

Electrónica Física

Daniel Vázquez Lago

Índice general

1. Física de semiconductores	5
1.1. Banda de valencia y conducción	5
1.1.1. Semiconductores directos e indirectos	6
1.1.2. Forma de los mínimos y máximos de banda: masa equivalente	6
1.1.3. Ecuación del movimiento	6
1.2. Portadores: concepto de hueco y electrón	6
1.3. Densidad de portadores y clasificación de semiconductores	8
1.3.1. Densidad de portadores en el caso más general posible	8
1.3.2. Semiconductores no degenerados y degenerados	9
1.3.3. Semiconductores intrínsecos caso no degenerado	10
1.3.4. Semiconductores extrínsecos caso no degenerado	10
1.4. Nivel de Fermi	11
1.5. Valores típicos	11
1.6. Valores típicos	11
1.7. Ejercicios	11
1.8. Solucion	13
2. Fenómenos de transporte en semiconductores	17
2.1. Fenómeno de transporte	17
2.1.1. Movilidad	17
2.1.2. Difusión	17
2.2. Procesos de generación y recombinación	17
2.2.1. Introducción	17
2.2.2. Consideraciones acerca los procesos RG	19
2.3. Recombinación directa en semiconductores de gap directo	19
2.4. Recombinación indirecta en semiconductores de gap indirecto: procesos RG.	20
2.4.1. Definición de términos	20
2.4.2. Obtención de las tasas de producción	20
2.5. Simplificaciones	21
3. La unión PN	23
4. El transistor bipolar de unión	25
5. El transistor MOSFET	27
A. Apéndice	29
A.1. Densidad de Estados y Estadística de Fermi-Dirac	29
A.1.1. Niveles de energía	29
A.1.2. Estadística de Fermi-Dirac	32

Capítulo 1

Física de semiconductores

1.1. Banda de valencia y conducción

Un semiconductor es un material sólido que presenta dos bandas (en realidad presenta más, solo accesibles¹ a energías térmicas o electromagnéticas muy altas, y por tanto innecesarias para nuestro estudio). Para definir una banda primero tenemos que entender que los electrones en los sólidos se pueden describir mediante una suma de ondas planas, y por tanto la energía de estos se puede describir como una función del momento de la onda $E(k)$ (aunque no tiene porque ser necesariamente de la forma $E = \hbar^2 k^2 / 2m$). Así, debido al carácter fermiónico de los electrones y otros potenciales aparecen energías inaccesibles para nuestros electrones, i.e. para ningún k existen esas energías. Así aparecen diferentes *bandas*, limitadas por una *energía superior* y una *energía inferior*.

Imágen sobre las bandas, por ejemplo la de la pág. 38

Como dijimos, un semiconductor posee dos bandas, separadas por una energía E_g . A la banda con energía superior se le llama **banda de conducción** (B.C) y a la banda inferior se le llama **banda de valencia** (B.V). Las bandas, a su vez, poseen diferentes líneas de dispersión, esto es diferentes relaciones $E(k)$. El número y forma de estas dependerá del tipo de material y la dirección de la onda, por esa misma razón solemos ver en la parte inferior de las bandas $\langle 111 \rangle$ o $\langle 100 \rangle$. Están denotando la dirección de la onda. En general suelen ser materiales muy simétricos, y por tanto con pocas direcciones representamos todas las posibles relaciones de dispersión.

La *energía mínima de la banda de conducción* se denota como E_c , la *energía máxima de la banda de valencia* se denota por E_v , y la diferencia entre el máximo de la BV y el mínimo de BC se denota por E_g :

$$E_g = E_c - E_v \quad (1.1.1)$$

En general se suele definir $E_v = 0$ como referencia. Así la banda de valencia posee energías negativas, y la banda de conducción energías positivas. Veamos las características de las bandas:

- **Bandas de valencia:** el *máximo siempre aparece en $k = 0$* . Está dividida en 3 subbandas (3 relaciones de dispersión), 2 de ellas degeneradas en $k = 0$ (son indistinguibles en $k = 0$).
- **Bandas de conducción:** está dividida en subbandas (aunque el número depende del material), y el valor de k_{\min} tal que $E_{\min} = E(k_{\min})$ del dependerá del material.

