

Carica, forza, energia potenziale, potenziale

In presenza di un campo elettrico $\underline{\mathcal{E}}$, magnetico \underline{H} una particella dotata di carica elettrica Q , e velocità \underline{v} subisce una forza \underline{F} pari a:

$$\underline{F} = Q\underline{\mathcal{E}} + Q\underline{v} \times \mu\underline{H}$$

La gran parte dei dispositivi opera in condizini di campo magnetico \underline{H} nullo

Se campo elettrico $\underline{\mathcal{E}}$, magnetico ha rotore nullo (a rigore solo nel caso statico), il campo di forze F è coservativo, ossia esiste una energia potenziale U (Joule, J) tale che:

$$\underline{F} = -\nabla U$$

Carica, forza, energia potenziale, potenziale

Poichè $\underline{F} = Q\underline{\mathcal{E}} = -Q\nabla\phi = -\nabla U$, ha senso introdurre il legame: $U = Q\phi$

Si nota che il legame tra energia potenziale e potenziale elettrico è concorde per le lacune e discorde per gli elettroni

L'elettronvolt

tenendo presente che in un dispositivo elettronico le differenze di potenziale sono dell'ordine di 1 V, le differenze di energia potenziale sono dell'ordine:

$$U = q\phi = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Si introduce l'unità di misura **elettronvolt**, **eV**, pari a $1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$.

L'eV è l'energia che l'elettrone acquista quando sottoposto ad un potenziale elettrico di 1 V.

Solid-State Electronic Materials

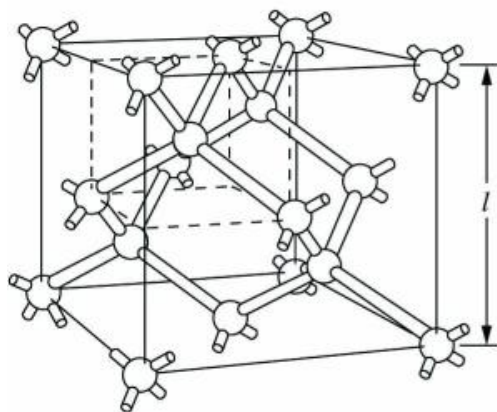
- Electronic materials fall into **three categories**:
 - Insulators Resistivity (ρ) $> 10^5 \Omega\text{-cm}$
 - semiconductor $10^{-3} < \rho < 10^5 \Omega\text{-cm}$
 - conductor $\rho < 10^{-3} \Omega\text{-cm}$
- Conventional semiconductors are formed from a single type of atom (**group IV**)
- Silicon (Si) is still the most used due to its higher **bandgap energy, lower cost**, and is easily oxidized to form silicon-dioxide (SiO_2) insulating layers, **low thermal resistance**.

Semiconductor Materials (cont.)

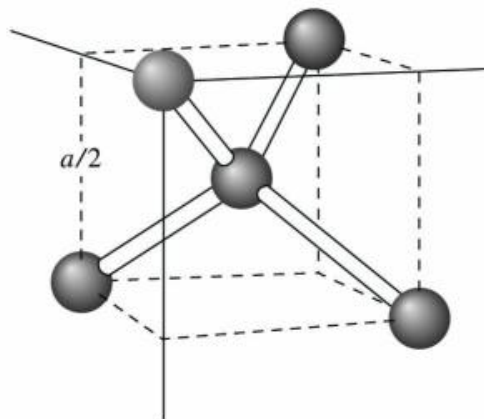
Semiconductor	Bandgap Energy E_G (eV)
Carbon (diamond)	5.47
Silicon	1.12
Germanium	0.66
Tin	0.082
Gallium arsenide	1.42
Gallium nitride	3.49
Indium phosphide	1.35
Boron nitride	7.50
Silicon carbide	3.26
Cadmium selenide	1.70

		IIIA	IVA	VA	VIA					
	5	10.811 B Boron	6	12.01115 C Carbon	7	14.0067 N Nitrogen	8	15.9994 O Oxygen		
	13	26.9815 Al Aluminum	14	28.086 Si Silicon	15	30.9738 P Phosphorus	16	32.064 S Sulfur		
IIB	30	65.37 Zn Zinc	31	69.72 Ga Gallium	32	72.59 Ge Germanium	33	74.922 As Arsenic	34	78.96 Se Selenium
	48	112.40 Cd Cadmium	49	114.82 In Indium	50	118.69 Sn Tin	51	121.75 Sb Antimony	52	127.60 Te Tellurium
	80	200.59 Hg Mercury	81	204.37 Tl Thallium	82	207.19 Pb Lead	83	208.980 Bi Bismuth	84	(210) Po Polonium

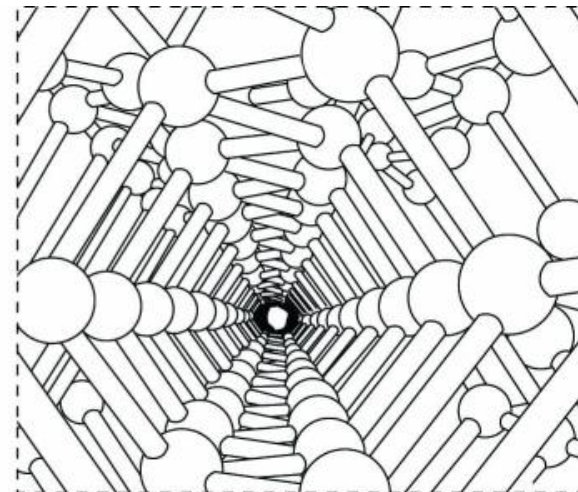
Covalent Bond Model



Silicon diamond
lattice unit cell.



Corner of diamond
lattice showing
four nearest
neighbor bonding.

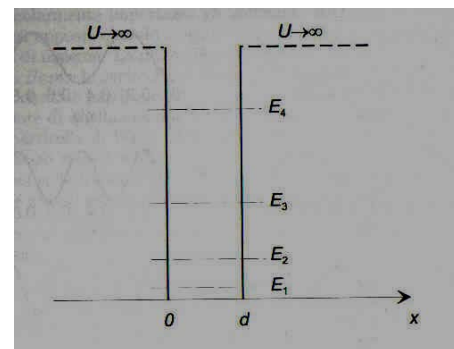


View of crystal
lattice along a
crystallographic axis.

