

# DISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES

**JASPRIT SINGH**

*University of Michigan*

**Traducción**

**Efrén Alatorre Miguel**

*Licenciado en Ciencias Físicas*

*Facultad de Ciencias, UNAM*

**Revisión técnica**

**David González Maxinez**

*Profesor-investigador*

*Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores*

*de Monterrey, Campus Estado de México*

**McGRAW-HILL**

MÉXICO • BUENOS AIRES • CARACAS • GUATEMALA • LISBOA

MADRID • NUEVA YORK • PANAMÁ • SAN JUAN

SANTAFÉ DE BOGOTÁ • SANTIAGO • SÃO PAULO

AUCKLAND • HAMBURGO • LONDRES • MILÁN • MONTREAL

# *Electrones en cristales: estructura de bandas del semiconductor*

---

## UNA MIRADA AL CAPÍTULO

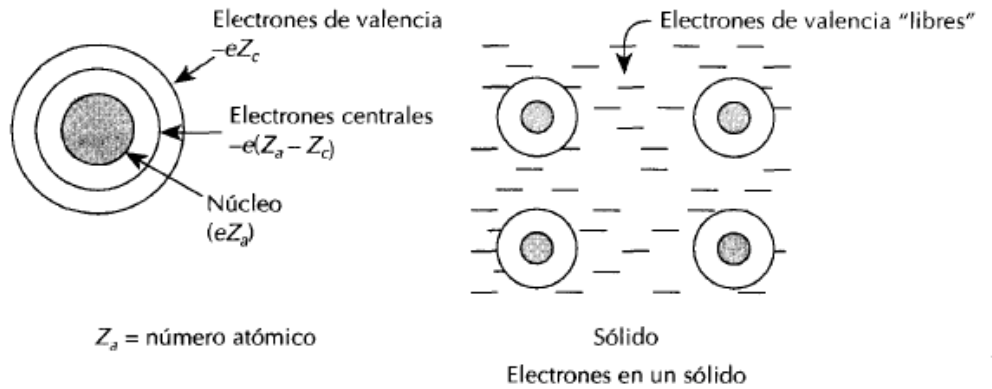
- ¿Por qué los problemas de estado sólido parecen tan difíciles? El gran número de electrones involucrados *Sección 2.1*
- Periodicidad de un cristal: característica esencial para tener sencillez y elegancia *Sección 2.2*
- Descripción de estructuras cristalinas importantes *Sección 2.3*
- Lo que hay de especial acerca de los electrones en una estructura periódica: el teorema de Bloch y el momento cristalino *Sección 2.4*
- ¿Qué hace que un material sea un metal, un semiconductor o un aislante? La valencia y la banda de conducción *Sección 2.5*
- Los electrones ausentes en la banda de valencia pueden conducir corriente: el concepto de los huecos *Sección 2.6*
- La estructura de bandas de algunos semiconductores importantes *Sección 2.7*
- ¿Pueden modificarse las estructuras de bandas? Sí, mediante el uso de aleaciones y barreras cuánticas *Sección 2.8*

---

## 2.1 EL RETO DE LA ELECTRÓNICA DE ESTADO SÓLIDO

—> En los dispositivos semiconductores, sean electrónicos u optoelectrónicos, estamos interesados en el comportamiento de un número muy grande de electrones cargados negativamente que se mueven a través de iones fijos cargados positivamente. En general, es muy difícil resolver un problema donde hay un gran número de partículas en interacción. Esto es cierto incluso en la mecánica clásica, donde se necesitan computadoras poderosas para calcular con precisión las órbitas de los planetas y sus lunas. El problema mecánico-cuántico es todavía más difícil.

Para apreciar la enormidad del problema examinemos la densidad del número de electrones que intervienen. Un elemento contiene  $6.022 \times 10^{23}$  átomos por mol (el número de Avogadro). Si  $\rho$  es la densidad del material, el número de moles por unidad de volumen es



**Figura 2.1** Imagen conceptual de un átomo mostrando el núcleo con carga  $eZ_a$ , los electrones centrales y los electrones de valencia. En un sólido, los electrones de valencia están "libres" y son capaces de conducción de carga. La concentración de electrones en los sólidos es bastante alta.

$\rho/A$ , donde  $A$  es la masa atómica. Supongamos ahora que el número de electrones que se encuentran libres para conducir corriente es  $Z_c$ , donde  $Z_c$  es el número de electrones en la capa más externa (es decir, la valencia del elemento) del átomo, como se ilustra en la figura 2.1. La densidad de electrones para los electrones de conducción es ahora

$$n = 6.022 \times 10^{23} \frac{Z_c \rho}{A} \tag{2.1}$$

Para la mayor parte de los materiales, este número es aproximadamente  $10^{23} \text{ cm}^{-3}$ . Hay una gigantesca densidad de electrones de conducción libres en el material. Se puede definir un radio promedio  $r$  de un volumen esférico por electrón mediante

$$\frac{4\pi r^3}{3} = \frac{1}{n}$$

o

$$r = \left( \frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} \tag{2.2}$$

¡Este radio es de 1-2 Å para la mayoría de los materiales!

¿Cómo se va a resolver un problema tan complejo? En verdad, este problema no se podría resolver si no hubiera una característica de simplificación en el sistema. Por fortuna, existe. Esta característica es la simetría y el orden presente en la estructura de los semiconductores. Los electrones no se mueven a través de una distribución aleatoria de iones, sino a través de una bien definida distribución con arreglo periódico. Los semiconductores en que estamos interesados tienen estructuras cristalinas que, como se verá, están dotadas con un

gran orden y periodicidad. Esta periodicidad permitirá reducir el gran número de electrones en los semiconductores, con lo que se tendrá un problema mucho más manejable. Así, mientras la mayor parte de las propiedades físicas de los cristales están muy bien definidas, para los materiales amorfos o no cristalinos incluso las propiedades simples no son claras. En realidad, es difícil concebir qué sería de la física de estado sólido y de la electrónica de estado sólido si los sólidos no se presentaran como cristales. El primer paso para comprender los semiconductores es comprender la periodicidad subyacente de los cristales.

## 2.2 PERIODICIDAD DE UN CRISTAL

→ Los cristales están hechos de bloques idénticos; estos bloques son de un átomo o un grupo de átomos. Mientras que en los cristales “naturales” la simetría cristalina está fija por naturaleza, los nuevos avances en las técnicas de crecimiento o formación de cristales han permitido a los científicos producir cristales artificiales con estructura cristalina modificada. Estos avances dependen de la capacidad de colocar capas atómicas con control y precisión exactos durante la formación, lo cual conduce a las “superredes”. La periodicidad subyacente de los cristales es la clave por la que se controlan las propiedades de los electrones dentro del material. De este modo, al alterar de manera artificial, la estructura cristalina, se tiene la capacidad de alterar las propiedades electrónicas.

La propiedad intrínseca de un cristal es que el medio ambiente alrededor de un átomo o átomos dados es exactamente igual al entorno alrededor de otro átomo o átomos. El bloque de construcción que se repite infinitamente para producir el cristal puede ser bastante sencillo, como un solo átomo de muchos metales (cobre, oro, aluminio, etc.), o podría ser bastante complejo (como en el caso de algunas proteínas). En las superredes hechas por el hombre, el número puede ser arbitrario. Para casi todos los *semiconductores* “naturales”, el bloque de construcción consiste en dos átomos. Para comprender y definir la estructura cristalina, se presentan dos conceptos importantes.

La *red (lattice)* representa un conjunto de puntos en el espacio que forman una estructura periódica. Cada punto tiene exactamente el mismo entorno. La red es por sí misma una abstracción matemática. Un bloque de construcción de átomos denominado *base* se adjunta luego a cada punto de la red, lo que produce la estructura cristalina.

Una propiedad importante de una red es la capacidad para definir tres vectores  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$ , de manera que cualquier punto  $\mathbf{R}'$  de la red puede obtenerse de cualquier otro punto  $\mathbf{R}$  de la misma red por medio de una traslación

$$\mathbf{R}' = \mathbf{R} + m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3 \quad (2.3)$$

La descripción del electrón en el semiconductor tiene que realizarse por medio de la ecuación de Schrödinger

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(r) \right] \psi(r) = E\psi(r) \quad (2.11)$$

donde  $U(r)$  es el potencial de fondo que ven los electrones. Debido a la naturaleza cristalina del material, el potencial  $U(r)$  tiene la misma periodicidad,  $R$ , que la red

$$U(r) = U(r + R) \quad (2.12)$$

Recordemos del capítulo 1 (sección 1.4) que si el potencial de fondo es cero, las funciones del electrón en un volumen  $V$  son

$$\psi(r) = \frac{e^{ik \cdot r}}{\sqrt{V}} \quad (2.13)$$

y el momento y la energía del electrón son

$$p = \hbar k \quad (2.14)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.15)$$

La función de onda se dispersa en la muestra completa y tiene la misma probabilidad ( $\psi^* \psi$ ) en cada punto del espacio. Examinemos el cristal periódico. Esperamos que la *probabilidad del electrón sea la misma en todas las celdas unitarias del cristal debido a que cada celda es idéntica*. Si el potencial fuera aleatorio, éste podría no ser el caso, como se muestra esquemáticamente en la figura 2.8. En realidad, el resultado esperado es correcto y se consigue en forma matemática por el teorema de Bloch. El teorema de Bloch establece que las eigenfunciones de la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico es el producto de una onda plana  $e^{ik \cdot r}$  por una función  $u_k(r)$ , la cual tiene la *misma periodicidad que el potencial periódico*. De este modo,

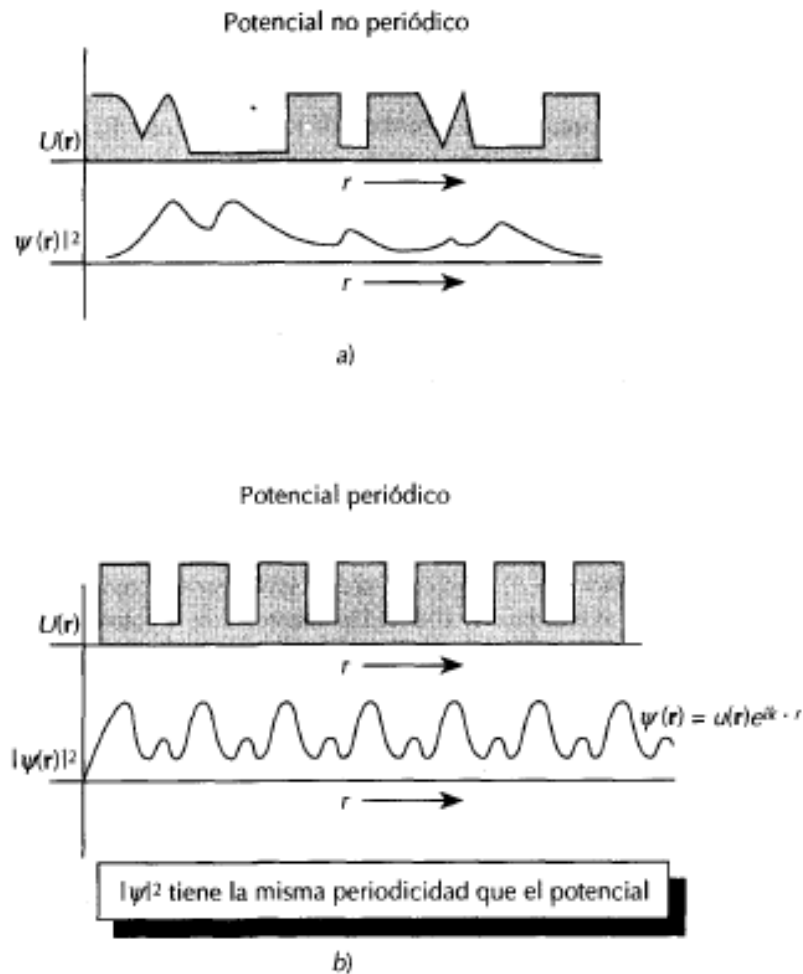
$$\psi_k(r) = e^{ik \cdot r} u_k(r) \quad (2.16)$$

es la forma de la función electrónica. La parte periódica de la "celda"  $u_k(r)$  tiene la misma periodicidad del cristal, es decir,

$$u_k(r) = u_k(r + R) \quad (2.17)$$

La función de onda tiene la propiedad

$$\begin{aligned} \psi_k(r + R) &= e^{ik \cdot (r + R)} u_k(r + R) = e^{ik \cdot r} u_k(r) e^{ik \cdot R} \\ &= e^{ik \cdot R} \psi_k(r) \end{aligned} \quad (2.18)$$



**Figura 2.8**

a) Potencial y valor de probabilidad del electrón de una función de onda electrónica típica en un material aleatorio. b) Efecto de un potencial de fondo periódico sobre una función de onda electrónica. En el caso del potencial periódico,  $|\psi|^2$  tiene la misma periodicidad espacial que el potencial. Esto pone una restricción especial sobre  $\psi(r)$  de acuerdo con el teorema de Bloch.

Puede ser de importancia advertir que el teorema de Bloch *no* asegura que la *función de onda* del electrón sea periódica en el espacio, y, de hecho, la función de onda cambia de una

celda unitaria a otra. Sin embargo, la *probabilidad* de hallar el electrón en cada celda (es decir,  $|\psi|^2$ ) es periódica, como se esperaba. Esta situación se ilustra en la figura 2.8b.

Mientras la solución de la ecuación de Schrödinger (ecuación 2.11) es aún bastante compleja y requiere de un detallado conocimiento de  $U(r)$ , el uso del teorema de Bloch, que describe la forma general del estado electrónico, hace más tratable el problema.

### 2.4.1 El modelo de Kronig-Penney para la estructura de bandas

→ Un modelo muy útil para comprender cómo se comportan los electrones dentro de los materiales cristalinos es el modelo de Kronig-Penney. El modelo permite calcular la energía de los electrones como una función del parámetro  $k$  que aparece en el teorema de Bloch. Esta relación, llamada la relación o la estructura de bandas  $E-k$  es muy importante para el entendimiento de los fenómenos electrónicos y optoelectrónicos.

El modelo de Kronig-Penney representa el potencial periódico de fondo que ven los electrones en el cristal como un potencial simple mostrado en la figura 2.9. Centremos la atención en el problema unidimensional puesto que sobre todo nos interesa un modelo conceptual simple. El potencial unidimensional tiene la forma

$$\begin{aligned} U(x) &= 0 & 0 \leq x \leq a \\ &= U_0 & -b \leq x \leq 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

El potencial se repite periódicamente, como se ilustra en la figura 2.9. La distancia de periodicidad es  $d (= a + b)$ . Ya que el potencial es periódico, la función de onda del electrón debería satisfacer el teorema de Bloch. De acuerdo con la ecuación 2.18 deberíamos obtener

$$\psi(x + d) = e^{i\phi} \psi(x) \quad (2.20)$$

donde

$$\phi = k_x d$$

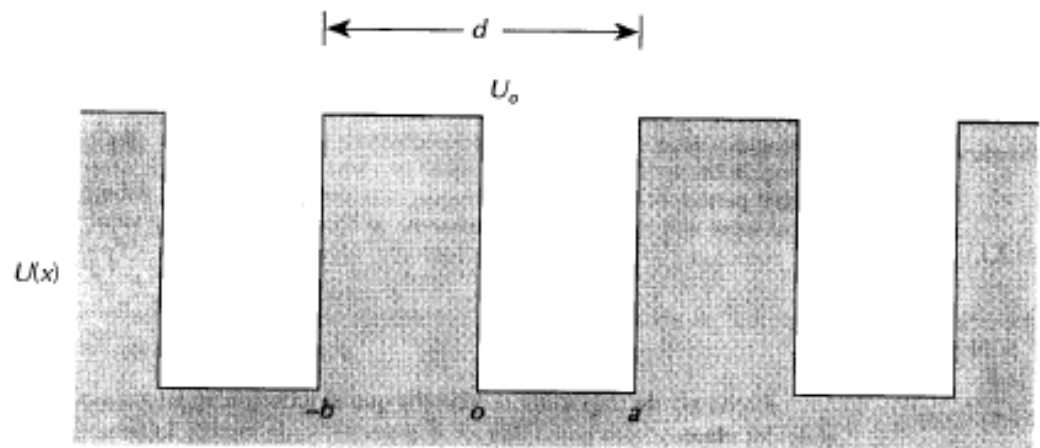


Figura 2.9

El potencial periódico utilizado para estudiar la estructura de bandas en el modelo de Kronig-Penney. El potencial varía entre 0 y  $U_0$ , como se ilustra, y tiene una periodicidad de  $d$ .

El concepto de bandas permitidas de energía separadas por bandas de separación es fundamental para la comprensión de los semiconductores. Nótese que en ausencia del potencial periódico de fondo, no hay regiones de energía prohibidas. Sólo cuando el electrón se introduce en un cristal hace que su energía vea esas bandas de energía prohibida. Antes de discutir el significado de las bandas permitidas y de las bandas prohibidas, será útil examinar otro modelo simple para la estructura de bandas.

