# LE ORIGINI DELLA TEORIA QUANTISTICA

**LEZIONE N.5a** 

**SEMICONDUTTORI-DIODO** 

## **TEORIA DELLE BANDE NEI CRISTALLI**

In un cristallo gli atomi sono disposti regolarmente occupando posizioni ben determinate, le distanze reticolari A parte l'agitazione termica hanno valori precisi determinati dall'equilibrio di forze attrattive e repulsive .

## IL RETICOLO CRISTALLINO

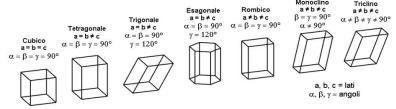
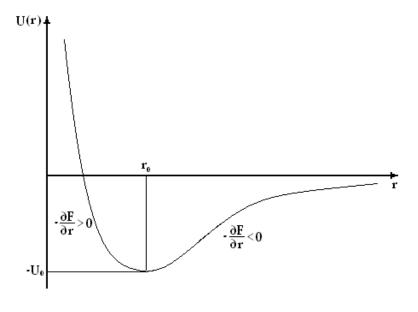
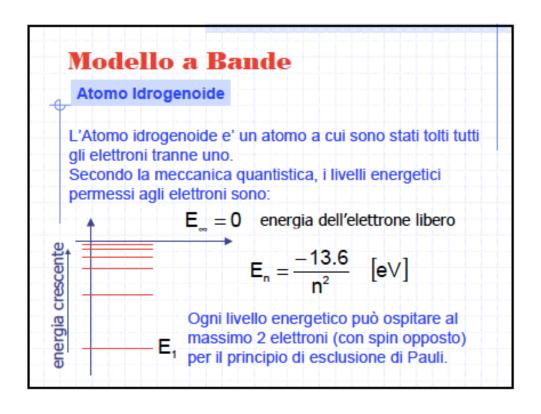


Figura 6 - I sette sistemi di cristallizzazione.

La struttura interna di un cristallo è quindi caratterizzata da una disposizione degli atomi nello spazio tale che una stessa configurazione si ripeta a intervalli regolari nelle tre dimensioni: tale struttura prende il nome di RETICOLO.

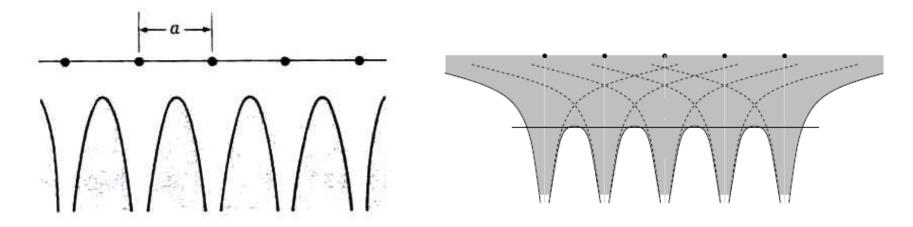
#### Potenziale di Lennard-Jones





#### **CONDUZIONE NEI SOLIDI**

La determinazione dei livelli di energia consentiti agli elettroni in un cristallo può essere effettuata immaginando di formare il cristallo partendo da un insieme di N atomi a grande distanza e di portarli nella configurazione cristallina.



Finché gli atomi sono lontani, gli stati quantici degli elettroni in ciascun atomo non sono influenzati dalla presenza degli elettroni degli altri atomi. Quando gli atomi sono avvicinati la distribuzione spaziale (orbitali) degli elettroni più esterni cominciano a sovrapporsi, il sistema di N atomi va considerato come un unico sistema quantistico. N elettroni che si trovavano sullo stesso livello di energia, a causa del principio di esclusione di Pauli si sposteranno su N livelli ravvicinati. Ciò vale per gli elettroni di valenza (esterni), ma anche per gli stati interni.