Quantizzazione dell'energia nei Semiconduttori

- Si supponga il moto dell'elettrone all'interno di un SC, simile a quello della buca di potenziale monodimensionale.
- L'elettrone per mezzo della sua funzione d'onda, ψ , è descritto dalla eq. di Schroedinger:

$$\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (E - U) \psi(x) = 0$$



- All'esterno della buca $U \rightarrow \infty$, quindi $\psi \rightarrow 0$
- All'interno $U=0$, da cui:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

Quantizzazione dell'energia nei Semiconduttori

- La soluzione generale è del tipo:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

- Dalla condizione al contorno sui bordi si ha:

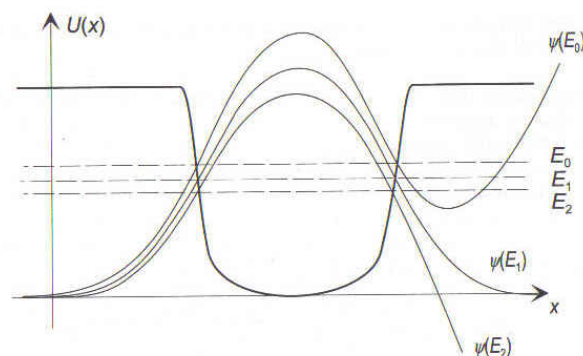
- $\psi(0) = B \cos(k0) = 0 \rightarrow B = 0$
- $\psi(d) = A \sin(kd) = 0 \rightarrow kd = n\pi$

- infine si trovano i livelli energetici ammessi:

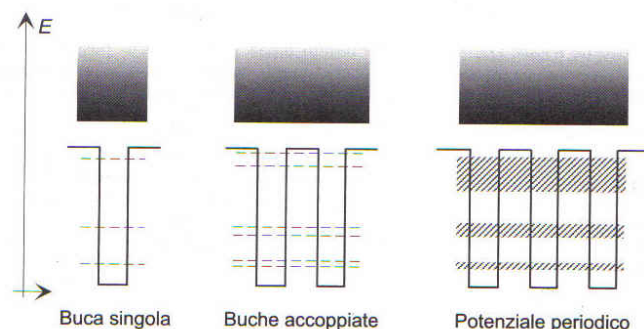
$$E = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2md^2}$$

Quantizzazione dell'energia nei Semiconduttori

- Nel caso più generale si ha una situazione del tipo



- Ovvero il potenziale esterno non $\rightarrow \infty$ e questo comporta che la ψ all'esterno della buca sia $\neq 0$
- Ne segue che esiste la probabilità di trovare l'elettrone fuori della buca.
- Nei semiconduttori questo determina la creazione di bande di energia



Semiconductor Energy Band Model

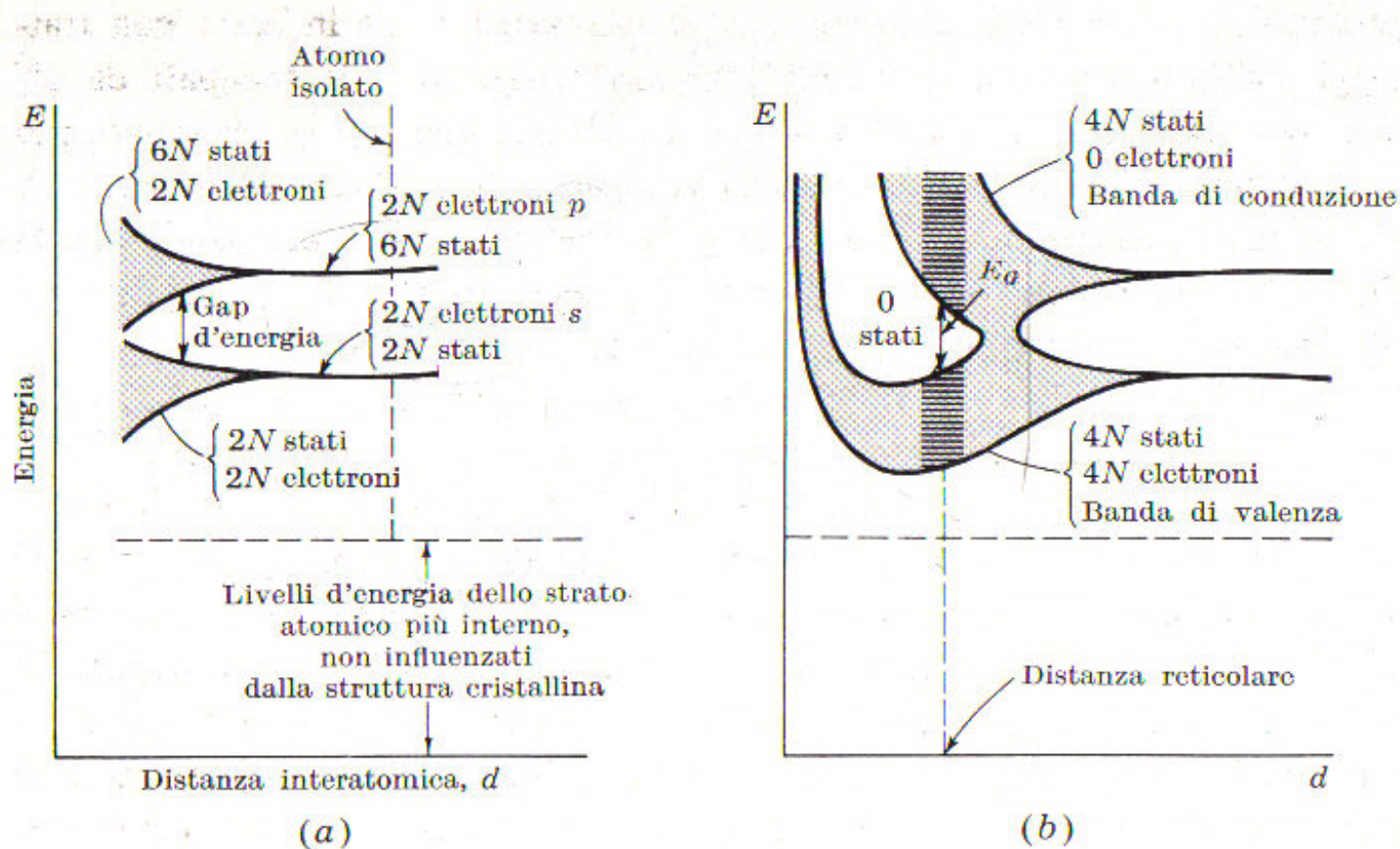
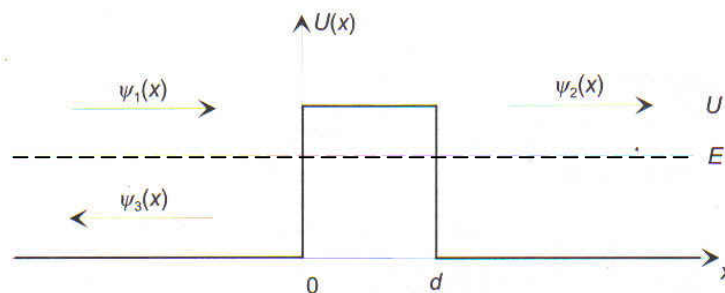


Fig. 28.1. Illustra come i livelli energetici si suddividano in bande d'energia quando gli atomi si avvicinano per formare un cristallo.

Effetto Tunnel

Un caso canonico della teoria dei semiconduttori riguarda l'incidenza di un elettrone con una barriera di potenziale di 'altezza' superiore all'energia totale dell'elettrone.