---

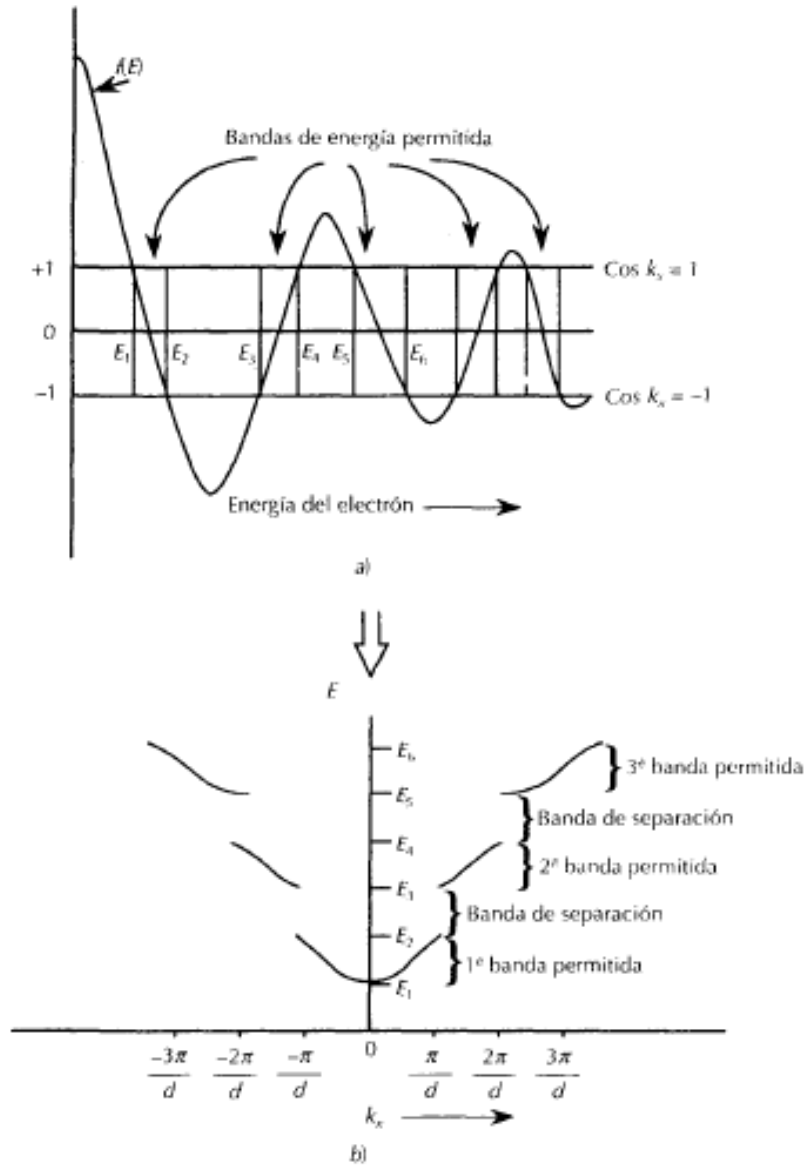
#### 2.4.2 De los niveles atómicos a las bandas

—> En el capítulo 1, sección 1.3.3, hemos discutido cómo cuando un electrón ve la interacción de Coulomb desde un núcleo, el espectro de energía del electrón tiene niveles de energía discretos. En ese estado atómico, si hacemos uso de la terminología de las bandas permitidas y las bandas de separación, las primeras serían infinitesimalmente estrechas, mientras las prohibidas serían bastante anchas, como se ilustra en la figura 2.11.

Si los átomos se conjuntan para formar un cristal, el electrón sobre un átomo comienza a ver los núcleos vecinos y los niveles discretos comienzan a ensancharse hasta que al fin se comienzan a obtener bandas, como se muestra en forma esquemática en la figura 2.11.

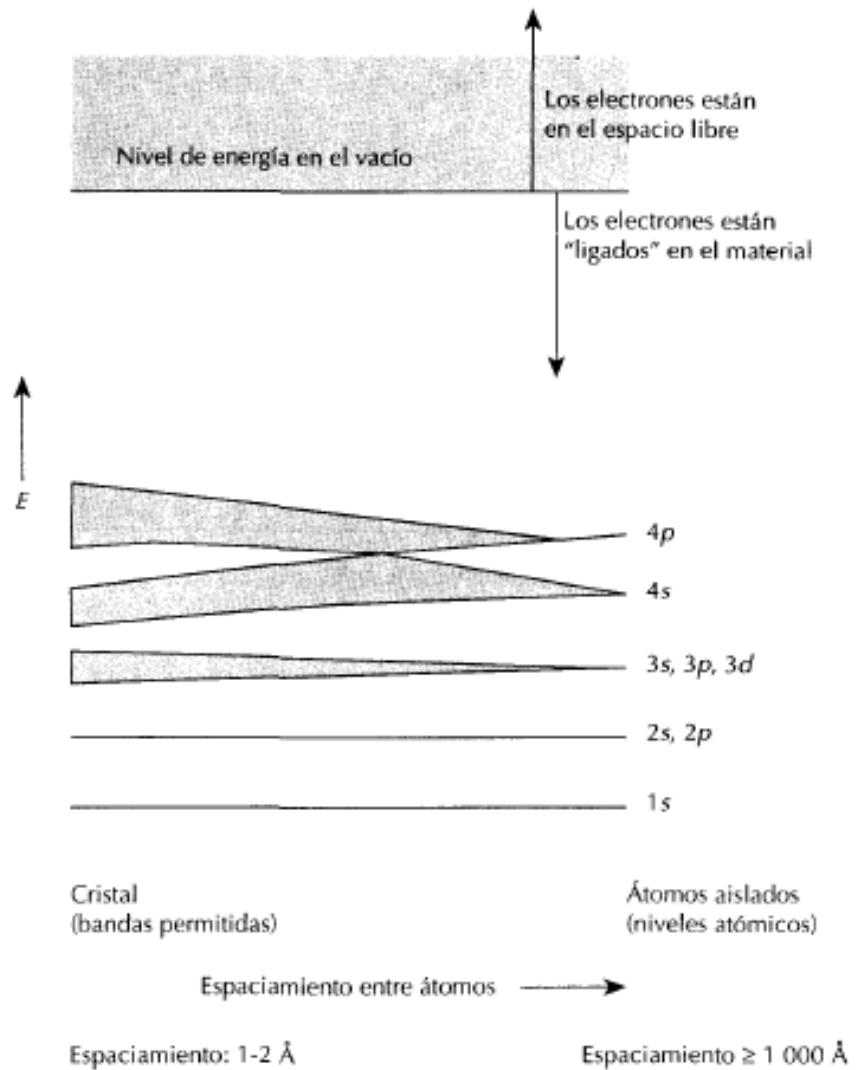
Los niveles de energía permitidos (es decir, las soluciones de la ecuación 2.11) en general no son continuos como en el caso de los electrones libres, pero tienen *regiones donde no hay valores de energía permitidos*. Esto significa que el electrón no puede ir a través del semiconductor en estas “brechas”. Para apreciar la presencia de estas “bandas permitidas” y “bandas prohibidas”, examinemos la estructura atómica de algunos de los elementos que conforman diversos semiconductores. Para entender esta notación revisemos nuestro análisis del capítulo 1 sobre el problema del átomo de hidrógeno.





**Figura 2.10**

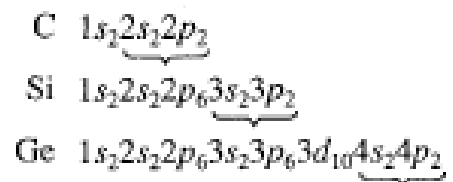
a) Solución gráfica para obtener los niveles permitidos de energía. La función  $\cos(k_x d)$  se grafica como una función de  $E$ . Solamente son permitidas las energías para las cuales  $\cos(k_x d)$  cae entre  $+1$  y  $-1$ . b) Las bandas permitidas y prohibidas se grafican en la relación  $E$  vs.  $k_x$  mediante los resultados de la figura a). La descripción  $E - k$  resultante se denomina estructura de bandas.



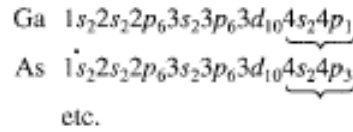
**Figura 2.11**

Esquema de cómo se forman las bandas permitidas y prohibidas. Cuando el espaciamiento entre los átomos es grande, los niveles permitidos son discretos. A medida que los átomos se acercan más, los niveles de energía del electrón interactúan entre sí formando complicadas bandas. Los niveles centrales profundos son relativamente poco afectados, pero los niveles más altos inciden en las bandas.

### Semiconductores IV



## Semiconductores III-V



Las llaves bajo cada estructura atómica representan los electrones en la capa más externa que están ligados tan débilmente al átomo individual, que cuando los átomos se juntan para formar el cristal, estos electrones exteriores forman una serie de bandas permitidas separadas por una banda prohibida, como se muestra en la figura 2.11. Por otra parte, los electrones centrales están tan estrechamente ligados que incluso en el cristal están inmóviles para todo propósito práctico. De este modo las propiedades de los semiconductores son determinadas esencialmente por los electrones de valencia más externos.

Los semiconductores como el Si, el Ge, el C son llamados semiconductores elementales y están hechos de átomos del grupo IV de la tabla periódica. En los semiconductores como el GaAs, InAs, CdTe, etc., intervienen átomos de los grupos III y V o de los grupos II y VI, y se conocen como semiconductores compuestos.

---

**2.4.3 El momento del cristal**

—> ¿Cuál es el significado del vector  $\mathbf{k}$  que aparece en la función de onda del electrón en el teorema de Bloch? Para el electrón de espacio libre, la  $\mathbf{k}$  está relacionada con el momento del electrón mediante  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ . Para los electrones que se mueven en el espacio libre hay dos importantes leyes que se utilizan para describir sus propiedades: *i*) la segunda ley de Newton del movimiento, que nos dice cómo la trayectoria del electrón evoluciona en presencia de una fuerza externa, y *ii*) la ley de la conservación del momento, que nos permite determinar la trayectoria del electrón cuando se tiene una colisión. Obviamente estamos interesados en averiguar cuáles son las leyes análogas cuando un electrón se encuentra dentro de un cristal y no en el espacio libre.

La cantidad  $\hbar\mathbf{k}$  desempeña exactamente el mismo papel para el electrón en el semiconductor perfecto como un "momento". Sin embargo,  $\hbar\mathbf{k}$  sólo reacciona a las fuerzas externas tales como un campo eléctrico como si fuera el momento del electrón. No es el momento real del electrón y se denomina momento del cristal porque incluye el efecto de los átomos en el cristal sobre los electrones. Examinemos la correspondencia de las ecuaciones satisfechas por el momento del cristal del electrón y el momento del electrón en el espacio libre:

**Relaciones de momento del electrón:**

$$\text{Espacio libre: } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.31)$$

$$\text{Cristal: } E = E(k) \quad (2.32)$$

La relación entre  $E$  y  $k$  en el material es la estructura de bandas del semiconductor.

**Ecuaciones de movimiento (en ausencia de cualquier colisión):**

Espacio libre: $\frac{dp}{dt} = \frac{\hbar dk}{dt} = F_{\text{ext}}$  Cristal: $\frac{\hbar dk}{dt} = F_{\text{ext}}$	(2.33)
--	--------

**Colisiones de electrones:**

Espacio libre: El momento se conserva en las colisiones (2.34)

Cristal: El momento del cristal se conserva en las colisiones (2.35)

En realidad, hay algunos casos raros de procesos de dispersión en semiconductores donde no se conserva el momento. Sin embargo, para la mayoría de los casos de interés, el momento se conserva.

Así, el único efecto del cristal es el de modificar la relación  $E$  vs.  $k$  que puede ser bastante complicada para semiconductores reales. El vector  $k$  para el electrón está relacionado con la longitud de onda  $\lambda$  de la función de onda del electrón mediante

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.36)$$

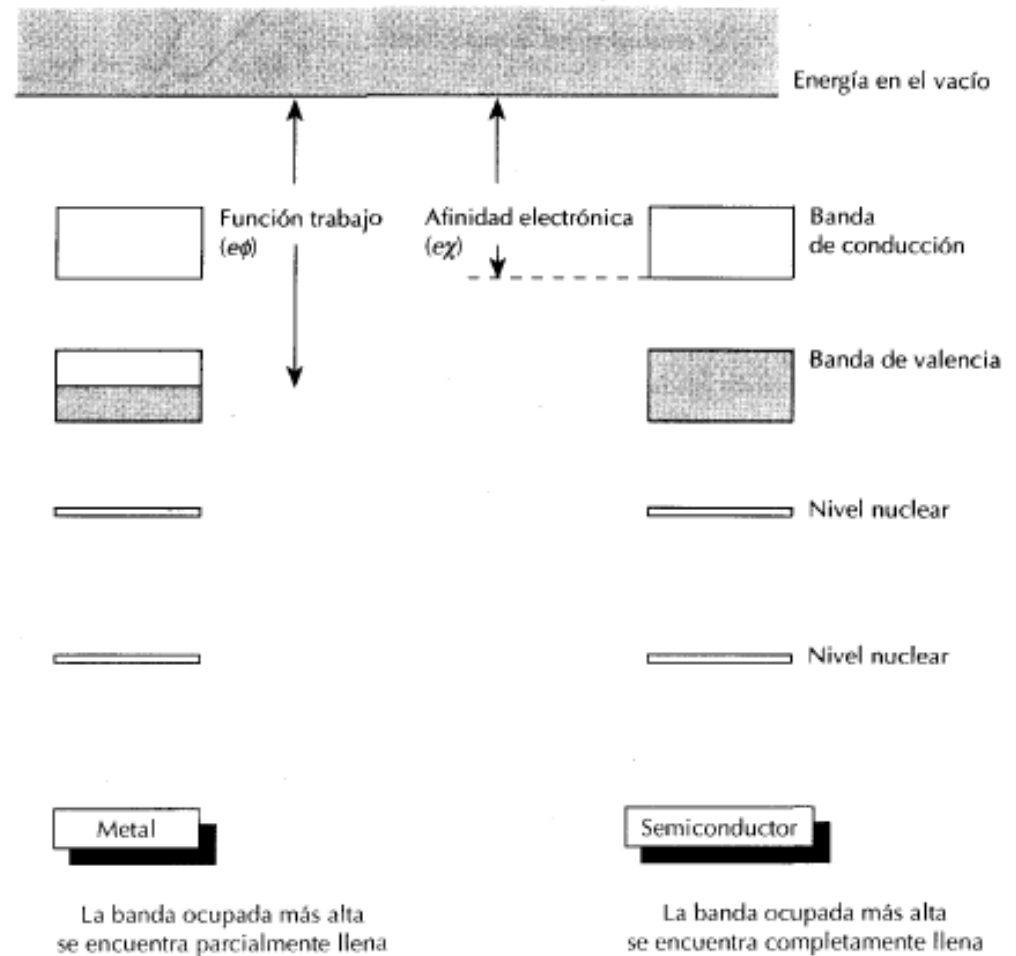
La longitud de onda más corta que se permite en un cristal está gobernada por el espaciado entre los puntos de la red en el espacio. De este modo la longitud de onda abarca desde infinito hasta las distancias del espaciado de la red. El valor de  $k$  varía en forma correspondiente desde 0 hasta algunos valores finitos determinados por el espaciado de la red. En la red fcc, que es la red para la mayor parte de los semiconductores, los valores del vector  $k$  se confinan de este modo a un volumen llamado zona de Brillouin. Esta zona de Brillouin se ilustra en la figura 2.12. El origen de dicha zona está en  $k = (0, 0, 0)$  y a este punto se le denomina el punto  $\Gamma$ . Hay otros puntos en la zona de Brillouin que ocurren en puntos de alta simetría. Todos ellos son denotados mediante notaciones estándar y están dados en la figura 2.12. Estos puntos son importantes debido a que los bordes de las bandas permitidas generalmente se presentan en valores  $k$  correspondientes a estos puntos.

## 2.5 METALES, SEMICONDUCTORES Y AISLANTES

—> Hemos discutido en la sección 2.4 que la solución del problema del electrón en un cristal proporciona una relación  $E$  vs.  $k$  que tiene regiones de bandas permitidas separadas por brechas prohibidas. Ahora surge la pregunta: ¿cuáles de estos estados permitidos están ocupados por electrones y cuáles no? Tenemos dos importantes situaciones cuando se examina la ocupación electrónica de las bandas permitidas. En la primera, una banda permitida está completa-

mente llena con electrones, mientras la siguiente banda permitida está separada en energía por una brecha  $E_g$  y se encuentra totalmente vacía a 0 K. En el segundo caso, la banda más alta ocupada sólo está medio llena (o parcialmente llena). Estas situaciones se ilustran esquemáticamente en la figura 2.13.

En este punto necesita introducirse un concepto muy importante. *Cuando una banda permitida está completamente llena con electrones, los electrones en la banda no pueden conducir ninguna corriente.* Este importante concepto es fundamental para las propiedades especiales de los semiconductores. Una banda llena es como un vagón de tren por completo lleno



**Figura 2.13**

Descripción esquemática de la ocupación electrónica de las bandas en un metal y en un semiconductor (o aislante). En un metal la banda ocupada más alta a 0 K está parcialmente llena con electrones. También se muestra la función trabajo del metal. En un semiconductor, a 0 K la banda ocupada más alta se encuentra completamente llena con electrones y la banda siguiente se halla completamente vacía. La separación entre las dos bandas es la banda de separación  $E_g$ . La afinidad electrónica y la función trabajo también se muestran en la figura.

con viajeros. ¡No hay movilidad! Se necesitan unos cuantos lugares para facilitar el transporte. Los electrones que son fermiones no pueden conducir ninguna corriente neta en una banda llena puesto que un electrón puede moverse solamente dentro de un estado vacío. Se puede imaginar una cancelación neta del movimiento de unos electrones que se mueven en una dirección y aquellos que se mueven en la otra. Debido a este efecto, cuando tenemos un material en el que una banda está completamente llena, mientras la siguiente banda permitida se encuentra separada en energía y está vacía, el material tiene, en principio, resistividad infinita, y se conoce como *aislante*. El material en el que una banda está sólo medio llena con electrones tiene una resistividad muy baja y se llama *metal*.