¹ Cuando decimos accesibles nos referimos a que existe una posibilidad no nula de que estén ocupadas.

1.1.1. Semiconductores directos e indirectos

Como hemos dicho, E_c es el mínimo de la banda de conducción y E_v es el máximo de la banda de valencia. En función del valor de k_{\min} distinguimos dos tipos de semiconductores:

- Definimos un **semiconductor indirecto** a aquel que verifica que $k_{\min} \neq 0$. Es decir, el gap de energía sucede entre diferentes momentos (lo que hará que cuando se excite a un electrón de la BV tenga que darsele un momento).
- Definimos un **semiconductor directo** a aquel que verifica que $k_{\min} = 0$. Es decir, el gap de energía sucede a $\Delta k = 0$ (lo que hará que cuando se excite a un electrón de la BV no se pueda intercambiar momento).

1.1.2. Forma de los mínimos y máximos de banda: masa equivalente

Cerca de los extremos de las bandas $E_0 = E(k_0)$ tenemos que se puede aproximar la energía por una función parabólica, tal que:

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)_{k_0} (k - k_0)^2 \quad (1.1.2)$$

Como podemos ver, esto se parece mucho a la expresión $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ que se usa para *partículas libres*. Es decir, cerca de los extremos de las bandas, los *portadores actúan como partículas libres con masa efectiva m^** definida como

$$(m^*)^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad (1.1.3)$$

Imagen de los mínimos/máximos.

1.1.3. Ecuación del movimiento

La ecuación del movimiento para los electrones es una generalización de la ecuación de Newton usando el momento de onda del electrón \mathbf{k} . Sabiendo que

$$\mathbf{F} = m^* \mathbf{a} = m^* \dot{\mathbf{v}} = m^* \hbar \mathbf{k} m^* \quad (1.1.4)$$

de lo que se deduce que

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F} \quad (1.1.5)$$

pudiendo ser la fuerza, por ejemplo, la fuerza de Lorentz $\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$, o cualquier otra.

1.2. Portadores: concepto de hueco y electrón

En los semiconductores hay 2 tipos de portadores, los portadores tipo hueco (o tipo p^2) y tipo electrón (tipo n). La pregunta que nos deberíamos plantear en este momento es: ¿Qué sentido tiene

²Por el hecho de que se pueden describir como partículas con carga positiva.

que existan portadores tipo electrón/hueco si solo tenemos electrones en el semiconductor? ¿Como que tipo electrón, no deberían ser electrones? La respuesta como siempre es complicada. Como hemos dicho, cerca de los extremos las partículas, los electrones se comportan como electrones libres con masa efectiva m^* (de hay viene *tipo electrón* se comportan así como electrones). Sin embargo, esto lleva a un problema, ya que la masa efectiva de un electrón en el máximo de la banda de valencia sea negativa (en un máximo $\partial^2 E / \partial k^2 < 0$),

Supongamos que tenemos la capa de valencia llena salvo por un electrón, que se ha excitado y ha subido a la capa de conducción. En la banda de valencia habrá entonces N electrones menos uno. La suma de los momentos de todos los electrones de la banda será entonces:

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{4N-1} \mathbf{k}_i \quad (1.2.1)$$

o lo que es lo mismo:

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{4N} (\mathbf{k}_i) - \mathbf{k}_e \quad (1.2.2)$$

denotándolo por \mathbf{k}_e ya que es un electrón cualquiera (son indistinguibles). Como sabemos, la suma del momento de los electrones en una banda tiene que ser cero, ya que k tiene tanto valores negativos y positivos, y están todos ocupados. Es decir, tenemos que el momento total de la banda será:

$$\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e \quad (1.2.3)$$

si a este momento total lo llamamos \mathbf{k}_p (momento de portador p o hueco), tenemos que *el movimiento efectivo de una capa sin un electrón es en el sentido opuesto al que tendría un electrón individual en la misma*. A este artificio matemático lo llamamos hueco, y no es más que la manera de describir el comportamiento de una capa entera a través de unas pocas partículas. La energía también tendrá el signo opuesto, ya que:

$$E_h = \sum_i E_i - E_e \quad (1.2.4)$$

y como $\sum_i E_i$ es una constante (se define como cero). Así pues:

$$E_h \equiv -E_e \quad (1.2.5)$$

Y por tanto, aunque la masa efectiva de un electrón en el máximo de la banda de valencia sea negativa (en un máximo $\partial^2 E / \partial k^2 < 0$), para el objeto matemático así definido tenemos que la masa efectiva será positiva, y la carga será positiva. Que la carga sea positiva no es tan obvio. Para ello tenemos que ver que la ecuación del movimiento

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_h}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B}) \quad (1.2.6)$$

hace que se comporte como un electrón con carga positiva ($\mathbf{k}_h \equiv -\mathbf{k}_e$). La pregunta ahora es: ¿Tiene sentido físico? La respuesta es que sí. El sentido físico está en que cuando excitamos un electrón a la BC desde la BV, queda un estado sin ocupar, un hueco, en la banda de valencia. Este hueco podría ser rellenado por los electrones vecinos, que desde fuera lo veríamos como un movimiento efectivo del hueco, que además tendría el sentido contrario al del electrón (si los electrones saltan

por ejemplo de izquierda a derecha por culpa de un campo eléctrico, veremos al hueco saltando de la derecha a la izquierda).

Consecuentemente los electrones en la banda de conducción se comportarán como electrones normales libres por la salvedad de que la masa efectiva será diferente; mientras que la falta de electrones en la banda de conducción (por la excitación de estos a la banda de conducción) se describirá a través de una serie de partículas con masa efectiva positiva diferente a la masa del electrón, carga positiva, con momento y energía efectiva de signo contrario al que tendría un electrón libre en la banda de valencia.

1.3. Densidad de portadores y clasificación de semiconductores

En esta sección vamos a tratar de expresar la densidad de portadores hueco, denotado por p , y la densidad de portadores electrones, denotado por n . Primero estudiaremos el caso mas general posible, en función de la densidad de estados $g(E)$ y de la función de Fermi-Dirac $f(E)$. Luego iremos haciendo ciertas aproximaciones para simplificar los resultados.

1.3.1. Densidad de portadores en el caso más general posible

El caso más general, como ya hemos dicho, estudia el número de portadores n y p a partir de las integrales sobre las densidades de energía y función de Fermi. La *densidad de estados* $g(E)$ es la distribución de los estados de energía a una energía dada, mientras que la *función de Fermi* indica, en condiciones de equilibrio, la probabilidad de que un estado permitido de energía E esté ocupado por un electrón. La función de densidad de estados depende de la dimensión del sistema, tal que:

$$g_{3D}(E) = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}m^{3/2}E^{1/2}}{\pi^2\hbar^3} \quad g_{2D}(E) = \frac{m}{p\hbar^2} \quad g_{1D}(E) = \frac{\sqrt{2}m^{1/2}}{\pi\hbar\sqrt{E}} \quad (1.3.1)$$

La deducción de estas densidades no es exageradamente complicada, véase apéndice A.1. Por otra parte, la función de Fermi nos dice que la probabilidad de que cierto estado esté ocupado es:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/kT}} \quad (1.3.2)$$

donde E_F es la energía de Fermi, de la cual hablaremos más adelante. Naifmente uno podría pensar que la densidad n/p sería simplemente la integral $g(E)f(E)$ entre diferentes intervalos de energía, ya que como sabemos los huecos se encuentran siempre en la banda de conducción, y por tanto entre las energías E_{\min} y E_c , mientras que los huecos se encuentran en la banda de valencia, y por tanto entre las energías E_{\max} y E_v .