Per questo sistema si definiscono le probabilità di trasmissione T e di riflessione R

$$T = \frac{\psi_2(d^+)}{\psi_1(0^-)} \quad R = 1 - T = \frac{\psi_3(0^-)}{\psi_1(0^-)}$$

Effetto Tunnel

Sviluppando i calcoli si ottiene con $\mathbf{E} < \mathbf{U}$:

$$T = \frac{1}{\left[1 + \frac{U^2 \sinh^2(\alpha d)}{4E(U-E)} \right]}$$

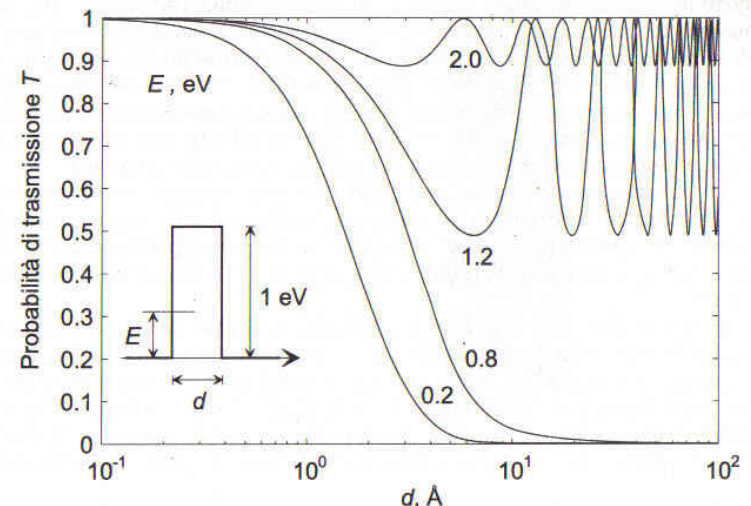
con: $\alpha = \sqrt{\frac{2m(U-E)}{\hbar^2}}$

Se invece $\mathbf{E} > \mathbf{U}$:

$$T = \frac{1}{\left[1 + \frac{U^2 \sinh^2(\beta d)}{4E(E-U)} \right]}$$

con: $\beta = \sqrt{\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}}$

Dall'esempio numerico si evince come la riflessione avvenga anche in presenza di una barriera si hanno riflessioni



Proprietà elettroniche del reticolo cristallino

Introduciamo la seguente proprietà fondamentale delle funzioni d'onda in un potenziale periodico mono-dimensionale:

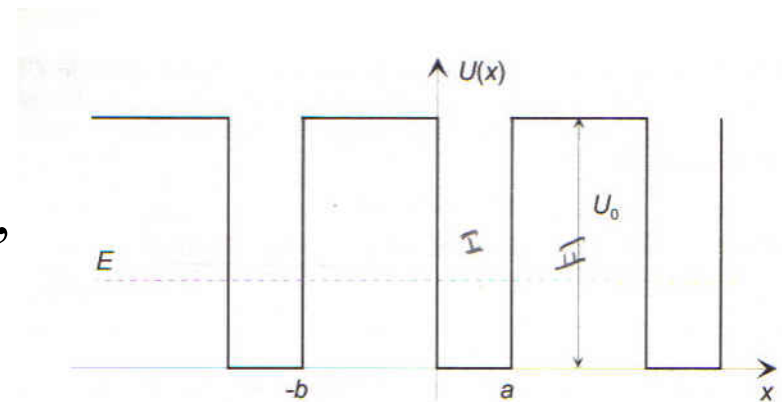
$$\psi(x) = \exp(-jkx) \cdot u_k(x)$$

Dove $u_k(x)$ è periodica in x .

Questa funzione può essere interpretata come una funzione periodica che 'modula' l'onda piana, tipica dello spazio libero, ed il parametro k è associabile alla **quantità di moto**, $p = \hbar k$, delle particelle

Il modello di Krönig-Penney

Assimiliamo il potenziale periodico del reticolo cristallino come quello di figura, l'obiettivo dello studio consiste nelle caratteristiche del moto dell'elettrone con energia $E < U_0$.



Il modello di Krönig-Penney

Nella regione I e II del periodo fondamentale si ha rispettivamente:

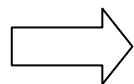
$$u_{kI}(x) = A \cos(\beta x) + B \sin(\beta x)$$

$$u_{kII}(x) = C \cosh(\alpha x) + D \sinh(\alpha x)$$

dove: $\beta = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ $\alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$

Notando che le condizioni al contorno possono essere applicate sia a ψ che a u_k , si impongono le seguenti:

$u_{kI}(0) = u_{kII}(0)$
$u'_{kI}(0) = u'_{kII}(0)$
$u_{kI}(a) = u_{kII}(-b)$
$u'_{kI}(a) = u'_{kII}(-b)$



$$A = C$$

$$B\beta = D\alpha$$

$$A \cos \beta a + B \sin \beta a = e^{-jkL} (C \cosh \alpha b + D \sinh \alpha b)$$

$$-A\beta \cos \beta a + B\beta \sin \beta a = e^{-jkL} (C\alpha \sinh \alpha b + D\alpha \cosh \alpha b)$$

Il modello di Krönig-Penney

Considerando le 4 equazioni nelle incognite A, B, C, D che derivano dall'imposizione delle condizioni al contorno, ed annullando il determinante (soluzione non banale), si giunge alla *relazione di dispersione*:

$$\frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sinh(\alpha b) \sin(\beta a) + \cosh(\alpha b) + \sinh(\beta a) = \cos(kL)$$

Fissato k, l'equazione sopra permette di ricavare E di cui sono funzione α e β .

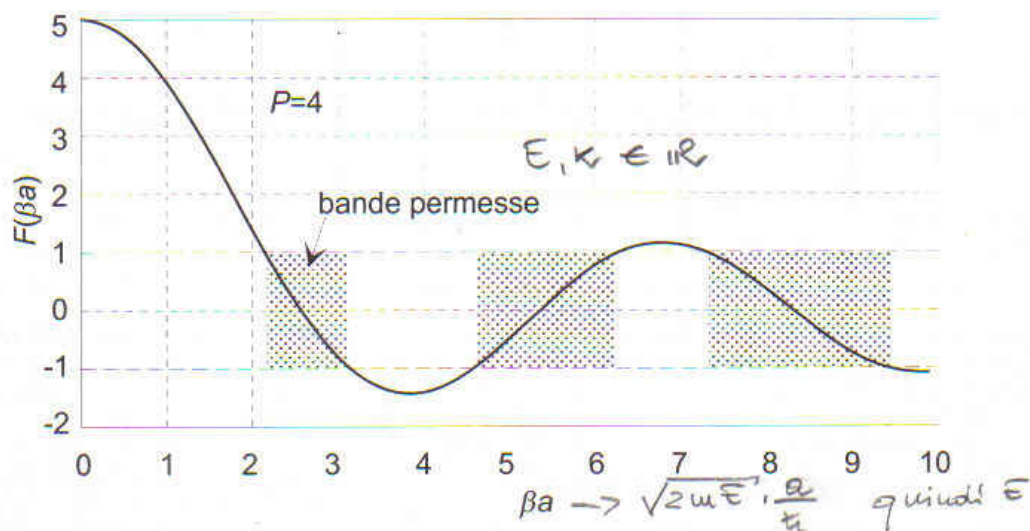
Per fissare le idee si considera il caso ideale: $b \rightarrow 0$, $U_0 \rightarrow \infty$; in questo caso si ottiene:

$$F(\beta) = \frac{P}{\beta a} \sin(\beta a) + \cos(\beta a) = \cos(ka) \qquad P = \frac{mabU_0}{\hbar^2}$$

Il modello di Krönig-Penney

Assegnato un valore di energia E oppure di β , si hanno *valori reali* di k solo se la funzione $F(\beta)$ risulta compresa tra $+1$ e -1 .

In tali intervalli esiste una relazione $E = E(k)$, tali intervalli sono le *bande permesse*.