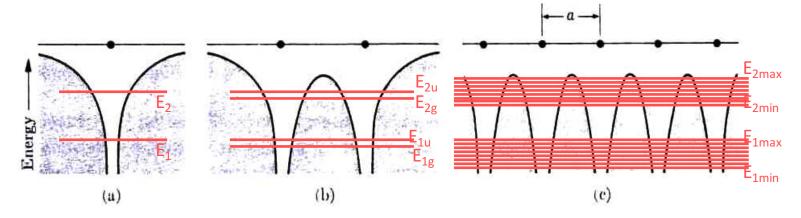
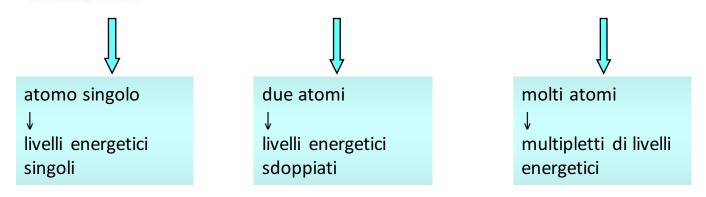
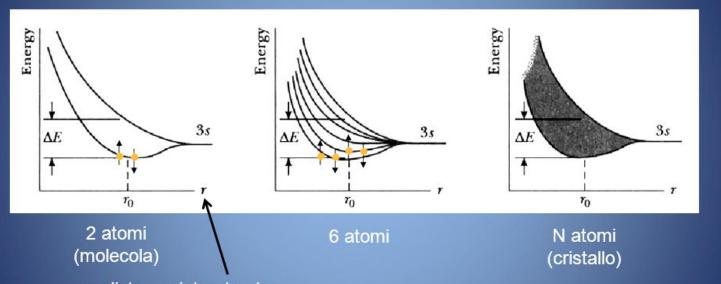


Fig. 6-15. Coulomb potential energy due to (a) a single ion, (b) two ions, (c) several ions in a row.



# Formazione di bande di energia



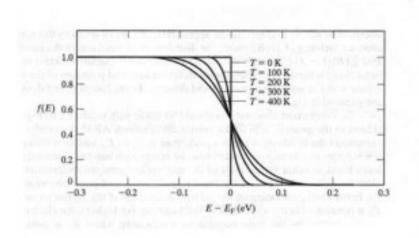
r = distanza interatomica

*r* grande = atomi sparati e orbitali indipendenti

*r* via via più piccolo = atomi vicini = orbitali sovrapposti = Pauli

#### STATISTICA DI FERMI

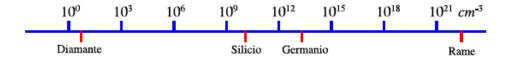
Gli elettroni nei metalli alla temperatura T si comportano come un gas che segue la statistica di Fermi-Dirac:



$$f_F(E) = \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1}$$

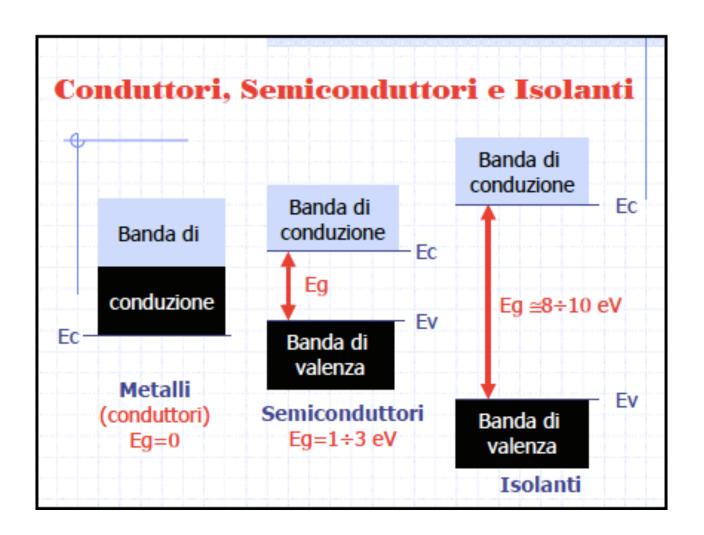
Dove  $E_F$  èuna costante detta livello di energia di Fermi. Essa fornisce la probabilità che un dato stato di energia E sia occupato. Ogni stato di energia può essere occupata da un solo elettrone (Pauli).