La distinción entre un semiconductor y un aislante no es muy brusca. Por lo general, si la brecha de separación entre la banda llena y la no llena es de  $\leq 3.0$  eV, el material es llamado *semiconductor*. A temperaturas finitas, algunos de los electrones en la banda llena del semiconductor son transferidos a la banda superior no llena y esto puede conducir a un incremento en la conductividad, como veremos en el siguiente capítulo. *La banda que está normalmente llena con electrones a 0 K en semiconductores se conoce como banda de valencia, mientras que la banda superior no llena se denomina banda de conducción.*

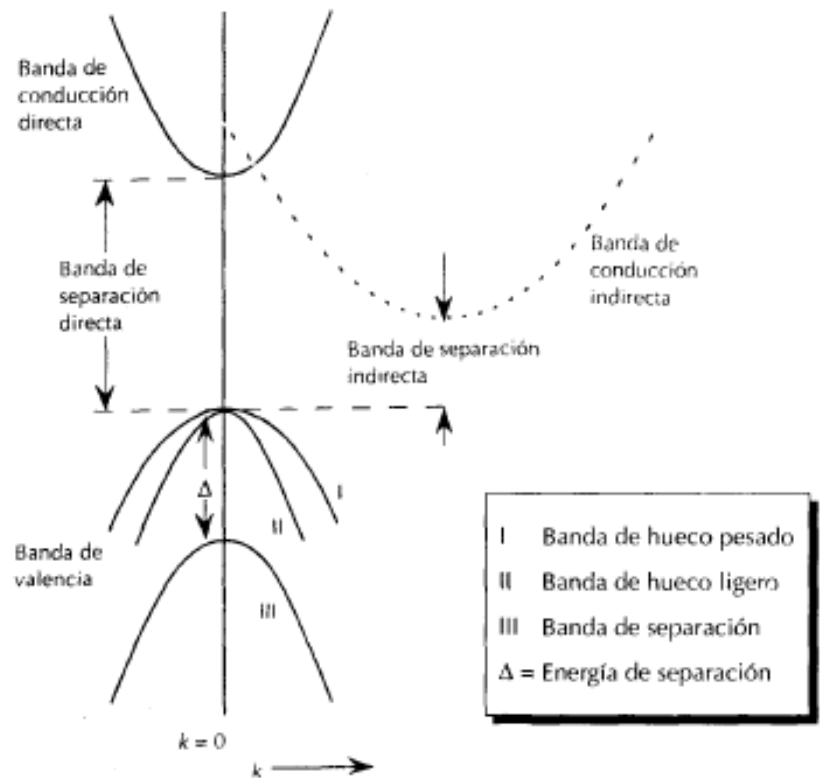
La diferencia de energía entre el nivel vacío y el estado electrónico ocupado más alto en un metal se conoce como función de trabajo del metal. La energía entre el nivel vacío y la parte baja de la banda de conducción se llama afinidad electrónica. Éstas se ilustran en la figura 2.13.

Aunque en lo que se presenta a continuación, estamos anticipando algunos resultados que se discutirán después, es importante resumir una diferencia muy importante entre los metales y los semiconductores. *Los metales tienen una conductividad muy alta debido al número mucho mayor de electrones que participan en el transporte de corriente. Es difícil alterar la conductividad de los metales en cualquier forma simple como resultado de lo anterior. Por otra parte, los semiconductores tienen conductividad cero a 0 K y una conductividad bastante baja a temperaturas finitas, pero es posible alterar su conductividad en órdenes de magnitud. Esta es la razón clave de por qué los semiconductores pueden utilizarse para dispositivos activos mientras los metales están relegados a la posición de ser componentes pasivos como interconexiones, contactos, etcétera.*

### 2.5.1 Semiconductores directos e indirectos; masa efectiva

→ Ya hemos discutido que la solución de la ecuación de Schrödinger conduce a la estructura de bandas del semiconductor. La parte superior de la banda de valencia de la mayoría de los semiconductores se presenta en  $k = 0$ , es decir, a un momento efectivo igual a cero. En la figura 2.14 se ilustra una estructura de bandas típica de un semiconductor cerca de la parte superior de la banda de valencia.

En algunos semiconductores la parte baja de la banda de conducción se presenta en  $k = 0$ . Esos semiconductores se conocen como materiales de banda de separación directa y, por razones que se revisan en el capítulo 4, son "ópticamente activos". Los semiconductores como GaAs, InP, InGaAs, etc., son semiconductores de banda de separación directa. En otros semiconductores, la parte baja de la banda de conducción no se presenta en el punto  $k = 0$  sino en otros puntos. Esos semiconductores se conocen como semiconductores indirectos. Ejemplos de estos últimos son el Si, Ge, AlAs, etc. Estos materiales tienen interacciones muy agu-



**Figura 2.14**

Esquema de la banda de valencia, y bandas de conducción con banda de separación directa y banda de separación indirecta. La banda de conducción del semiconductor de banda directa se ilustra como la línea continua mientras la banda de conducción del semiconductor indirecto se muestra como la línea interrumpida. Las curvas I, II, III en la banda de valencia se denominan estados de hueco pesado, hueco ligero y hueco de separación, respectivamente. La razón por la que los estados de la banda de valencia se denominan huecos se discutirá en la sección 2.6.

das con la luz y no pueden utilizarse para dispositivos ópticos eficaces. Las razones están basadas en las reglas de conservación del momento en transiciones ópticas, lo que hace difícil tener transiciones fuertes en semiconductores indirectos (véase el ejemplo 2.6).

Cerca de los bordes de las bandas (que se presentan en el punto  $k = k_0$ ) por lo general es posible representar la estructura de bandas mediante una relación simple de la forma

$$E(k, k_0) = E(k_0) + \hbar^2 \sum_{i=x, y, z} \frac{(k_i - k_{0i})^2}{2m_i^*} \quad (2.37)$$

donde el índice  $i$  representa las componentes  $x, y, z$  de  $k$  o  $k_0$ , para materiales con banda de separación directa  $k_0 = (0, 0, 0)$ . Sólo están presentes términos cuadráticos en la ecuación

anterior. Los términos lineales en  $k$  están ausentes debido a la simetría de inversión del sistema, puesto que los términos lineales podrían cambiar el signo si invertimos las direcciones.

Si la estructura de bandas es isotrópica, como en el caso de la mayor parte de los semiconductores con brecha directa, la relación se transforma en

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (2.38)$$

donde  $E_c$  es el borde de la banda de conducción, y la estructura de bandas es una simple parábola con superficies de energía iguales a las superficies de una esfera.

Para materiales indirectos, como el Si, la parte baja de la banda de conducción se presenta en los seis puntos equivalentes:  $\frac{2\pi}{a}(0.85, 0, 0)$ ,  $\frac{2\pi}{a}(0, 0.85, 0)$ ,  $\frac{2\pi}{a}(0, 0, 0.85)$  y sus inversos. La relación del momento de energía tiene la forma

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k_l^2}{2m_l^*} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_t^*} \quad (2.39)$$

donde  $k_l$  es la parte longitudinal de  $k$  (es decir, paralela al valor  $k$  en el borde de la banda) y  $k_t$  es la parte transversal medida desde el borde de la banda de conducción. La superficie de energía constante de la estructura de bandas es una elipsoide.

Cerca de los bordes de las bandas, los electrones en semiconductores se comportan como si tuvieran una masa  $m^*$ , que se conoce como la masa efectiva. Para semiconductores de brecha directa, la masa efectiva de los electrones en el borde de la banda de conducción está dada por la siguiente relación aproximada, que resulta de detallados cálculos de estructura de bandas,

$$\frac{1}{m^*} \cong \frac{1}{m_0} + \frac{2p_{cv}^2}{E_g} \quad (2.40)$$

donde, para la mayoría de los semiconductores,

$$\frac{2p_{cv}^2}{m_0} \cong 20.0 \text{ eV} \quad (2.41)$$

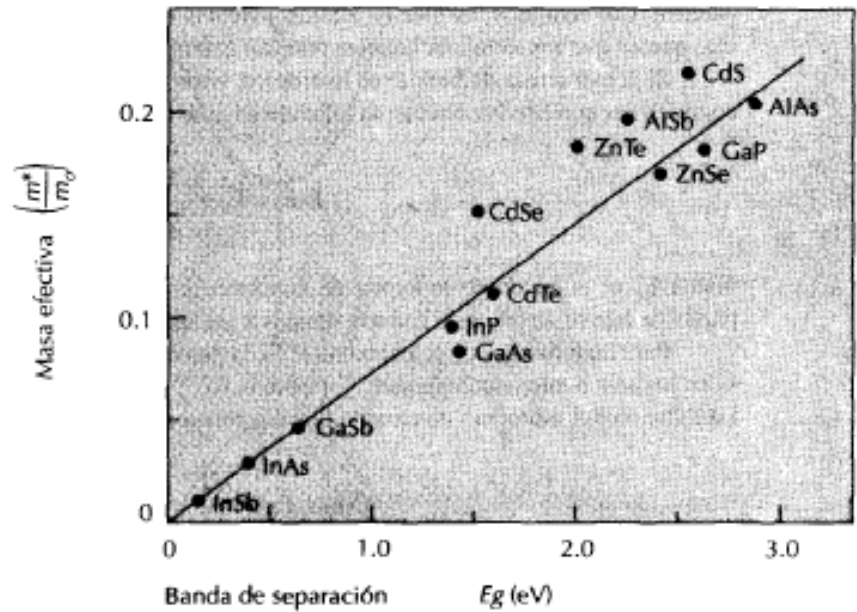
donde  $m_0$  es la masa del electrón libre.

La masa efectiva de la banda de conducción entonces decrece rápidamente con la banda de separación decreciente, como se muestra en la figura 2.15.

Cerca de la parte superior de la banda de valencia, como se hizo notar con anterioridad (véase la figura 2.14), hay tres curvas importantes. La banda de masa más pesada se denomina banda de huecos pesados (I en la figura 2.14). La segunda banda más ligera se conoce como banda de huecos ligeros (II en la figura 2.14). y la tercera, separada por una energía  $\Delta$ , se llama

banda de separación (III en la figura 2.14). Las masas de los electrones de la banda de valencia son generalmente mucho más pesados que los situados en la banda de conducción y también son negativos. La razón por la que llamamos "huecos" a los estados de la banda de valencia se discutirán en la siguiente sección. En general, la masa efectiva está definida por la relación





**Figura 2.15** Masa efectiva  $m^*$  del electrón como una función de la banda directa más baja  $E_g$  para diversos semiconductores compuestos. Es interesante advertir que la masa efectiva decrece a medida que la banda de separación disminuye.

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad (2.42)$$

En el capítulo 1, sección 1.4.2, habíamos discutido el concepto de densidad de estados. El mismo concepto es aplicable para los electrones en un semiconductor excepto que la relación  $E$  vs.  $k$  ya no es

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.43)$$

sino que está dada por la estructura de bandas. Recordamos del capítulo 1 (sección 1.4.2) que la densidad de estados en un sistema tridimensional está dada por

$$N(E) = \frac{\sqrt{2}(m_{dos}^*)^{3/2} E^{1/2}}{\pi^2 \hbar^2} \quad (2.44)$$

$$\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e \quad (2.51)$$

Nótese que el hueco es una representación para la banda de valencia con un electrón perdido. Como se discutió con anterioridad, si el electrón no está perdido los electrones de la banda de valencia no pueden conducir ninguna corriente. Sin embargo, si un electrón está perdido, se permite el flujo de corriente como se ilustra en la figura 2.17. En la figura 2.17a, se muestra un hueco con  $k = 0$ , es decir, en el punto  $F$ . Ahora, como se ve, si se aplica un campo eléctrico, todos los electrones se mueven en dirección opuesta al campo eléctrico. Como también se muestra, esto resulta en el estado no ocupado moviéndose en la dirección del campo. *El hueco responde entonces como si tuviera carga positiva.* Por tanto, responde a los campos externos eléctrico y magnético  $F$  y  $B$ , respectivamente, de acuerdo con la ecuación de movimiento,

$$\hbar \frac{dk_h}{dt} = e \left[ F + \frac{v_h}{c} \times B \right] \quad (2.52)$$

donde  $\hbar k_h$  y  $v_h$  son el momento y la velocidad del hueco.

De este modo, la ecuación de movimiento de los huecos es la de una partícula con una carga *positiva*  $e$ . Es importante reconocer que no tenemos realmente una partícula positivamente cargada. Los huecos se comportan "como si" tuvieran una carga positiva. Esto ocurre porque los huecos de los estados ocupados en la banda de valencia responden a las fuerzas externas con una respuesta de carga negativa propia, pero el estado del electrón perdido responde con una respuesta de carga positiva. La masa del hueco tiene un valor positivo, aunque la masa del electrón en su banda de valencia sea negativa.

Debido a la ecuación de movimiento discutida con anterioridad, en un campo eléctrico los electrones en la banda de conducción se mueven en una dirección opuesta a la dirección de los huecos en la banda de valencia. Sin embargo, debido a que éstos conducen efectivamente una carga positiva, la dirección de la corriente producida es la misma, como se muestra en la figura 2.17d.

*Cuando discutimos las propiedades de la banda de conducción de los semiconductores hablamos acerca de los electrones, pero cuando discutimos las propiedades de la banda de valencia, hablamos acerca de los huecos. Esto porque en la banda de valencia sólo los electrones perdidos o huecos conducen para el transporte de carga y el flujo de corriente.*

En este capítulo hemos visto las palabras, "los electrones se comportan como si..." en una gran cantidad de sitios. Los conceptos de masa efectiva, momento efectivo, huecos con carga positiva, etc., no representan la masa, momento, carga, etc., reales de los electrones. Sin embargo, toman en cuenta los efectos del potencial de fondo debido a los átomos en el cristal. De este modo, al invocar estas cantidades "efectivas" se puede hacer caso omiso de los átomos de fondo y emplear ecuaciones muy simples "tipo electrón libre" para representar los electrones dentro de los semiconductores.

$$\boxed{m_{dos}^* = m^*} \quad (2.45)$$

Para materiales como el silicio en el que la masa efectiva es diferente en varias direcciones, la masa de densidad de estados para un valle es

$$\boxed{m_{dos}^* = (m_1 m_2 m_3)^{1/3}} \quad (2.46)$$

donde  $m_1$ ,  $m_2$  y  $m_3$  son las masas efectivas en las tres direcciones principales. Para el silicio

$$m_l^* = m_1; m_t^* = m_2 = m_3 \quad (2.47)$$

Puesto que el silicio tiene seis valles de bordes de banda de conducción, la densidad de estados calculada para un valle debe multiplicarse por seis para obtener la densidad total de los estados.

En el caso de las masas de la banda de valencia, existen las masas de los huecos pesados y los huecos ligeros. Se puede definir el efecto de estas dos bandas mediante una masa de densidad de estados efectiva dada por (la masa de los huecos, como se discutirá más adelante, es positiva)

$$m_{dos}^{*3/2} = (m_{lh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2}) \quad (2.48)$$

---

## 2.6 HUECOS EN SEMICONDUCTORES

→ Como se habrá notado en la sección anterior, los semiconductores están definidos como materiales en los que la banda de valencia se encuentra llena de electrones y la banda de

conducción está vacía a 0 K. A temperaturas finitas algunos de los electrones abandonan la banda de valencia y ocupan la banda de conducción. La banda de valencia se queda entonces con algunos lugares sin ocupar. Consideremos la situación que se ilustra en la figura 2.16, donde un electrón con momento  $k_e$  se pierde de la banda de valencia.

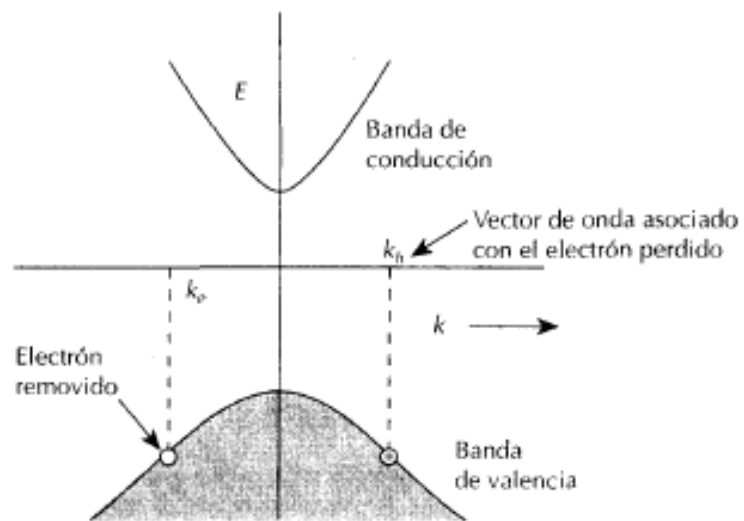
Cuando todos los estados de la banda de valencia están ocupados, la suma sobre todos los estados del vector de onda es cero, es decir,

$$\sum \mathbf{k}_i = 0 = \sum_{\mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_e} \mathbf{k}_i + \mathbf{k}_e \quad (2.49)$$

Este resultado es apenas una indicación de que hay tantos estados  $k$  positivos ocupados como negativos. Ahora, en la situación donde un electrón con vector de onda  $\mathbf{k}_e$  se pierde, el vector de onda total es

$$\sum_{\mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_e} \mathbf{k}_i = -\mathbf{k}_e \quad (2.50)$$

El estado perdido se denomina *hueco* y el vector de onda del sistema  $-\mathbf{k}_e$  se atribuye a él. Es importante advertir que el electrón se pierde del estado  $\mathbf{k}_e$  y el momento asociado con el hueco está en  $-\mathbf{k}_e$ . La posición del hueco se representa como la del electrón perdido. Pero en realidad el vector de onda  $\mathbf{k}_h$  del hueco es  $-\mathbf{k}_e$ , como se muestra en la figura 2.16.