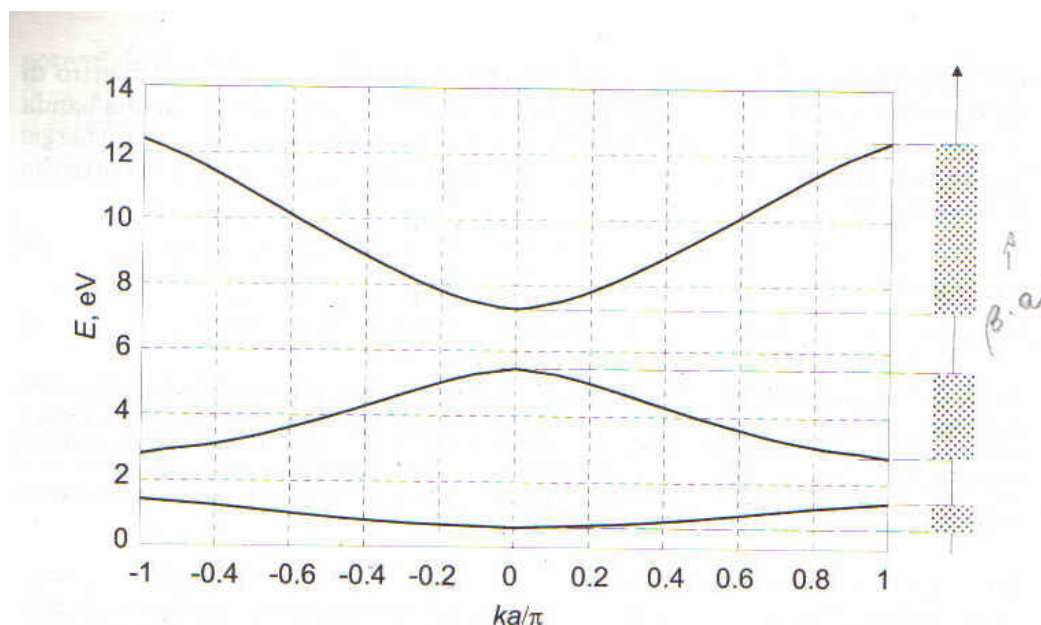
N.B. se K è immaginario si hanno del funzioni d'onda evanescenti:

$$\psi(x) = \exp(-jkx) \cdot u_k(x)$$

Il modello di Krönig-Penney

Si osservano le seguenti proprietà per $E(k)$:

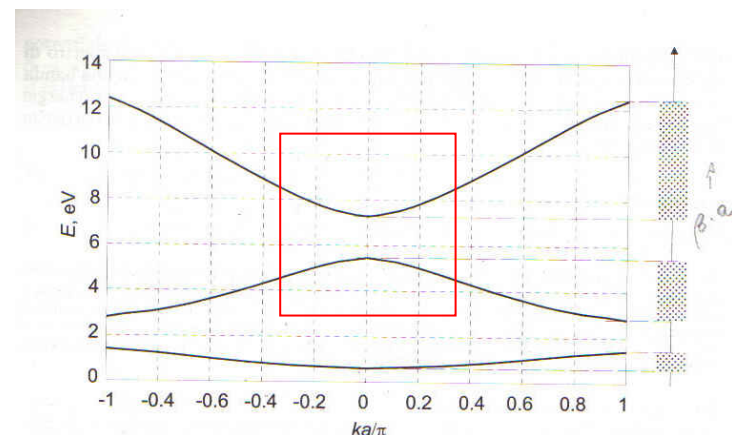
- è a più valori, ciascuno dei quali corrisponde ad una banda
- è pari $E(k) = E(-k)$
- è periodica in k con periodo $2\pi/a$; il periodo fondamentale è detto prima zona di Brillouin



Il modello di Krönig-Penney – Massa efficace

L'approssimazione della relazione di dispersione nell'intorno di $k=0$ mediante:

$$E_k = E_{0k} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_k^*}$$



Permette di introdurre il concetto di massa efficace

Ovvero una quantità che tiene conto dell'interazione con il cristallo ma associa all'elettrone in ogni specifica banda energetica, una massa dipendente dalla curvatura della banda corrispondente.

In banda di conduzione: $m_c^* > 0$

In banda di valenza: $m_v^* < 0$

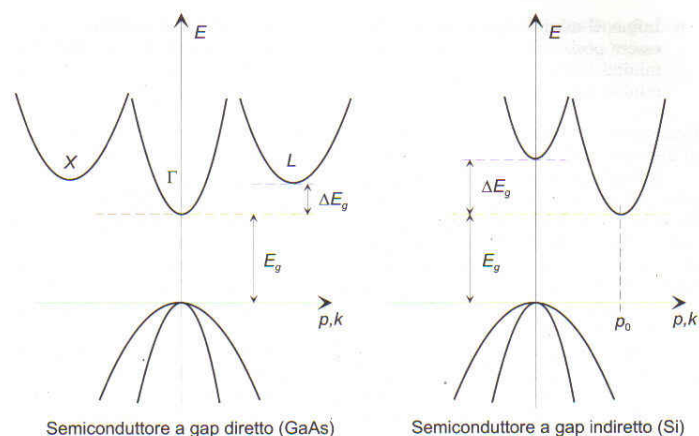
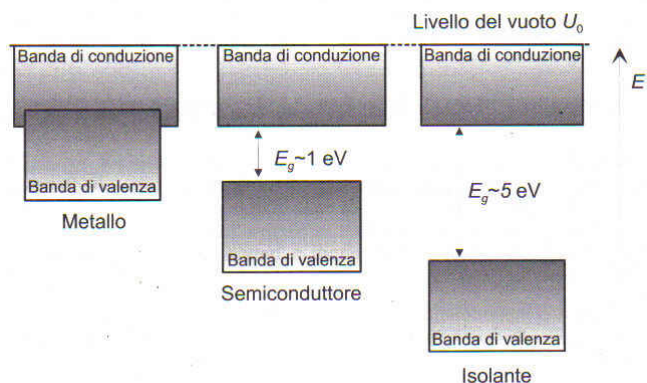
Massa efficace di elettroni e lacune

La relazione di dispersione *Energia - Quantità di Moto* nell'intorno di $k=0$ mediante si ha:

$$E_n(p) \approx \frac{p^2}{2m_n^*} \quad |E_h(p)| \approx \frac{p^2}{2m_h^*}$$

Relazione di dispersione per diversi tipi di SC.

- Il minimo assoluto della banda superiore è il **limite della banda di conduzione E_c** .
- Il massimo assoluto della banda inferiore è il **limite della banda di valenza E_v** .



Semiconduttori in equilibrio termodinamico

Densità di stati: *numero degli stati disponibili per unità di volume ed energia*. A causa del principio di esclusione, anche se il diagramma a bande ammette distribuzione di E continua.