Nel caso dei metalli l'energia di Fermi  $E_F$  alla temperatura dello zero assoluto è dell'ordine di i 5eV. La dipendenza dalla Temperatura di  $E_F$  è talmente piccola da poter ritenere tale valore costante.

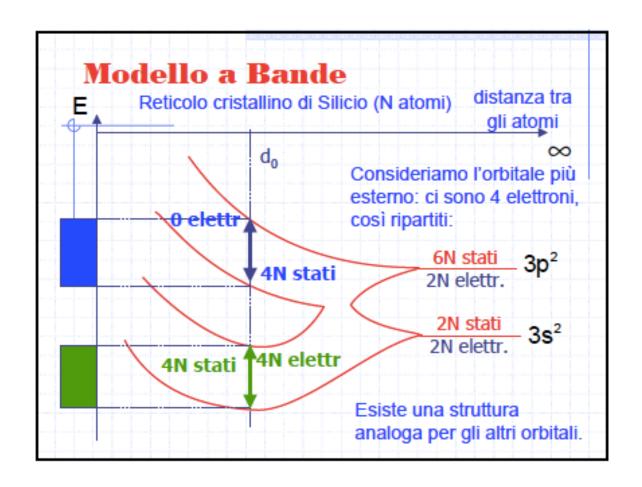


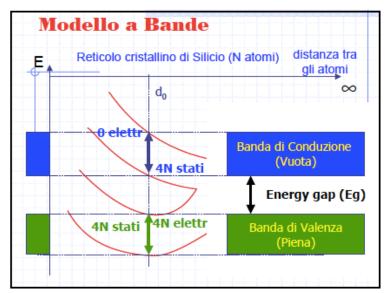
	IIIA	IVA	VA	VIA	
	B Boro	C Carbonio	7 N Azoto	8 O Ossigeno	
IIB	Al Alluminio	Si Silicio	P Fosforo	S Zolfo	
Zn Zinco	Ga Gallio	Ge Germanio	As Arsenico	Se Selenio	
 Cd Cadmio	In Indio	Sn Stagno	51 Sb Antimonio	Te Tellurio	
Hg Mercurio	Ti Ti	Pb Piombo	Bi Bismuto	Po Polonio	

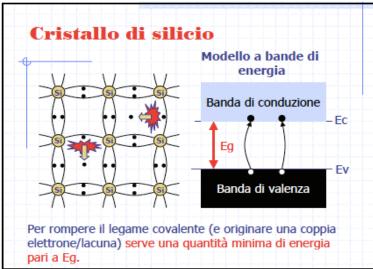
Conduttori  $\rho < 10^{-5} \Omega m$   $(rame: 3 \cdot 10^{-8} \Omega m)$ Semiconduttori  $10^{-5} < \rho < 10^{3} \Omega m$   $(silicio: 2300 \Omega m)$ Isolanti  $\rho > 10^{3} \Omega m$   $(diamante: 10^{14} \Omega m)$ 



## **I SEMICONDUTTORI**





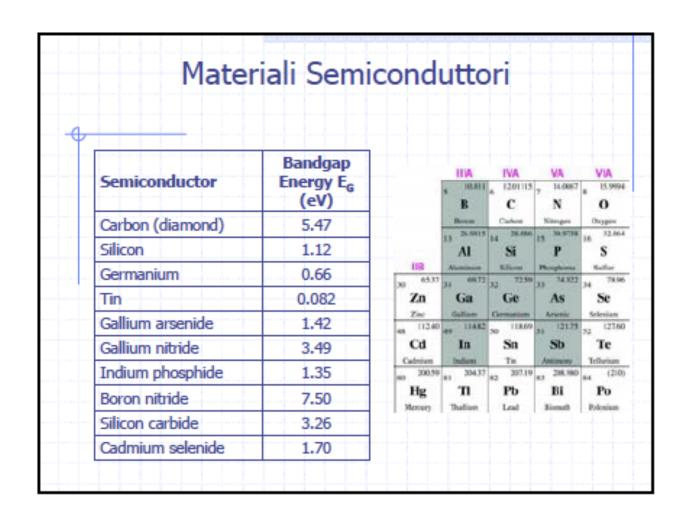


Un semiconduttore a bassissima temperatura (~ 0 K) ha una struttura cristallina simile a quella "ideale" non sono disponibili cariche libere e si comporta come un isolante.