---

## 2.8 MODIFICACIÓN DE LA ESTRUCTURA DE BANDAS

~> Puesto que en esencia todas las propiedades electrónicas y ópticas de los dispositivos semiconductores son dependientes de la estructura de bandas, la pregunta obvia es, ¿puede cambiarse la estructura de bandas de un material? Obviamente, la habilidad para adaptar la estructura de bandas podría ser una poderosa herramienta en manos de un brillante ingeniero electrónico. Dispositivos novedosos pueden concebirse y diseñarse para un desempeño superior y adecuado. La respuesta a la pregunta anterior es un sí enfático. La estructura de bandas de los semiconductores puede ser modificada, y en la última década esto ha sido una de las fuerzas directrices en la física de semiconductores. De hecho, puede argumentarse que sin los nuevos conceptos en la adaptación de bandas, la nueva investigación en la física de semiconductores podría haberse detenido. Sin embargo, mientras la habilidad para modificar la estructura de bandas proporciona una nueva e interesante dimensión en el diseño de dispositivos, también representa una carga tremenda para el ingeniero electrónico. Sin la habilidad para modificar la estructura de bandas, la base de conocimientos requerida por un ingeniero electrónico promedio estaba limitada a las propiedades de los semiconductores que se “presentaban” naturalmente, por ejemplo, Si, GaAs, Ge, etc. Con los revolucionarios avances en la modificación de la estructura de bandas, el ingeniero electrónico debe aprender los conceptos de mecánica cuántica que gobiernan las modificaciones y su control. Esto, por supuesto, hace que la vida profesional sea un reto más excitante para el ingeniero electrónico.

En principio, muchos fenómenos físicos pueden modificar las estructuras de bandas electrónicas, pero como éstos son ampliamente utilizados para adaptación de bandas discutiremos

# Adulteración de semiconductores

## UNA MIRADA AL CAPÍTULO

- **Electrones y huecos en semiconductores puros: Portadores intrínsecos. Por qué los portadores intrínsecos no son suficientes para explotar los semiconductores** *Sección 3.1*
- **La física detrás de la adulteración (“doping”): Cómo se introduce un exceso de electrones y huecos** *Sección 3.2*
- **La densidad de portadores en exceso debido a la adulteración: Efectos de inmovilización del portador** *Sección 3.3*
- **Modulación de adulteración: Cómo se puede evitar la inmovilización de portador y la dispersión de portadores** *Sección 3.4*

En el capítulo anterior hemos discutido que un semiconductor está caracterizado por el hecho de que, a cero grados Kelvin, la banda de valencia se encuentra completamente ocupada, mientras la banda de conducción se halla completamente vacía. También hemos visto que una banda completamente llena no conduce carga. De este modo, a bajas temperaturas, el semiconductor puro ofrece una resistencia muy alta al transporte de corriente. A medida que la temperatura se eleva, la función de distribución de Fermi se esparce, como se discutió en el capítulo 1, y se emiten algunos electrones desde la banda de valencia hacia la banda de conducción. Ahora existen electrones en la banda de conducción y huecos en la banda de valencia que pueden conducir corriente. Sin embargo, tales electrones portadores de corriente producidos al elevar la temperatura, conocidos como portadores intrínsecos, no son útiles en los dispositivos de semiconductor y con frecuencia son una molestia. Los portadores intrínsecos a menudo son una fuente de limitación para la operación a alta temperatura de los dispositivos, puesto que no pueden ser controlados efectivamente mediante campos eléctricos.

Una manera controlable de introducir portadores en semiconductores se conoce como adulteración o dopado (doping). La adulteración permite variar la concentración de electrones sobre un intervalo muy amplio (digamos, desde  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  hasta  $10^{30} \text{ cm}^{-3}$ ) alterando así también la conductividad sobre un intervalo similarmente grande. La concentración de portador también puede variarse espacialmente con bastante precisión, y producen así uniones  $p-n$  y campos eléctricos interconstruidos. En esencia, todos los dispositivos electrónicos, desde conmutadores y memorias hasta láseres de semiconductor, incorporan adulterantes como un ingrediente crucial de la estructura del dispositivo. En este capítulo estudiaremos la física en que se buscan los adulteradores en los semiconductores. En este capítulo se aplican los con-

ceptos de mecánica estadística desarrollados en el capítulo 1. Se recomienda al lector repasar la sección 1.5. La mayor parte de las expresiones derivadas en esa sección se utilizarán con la sustitución de la masa del electrón libre por la masa efectiva. El problema del átomo de hidrógeno discutido en el capítulo 1 (sección 1.3.3) también debería repasarse puesto que se empleará para comprender las propiedades de los adulterantes.

### 3.1 CONCENTRACIÓN DE PORTADOR INTRÍNSECO

—→ La concentración de portador intrínseco se refiere a los electrones (huecos) presentes en la banda de conducción (banda de valencia) de un semiconductor puro. La concentración de portador intrínseco depende de la banda de separación y de la temperatura así como de los detalles de las masas del borde de la banda. Haremos la suposición de que la densidad de estados del borde de banda para electrones y huecos se origina de relaciones  $E-k$  parabólicas. La densidad de estados de la banda de conducción y de valencia se muestran en la figura 3.1 junto con la posición del nivel de Fermi.

La concentración de electrones en la banda de conducción es (sería útil para el lector revisar la sección 1.5)

$$n = \int_{E_c}^{\infty} N_c(E) f(E) dE \quad (3.1)$$

donde  $N_c(E)$  es la densidad de estados del electrón cerca del borde de la banda de conducción y  $f(E)$  es la función de Fermi. Por medio de las expresiones adecuadas para  $N_c$  y  $f$  obtenemos, para un sistema de 3 dimensiones (la densidad de estados de la banda de conducción comienza en  $E = E_c$  como se muestra en la figura 3.1),

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_c}^{\infty} \frac{(E - E_c)^{1/2} dE}{\exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right) + 1} \quad (3.2)$$

Si el potencial químico está lejos del borde de banda, entonces la unidad en el denominador puede despreciarse. Esta aproximación, denominada la aproximación de Boltzmann, es válida cuando  $n$  es pequeña ( $\lesssim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  para la mayoría de los semiconductores), y generalmente es válida para concentraciones intrínsecas. Entonces obtenemos (véanse las ecuaciones 1.81 y 1.82 derivadas en el capítulo 1 para electrones libres)

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_f}{k_B T}\right) \int_{E_c}^{\infty} (E - E_c)^{1/2} \exp(-E/k_B T) dE \\ &= 2 \left( \frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp[(E_f - E_c)/k_B T] = N_c \exp[(E_f - E_c)/k_B T] \end{aligned}$$

donde,

$$N_c = 2 \left( \frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (3.3)$$

$N_c$  se conoce como la densidad efectiva de estados en el borde de la banda de conducción. Adviértase que las unidades de la densidad de estados  $N_c$  son  $eV^{-1} cm^{-3}$  mientras las de la densidad efectiva de estados  $N_v$  son  $cm^{-3}$ . También nótese que la masa efectiva por utilizarse es la masa efectiva de la densidad de estados.

La concentración de portador se conoce cuando  $E_f$  se calcula. Para encontrar la concentración de portador intrínseca, esto requiere hallar también la concentración de huecos  $p$ .

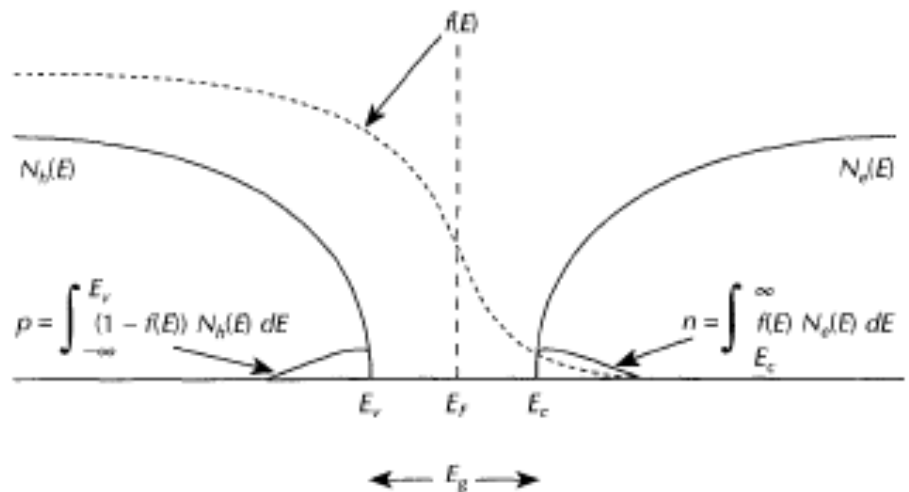
La función de distribución de huecos  $f_h$  está dada por (recuérdese que el hueco es la ausencia de un electrón)

$$F_h = 1 - f_e = 1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right) + 1} = \frac{1}{\exp\left[\frac{(E_f - E)}{k_B T}\right] + 1} \equiv \exp\left[-\frac{(E_f - E)}{k_B T}\right] \tag{3.4}$$

La aproximación está basada nuevamente en nuestra suposición de que  $E_f - E \gg k_B T$ , lo que es una buena aproximación para semiconductores puros. Al efectuar el proceso matemático en forma similar al caso de los electrones, encontramos que

$$p = 2 \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2} \exp[(E_v - E_f)/k_B T] = N_v \exp[(E_v - E_f)/k_B T] \tag{3.5}$$

donde  $N_v$  es la densidad efectiva de estados para el borde de la banda de valencia.



**Figura 3.1** Un esquema de la densidad de estados de las bandas de conducción y de valencia.  $N_v$  y  $N_c$  son la densidad de estados de electrones y de huecos. También se muestra la función de Fermi dando la probabilidad de ocupación para los electrones. Se ilustran las concentraciones resultantes de electrones y huecos. Para un semiconductor intrínseco  $n = p$ , puesto que cada electrón producido en la banda de conducción deja atrás un hueco en la banda de valencia.

*En semiconductores intrínsecos, la concentración de electrones es igual a la concentración de huecos ya que cada electrón en la banda de conducción deja un hueco en la banda de valencia.*



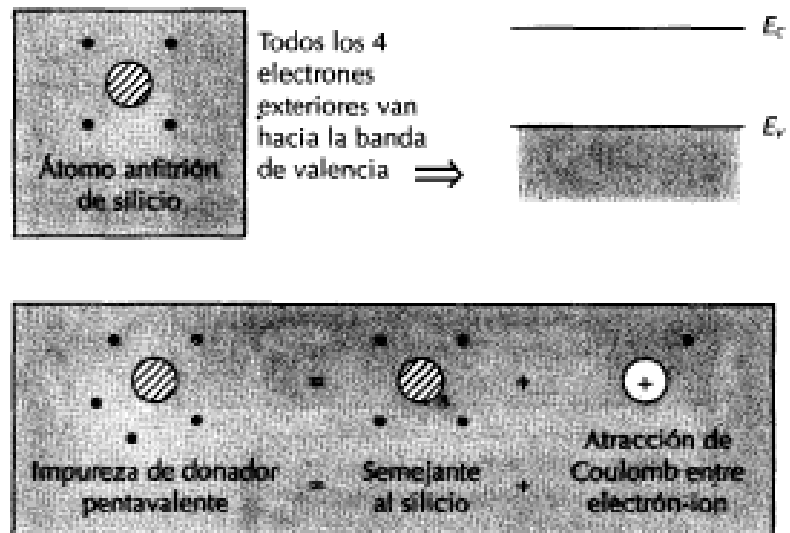
### 3.2 ADULTERACIÓN: DONADORES Y ACEPTORES

—→ Cuando un átomo adulterante (impureza) se introduce en un cristal, la periodicidad del cristal es destruida. En un sitio atómico particular el potencial de fondo de la red anfitriona se reemplaza por el potencial de la impureza. Si el cambio en el potencial de fondo debido a la impureza es agudo y de amplio rango (es decir, se extiende sobre varias decenas de sitios atómicos), puede introducirse una tremenda simplificación. En esta simplificación las propiedades del átomo adulterante pueden describirse mediante un modelo simple tipo átomo de hidrógeno donde la *masa del electrón es simplemente la masa efectiva en el borde de la banda*. Esta aproximación se conoce como la aproximación de la masa efectiva para impurezas.

Para resolver el problema del donador (o aceptor) dentro de esta aproximación, consideremos un átomo donador sobre un sitio de la red cristalina. El átomo donador podría ser un átomo pentavalente en silicio o un átomo de Si sobre un sitio Ga en el GaAs. Al enfocarse sobre el átomo pentavalente en Si, cuatro de los electrones de valencia del átomo donador se comportan como si estuvieran en un átomo de Si, y el quinto electrón restante ahora ve un ion cargado positivamente hacia el cual es atraído como se ilustra en la figura 3.3. El ion tiene una carga unitaria y la atracción es sencillamente una atracción de tipo de Coulomb suprimida por la constante dieléctrica del material. El problema es ahora el del caso del átomo de hidrógeno discutido en el capítulo 1 excepto que la masa del electrón es la masa efectiva en el borde de la banda. El potencial de atracción es ( $\epsilon$  es la constante dieléctrica del semiconductor, es decir, el producto de  $\epsilon_0$  y la constante dieléctrica relativa)

$$U(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon r} \quad (3.13)$$

obtenemos la ecuación de masa efectiva para el nivel del donador, la cual tiene una energía para  $E_d$ ,



**Figura 3.3** Un esquema que ilustra el enfoque que se toma para entender los donadores en semiconductores. El problema del donador es tratado como el problema del átomo anfitrión junto con un término de interacción coulombiana. El átomo de silicio tiene cuatro electrones “libres” por átomo. Todos los cuatro electrones contribuyen a la banda de valencia a 0 K. El adulterante tiene cinco electrones, de los cuales cuatro contribuyen a la banda de valencia, mientras el quinto puede emplearse para incrementar los electrones en la banda de conducción.

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m_c^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \right] F_d(r) = (E_d - E_c) F_d(r) \tag{3.14}$$

donde  $m_c^*$  es la masa del borde de la banda de conducción y  $E_d - E_c$  es la energía de la impureza con respecto a la  $E_c$  de la banda de conducción. Esta ecuación es considerada para el *borde de la banda de conducción* porque ésta es la banda que produce un nivel en la región de la banda de separación para los niveles de donador.

Esta ecuación es ahora esencialmente la misma de la de un electrón en el problema del átomo de hidrógeno. La única diferencia es que la masa del electrón es  $m^*$  y el potencial de Coulomb está reducido mediante  $\epsilon_0/\epsilon$ .

Las soluciones de energía para este problema son (véase el capítulo 1, sección 1.3.3)

$$E_d = E_c - \frac{e^4 m_c^*}{2(4\pi\epsilon)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, n = 1, 2, \dots \tag{3.15}$$

Se producen una serie de niveles de energía, y el nivel de energía del estado base es

$$\begin{aligned} E_d &= E_c - \frac{e^4 m_c^*}{2(4\pi\epsilon)^2 \hbar^2} \\ &= E_c - 13.6 \left( \frac{m^*}{m_0} \right) \left( \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right)^2 \text{ eV} \end{aligned} \tag{3.16}$$

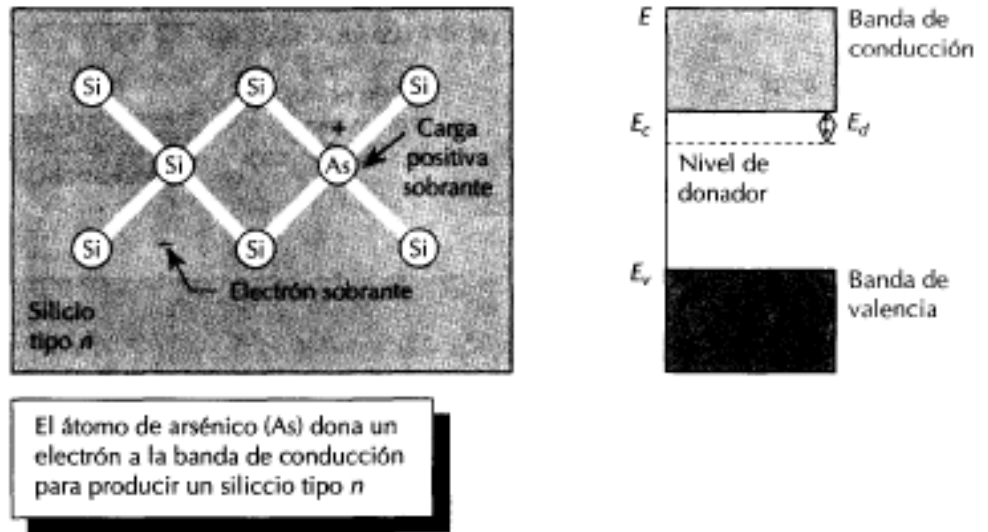


Figura 3.4

Cargas asociadas con un átomo de impureza de arsénico en silicio. El arsénico tiene cinco electrones de valencia, pero el silicio tiene solamente cuatro electrones de valencia. Así cuatro electrones del arsénico forman ligaduras covalentes tetraédricas semejantes al silicio, y el quinto electrón queda disponible para la conducción. El átomo de arsénico se denomina donador porque cuando se ioniza dona un electrón a la banda de conducción.

Nótese que en el problema del átomo de hidrógeno los niveles del electrón se miden desde el nivel de energía del vacío, que se toma como  $E = 0$ . En el problema del donador, el nivel de energía se mide desde el borde de la banda. El estado base se ilustra en forma esquemática en la figura 3.4 y los valores de la energía del donador para algunos semiconductores se muestran en la tabla 3.1.

La función de onda del estado base es como en el problema del átomo de hidrógeno,

$$F_c(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \quad (3.17)$$

donde "a" es el radio de Bohr del donador y está dado por

$$a = \frac{(4\pi\epsilon)\hbar^2}{m_c^* e^2} = 0.53 \frac{(\epsilon/\epsilon_0)}{(m_c^*/m_0)} \text{ \AA} \quad (3.18)$$

Para la mayoría de los semiconductores las energías del donador son de unos cuantos meV por debajo del borde de la banda de conducción y el radio de Bohr es  $\sim 100 \text{ \AA}$ . En este punto presentamos otra masa efectiva denominada la masa efectiva de conductividad  $m_c^*$  que nos dice cuántos electrones responden a potenciales externos. Esta masa es utilizada para energías de donador así como para transporte de carga en un campo eléctrico. Para materiales de

**Tabla 3.1**

Energías de nivel superficial en algunos semiconductores. Todos los valores se refieren a la energía por debajo del borde de la banda de conducción (para donadores) y por encima del borde de la banda de valencia (para aceptores).