Modellando il SC come un solido cubico di lunghezza L:

$$p = \hbar \cdot k = \sqrt{2m^* E} \quad E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} \quad \longrightarrow \quad p = \frac{nh}{2L}$$

- **il volume occupato da ogni stato nello spazio delle quantità di moto è:** $(h/2L)^3 / 2$ dove il fattore 2 è dovuto al diverso spin.
- **Il volume della corteccia sferica nello spazio delle quantità di moto:** $4\pi p^2 dp / 8$
- la quantità di moto essere espressa in funzione della energia totale meno quella potenziale:

$$p = \sqrt{2m_n^* (E - E_c)} \quad \longrightarrow \quad p dp = m_n^* dE$$

Semiconduttori in equilibrio termodinamico

Effettuando il rapporto tra il volume e l'occupazione nello spazio delle quantità di moto si ottiene:

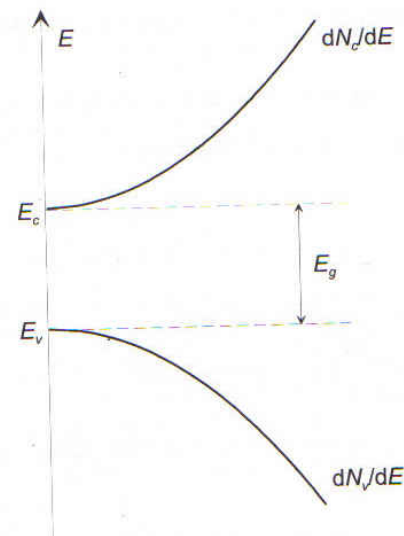
$$dN_c(p) = \frac{4\pi p^2 dp / 8}{\frac{1}{2} \left(\frac{h}{2L} \right)^3} = \frac{8\pi L^3 p^2 dp}{h^3}$$

- Infine, cambiando le variabili il numero di stati disponibili per unità di volume compresi nella banda di conduzione tra E ed $E+dE$ è:

$$dN_c(E) = 4\pi \left(2m_n^* \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c} dE / h^3$$

- Analogamente per la banda di valenza:

$$dN_v(E) = 4\pi \left(2m_h^* \right)^{3/2} \sqrt{E_v - E} dE / h^3$$



Semiconduttori in equilibrio termodinamico

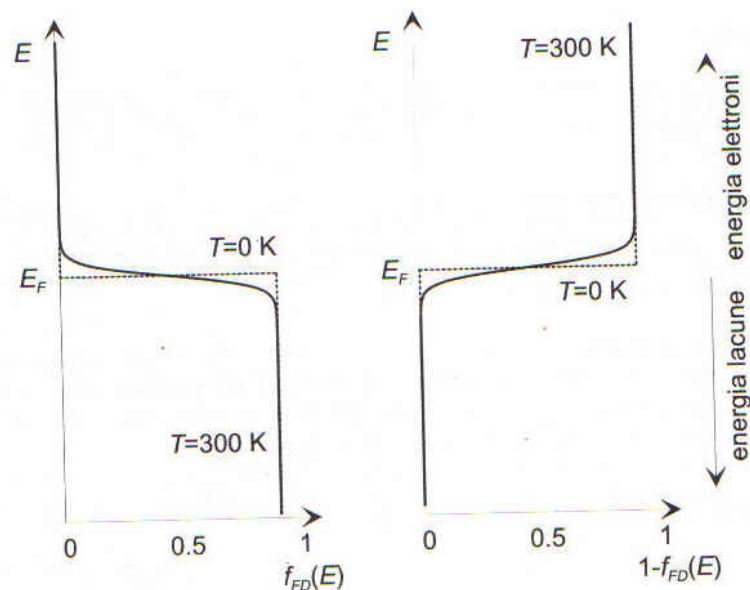
Nel caso degli elettroni, la loro statistica è descritta dalla distribuzione di Fermi-Dirac:

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T}\right)} \approx \exp\left(-\frac{E - E_F}{K_B T}\right) \quad \text{per } E \gg E_F$$

Dove E_F è il livello di Fermi, il quale dipende dalla densità volumetrica di elettroni e lacune

Analogamente per le lacune:

$$1 - f_{FD}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{K_B T}\right)}$$



Semiconduttori in equilibrio termodinamico

Possiamo ora calcolare la densità di elettroni in banda di conduzione:

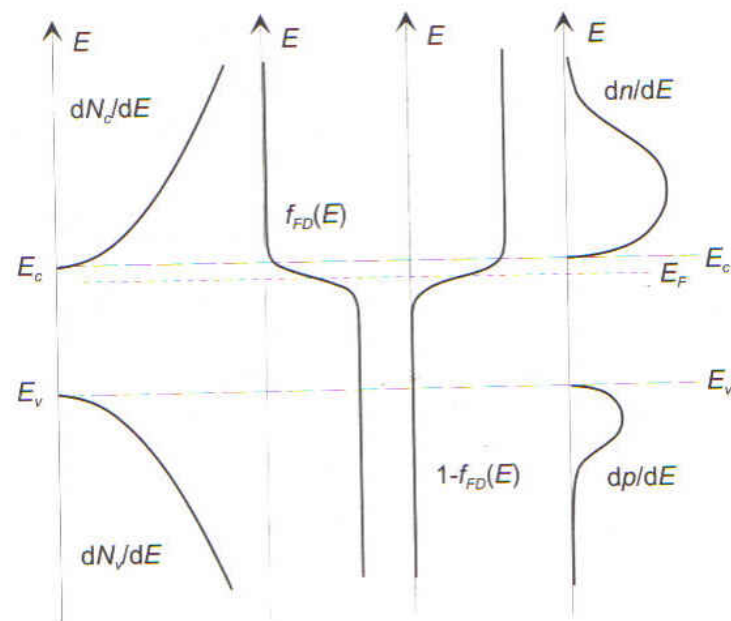
$$n = \int_{E_C}^{\infty} f_{FD}(E) dN_c(E) \approx N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{K_B T}\right) \quad \text{per } E \gg E_F$$

Dove $N_C = 2 \frac{(2\pi m_n^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$ rappresenta la densità di stati equivalenti

Analogamente:

$$p = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{K_B T}\right)$$

$$N_V = 2 \frac{(2\pi m_h^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$



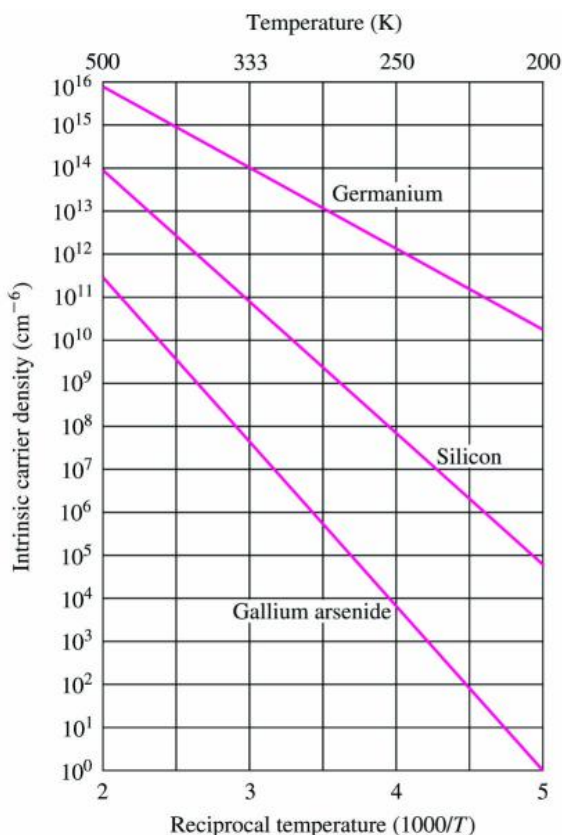
Semiconduttori in equilibrio termodinamico

