un atomo di silicio con un atomo di un elemento della III colonna del sistema periodico si crea una lacuna.

Accettori: B, In, Al, Ga

rappresentazione 2D



Accettore

I droganti sono aggiunti per controllare le proprietà elettroniche del materiale. A temperatura ambiente (RT) tutti gli accettori sono ionizzati e cresce la conducibilità elettrica. Concentrazioni tipiche vanno da  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  a  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ .

# Drogaggio: livello di Fermi estrinseco

- $N_d^+$  = densità di donori ionizzati (densità di livelli  $E_d$  non occupati da elettroni, finiti in banda di conduzione)
- $N_a^+$  = densità di accettori ionizzati (densità di livelli  $E_a$  occupati da elettroni che creano lacune in banda di valenza)



# Livello di Fermi estrinseco

➤ dalla condizione di neutralità della carica

$$n + N_a^- = p + N_d^+ \quad \text{essendo}$$

$$N_d^+ = N_d (1 - f_D(E)) = \frac{N_d}{1 + e^{(E_f - E_d)/kT}}$$

$$N_a^- = N_a f_D(E) = \frac{N_a}{1 + e^{(E_a - E_f)/kT}}$$

se  $E_a = E_f = E_d$  (ovvero  $T$  elevate)

$N_d^+ \approx N_d$  e  $N_a^- \approx N_a$  quindi  $n + N_a = p + N_d$  ed essendo  $np = n_i^2$

$$n = \frac{1}{2} \left[ \sqrt{(N_d - N_a)^2 + 4n_i^2} + (N_d - N_a) \right] \approx (N_d - N_a) \quad \text{per } (N_d - N_a) \gg n_i$$

per il silicio di tipo  $n$

# Livello di Fermi estrinseco

➤ poichè deve comunque sempre essere valida la relazione

$$n = N_C e^{-(E_c - E_f)/kT} = N_C e^{-(E_c - E_i)/kT} e^{-(E_i - E_f)/kT} = n_i e^{-(E_i - E_f)/kT} \text{ da cui}$$

$$E_f = E_i + kT \ln \frac{n}{n_i}$$

$$\text{analogamente } p = \frac{1}{2} \left[ \sqrt{(N_a - N_d)^2 + 4n_i^2} + (N_a - N_d) \right] \approx (N_a - N_d)$$

$$p = n_i e^{-(E_f - E_i)/kT} \text{ e, quindi } E_f = E_i + kT \ln \frac{p}{n_i} \text{ per il silicio di tipo } p$$