A temperatura ambiente (~ 300 K) alcuni legami covalenti sono rotti (energia termica fornita al cristallo) e la conduzione diventa possibile (elettroni liberi).

La mancanza di un elettrone in un legame covalente è detta lacuna.

Una lacuna può fungere da portatore libero di carica.



#### SEMICONDUTTORE INTRINSECO

Un semiconduttore intrinseco è privo di ogni impurità e le sue proprietà dipendono dal materiale soltanto. Alla temperatura di 0°K le bande di energia mostrano la banda di valenza completa, la banda di conduzione vuota, separate dall' Energy Gap E<sub>g.</sub>

A temperatura ambiente una piccola frazione degli elettroni di valenza sono eccitati termicamente e saltano sulla banda si conduzione. La conducibilità del semiconduttore dipende dagli elettroni di conduzione e da un egual numero di lacune lasciate nella banda di valenza.

Per calcolare il numero di elettroni per unità di volume presenti nella banda di conduzione alla temperatura T, dobbiamo conoscere la funzione "densità di stati" e il livello di Fermi.

Abbiamo visto dalla soluzione dell'equazione di Schroedinger che gli stati di energia permessi per gli elettroni in una buca di potenziale a pareti infinite sono dati da:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{8m L^2}$$

Vogliamo ora calcolare la densità degli stati g(E) per la scatola, dove g(E) dE è il numero degli stati permessi agli elettroni nell'intervallo di energia E ed E+dE. Il numero di stati (sapendo che ci sono due valori di spin) è dato da (Sommerfeld):

$$g(n)dn = 2\frac{1}{8} \frac{4\pi n^2 dn}{V}$$

Da cui ricaviamo il numero di stati per l'energia:

$$g(E)dE = \frac{\pi}{V} \frac{8mL^2 E}{h^2} \frac{\sqrt{8mL^2}}{h} \frac{dE}{2\sqrt{E}}$$

$$V = L^3$$

$$g(E)dE = \frac{8\sqrt{2}\pi(m)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E}dE$$

$$g(E)dE = \frac{8\sqrt{2}\pi(m)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E}dE$$

La probabilità di occupazione è data dalla statistica di Fermi:

$$f_F(E) = \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1}$$

Il numero di elettroni per unità di volume con energia compresa tra E ed E+dE è dato dal prodotto del numero di stati per la probabilità di occupazione:

$$N(E)dE = g(E)f_F(E) = \frac{8\sqrt{2}\pi(m)^{\frac{3}{2}}}{h^3(e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1)}\sqrt{E}dE$$

Per calcolare il livello di Fermi imponiamo che a 0 K per energie minori di Ef troviamo tutti gli n elettroni

$$N(E)dE = g(E)f_F(E) = \frac{8\sqrt{2}\pi(m)^{\frac{3}{2}}}{h^3(e^{\frac{E-E_F}{kT}}+1)}\sqrt{E}dE$$

$$n = \int_0^{E_F} N(E) dE = \frac{\sqrt{2}\pi(m)^{\frac{3}{2}}}{3h^3} \sqrt{E} dE = \frac{\sqrt{2}\pi(m)^{\frac{3}{2}}}{3h^3} E_F^{\frac{3}{2}}$$

Da cui

$$E_F = \frac{3^{\frac{3}{2}}h^2}{8\pi^{\frac{3}{2}}m}n^{\frac{2}{3}}$$

Se assumiamo che il limite inferiore della banda di conduzione è  $E_{\it c}$ 

$$N(E)dE = g(E)f_F(E) = \frac{8\sqrt{2}\pi(m)^{\frac{3}{2}}}{h^3(e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1)}\sqrt{E - E_C}dE$$

Calcoliamo il numero di elettroni nella banda di conduzione

$$n = \int_{E_F}^{\infty} N(E) dE = 2 \left( \frac{2\pi m kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-(E_c - E_F)}{kT}}$$