Legge dell'azione di massa:

$$pn = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{K_B T}\right) = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_G}{K_B T}\right)$$

Essendo indipendente dalla posizione del livello di Fermi e quindi dal drogaggio:

$$pn = p_i n_i = n_i^2$$



	$B (\text{K}^{-3} \cdot \text{cm}^{-6})$	$E_G (\text{eV})$
Si	1.08×10^{31}	1.12
Ge	2.31×10^{30}	0.66
GaAs	1.27×10^{29}	1.42

$$n_i^2 \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3} \text{ for Si}$$

Semiconduttori in equilibrio termodinamico

Costanza del livello di Fermi: **due SC in giunzione tra di loro in equilibrio hanno lo stesso livello di Fermi**

L'equilibrio è raggiunto quando la probabilità di passaggio per un elettrone dal SC1 al SC2 e viceversa sono identiche, per ogni energia:

$$P_{1 \rightarrow 2} = P_{2 \rightarrow 1} \quad \begin{aligned} P_{1 \rightarrow 2} &= g_1(E) f_{FD}^1(E) \times g_2(E) [1 - f_{FD}^2(E)] \\ P_{2 \rightarrow 1} &= g_2(E) f_{FD}^2(E) \times g_1(E) [1 - f_{FD}^1(E)] \end{aligned}$$

Essendo la densità degli stati indipendente da E_F :

$$g(E) = \frac{dN_c}{dE} = \frac{4\pi}{h^3} (2m_n^*)^{3/2} \sqrt{E - E_c}$$

Si ricava:

$$f_{FD}^2 = f_{FD}^1 \rightarrow \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F^2}{K_B T}\right)} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F^1}{K_B T}\right)} \rightarrow E_F^2 = E_F^1$$

Semiconduttori in equilibrio termodinamico

Posizione del livello di Fermi nei semiconduttori **intrinseci**:

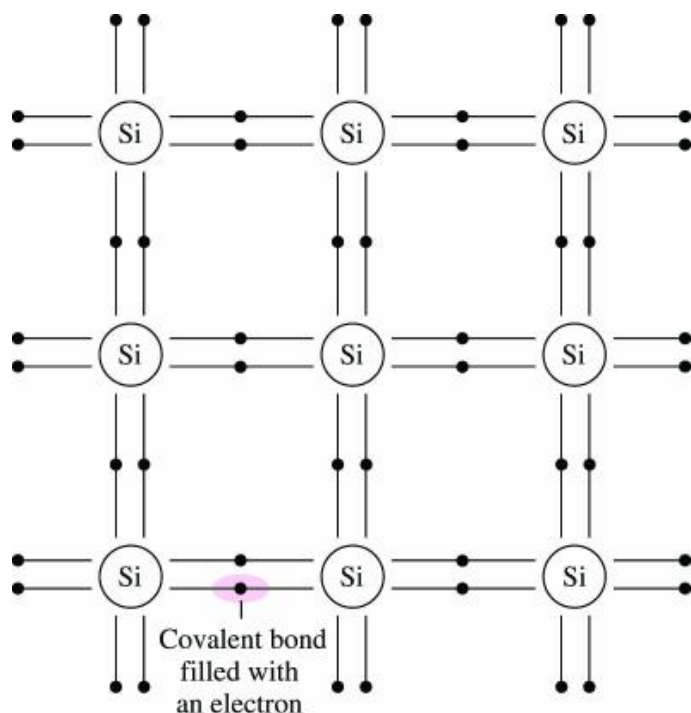
$$n = N_C \exp\left(\frac{E_{Fi} - E_C}{K_B T}\right) = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_{Fi}}{K_B T}\right) = p$$

da cui:

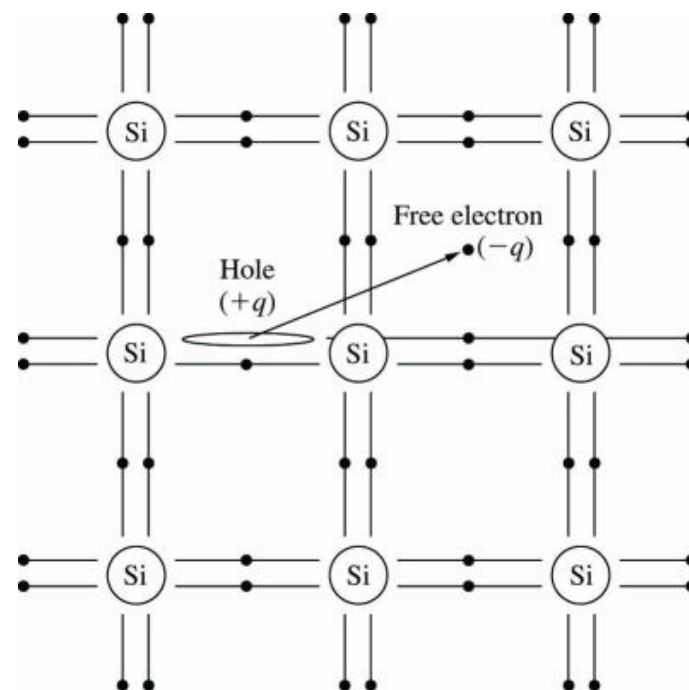
$$E_{Fi} = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{K_B T}{2} \log\left(\frac{N_C}{N_V}\right)$$

Poiché $N_V \approx N_C$ il livello di Fermi per semiconduttori intrinseci si trova *approssimativamente* al centro della banda proibita

Legami covalenti nel Silicio e generazione di portatori intrinseci

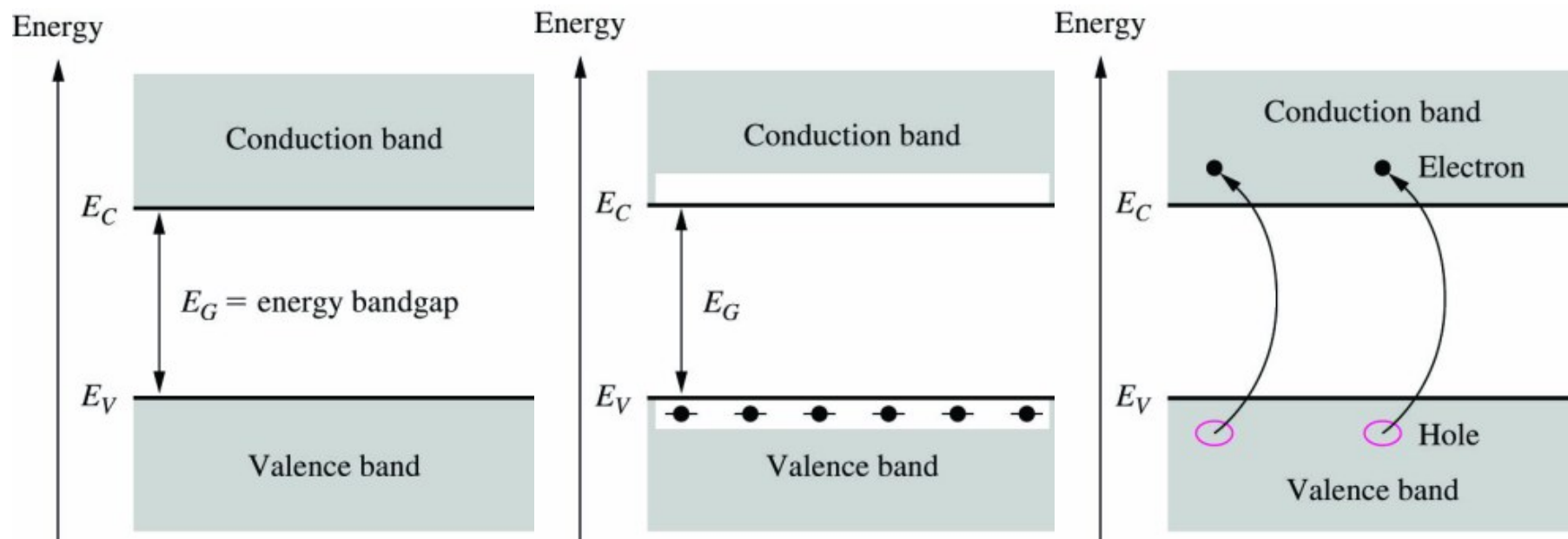


Near absolute zero, all bonds are complete. Each Si atom contributes one electron to each of the four bond pairs.