Sin embargo esto no es correcto, por dos razones. La primera de ellas es que por culpa de la forma de parábola cerca del máximo y el mínimo de la banda de valencia y conducción respectivamente, es necesario redefinir el cero en el máximo local/mínimo local. La razón no es evidente a primera vista, pero uno lo puede entender cuando piensa que en un extremo local solo caben 2 electrones (uno con espín arriba y otro con espín abajo). Así pues, las densidades en la banda de valencia $g_v(E)$ y en la banda de conducción $g_c(E)$ son:

$$g_c(E) = \frac{(m_n^*)^{3/2}\sqrt{2(E-E_c)}}{\pi^2\hbar^3} \quad E \geq E_c \quad g_v(E) = \frac{(m_p^*)^{3/2}\sqrt{2(E_v-E)}}{\pi^2\hbar^3} \quad E \leq E_v \quad (1.3.3)$$

La segunda razón es que si $f(E)$ es la probabilidad de que esté un estado ocupado con energía E en el equilibrio, entonces $1 - f(E)$ será la probabilidad de que no esté ocupado, y por tanto la probabilidad de que haya un hueco. Así pues, **las densidades de los portadores son**

$$n = \int_{E_c}^{E_{\max}} g_c(E) f(E) dE \quad p = \int_{E_{\min}}^{E_v} g_v(E) (1 - f(E)) dE \quad (1.3.4)$$

que se puede aproximar para obtener las densidades en función de la llamada *integral de Fermi-Dirac de orden 1/2* $F_{1/2}(\eta_c)$. La aproximación consiste básicamente en decir que $E_{\max} \rightarrow \infty$, y que por tanto

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (kT)^{3/2} F_{1/2}(\eta_c) \quad F_{1/2}(\eta_c) = \int_0^\infty \frac{\eta^{1/2}}{1 + e^{\eta - \eta_c}} d\eta \quad (1.3.5)$$

$$\eta = \frac{E - E_c}{kT} \quad \eta_c = \frac{E_F - E_c}{kT} \quad (1.3.6)$$

(no hemos hecho todos los pasos para deducir la forma ya que no se va a usar en ningún momento). Esta ecuación no tiene solución analítica, por tanto es necesario hacer ciertas aproximaciones si queremos trabajar con ella, lo cual trataremos en el siguiente apartado.

1.3.2. Semiconductores no degenerados y degenerados

Como hemos dicho, las densidades de los portadores en función de la integral de Fermi-Dirac La aproximación más interesante es la llamada *aproximación de Boltzmann*, que nos permite obtener una solución muy sencilla, que es la siguiente:

$$F_{1/2}(\eta_c) = \int_0^\infty \frac{\eta^{1/2}}{1 + e^{\eta - \eta_c}} d\eta \simeq \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{\eta_c} \quad (1.3.7)$$

Esta aproximación solo es válida cuando $E_c - 3kT > E_F > E_v + 3kT$, y por tanto cuanta más alta la temperatura más restringida será su aplicación. Cuando un semiconductor verifica estas condiciones para una temperatura dada decimos que se encuentra en el *régimen no degenerado*, mientras que cuando *no* verifica dichas condiciones decimos que está en el *régimen degenerado*.