Semiconductor	Impureza (donador)	Donador superficial energía (meV)	Impureza (aceptor)	Aceptor superficial energía (meV)
GaAs	Si	5.8	C	26
	Ge	6.0	Be	28
	S	6.0	Mg	28
	Sn	6.0	Si	35
Si	Li	33	B	45
	Sb	39	Al	67
	P	45	Ga	72
	As	54	In	160
Ge	Li	9.3	B	10
	Sb	9.6	Al	10
	P	12.0	Ga	11
	As	13.0	In	11

banda de separación directa como el GaAs, esto es simplemente la masa efectiva. Para materiales como el Si, la masa de conductividad es

$$m_c^* = 3 \left( \frac{2}{m_v^*} + \frac{1}{m_c^*} \right)^{-1} \quad (3.19)$$

En materiales de banda de separación indirecta la masa de densidad de estados es diferente de la masa de conductividad. La masa de densidad de estados representa las propiedades de los electrones a una superficie de energía constante en la estructura de bandas. La masa de conductividad, por otro lado, proporciona la respuesta de los electrones a un potencial externo.

De acuerdo con la imagen simple de la impureza de donador discutida anteriormente, los niveles de energía del donador dependen solamente del cristal anfitrión (a través de  $\epsilon$  y  $m^*$ ) y no de la naturaleza del adulterante. De acuerdo con la ecuación 3.17, las energías del donador para el Ge, el Si y el GaAs deberían ser 0.006, 0.025 y 0.007 eV, respectivamente. Sin embargo, como puede verse de la tabla 3.1, hay una pequeña desviación de estos números, según la naturaleza del adulterante. Esta diferencia ocurre porque la perturbación del potencial de impureza real no es simplemente el potencial de Coulomb como hemos supuesto, sino que tiene corrección de intervalo corto que depende del átomo de la impureza adulterante. Teorías más precisas para los niveles del donador incluyen este potencial para obtener una mejor coincidencia con los experimentos.

Otra clase importante de impurezas intencionales son los aceptores. Exactamente como los donadores tienen niveles defectuosos que son neutrales cuando un electrón ocupa el nivel defectuoso y cargados positivamente cuando están sin ocupar, los aceptores son neutrales cuando están vacíos y cargados negativamente al estar ocupados por un electrón. Los niveles del aceptor se producen cuando las impurezas que tienen un potencial central semejante al de los átomos

en la red anfitriona, pero tienen un electrón menos en la capa más externa, se introducen en el cristal. De este modo los elementos del grupo III pueden formar aceptores en Si o Ge mientras el Si podría ser un aceptor si reemplaza al As en el GaAs. En la figura 3.5 se ilustra un ejemplo para el Boro (B) en el Si.

El potencial de impureza del aceptor se podría ahora considerar equivalente a un potencial de átomo anfitrión junto con un potencial de Coulomb cargado *negativamente*. El "hueco" (es decir, la ausencia de un electrón) puede entonces comprometer el potencial aceptor. La ecuación de masa efectiva puede utilizarse otra vez puesto que solamente la parte superior de la banda de valencia contribuye al nivel del aceptor. El problema de la banda de valencia es considerablemente más complejo y requiere la solución de la teoría de masa efectiva de multibandas. Sin embargo, el nivel del aceptor puede predecirse razonablemente mediante el uso de la masa del hueco pesado. Debido a las masas de huecos más pesados, el radio de Bohr para los niveles de aceptor es generalmente un factor de 2 o 3 veces más pequeño que para los donadores.

De las discusiones anteriores, es claro que mientras que en los semiconductores del grupo IV la naturaleza de una impureza de donador o de tipo aceptor está bien establecida, en los semiconductores compuestos, los adulterantes pueden ser "anfotéricos". Por ejemplo, el Si puede actuar como un donador en el GaAs si reemplaza un átomo de Ga, y puede actuar como un aceptor si reemplaza un átomo de As. En muchos semiconductores compuestos, puede presentarse una "autoadulteración" si un elemento reemplaza a otro. Por ejemplo, en la aleación HgCdTe, el reemplazo de un átomo de Hg o Cd por un átomo de Te puede causar niveles de donador. La naturaleza anfotérica de algunos adulterantes puede explotarse mediante un crecimiento cristalino inteligente para producir una unión  $p-n$  mediante el uso del mismo

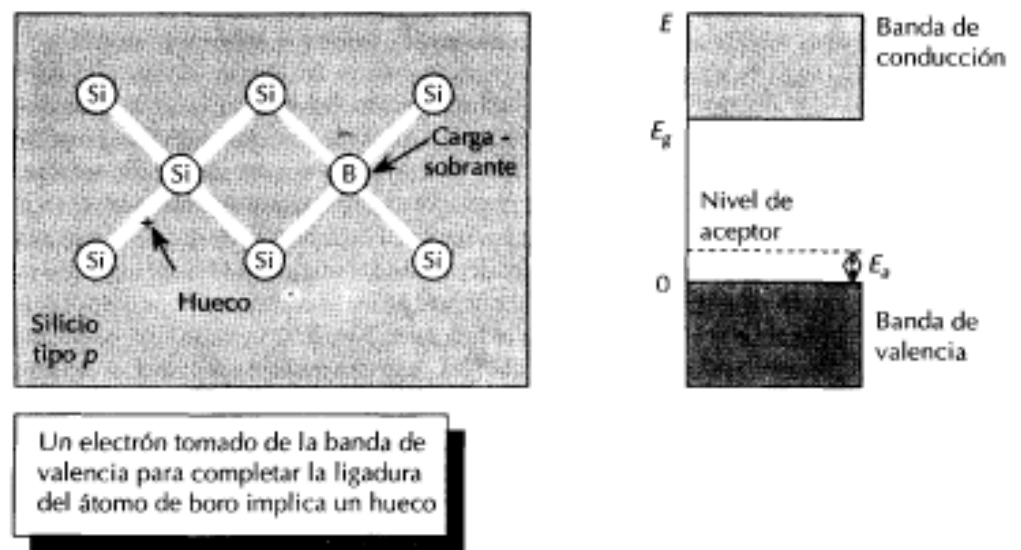


Figura 3.5

El boro tiene solamente tres electrones de valencia; puede completar sus ligaduras tetraédricas sólo mediante la captura de un electrón de una ligadura Si-Si, dejando detrás un hueco en la banda de valencia del silicio. El hueco positivo se encuentra disponible entonces para conducción. El átomo de boro se conoce como un aceptor porque cuando se ioniza acepta un electrón de la banda de valencia.

adulterante, pero cambiando las condiciones de crecimiento en la unión. Por lo general, el carácter adulterante (digamos en el GaAs) es determinado dependiendo si las condiciones de crecimiento son "ricas en As" (es decir, la superficie de crecimiento del cristal es en su mayoría As) o "rico en Ga".

### 3.3 PORTADORES EN SEMICONDUCTORES ADULTERADOS

—→ En el estado de energía más bajo del átomo donador, el electrón extra del donador se atrapa en el sitio del donador y ocupa el nivel de donador  $E_d$ . Un electrón de esta clase no puede conducir ninguna corriente y no es útil para cambiar las propiedades electrónicas del semiconductor. A muy bajas temperaturas, los electrones de donador están, en realidad, ata-

110 Capítulo 3 Adulteración de semiconductores

dos a los sitios de donador y este efecto se conoce como inmovilización de portador. Sin embargo, a altas temperaturas, el electrón donador es "ionizado" y reside en la banda de conducción como electrón libre, tal como se ilustra en la figura 3.6. Esos electrones pueden, por supuesto, conducir corriente y modificar las propiedades electrónicas del semiconductor. El átomo donador ionizado está cargado positivamente y ofrece un centro de dispersión para los electrones libres. Discutiremos la dispersión en el capítulo siguiente.

#### 3.3.1 Densidad de portador extrínseca

—→ La ionización de los adulterantes se calculará ahora, junto con algunas expresiones para propiedades de portador extrínsecas. Debido a la adulteración ( $N_d$  es la densidad del donador,  $N_a$  es la densidad del aceptor), ya no tenemos la igualdad entre electrones y huecos, es decir,

$$n - p = \Delta n \neq 0 \quad (3.20)$$

Sin embargo, la ley de la acción de masa aún se mantiene (el valor del producto cambia sólo a niveles de adulteración altos, como lo discutiremos después)

$$np = \text{constante} = n_i^2 \quad (3.21)$$

Si eliminamos  $p$  en estas ecuaciones obtenemos, después de resolver una ecuación cuadrática,

$$n = \frac{1}{2} \Delta n + \frac{1}{2} (\Delta n^2 + 4n_i^2)^{1/2} \quad (3.22)$$

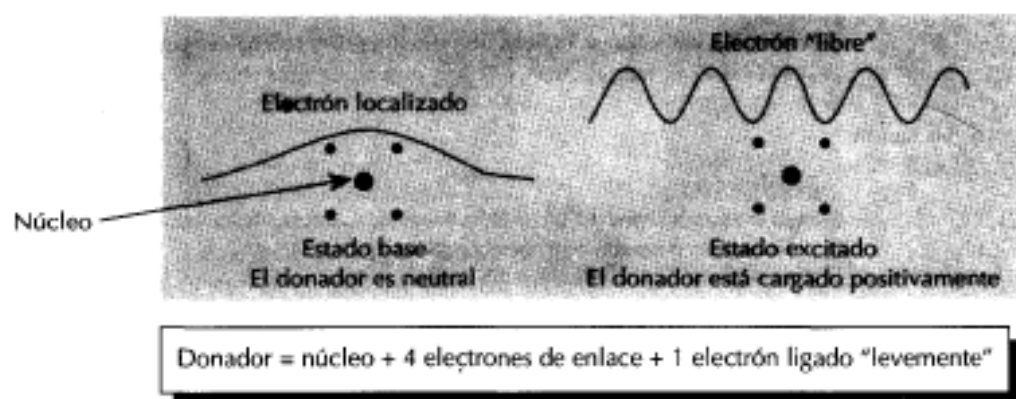


Figura 3.6

Un electrón ligado a un donador no contribuye a la conducción de carga. Sin embargo, si el donador se encuentra "ionizado", el electrón llega a ser libre y puede contribuir al transporte de carga.

---

### 3.3.2 Población de niveles de impureza: inmovilización de portador

↪ Cuando adulteramos un material como el Si con un átomo pentavalente  $P$ , surge la pregunta siguiente. ¿El quinto átomo extra se ligará por sí mismo al átomo donador y ocupará un nivel de energía  $E_d$  por debajo de la banda de conducción? O, ¿"abandonará" el átomo donador y se convertirá en un electrón "libre" en la banda de conducción? Como con cualquier otra cosa, también esto está controlado por los principios de la termodinámica de la minimización de la energía libre. La parte de la energía interna de la energía libre prefiere que los electrones permanezcan ligados al donador y así tengan una energía más baja que la del electrón libre. Sin embargo, la parte de entropía, que es proporcional a la temperatura  $T$ , prefiere el estado del electrón libre. A baja temperatura, la parte de la entropía llega a ser insignificante y los electrones están confinados al átomo donador. La densidad de electrón libre tiende a cero y este fenómeno es llamado inmovilización de portador. A medida que la temperatura se incrementa, la fracción de donadores "ionizados" comienza a aumentar hasta que todos los donadores están ionizados y la densidad de portador libre es igual a la densidad de donador. Esta región se conoce como la región de saturación. Eventualmente, a medida que la temperatura se eleva adicionalmente, la densidad de portador comienza a incrementarse debido a que la densidad de portador intrínseco excede la densidad de donador. Estos tres regímenes se ilustran en la figura 3.8 para el Si.

El análisis completo de este problema es algo intrincado y requiere de técnicas numéricas. Consideraremos simplemente algunos casos sencillos.

En general, un semiconductor tendrá tanto donadores y aceptores, como impurezas. Para hallar la densidad de portador se tiene que relajar la limitante  $n = p$  y reemplazarla con una ecuación que pueda ser utilizada para calcular la posición del potencial químico. Examinemos en primer lugar el problema a  $T \approx 0$  K, donde la imagen física es bastante simple. Si hacemos la suposición de que  $N_d > N_a$ , entonces a  $T = 0$  K, los estados de la banda de valencia estarán todos llenos, y  $N_a$  electrones de los átomos donadores caerán en los niveles de aceptor. La cantidad restante  $N_d - N_a$  de los electrones estarán entonces ligados a los donadores. No habrá electrones en la banda de conducción a una temperatura de  $T = 0$  K.

A temperaturas finitas, los electrones serán redistribuidos, pero sus números serán conservados y satisfarán la siguiente igualdad resultante de la neutralidad de carga:

$$(n - n_i) + n_d = N_d \quad (3.33)$$

$$(p - p_i) + p_a = N_a \quad (3.34)$$

lo que da

$$n + n_d = N_d - N_a + p + p_a \quad (3.35)$$

donde

$n$  = total de electrones libres en la banda de conducción

$n_d$  = electrones ligados a los donadores

$p$  = total de huecos libres en la banda de valencia

$p_a$  = huecos ligados a los aceptores

Con el fin de obtener qué fracción de los átomos donadores (aceptores) están ionizados, se necesita conocer la función de distribución para los átomos de impureza. Hemos discutido mucho la función estadística de Fermi-Dirac. Un enfoque semejante se utiliza para calcular la función de probabilidad para un nivel de donador que tiene una energía  $E_d$  medida desde el borde de la banda de conducción. La probabilidad de que un estado donador esté ocupado está dada por ( $n_d$  es el número de electrones ligados a los donadores,  $N_d$  es la densidad de donador)

$$\frac{n_d}{N_d} = \frac{1}{\frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_d - E_F}{k_B T}\right) + 1} \quad (3.36)$$

El factor  $\frac{1}{2}$  surge esencialmente del hecho de que hay dos estados que un electrón puede ocupar en un sitio de donador correspondiente a los dos estados de spin.

La probabilidad de que un hueco sea atrapado por un nivel de aceptor está dada por

$$\frac{p_a}{N_a} = \frac{1}{\frac{1}{4} \exp\left(\frac{E_F - E_a}{k_B T}\right) + 1} \quad (3.37)$$



El factor  $\frac{1}{4}$  se debe a la presencia de las dos bandas, hueco ligero, hueco pesado y los dos estados de spin.

Para una solución precisa del problema de encontrar el número de electrones en la banda de conducción, de huecos en la banda de valencia, de electrones en los átomos donadores y huecos en los niveles aceptores, se necesita emplear una computadora. Sin embargo, se puede obtener una expresión aproximada al aplicar la aproximación de Boltzmann, que es válida si  $E_d - E_F \gg k_B T$  y  $E_c - E_F \gg k_B T$ . Con esta aproximación tenemos (si se supone un material de tipo  $n$  para el cual  $N_a$  sea cero)

$$n_d = \frac{N_d}{\frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_d - E_F}{k_B T}\right)} = 2N_d \exp\left[-\left(\frac{E_d - E_F}{k_B T}\right)\right] \quad (3.38)$$

También, tenemos que para la densidad de electrones en la banda de conducción (véase la ecuación 3.3)

$$n = N_c \exp\left[-\frac{E_c - E_F}{k_B T}\right] \quad (3.39)$$

La fracción de electrones ligados a los niveles de donador es ahora (para concentraciones intrínsecas pequeñas  $N_d = n + n_d$ )

$$\begin{aligned} \frac{n_d}{n + n_d} &= \frac{2N_d \exp\left[-\frac{(E_d - E_F)}{k_B T}\right]}{N_c \exp\left[-\frac{(E_c - E_F)}{k_B T}\right] + 2N_d \exp\left[-\frac{(E_d - E_F)}{k_B T}\right]} \\ &= \frac{1}{\frac{N_c}{2N_d} \exp\left[-\frac{(E_c - E_d)}{k_B T}\right] + 1} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Nótese que en esta aproximación el nivel de Fermi no aparece en la relación y la energía de ionización del donador ( $E_c - E_d$ ) y la temperatura determinan la fracción de electrones ligados.

A bajas temperaturas, la relación  $n_d/(n + n_d)$  se aproxima a la unidad, de modo que todos los electrones se encuentran ligados a los donadores. Esto se denomina inmovilización de portador. En general, la dependencia de la temperatura de los portadores libres se muestra en la figura 3.8.

Un tratamiento similar del problema del aceptor proporciona la razón

$$\frac{p_a}{p + p_a} = \frac{1}{\frac{N_v}{4N_a} \exp\left[-\frac{(E_a - E_v)}{k_B T}\right] + 1} \quad (3.41)$$

## 4.2 RELACIONES DE VELOCIDAD-CAMPO ELÉCTRICO EN SEMICONDUCTORES

—> Cuando una distribución electrónica está sujeta a un campo eléctrico, los electrones tienden a moverse en dirección del campo (dirección opuesta al campo  $\mathbf{F}$ ) y a ganar velocidad a

expensas del campo. Sin embargo, debido a las imperfecciones, se dispersan en direcciones aleatorias. Se establece un estado estacionario en el cual los electrones tienen alguna velocidad de deriva neta en dirección del campo.