Increasing temperature adds energy to the system and breaks bonds in the lattice, **generating electron-hole pairs.**

Semiconductor Energy Band Model



Semiconductor energy band model. E_C and E_V are energy levels at the edge of the conduction and valence bands.

Electron participating in a covalent bond is in a lower energy state in the valence band. This diagram represents 0 K.

Thermal energy breaks covalent bonds and moves the electrons up into the conduction band.

Semiconduttori in equilibrio termodinamico

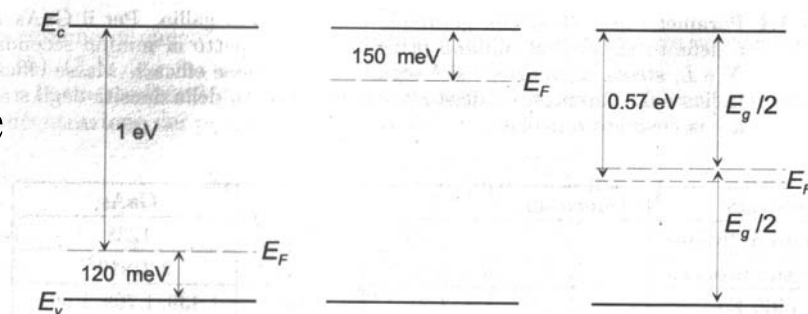
Posizione del livello di Fermi nei semiconduttori **drogati**:

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{K_B T}\right); \quad p = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{K_B T}\right)$$

Dalla legge dell'azione di massa, $pn = n_i^2$ si ottiene:

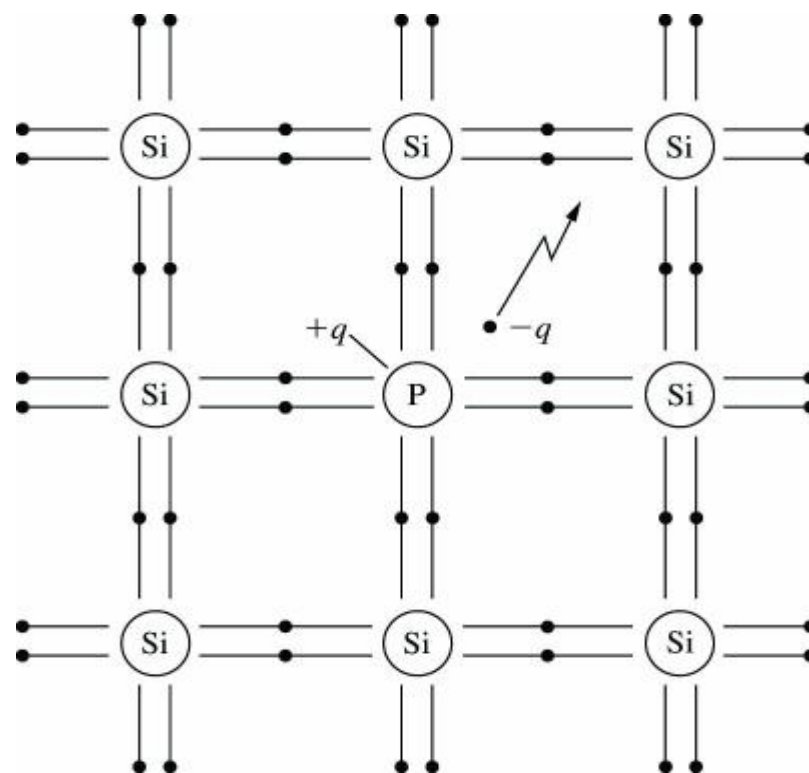
$$E_F = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{K_B T}{2} \left[\log\left(\frac{N_C}{N_V}\right) + \log\left(\frac{n}{p}\right) \right]$$

Si ha dunque uno spostamento verso E_C oppure verso E_V dipendentemente dal tipo di drogaggio



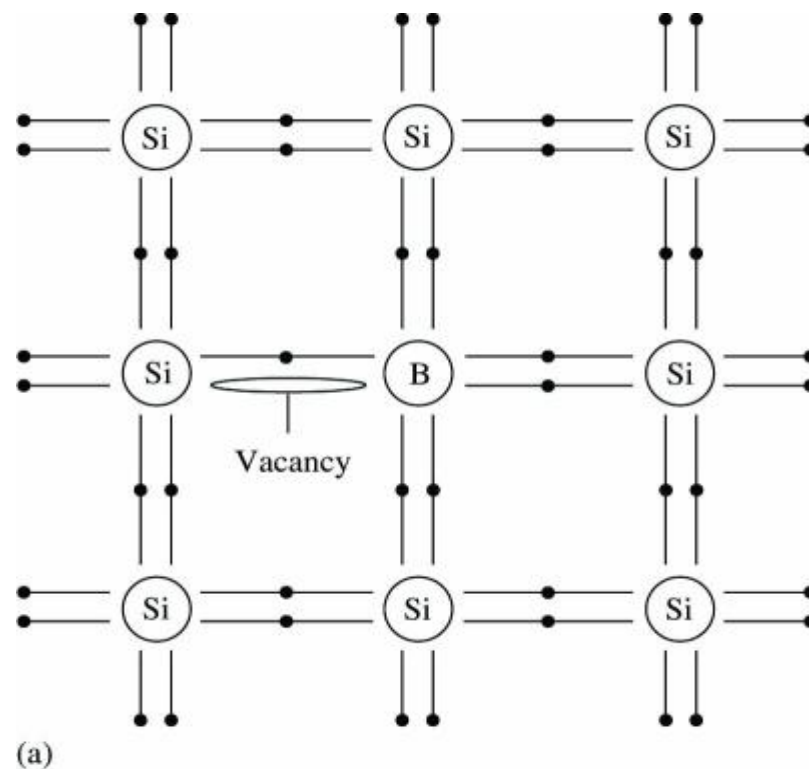
Donor Impurities in Silicon

- **Phosphorous** (or other column V element) atom replaces silicon atom in crystal lattice.
- Since phosphorous has **five outer shell electrons**, there is now an **'extra' electron** in the structure.
- Material is **still charge neutral**, but **very little energy is required to free the electron** for conduction since it is not participating in a bond.