En general nosotros trabajaremos únicamente con semiconductores no degenerados, y por tanto en el rango de validez de la aproximación de Boltzmann, la que da como resultado las siguientes densidades de portadores:

$$p = N_v e^{(E_v - E_F)/kT} \quad n = N_c e^{(E_F - E_c)/kT} \quad (1.3.8)$$

donde N_c y N_v son las llamadas **densidades equivalentes de los estados de la banda de valencia y conducción**, con la siguiente forma:

$$N_c = 2 \left(\frac{m_n^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \quad N_v = 2 \left(\frac{m_p^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (1.3.9)$$

Para una temperatura aproximada de 300K tenemos que

$$N_{C,V} = (2.509 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}) \left(\frac{m_{n,p}^*}{m_0} \right)^{3/2} \quad (1.3.10)$$

siendo m_0 la masa del electrón.

1.3.3. Semiconductores intrínsecos caso no degenerado

Definimos como **semiconductor intrínseco** a un material semiconductor extremadamente puro, sin dopantes, cuyas propiedades solo dependan del material. En este tipo de materiales el número de electrones es igual al número de huecos (en virtud de la neutralidad electrónica: el número de electrones en la banda de conducción será el mismo el número que electrones faltan en la banda de valencia, i.e. el número de huecos). Matemáticamente se expresa como

$$n = p = n_i \quad (1.3.11)$$

y se llama *condición intrínseca*. Siempre que estudiemos semiconductores intrínsecos lo haremos a través de los semiconductores no degenerados, ya que de cualquier otra forma no podemos tener expresiones analíticas. Denotamos E_i al **nivel de fermi intrínseco**. Usando la ecuación anterior, obtenemos que:

$$n_i = \sqrt{np} = \sqrt{N_C N_V} e^{E_g/2kT} = \quad (1.3.12)$$

donde $E_g = E_c - E_v$, y se le llama *energía de gap*. El valor de n_i para un semiconducto dado es muy importante, incluso cuando está dopado. La razón es que siempre podemos expresar n y p en función de n_i (a la misma temperatura), ya que si $n = p = n_i$:

$$n_i = N_C e^{(E_i - E_c)/kT} = N_V e^{(E_v - E_i)/kT} \Rightarrow N_C = n_i e^{(E_c - E_i)/kT} \quad N_V = n_i e^{(E_i - E_v)/kT} \quad (1.3.13)$$

tal que

$$n = n_i e^{(E_F - E_i)/kT} \quad p = n_i e^{(E_i - E_F)/kT} \quad (1.3.14)$$

lo cual nos está dando en realidad una información muy relevante: en función del nivel de fermi, i.e., si $E_F > E_i$ o $E_F < E_i$, podremos saber si el conductor es de tipo n o tipo p (solo cuando $E_F = E_i$ tenemos $n = p$, precisamente la condición intrínseca). Además tenemos que de la expresión anterior podemos deducir la llamada **ley de acción de masas** (que se verifique siempre que estemos en el rango no degenerado):

$$np = n_i^2 \quad (1.3.15)$$

1.3.4. Semiconductores extrínsecos caso no degenerado

Definimos como **semiconductor extrínseco** o **semiconductor dopado** a un material semiconductor al que se le han insertado átomos de otro grupo. Pero antes es importante preguntarse por qué se incluyen estos átomos en nuestro semiconductor, y cuáles son sus ventajas. La respuesta todavía no podemos darla de manera muy profunda, sin embargo si podemos decir lo siguiente: a temperaturas ambiente, la cantidad de portadores tipo n y tipo p intrínsecas son muy bajas, y por tanto habrá una conductividad muy baja. Cuando dopamos un semiconductor no solo estamos aumentando el número de portadores de un tipo, estamos aumentando la conductividad. De hecho, al ser capaces de controlar el nivel de dopado, podemos elegir la conductividad arbitrariamente, pudiendo optimizar y controlar totalmente las propiedades eléctricas.

Así pues, tenemos dos tipos de dopantes, que además definirán el tipo de portador mayoritario que tendremos. Tenemos pues:

- Dopante dador. Los dopantes dadores o dadores aportan electrones a la banda de conducción (por lo general son elementos del grupo V, aportando un electrón), lo que hará que el portador mayoritario sea el portador n . A la concentración de dadores la denotamos por N_D .
- Dopante aceptor. Los dopantes aceptores o aceptores aportan huecos a la banda de valencia (por lo general son elementos del grupo III, aportando un hueco), lo que hará que el portador mayoritario sea el portador p . A la concentración de dadores la denotamos por N_A .