En ausencia de cualquier campo aplicado (es decir, bajo equilibrio), la distribución electrónica está dada por la distribución de Fermi-Dirac, como lo hemos discutido anteriormente. Cuando se aplica un campo y los electrones derivan en dirección del campo, la función de distribución cambia. La nueva distribución es una función de las tasas de dispersión y de la magnitud del campo y se determina al resolver una ecuación conocida como la ecuación de transporte de Boltzmann. Ésta es una ecuación difícil de resolver especialmente en campos eléctricos de gran magnitud. La respuesta de los electrones al campo puede ser representada por una relación de velocidad-campo. Discutiremos brevemente las relaciones velocidad-campo en campos eléctricos de baja magnitud y en campos eléctricos moderadamente altos.

### 4.2.1 Respuesta de campo de baja intensidad: movilidad

—> En campos eléctricos menores o de baja intensidad, las propiedades de transporte macroscópicas del material (movilidad, conductividad) pueden relacionarse con las propiedades microscópicas (tasa de dispersión o tiempo de relajación) mediante argumentos simples. No resolveremos la ecuación de transporte de Boltzmann, sino que aplicaremos argumentos conceptuales simples para comprender esta relación. Seguiremos un enfoque desarrollado por Drude al final del siglo, excepto que a la vez Drude no tenía conocimiento acerca del concepto de masa efectiva y de la fuente de dispersión. En este enfoque haremos las suposiciones siguientes derivadas de modificaciones al enfoque de Drude:

- i) Los electrones en el semiconductor no interactúan entre sí. Esta aproximación se denomina la aproximación de electrón independiente.
- ii) Los electrones sufren colisiones de varias fuentes de dispersión y el tiempo  $\tau_{disp}$  describe el tiempo promedio entre colisiones sucesivas.
- iii) Los electrones se mueven de acuerdo con la ecuación del electrón libre

$$\frac{\hbar dk}{dt} = \mathbf{F}_{ext} \quad (4.4)$$

*entre colisiones.* Después de una colisión, los electrones pierden toda su energía sobrante (en promedio) de modo que el gas de electrones se encuentra esencialmente en equilibrio térmico. Esta suposición es válida solamente para campos eléctricos muy bajos.

De acuerdo con estas suposiciones, inmediatamente después de una colisión la velocidad del electrón es la misma que la dada en condiciones de equilibrio térmico. Esta velocidad promedio es entonces cero, después de las colisiones. El electrón gana una velocidad entre colisiones, es decir, sólo durante el tiempo  $\tau_{disp}$ .

Esta ganancia de velocidad promedio es por tanto la de un electrón con masa  $m^*$  que viaja en un campo  $F$  durante un tiempo  $\tau_{disp}$ :

$$v_{prom} = -\frac{eF\tau_{disp}}{m^*} = v_d \quad (4.5)$$

donde  $v_d$  es la velocidad de deriva. La densidad de corriente es ahora

$$\mathbf{J} = -nev_d = \frac{ne^2\tau_{disp}}{m^*} \mathbf{F} \quad (4.6)$$

Al comparar esto con el resultado de la ley de Ohm para conductividad  $\sigma$

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{F} \quad (4.7)$$

tenemos que

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_{disp}}{m^*} \quad (4.8)$$

La resistividad del semiconductor es sencillamente el inverso de la conductividad. De la definición de movilidad  $\mu$ , para electrones

$$v_d = \mu \mathbf{F} \quad (4.9)$$

tenemos que

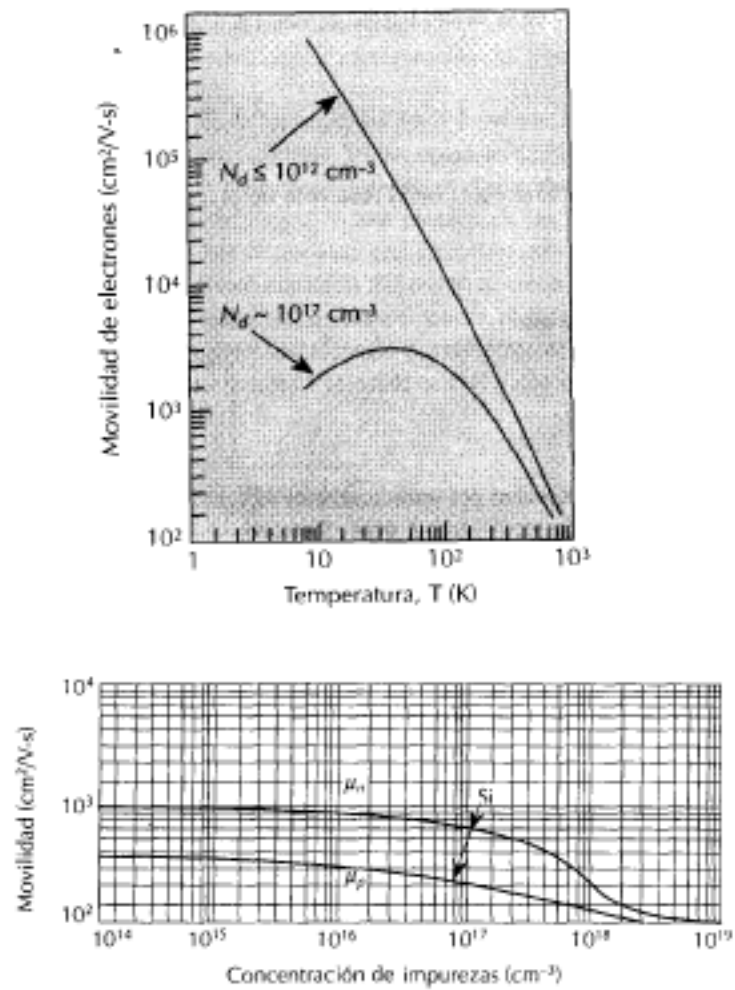
$$\mu = \frac{e\tau_{disp}}{m^*} \quad (4.10)$$

Nótese que la movilidad tiene una dependencia explícita de  $\frac{1}{m^*}$  en ella. Adicionalmente, también  $\tau_{disp}$  decrece con  $m^*$  como hemos discutido en la sección anterior debido a la reducción en la densidad de estados. De esta manera la movilidad tiene una fuerte dependencia sobre la masa de portador. La masa efectiva por utilizarse en estos parámetros de transporte es la masa de conductividad. En el apéndice B se muestran movilidades de algunos semiconductores puros.

La sencilla formulación anterior nos permite relacionar cantidades microscópicas tales como la masa efectiva y el tiempo de dispersión con una propiedad macroscópica como la conductividad o la movilidad. La cantidad macroscópica puede medirse fácilmente en el laboratorio. Una conexión de esta clase entre cantidades microscópicas y macroscópicas es una de las razones clave para el desarrollo de modelos teóricos.

### Movilidad en campo de baja magnitud en el silicio

El Si tiene una movilidad baja en comparación con las movilidades en materiales con banda de separación directa. Afortunadamente, en el transporte en campos de gran magnitud de dispositivos electrónicos domina el desempeño del dispositivo, lo que permite a los dispositivos de Si desempeñarse bastante bien. En la figura 4.4 se muestran las movilidades típicas para el Si como una función de la temperatura y la adulteración. Para muestras de alta calidad, la movilidad continúa incrementándose a medida que la temperatura disminuye puesto que la disper-



**Figura 4.4**  
 a) Movilidad de los electrones en el silicio como función de la aduiteración y la temperatura; b) movilidad de electrones y huecos en el silicio como función de la aduiteración a 300 K. (Después de Sze (1981).)

sión por impurezas ionizadas está ausente y la dispersión de red decrece con la temperatura. Sin embargo, para muestras aduiteradas la movilidad muestra un pico a bajas temperaturas y luego disminuye, ya que la dispersión de impurezas domina el transporte a temperaturas más bajas en los materiales aduiterados.

#### 4.2.2 Transporte en campo de gran magnitud

—→ En la mayoría de los dispositivos electrónicos ocurre una proporción significativa de transporte electrónico bajo fuertes campos eléctricos. Esto es especialmente cierto en transistores de efecto de campo. En tales campos de gran magnitud ( $F \sim 1\text{-}100 \text{ kV/cm}^2$ ) los electrones se mantienen “calientes” y sus temperaturas (la temperatura del electrón definida a través de su energía promedio) puede ser mucho más alta que la temperatura de red. La energía extra se presenta debido a los fuertes campos eléctricos. La velocidad de deriva también es bastante alta. La descripción de electrones en tales campos eléctricos de gran magnitud es bastante compleja y requiere ya sea de técnicas numéricas (el enfoque de balanceo de ecuaciones) o de simulaciones por computadora (el método de Monte Carlo). En particular, los detalles de la estructura de bandas llega a ser muy importante. Consideraremos dos casos genéricos: Si y GaAs, los cuales son representativos del transporte en materiales con banda de separación indirecta y directa. Las relaciones de velocidad-campo para varios semiconductores se muestran en el apéndice B.

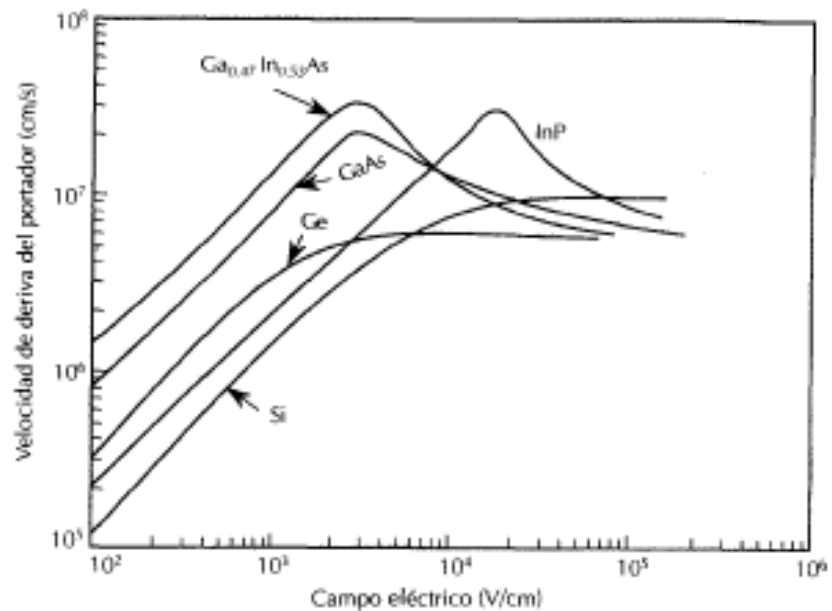
### Transporte en campo de gran magnitud en el Si

Como se discutió en el capítulo 3, la parte baja de la banda de conducción en el Si tiene seis valles equivalentes. Por encima de campos eléctricos de  $\sim 100 \text{ kV/cm}^{-1}$ , los electrones permanecen en estos valles. A medida que el campo se incrementa, la velocidad de los electrones aumenta constantemente. Sin embargo, en forma gradual, a medida que los electrones se hacen más calientes y ocupan estados de energía más altos, las tasas de dispersión comienzan a incrementarse también. Esto se debe principalmente al aumento en la densidad de estados con la energía. La velocidad eventualmente se satura, como se ilustra en la figura 4.6 para un valor de  $\sim 1.2 \times 10^7 \text{ cm-s}^{-1}$ .

El incremento monótono y la saturación posterior de la velocidad con el campo eléctrico es genérico de todos los semiconductores con banda de separación indirecta (AlAs, Ge, etc.) donde los electrones permanecen en los mismos valles inferiores con masa efectiva alta.

### Transporte en campo de gran magnitud en el GaAs

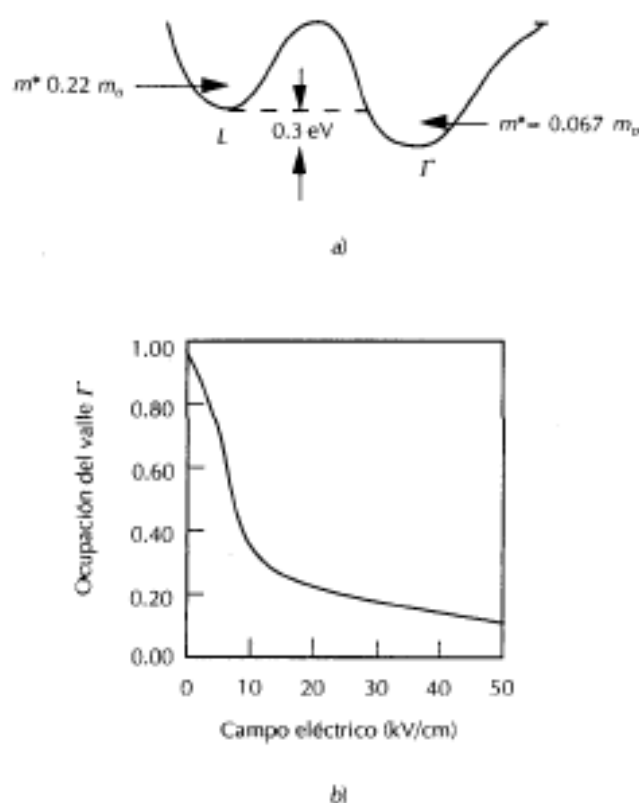
El transporte de electrones en el GaAs tiene algunas características notables que se explotan para aplicaciones de microondas. Estas características están relacionadas con la resistencia diferencial negativa en las relaciones  $v$ - $F$ . En el GaAs y otros semiconductores con banda de separación directa, los mínimos de la banda de conducción están formados de un valle simple con una masa muy ligera  $m^* = 0.067 m_0$  (el llamado valle  $\Gamma$ ). Ligeramente superior en energía,



**Figura 4.6**  
Relación velocidad-campo para los electrones en Si, Ge y GaAs.

separado por  $\sim 0.3$  eV, se encuentra un valle de masa pesada (el valle  $L$ ) con  $m^* = 0.22 m_0$ , como se ilustra en la figura 4.7a para campos eléctricos por debajo de  $\sim 3$  kV/cm $^{-1}$ , los electrones se hallan primordialmente en el valle donde tienen masa baja y una alta velocidad. La velocidad pico en el GaAs puro puede alcanzar un valor de  $\sim 2 \times 10^7$  cm-s $^{-1}$  para  $\sim 2.5$  kV/cm $^{-1}$ , como se muestra en la figura 4.6. A medida que se incrementa el campo, la fracción de electrones en el valle superior comienza a aumentar como se ilustra en la figura 4.7b. Puesto que los electrones del valle superior son pesados, la velocidad del electrón disminuye aun cuando el campo se incrementa. Eventualmente, cuando la mayor parte de los electrones se encuentren en el valle superior, la velocidad se satura a  $\sim 10^7$  cm-s $^{-1}$ .

Los resultados descritos para el GaAs son típicos del transporte de electrones en la mayoría de los semiconductores con banda de separación directa. Un sistema de material que ha llegado a ser muy importante para dispositivos de microondas de alta frecuencia es el In $_{0.53}$ Ga $_{0.47}$ As. Este material tiene una masa de portador muy pequeña ( $m^* = 0.04 m_0$ ) y una separación grande entre valles ( $\Delta E_{L-\Gamma} \sim 0.55$  eV) lo que proporciona una relación  $v$ - $F$  superior que la del GaAs. La velocidad pico en el In $_{0.53}$ Ga $_{0.47}$ As es de  $\sim 4.4 \times 10^7$  cm-s $^{-1}$ .



**Figura 4.7**

a) La estructura de bandas del GaAs. Para campos de baja intensidad, los electrones se hallan todos en el valle  $\Gamma$  de masa baja. Para campos de gran magnitud los electrones se transfieren por dispersión al valle  $L$  de baja movilidad y masa alta. b) La ocupación del valle en el transporte de electrones de GaAs como función del campo eléctrico.

---

### 4.2.3 Transporte de huecos

El transporte de huecos es considerablemente más complejo que el transporte de electrones, debido a la complejidad de la estructura de la banda de valencia. La densidad de estados es muy alta para la mayoría de los semiconductores, donde la excepción principal es el Ge. En la figura 4.8 se ilustran los resultados del transporte de huecos en campos de gran magnitud para el Si y el Ge. Las movilidades de los huecos en campos de baja magnitud para diversos semiconductores se enumeran en el apéndice B.

El transporte de huecos es muy importante en muchos dispositivos electrónicos tales como los de unión *p-n*, transistores bipolares y dispositivos CMOS. Es también de importancia en todos los dispositivos optoelectrónicos donde los electrones y los huecos participan como socios en el desempeño del dispositivo. Solamente en el Ge el transporte de huecos es comparable al de electrones. En el Si el transporte de huecos es relativamente escaso, pero debido a la facilidad de procesamiento y de fabricación, el Si ha llegado a ser el material de elección para los dispositivos electrónicos.

---

## 4.4 TRANSPORTE DE PORTADORES POR DIFUSIÓN

—> Hasta ahora hemos estudiado el transporte de portador debido a la deriva en un campo eléctrico. Es intuitivamente fácil ver por qué la fuerza debida a un campo eléctrico causaría que los electrones se movieran de cierta manera. Sin embargo, hay otro importante mecanismo de transporte que no involucra tales fuerzas directas. Éste es el proceso de difusión y es un fenómeno maravilloso que proviene de la termodinámica. Dependemos de este fenómeno cuando olfateamos una rebanada de pan recién horneado. Así lo hacen los tiburones, que pueden, según se cree, detectar unas cuantas moléculas de sangre difundiéndose desde una herida a muchos kilómetros de distancia!

Cuando existe un gradiente en la concentración de una especie de partículas móviles, las partículas se difunden de las regiones de alta concentración a las regiones de baja concentración. Esta difusión se debe al movimiento aleatorio de las partículas que tiende a incrementar el desorden o entropía del sistema.