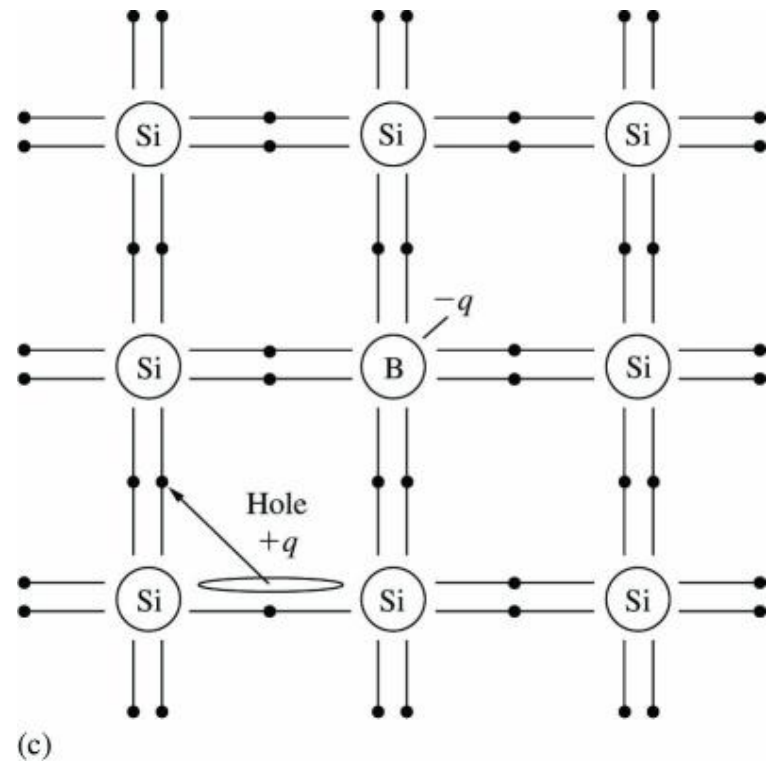
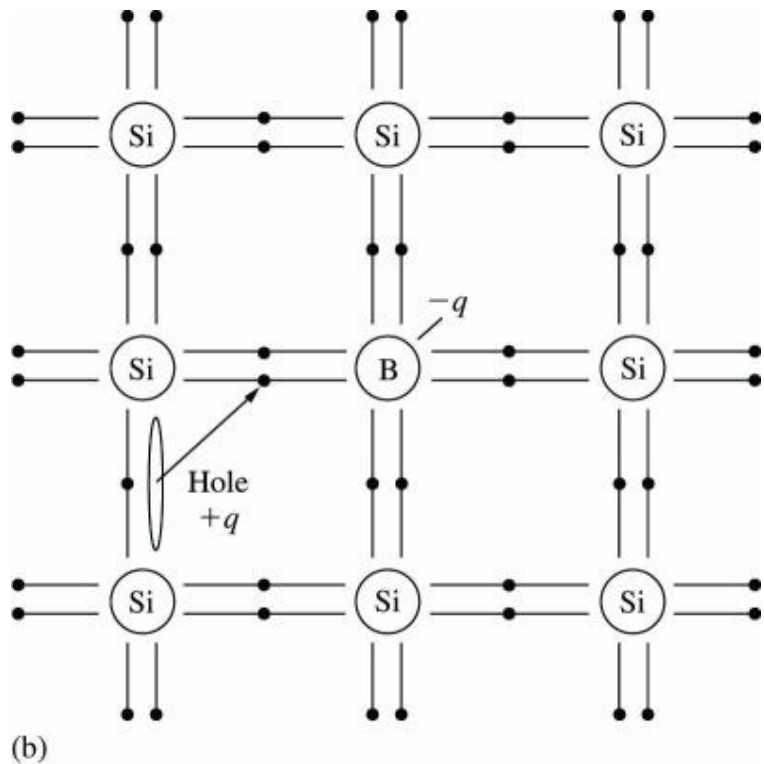


Acceptor Impurities in Silicon

- **Boron** (column III element) has been added to silicon.
- There is now an **incomplete bond pair**, creating a vacancy for an electron.
- **Little energy is required to move a nearby electron into the vacancy.**
- As the **‘hole’ propagates**, charge is moved across the silicon.

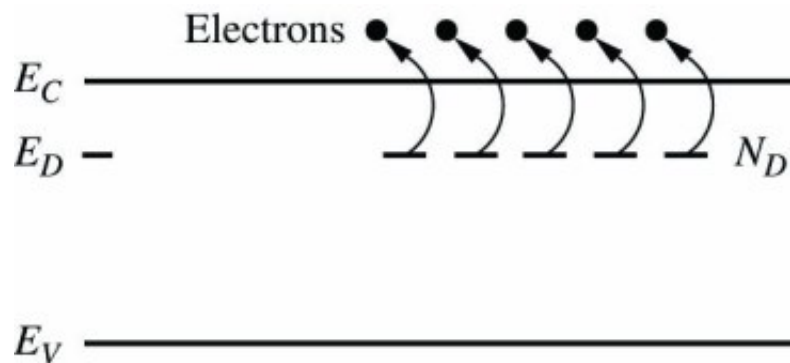


Acceptor Impurities in Silicon (cont.)

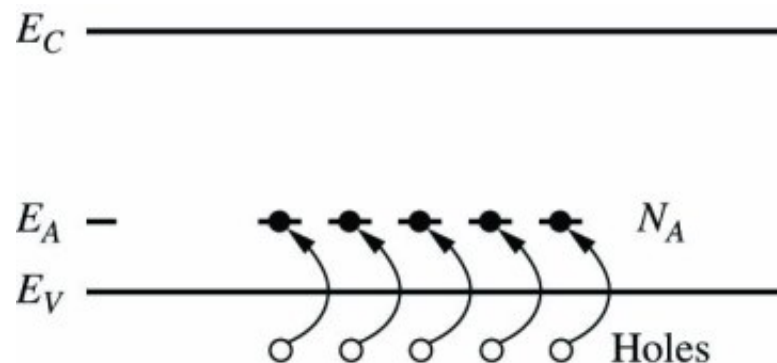


Hole is propogating through the silicon.

Energy Band Model for a Doped Semiconductor



Semiconductor with donor or n-type dopants. The donor atoms have free electrons with energy E_D . Since E_D is close to E_C , (about 0.045 eV for phosphorous), it is easy for electrons in an n-type material to move up into the conduction band.



Semiconductor with acceptor or p-type dopants. The donor atoms have unfilled covalent bonds with energy state E_A . Since E_A is close to E_V , (about 0.044 eV for boron), it is easy for electrons in the valence band to move up into the acceptor sites and complete covalent bond pairs.

Equazioni di Shockley

Descrivono le concentrazioni di portatori in funzione dei portatori intrinseci e del livello di fermi intrinseco

$$n = N_C \exp\left[-\frac{E_C - E_F}{K_B T}\right] \quad p = N_V \exp\left[-\frac{(E_F - E_V)}{K_B T}\right]$$

Per il SC intrinseco:

$$n_i = N_C \exp\left[\frac{E_{Fi} - E_C}{K_B T}\right]$$

Da cui dividendo membro a membro:

$$n = n_i \exp\left[\frac{E_F - E_{Fi}}{K_B T}\right] \quad p = n_i \exp\left[\frac{E_{Fi} - E_F}{K_B T}\right]$$