C

1.4. Nivel de Fermi

La posición del nivel de Fermi es una relación entre el número destados ocupados n y p . Cuanto mas cerca de E_c mas portadores tipo n y cuanto mas cerca de E_v más portadores tipo p .

Hay que hablar de nivel de fermi, cual es su significado, ya que dijo Javier Fernando Lozano que es importante sobretodo cuando hablemos de las uniones pn y los diodos.

1.5. Valores típicos

1.6. Valores típicos

Los valores mas típicos para algunos semiconductores son:

1.7. Ejercicios

Ejercicio 1.1:

Se dopa silicio con Boro (B) en una proporción de 2 ppm (partes por millón)

- a) Calcula la concentración intrínseca del Si y obtén una expresión de dicha concentración en función de la temperatura.
- b) Indica el tipo de conducción de este material y calcula la concentración de impurezas y la de electrones y huecos (n y p) a temperatura ambiente si todos los dopantes están ionizados.
- c) Calcula la posición del nivel de Fermi y dibuja el diagrama de bandas completo correspondiente.
- d) ¿Qué pasa si la concentración de impurezas igualase el valor de N_V ? Representa gráficamente las bandas de energía frente a la concentración de impurezas usando todas las aproximaciones que conozcas.

(DATO: Constante de red del Si $a_0 = 5.431 \text{ \AA}$).

Solución en la página 13

Ejercicio 1.2:

Una muestra de Si está dopada con 6×10^{15} átomos de As por cm^3

- ¿Cuál es la concentración de portadores en la muestra de Si a 300 K?
- ¿Cuál es la concentración de portadores a 470 K?
- Para cada una de las dos temperaturas anteriores determinar la posición de E_i , calcular $E_F - E_i$ y dibujar a escala el diagrama de bandas de energía para la muestra.
- Si dopamos el Si con 10^{16} átomos donadores y 5×10^{15} átomos aceptores por cm^3 . ¿Cuál es la concentración de portadores a 300 K?+
- Partimos de una muestra de Si puro y lo dopamos exclusivamente con 10^{14} átomos donadores y 10^{14} átomos aceptores por cm^3 . Calcula la concentración de portadores y explica el resultado obtenido.

Tener en cuenta que $E_G = 1.08 \text{ eV}$ a 470 K y suponer que $m_e^*/m_h^* = 0.69$ es independiente de la temperatura.

Solución en la página 14

Ejercicio 1.3:

Cuestiones sobre el nivel de Fermi:

- Calcular la temperatura T para que el nivel de Fermi de un cristal de Silicio tipo N con $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ quedara a una energía $E_G/3$ por debajo de la banda de conducción. Suponer que N_C y E_G son constantes con la temperatura e iguales a sus valores a temperatura ambiente. Y repetir para el caso de dopar con $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.
- En un semiconductor determinado, la probabilidad de que los electrones ocupen un estado de energía kT , por encima del extremo inferior de la banda de conducción es e^{-10} . Determinar la posición del nivel de Fermi en dicho material.
- ¿Cuál es la probabilidad de que un estado de energía kT por debajo del nivel de Fermi esté ocupado por un hueco?

Solución en la página 15

Ejercicio 1.4:

Cuestiones sobre la resistividad y movilidad:

- La resistividad de un material tipo N es por lo regular más pequeña que la resistividad de un material tipo P de dopado comparable, explica por qué suele ocurrir esto. Calcula la resistividad del Si si se dopa con fósforo con una concentración de 10^{17} cm^{-3} . Repite el cálculo para el caso en que dopemos con aluminio con la misma concentración y calcular la corriente de arrastre en ambos casos considerando un campo eléctrico de 10^5 V/cm .