En el caso de los electrones (o huecos), a medida que las partículas se mueven sufren colisiones aleatorias como hemos discutido en la sección previa. El proceso de colisión puede ser descrito mediante la trayectoria libre media  $\ell$  y el tiempo de colisión medio  $\tau_{\text{disp}}$ . La trayectoria libre media es la distancia promedio que viaja el electrón (hueco) entre colisiones sucesivas. Estas colisiones se deben a los diversos procesos de dispersión que fueron discutidos para el problema de la deriva. Entre las colisiones los electrones se mueven en forma aleatoria con la misma probabilidad de desplazarse en cualquier dirección (recuérdese que no hay campo

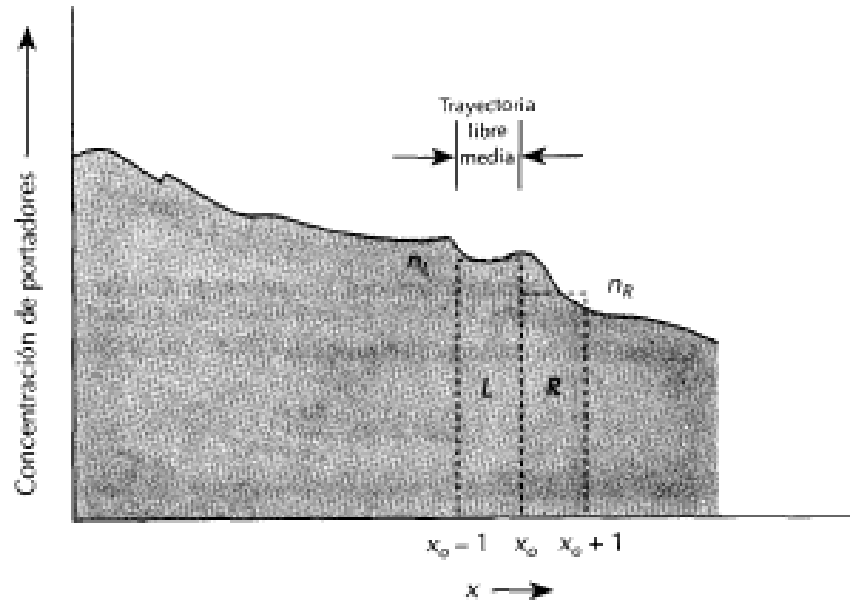
eléctrico). Estamos interesados en saber cómo se mueven (difunden) los electrones cuando hay un gradiente de concentración en el espacio.

Considere un perfil de concentración  $n(x, t)$  de electrones, como se muestra en la figura 4.12 al tiempo  $t$ . Vamos a calcular el flujo de electrones  $\phi(x, t)$  a través del plano  $x = x_0$  en cualquier instante de tiempo. Podemos considerar en una región del espacio una trayectoria libre media  $\ell$  a cada lado de  $x_0$  de la que los electrones pueden provenir a través de la frontera  $x = x_0$  en el tiempo  $\tau_{\text{disp}}$ . Los electrones de regiones adicionales aparte sufrirán colisiones que cambiarán en forma aleatoria sus direcciones. Puesto que en las dos regiones denominadas  $L$  y  $R$  en la figura 4.12 los electrones se mueven de manera aleatoria, la mitad de los electrones en la región  $L$  irán a través de  $x = x_0$  hacia la derecha y la otra mitad que se halla en la región  $R$  pasarán a través de  $x = x_0$  hacia la izquierda en el tiempo  $\tau_{\text{disp}}$ . El flujo hacia la derecha es entonces

$$\phi_n(x, t) = \frac{(n_L - n_R)\ell}{2\tau_{\text{disp}}} \tag{4.19}$$

donde  $n_L$  y  $n_R$  son las densidades de portador promedio en las dos regiones. Ya que las dos regiones  $L$  y  $R$  se encuentran separadas por la distancia  $\ell$ , podemos escribir

$$n_L - n_R \equiv -\frac{dn}{dx} \cdot \ell \tag{4.20}$$



**Figura 4.12**  
El perfil de concentración de electrones como una función del espacio. Los términos  $n_L$ ,  $n_R$ ,  $L$  y  $R$  se emplean para derivar la ley de difusión en el texto. La distancia  $\ell$  es la trayectoria libre media para los electrones, es decir, la distancia que ellos viajan entre colisiones.



De esta forma el flujo neto es

$$\phi_n(x, t) = -\frac{\ell^2}{2\tau_{\text{disp}}} \frac{dn(x, t)}{dx} = -D_n \frac{dn(x, t)}{dx} \quad (4.21)$$

donde  $D_n$  se denomina el coeficiente de difusión del sistema electrónico y depende claramente de los procesos de dispersión que controlan  $\ell$  y el  $\tau_{\text{disp}}$ . Puesto que la trayectoria libre media es esencialmente  $v_{\text{th}} \tau_{\text{disp}}$ , donde  $v_{\text{th}}$  es la velocidad térmica media, el coeficiente de difusión depende de la también temperatura.

De manera semejante, el coeficiente de difusión de los huecos proporciona el flujo de huecos debido a un gradiente de densidad de huecos

$$\phi_p(x, t) = -D_p \frac{dp(x, t)}{dx} \quad (4.22)$$

A consecuencia de este flujo de electrones y huecos, puede fluir una corriente en la estructura que en ausencia de un campo eléctrico está dada por (la corriente es justamente la carga multiplicada por el flujo de partículas)

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\text{tot}}(\text{diff}) &= \mathbf{J}_n(\text{diff}) + \mathbf{J}_p(\text{diff}) \\ &= eD_n \frac{dn(x, t)}{dx} - eD_p \frac{dp(x, t)}{dx} \end{aligned} \quad (4.23)$$

Mientras que tanto electrones como huecos se mueven en dirección de la menor concentración de electrones y huecos respectivamente, las corrientes que conducen ellos son opuestas debido a la diferencia de sus cargas.

**EJEMPLO 4.8** En un cristal de GaAs tipo  $n$  a 300 K, la concentración de electrones varía como

$$n(x) = 10^{16} \exp\left(-\frac{x}{L}\right) \text{ cm}^{-3} \quad x > 0$$

donde  $L$  es de  $1 \mu\text{m}$ . Calcule la densidad de corriente de difusión en  $x = 0$  si el coeficiente de difusión de electrones es de  $220 \text{ cm}^2/\text{s}$

La densidad de corriente de difusión es

$$\begin{aligned} J_n(\text{diff}) &= eD_n \left. \frac{dn}{dx} \right|_{x=0} \\ &= (1.6 \times 10^{-19} \text{ C}) (220 \text{ cm}^2/\text{s}) \left( \frac{10^{16} \text{ cm}^{-3}}{10^{-4} \text{ cm}} \right) \\ &= 3.5 \text{ kA/cm}^2 \end{aligned}$$

Nótese que en este problema la corriente de difusión de los electrones cambia con la posición en el espacio. Ya que la corriente total es constante en ausencia de cualquier fuente o sumidero de corriente, alguna otra corriente debe estar presente para compensar el cambio espacial en la corriente de difusión electrónica.

## 4.5 TRANSPORTE POR DERIVA Y DIFUSIÓN: LA RELACIÓN DE EINSTEIN

→ En muchos dispositivos electrónicos la carga se mueve bajo la influencia combinada de campos eléctricos y gradientes de concentración. La corriente está dada entonces por

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_n(x) &= -e\mu_n n(x)\mathbf{F}(x) + eD_n \frac{dn(x)}{dx} \\ \mathbf{J}_p(x) &= e\mu_p p(x)\mathbf{F}(x) - eD_p \frac{dp(x)}{dx} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Mientras se emplea una relación de esta clase es importante tener en mente que las movilidades del electrón y el hueco no son valores constantes. Son constantes sólo en campos eléctricos de baja intensidad. En campos de gran intensidad las movilidades disminuyen y el producto  $\mu F$  alcanza una constante correspondiente con la velocidad de saturación. Así, la corriente de deriva se satura y llega a ser independiente del campo. Este concepto se retoma más adelante cuando discutamos la corriente de deriva en transistores de unión  $p$ - $n$  y bipolares.

En nuestra discusión del coeficiente de difusión, habíamos indicado que es controlado esencialmente por los mismos mecanismos de dispersión que controlan la movilidad. Ahora estableceremos una importante relación entre ellos. Para hacerlo, examinemos el efecto de los campos eléctricos sobre las bandas de energía del semiconductor. Las bandas de energía representan los niveles de energía del electrón, incluso el efecto de la carga negativa. Si se aplica un campo eléctrico  $\mathbf{F}(x)$ , la fuerza sobre los electrones es  $-e\mathbf{F}(x)$  y por lo tanto la energía potencial  $U(x)$  y la fuerza estarán relacionados por

$$\text{Fuerza} = -\nabla U(x) \quad (4.25)$$

para campo eléctrico uniforme podemos escribir

$$U(x) = eF(x) \cdot x \quad (4.26)$$

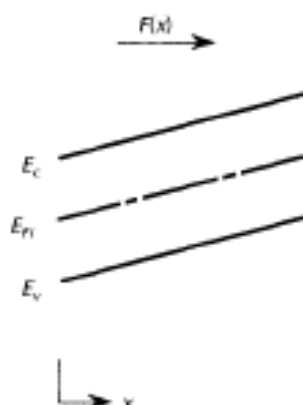
Así, puesto que la carga del electrón  $-e$  es negativa, las bandas se curvan como se ilustra en la figura 4.13 de acuerdo con la relación

$$E_c(x) = E_c(F=0) + eF(x) \cdot x \quad (4.27)$$

*De esta forma, si un potencial positivo es aplicado a la izquierda del material y otro negativo a la derecha, las bandas se doblarán de acuerdo con la figura 4.13. La deriva de electrones descenderá en la imagen de la banda de energía y así opuesta al campo.*

En equilibrio, las corrientes totales de electrón y hueco son individualmente cero y tenemos de la ecuación 4.24

$$\mathbf{F}(x) = \frac{D_n}{\mu_n} \frac{1}{n(x)} \frac{dn(x)}{dx} \quad (4.28)$$



**Figura 4.13** las bandas de energía en la presencia de un campo eléctrico  $F(x)$ . Las bandas se dibujan de manera convencional para las energías del electrón y justificar la carga negativa del electrón.

Si suponemos que la distribución del electrón está dada por la distribución de Boltzmann obtenemos (véase la ecuación 3.24)

$$n(x) = n_i \exp \left\{ - \left( \frac{E_{Fi} - E_F(x)}{k_B T} \right) \right\} \quad (4.29)$$

donde  $E_{Fi}$  y  $E_F(x)$  son el nivel de Fermi intrínseco y el nivel de Fermi en presencia de cargas extrínsecas. Esto da

$$\frac{dn}{dx} = \frac{n(x)}{k_B T} \left( \frac{dE_{Fi}}{dx} - \frac{dE_F}{dx} \right) \quad (4.30)$$

En equilibrio, el nivel de Fermi no puede variar espacialmente, de otro modo la probabilidad de hallar electrones a lo largo de una posición de energía constante variará a lo largo del semiconductor. Esto podría ocasionar que los electrones a un nivel dado de energía en una región donde la probabilidad es baja para moverse a la misma energía en una región donde la probabilidad es alta. Puesto que no está permitido por definición de las condiciones de equilibrio, el nivel de Fermi tiene que ser constante en equilibrio o

$$\boxed{\frac{dE_F}{dx} = 0} \quad (4.31)$$

Entonces tenemos de las ecuaciones 4.28 y 4.30 (mediante la relación  $F(x) = \frac{1}{e} \frac{dE_{Fi}}{dx}$ )

$$\boxed{\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{k_B T}{e}} \quad (4.32)$$

que es la relación de Einstein satisfecha para electrones. Hay una relación semejante para los huecos.

En la tabla 4.2 se enumeran las movilidades y coeficientes de difusión para algunos semiconductores a temperatura ambiente. Se observa que la relación de Einstein se satisface muy bien.

Para campos eléctricos de gran magnitud la movilidad disminuye como un inverso del campo eléctrico debido a la disminución del tiempo de dispersión  $\tau_{disp}$ . El coeficiente de difusión también tiene el mismo final. Para campos de gran intensidad la relación de Einstein no se mantiene, así como también lo hace para campos de baja magnitud, puesto que la función de distribución electrónica es bastante complicada.

**EJEMPLO 4.9** Utilice las relaciones de velocidad-campo para electrones en silicio para obtener el coeficiente de difusión en un campo eléctrico de 1 kV/cm y 10 kV/cm a 300 K.

De acuerdo con las relaciones  $v$ - $F$  dadas en el apéndice B, la velocidad de los electrones en el silicio es de  $-1.4 \times 10^6$  cm/s y  $-7 \times 10^6$  cm/s a 1 kV/cm y 10 kV/cm. Por medio de la relación de Einstein obtenemos para el coeficiente de difusión

$$D = \frac{\mu k_B T}{e} = \frac{v k_B T}{eF}$$

Esto nos da

$$\begin{aligned} D(1 \text{ kV/cm}^{-1}) &= \frac{(1.4 \times 10^6 \text{ m/s})(0.026 \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J})}{(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})(10^5 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1})} \\ &= 3.64 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s} = 36.4 \text{ cm}^2/\text{s} \\ D(10 \text{ kV/cm}^{-1}) &= \frac{(7 \times 10^6 \text{ m/s})(0.026 \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J})}{(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})(10^6 \text{ V}\cdot\text{m}^{-1})} \\ &= 1.82 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s} = 18.2 \text{ cm}^2/\text{s} \end{aligned}$$

El coeficiente de difusión disminuye con el campo debido a la muy alta tasa de dispersión para campos de alta intensidad.

**Tabla 4.2**

Movilidad de campo de baja intensidad y coeficientes de difusión para diversos semiconductores a temperatura ambiente. La relación de Einstein se satisface bastante bien.

	$D_n$ (cm <sup>2</sup> /s)	$D_p$ (cm <sup>2</sup> /s)	$\mu_n$ (cm <sup>2</sup> /V·s)	$\mu_p$ (cm <sup>2</sup> /V·s)
Ge	100	50	3 900	1 900
Si	35	12.5	1 350	480
GaAs	220	10	8 500	400

---

## 4.7 INYECCIÓN DE CARGA Y CUASI NIVELES DE FERMI

En la discusión del coeficiente de absorción y el tiempo de recombinación, no hemos mencionado si los *electrones y los huecos se encuentran realmente presentes en los estados que están involucrados en los procesos ópticos*. Por ejemplo, en la absorción de fotones hemos supuesto que el *estado inicial en la banda de valencia está ocupado mientras que el estado final se encuentra vacío*. En general, esto puede no ser cierto. Si los electrones y huecos son inyectados en un semiconductor, ya sea por contactos externos o mediante excitación óptica, el sistema puede no estar en equilibrio, y entonces surge la pregunta: *¿qué clase de función de distribución describe la ocupación de electrones y huecos?* Sabemos que en equilibrio la ocupación del electrón y el hueco se representa por la función de Fermi. Se necesita una nueva función para describir el sistema cuando los electrones y los huecos no se hallan en equilibrio.

---

### 4.7.1 Cuasi niveles de Fermi

—→ Sabemos que en equilibrio la distribución de electrones y huecos está dada por la función de Fermi que está definida una vez que se conoce el nivel de Fermi. También el producto de electrones y huecos,  $np$  es constante. Si los electrones y huecos en exceso se inyectan en el semiconductor, claramente la misma función no describirá la ocupación de los estados. Bajo ciertas suposiciones la ocupación de electrones y huecos pueden describirse mediante el uso de los *cuasi-niveles de Fermi*. Estas suposiciones son:

- i) Los electrones están esencialmente en equilibrio térmico en la banda de conducción y los huecos en exceso se hallan en equilibrio en la banda de valencia. Esto significa que

los electrones no están ni ganando ni perdiendo energía de los átomos de la red cristalina.

- ii) El tiempo de recombinación electrón-hueco es mucho mayor que el tiempo para que los electrones y huecos alcancen el equilibrio dentro de las bandas de conducción y valencia, respectivamente.

En la mayoría de los problemas de interés, el tiempo para alcanzar el equilibrio en la misma banda es aproximadamente de unos cuantos picosegundos mientras el tiempo de recombinación  $e-h$  se encuentra en algún lugar entre un nanosegundo y un microsegundo. De este modo, las suposiciones anteriores por lo general se cumplen. En este caso, los electrones y huecos en cuasi-equilibrio pueden representarse por una función de electrón de Fermi  $f^e$  (con nivel de Fermi de electrón) y una función de Fermi de hueco  $f^h$  (con un *diferente* nivel de Fermi de hueco). Ahora tenemos que

$$n = \int_{E_c}^{\infty} N_c(E) f^e(E) dE \quad (4.46)$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} N_v(E) f^h(E) dE \quad (4.47)$$

donde

$$f^e(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_{F_n}}{k_B T}\right) + 1} \quad (4.48)$$

$$\begin{aligned} f^h(E) = 1 - f^e(E) &= 1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_{F_p}}{k_B T}\right) + 1} \\ &= \frac{1}{\exp\left(\frac{E_{F_p} - E}{k_B T}\right) + 1} \end{aligned} \quad (4.49)$$

En equilibrio,  $E_{F_n} = E_{F_p}$ . Si electrones y huecos en exceso se inyectan en el semiconductor, el nivel de Fermi de electrón  $E_{F_n}$  se mueve hacia la banda de conducción, mientras el nivel de Fermi del hueco  $E_{F_p}$  lo hace hacia la banda de valencia. La habilidad para definir cuasi-niveles de Fermi  $E_{F_n}$  y  $E_{F_p}$  nos proporciona un enfoque muy poderoso para resolver problemas fuera de equilibrio los cuales son, por supuesto, de enorme interés en dispositivos.