Eseguendo lo stesso calcolo per il numero di lacune otteniamo

$$p = \int_{-\infty}^{E_{v}} N(E) dE = 2 \left( \frac{2\pi m kT}{h^{2}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-(E_{F} - E_{v})}{kT}}$$

Per un semiconduttore intrinseco n = p, da cui ricaviamo:

$$E_F \approx \frac{E_v + E_c}{2}$$

La conducibilità di un semiconduttore intrinseco è data da:

$$J = -nev_n + pev_n$$

$$J = ne\mu_n E + pe\mu_n E$$



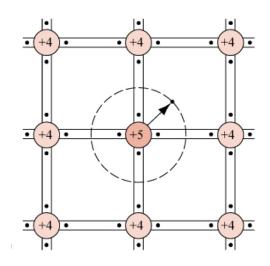
$$\sigma = ne\mu_n + pe\mu_n$$

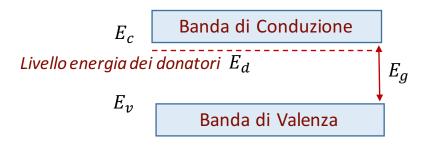
#### LIVELLO DI FERMI PER UN SEMICONDUTTORE ESTRINSECO

Un semiconduttore estrinseco contiene delle impurità che introducono nuovi livelli di energia. Consideriamo ad esempio il cristallo di silicio, mezzo di elevata costante dielettrica (12) e supponiamo di inserire un elemento con 5 elettroni di valena, di cui solo 4 creano legami covalenti. Il 5° elettrone è debolmente legato al suo atomo, con un'energia di soli 0.049 eV. A causa dell'eccitazione termica si triva per la maggior parte del tempo nella banda di conduzione. L'atomo di impurità cene detto "donatore". Un semiconduttore "drogato" inserendo "donatori" è chiamato di tipo "n", perché la conduzione è dovuta principalmente agli elettroni degli atomi donatori.

Quando l'atomo inserito ha 3 elettroni di valenza, ma occupa una posizione dove è possibile un legame covalente con 4 elettroni. Mancando un elettrone, questo atomo può catturare facilmente un elettrone libero, l'atomo è detto "accettore". Materiali drogati con tai impurità sono detti di tipo p, gli accettori introducono livelli di energia nella banda proibita di circa 0.1 eV al di sopra della banda di valenza.

#### **SEMICONDUTTORE ESTRINSECO**

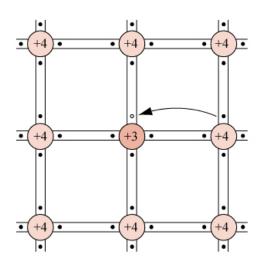




### Semiconduttore drogato tipo n

Un semiconduttore estrinseco contiene delle impurità che introducono nuovi livelli di energia. Consideriamo ad esempio il cristallo di silicio, mezzo di elevata costante dielettrica (12) e supponiamo di inserire un elemento con 5 elettroni di valena, di cui solo 4 creano legami covalenti. Il 5° elettrone è debolmente legato al suo atomo, con un'energia di soli 0.049 eV. A causa dell'eccitazione termica si triva per la maggior parte del tempo nella banda di conduzione. L'atomo di impurità cene detto "donatore". Un semiconduttore "drogato" inserendo "donatori" è chiamato di tipo "n", perché la conduzione è dovuta principalmente agli elettroni degli atomi donatori.

### Semiconduttore drogato tipo p



l'inscrimente di atemi denatori e accettori incrementa la

Quando l'atomo inserito ha 3 elettroni di valenza, ma

occupa una posizione dove è possibile un legame

covalente con 4 elettroni. Mancando un elettrone, questo

atomo può catturare facilmente un elettrone libero,



L'inserimento di atomi donatori e accettori incrementa la conducibilità del cristallo rispetto al livello intrinseco.

#### Livello di Fermi nei semiconduttori estrinseci

Aggiungendo donatori al materiale intrinseco fa incrementare il livello di Fermi nella banda proibita (gap) di una quantità che dipende dal drogaggio e datta temperatura T.