Al definir niveles de Fermi separados para electrones y huecos, se pueden estudiar las propiedades de los portadores en exceso por medio de la misma relación entre el nivel de Fermi y la densidad de portador como desarrollamos para el problema en equilibrio. De esta manera, en la aproximación de Boltzmann tenemos

$$\boxed{\begin{aligned} n &= N_c \exp\left[\frac{(E_{Fn} - E_c)}{k_B T}\right] \\ p &= N_v \exp\left[\frac{(E_v - E_{Fp})}{k_B T}\right] \end{aligned}} \quad (4.50)$$

En la más precisa aproximación de Joyce-Dixon tenemos que (véase la sección 1.5)

$$(E_{Fn} - E_c) = k_B T \left[ \ln \frac{n}{N_c} + \frac{n}{8N_c} \right] \quad (4.51)$$

con una expresión similar para  $E_v - E_{Fp}$ . Advierta el cambio de signo para la expresión de cuasi-nivel de Fermi para el hueco.

**EJEMPLO 4.15** Por medio de la estadística de Boltzmann calcule la posición de los cuasi-niveles de Fermi del electrón y del hueco cuando una densidad e-h de  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  se inyecta en silicio puro (no adulterado) a 300 K. Las densidades de electrón y de hueco están relacionadas con los cuasi-niveles de Fermi por las ecuaciones.

$$\begin{aligned} n_c &= N_c \exp[(E_{Fn} - E_c)/k_B T] \\ p_v &= N_v \exp[(E_v - E_{Fp})/k_B T] \end{aligned}$$

Recuérdese que cuando discutimos las concentraciones de portadores en *semiconductores en equilibrio*, utilizamos ecuaciones semejantes, excepto que  $E_{Fn}$  y  $E_{Fp}$  eran las mismas. Aquí, puesto que no estamos en equilibrio, las dos son diferentes.

A temperatura ambiente para el Si tenemos que

$$\begin{aligned} N_c &= 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3} \\ N_v &= 1.04 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3} \end{aligned}$$

Si  $n_c = p_v = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , obtenemos ( $k_B T = 0.026 \text{ eV}$ )

$$\begin{aligned} E_{Fn} &= k_B T \ln \left[ \frac{n}{N_c} \right] + E_c \\ &= E_c - 0.146 \text{ eV} \\ E_{Fp} &= E_v - k_B T \left[ \ln \frac{p}{N_v} \right] \\ &= E_v + 0.121 \text{ eV} \end{aligned}$$

Ya que en el Si la banda de separación es  $E_c = E_v = 1.1 \text{ eV}$ , tenemos que

$$\begin{aligned} E_{Fn} - E_{Fp} &= (E_c - E_v) - (0.146 + 0.121) \\ &= 1.1 - 0.267 = 0.833 \text{ eV} \end{aligned}$$

La tasa de recombinación espontánea es bastante importante tanto para dispositivos electrónicos como optoelectrónicos. Es importante examinar la tasa para varios casos importantes. Se proporcionarán los resultados para la recombinación electrón-hueco para los casos siguientes:

- i) **Inyección de portador minoritario.** Si  $n \gg p$  y la muestra está fuertemente adulterada, podemos suponer que  $f^e(E^e)$  está cerca de la unidad. Entonces tenemos para la tasa a la que los huecos se recombinarán con electrones,

$$R_{\text{espon}} \equiv \frac{1}{\tau_p} \int d(\hbar\omega) N_{cv} f^e(E^e) = \frac{1}{\tau_p} \int d(\hbar\omega) N_v f^h(E^h) \left( \frac{m_r^*}{m_h^*} \right)^{3/2} \\ \cong \frac{1}{\tau_p} \left( \frac{m_r^*}{m_h^*} \right)^{3/2} p \quad (4.59)$$

De esta forma, la tasa de recombinación es proporcional a la densidad de portador minoritario (huecos en este caso). Esta condición es útil para diodos  $p$ - $n$  y transistores bipolares que serán discutidos después.

- ii) **Inyección fuerte.** Este caso es importante cuando se inyecta una alta intensidad tanto de electrones como de huecos. Ahora podemos suponer que tanto  $f^e$  como  $f^h$  son funciones de paso agudo y obtenemos aproximadamente

$$R_{\text{espon}} = \frac{n}{\tau_p} = \frac{p}{\tau_p} \quad (4.60)$$

- iii) **Inyección débil.** En este caso podemos utilizar la distribución de Boltzmann para describir las funciones de Fermi. Tenemos que

$$f^e \cdot f^h = \exp \left\{ -\frac{(E_c - E_{F0})}{k_B T} \right\} \exp \left\{ -\frac{(E_{F0} - E_v)}{k_B T} \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{(\hbar\omega - E_g)}{k_B T} \right\} \quad (4.61)$$

La tasa de emisión espontánea ahora resulta ser de

$$R_{\text{espon}} = \frac{1}{2\tau_p} \left( \frac{2\pi\hbar^2 m_r^*}{k_B T m_e^* m_h^*} \right)^{3/2} np \quad (4.62)$$



Si escribimos la carga total como la carga en equilibrio más el exceso de carga,

$$n = n_0 + \Delta n; p = p_0 + \Delta n \quad (4.63)$$

tenemos para la recombinación de portador en exceso (nótese que en equilibrio las tasas de recombinación y generación son iguales)

$$R_{\text{expon}} = \frac{1}{2\tau_0} \left( \frac{2\pi\hbar^2 n v_r^*}{k_B T m_e^* m_h^*} \right)^{3/2} (\Delta n p_0 + \Delta n n_0) \quad (4.64)$$

Si  $\Delta n = \Delta p$ , podemos definir la tasa de una recombinación de portador en exceso simple como  $\frac{\Delta n}{\tau_r}$ , donde

$$\frac{1}{\tau_r} = \frac{1}{2\tau_0} \left( \frac{2\pi\hbar^2 n v_r^*}{k_B T m_e^* m_h^*} \right) (n_0 + p_0) \quad (4.65)$$

Para inyección baja  $\tau_r$  es mucho mayor que  $\tau_0$  y es un resultado del hecho que, para inyección baja, los electrones tienen una baja probabilidad de encontrar un hueco con el cual recombinarse.

- iv) **Condición de inversión.** Otra aproximación útil ocurre cuando las densidades del electrón y del hueco son de tal forma que  $f^e + f^h = 1$ . Ésta es la condición para inversión cuando los coeficientes de emisión y de absorción llegan a ser iguales. Si suponemos en este caso que  $f^e \sim f^h = 1/2$ , obtenemos la relación aproximada

$$R_{\text{expon}} = \frac{n}{4\tau_0} = \frac{p}{4\tau_0} \quad (4.66)$$

El tiempo de vida de la recombinación es de aproximadamente  $4\tau_0$  en este caso. Éste es un resultado útil para estimar la corriente de umbral de los láseres de semiconductor.

Los procesos de ganancia y recombinación discutidos aquí son muy importantes tanto para dispositivos electrónicos como optoelectrónicos, que serán discutidos más tarde. Apuntamos de la discusión anterior que el tiempo de recombinación para un portador en exceso simple puede escribirse en muchas situaciones en la forma

$$\tau_r = \frac{\Delta n}{R_{\text{expon}}} \quad (4.67)$$

Para inyección de portadores minoritarios o inyección fuerte  $\tau_r \cong \tau_0$ . En general,  $R_{\text{expon}}$  tiene una fuerte dependencia de la densidad de portador como  $\tau_r$ .

#### 4.10 LA ECUACIÓN DE CONTINUIDAD: LONGITUD DE DIFUSIÓN

—→ En nuestras discusiones sobre transporte de carga, habíamos considerado los procesos de deriva y difusión a través del semiconductor, sin preocuparnos acerca de la recombinación electrón-hueco. Los procesos de recombinación remueven los electrones y huecos y alteran así la imagen de transporte de carga. Para describir el transporte y la recombinación de los electrones y huecos inyectados desarrollemos una ecuación de continuidad para el problema. El proceso de recombinación de portador es crítico para cualquier dispositivo en que intervenga tanto flujo de electrones como de huecos (por ejemplo el diodo  $p$ - $n$ , el transistor de unión bipolar).

Si consideramos un volumen espacial en el que ocurra transporte de carga y recombinación, tenemos la simple igualdad

$$\begin{array}{l} \text{Tasa de flujo} \\ \text{de partículas} \end{array} = \begin{array}{l} \text{Tasa de flujo de partículas debido a la corriente} - \\ \text{Tasa de partículas perdidas debido a la recombinación} \end{array}$$

Esta ecuación es simplemente un postulado de conservación de partículas. Si  $\delta n$  es la densidad de portadores sobrantes o en exceso de la región, la tasa de recombinación en un volumen  $A \cdot \Delta x$  ilustrado en la figura 4.18 puede escribirse aproximadamente como

$$R = \frac{\delta n}{\tau_n} \cdot A \cdot \Delta x \quad (4.81)$$

donde  $\tau_n$  es el tiempo de recombinación del electrón por partícula en exceso e incluye componentes radiativos y no radiativos. La tasa de flujo de partículas dentro del mismo volumen debida a la corriente  $J_n$  está dada por

$$\left[ \frac{-J_n(x)}{e} + \frac{J_n(x + \Delta x)}{e} \right] A \cong \frac{1}{e} \frac{\partial J_n(x)}{\partial x} \Delta x \cdot A \quad (4.82)$$

La tasa total del electrón construida en el volumen  $A \cdot \Delta x$  es entonces

$$A \cdot \Delta x \left[ \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial \delta n}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial J_n(x)}{\partial x} - \frac{\delta n}{\tau_n} \right] \quad (4.83)$$

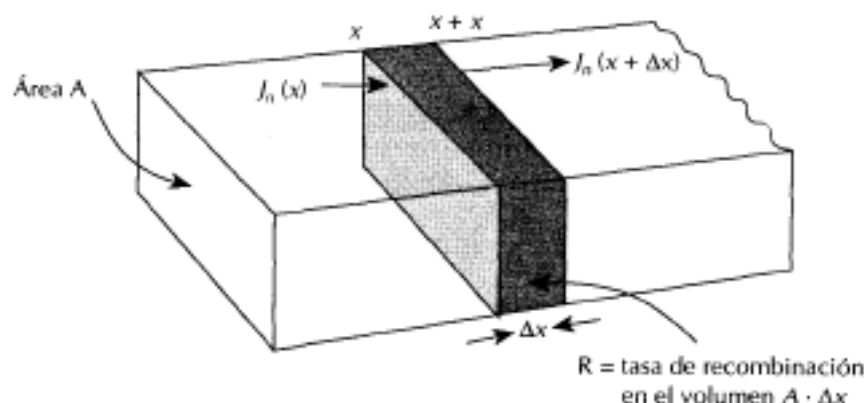


Figura 4.18

Una conservación de partículas aplicada a un volumen  $A \cdot \Delta x$ . La diferencia en las corrientes de las partículas tienen para igualar la tasa de recombinación.

donde  $\delta n$  es la densidad de portadores en exceso, que es la única parte que cambia con el tiempo. Las mismas consideraciones se aplican a los huecos. Así tenemos las ecuaciones de continuidad para los electrones y los huecos

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial J_n(x)}{\partial x} - \frac{\delta n}{\tau_n} \quad (4.84)$$

$$\frac{\partial \delta p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial J_p(x)}{\partial x} - \frac{\delta p}{\tau_p} \quad (4.85)$$

Es interesante examinar estas ecuaciones para el caso especial donde la corriente se conduce únicamente por el proceso de difusión. Esto ocurre en los casos de transportes de unión  $p$ - $n$  así como en los transistores bipolares. Al escribir las corrientes de difusión como (véase la ecuación 4.23)

$$J_n(\text{dif}) = eD_n \frac{\partial \delta n}{\partial x} \quad (4.86)$$

$$J_p(\text{dif}) = -eD_p \frac{\partial \delta p}{\partial x} \quad (4.87)$$

tenemos

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 \delta n}{\partial x^2} - \frac{\delta n}{\tau_n} \quad (4.88)$$

$$\frac{\partial \delta p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2} - \frac{\delta p}{\tau_p} \quad (4.89)$$

Estas ecuaciones se emplearán cuando discutamos las respuestas transitorias de tiempo de los diodos  $p-n$  y de transistores bipolares. Estas ecuaciones también son utilizadas para estudiar el perfil de carga en estado estacionario en estos dispositivos. En estado estacionario tenemos que (la derivada del tiempo es cero)

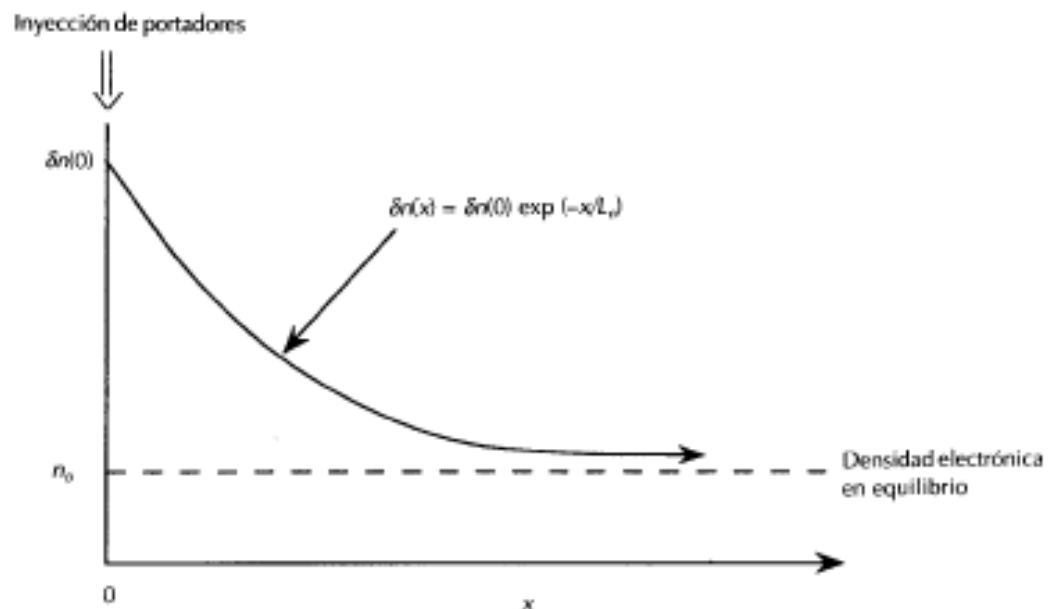
$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d^2 \delta n}{dx^2} &= \frac{\delta n}{D_n \tau_n} = \frac{\delta n}{L_n^2} \\ \frac{d^2 \delta p}{dx^2} &= \frac{\delta p}{D_p \tau_p} = \frac{\delta p}{L_p^2} \end{aligned}} \quad (4.90)$$

donde  $L_n(L_p)$  definidas como  $D_n \tau_n$  ( $D_p \tau_p$ ) se denominan las longitudes de difusión, por razones que aclararemos a continuación.

Considérese primero el caso donde debido a algún mecanismo externo de inyección se mantiene una densidad electrónica de exceso  $\delta n(0)$  en el borde del semiconductor  $x = 0$ , como se ilustra en la figura 4.19. Si  $n_0$  es la densidad de equilibrio, estamos interesados en explicar cómo la densidad de exceso varía con la posición. La solución general de la ecuación diferencial de segundo orden 4.90 es

$$\delta n(x) = A_1 e^{-x/L_n} + A_2 e^{+x/L_n} \quad (4.91)$$

Puesto que para valores grandes de  $x$ ,  $\delta n(x)$  debe tender a cero, debemos requerir que  $A_2 = 0$ . Nótese que sólo podemos imponer esta condición si la muestra es grande. Ya que  $\delta n(0)$  se conoce y se fija por la condición de inyección, tenemos que



**Figura 4.19**

Los electrones se inyectan a  $x = 0$  en una muestra. Para  $x = 0$ , se mantiene una concentración de portador fija. La figura muestra cómo el exceso de portadores decae dentro del semiconductor.

$$A_2 = \delta n(0) \quad (4.92)$$

La solución es por lo tanto

$$\delta n(x) = \delta n(0)e^{-x/L_n} \quad (4.93)$$

La longitud de difusión  $L_n$  representa la distancia sobre la cual la densidad de portador inyectado decae a  $1/e$  de su valor original. También representa la distancia promedio que un electrón se difundirá antes de que se recombinen con un hueco. Esto puede verse como sigue.

La probabilidad de que un electrón sobreviva arriba de un punto  $x$  sin recombinarse es

$$\frac{\delta n(x)}{\delta n(0)} = e^{-x/L_n} \quad (4.94)$$

La probabilidad de que se recombinen en una distancia  $\Delta x$  es

$$\frac{\delta n(0) - \delta n(x - \Delta x)}{\delta n(x)} = -\frac{\Delta x}{\delta n(x)} \frac{d\delta n(x)}{dx} = \frac{1}{L_n} \Delta x \quad (4.95)$$

donde se ha expandido  $\delta n(x + \Delta x)$  en términos de  $\delta n(x)$  y la primera derivada de  $\delta n$ . De este modo la probabilidad de que el electrón sobreviva arriba de un punto  $x$  y luego se recombinen es

$$P(x)\Delta x = \frac{1}{L_n} e^{-x/L_n} \Delta x \quad (4.96)$$

Así la distancia promedio que un electrón se puede mover y después recombinarse es

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_0^\infty xP(x) dx = \int_0^\infty \frac{x e^{-x/L_n}}{L_n} dx \\ &= L_n \end{aligned} \quad (4.97)$$

Esta distancia promedio ( $= \sqrt{D_n \tau_n}$ ) depende del tiempo de recombinación y la constante de difusión en el material. En la derivación de esta sección, utilizamos una forma simple de tasa de recombinación

$$R = \frac{\delta n}{\tau_n} \quad (4.98)$$

donde  $\tau_n$  está dada en términos de las tasas radiativa y no radiativa como

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_{nr}} \quad (4.99)$$

La forma simple  $\delta n/\tau_n$  es válida, por ejemplo, para la recombinación de portador minoritario ( $p \gg n$ ). Estas ecuaciones se utilizan por consiguiente de manera amplia para discutir la inyección de portador minoritario.