Consideriamo un materiale tipo-n alla temperatura di 0°K. Non ci sono elettroni nella banda di condizione ma sono occupati I livelli dei donatori. Dato che la probabilità di occupazione è pari a

$$\begin{cases} f_F(E) = 1 & per \ E < E_d \\ f_F(E) = 0 & per \ E > E_d \end{cases}$$

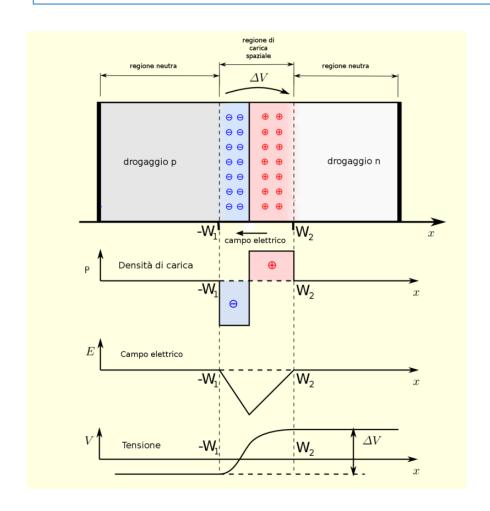
Il livello di fermi (dove la probabilità è 0,5) si trova nell'intervallo:

$$E_d < E_F < E_c$$

Analogamente per il materiale di tipo-n, il livello di fermi si trova nell'intervallo

$$E_{v} < E_{F} < E_{a}$$

## **GIUNZIONE** p-n

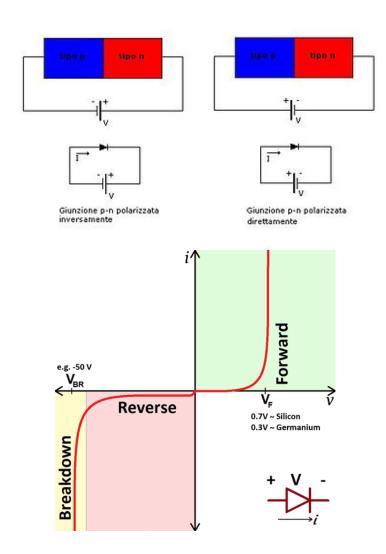


L'interfaccia tra una regione tipo-p e una regione tipo-n è chiamata giunzione p-n.

La regione di transizione è tipicamente dell'ordine di 1 micron ed è prodotta in un singolo cristallo.

Il livello di energia di riferimento è sulla banda di valenza tipo-p. All'equilibrio il livello di Fermi deve essere uguale per tutto il cristallo. Si genera un trasferimento di elettroni da n a p, che produce un doppio strato carico nella regione, con elettroni che riempiono I livelli degli accettori, lasciando donatori ionizzati nel lato-n.

Questo produce una differenza di energia potenziale tra le regioni n e p.

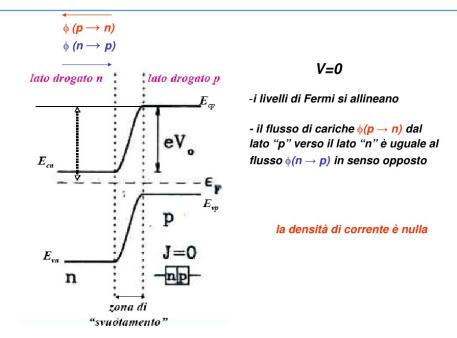


Quando si raggiunge l'equilibrio, gli elettroni e le lacune migrano i eguale quantità (media) in entrambe le direzioni.

Mentre c'è un elevato numero di elettroni nella banda di conduzione del regione-n, solo pochi elettroni con sufficiente energia possono superare la barriera di potenziale.

Se si applica una differenza di potenziale ai capi del cristallo, la barriera di potenziale può aumentare o diminuire a seconda della polarità.

Se la barriera diminuisce, si incrementa il flusso di elettroni che si spostano da n a p e abbiamo passaggio di corrente, nel caso opposto la corrente è minima, soloi dovuta ai cosiddetti portatori minoritari.



L. P