- b) Calcula la densidad de impurezas necesarias para tener un cristal de Si tipo P con resistividad $0.1 \Omega \cdot \text{cm}$. ¿Qué proporción hay de átomos de impureza sobre el número de átomos de Si? (DATO: Constante de red del Si $a_0 = 5.431 \text{ \AA}$). Si suponemos que el semiconductor es no degenerado, ¿cuánto vale D_p ?

Solución en la página 16

1.8. Solucion

Solución del ejercicio 1.1 en la página 11:

Veamos las soluciones por apartados

- a) La concentración intrínseca del Silicio en un semiconductor es el número de portadores n_i en el semiconductor, si no estuviera dopado. No hay que confundir la concentración intrínseca n_i con la concentración n , en la que si se tendrá en cuenta que el material está dopado. La concentración intrínseca es:

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-E_G/2kT} \quad (1.8.1)$$

donde $E_G = E_c - E - v$, y además

$$N_{C,V} = 2 \left(\frac{m_{e,p}^* k T}{2\pi\hbar^2} \right)^{-3/2} \quad (1.8.2)$$

Las masas $m_p^* = 1.18m_e$ y $m_n^* = 0.81m_e$. Si queremos dar el valor:

$$N_c = 3.22 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \quad N_v = 1.83 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \quad (1.8.3)$$

De lo que se deduce

$$n_i = 9.56 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3} \quad (1.8.4)$$

- b) Están dopando con boro, que es del grupo III, y por tanto es un dador. Esto significa que será un conductor tipo p . Para calcular la concentración de impurezas, primero tenemos que obtener la densidad de Boro en nuestro silicio. La densidad del silicio se calcular a partir de la constante de red y sabiendo que posee una red diamante. Así pues:

$$N_{Si} = \frac{8}{a_0^3} \quad (1.8.5)$$

de lo que se puede deducir entonces que:

$$N_B = 2 \cdot 10^{-6} \cdot N_{Si} = 9.988 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} \quad (1.8.6)$$

Nos dicen que todos los dopantes están ionizados, es decir, que estamos en el régimen extrínseco. En este régimen todos los átomos de Boro son impurezas, tal que $N_A^- = N_A = N_B$. Suponiendo que $N_A^- \gg N_D^+$, tenemos que la ecuación de neutralidad de carga:

$$n \cdot p = n_i^2 \quad p - n - N_A = 0 \quad (1.8.7)$$

usando estas ecuaciones para despejar el valor de n y p , tenemos que:

$$p = \frac{N_A}{2} + \left[\left(\frac{N_A}{2} \right)^2 + n_i^2 \right]^{1/2} \quad (1.8.8)$$

y luego calculamos

$$n = \frac{n_i^2}{p} \quad (1.8.9)$$

Numéricamente podemos obtener los resultados:

$$n = 915.034 \text{ cm}^{-3} \quad p = 9.988 \cdot 10^{16} \text{ cm}^3 \quad (1.8.10)$$

- c) La posición del nivel de Fermi de un semiconductor dopado se calcula a partir del nivel de Fermi intrínseco. Así pues

$$E_{Fi} = E_i = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3kT}{4} \ln \frac{m_p^*}{m_e^*} = 0.523 \text{ eV} \quad (1.8.11)$$

tal que la energía de Fermi. *Introducir imagen*

$$E_F = E_i + kT \ln \left(\frac{p}{n_i} \right) = 0.1350.135 \quad (1.8.12)$$

- d) Cuando la concentración de impurezas es igual al valor de N_V , dado que $p = N_V e^{(E_v - E_F)/kT}$, esto implicaría que $E_v = E_F$, y que por tanto la condición de semiconductor no degenerado $E_F > E_v + 3kT$ no se cumpliría. *Tenemos un semiconductor degenerado, teniendo que calcular los valores de n y p mediante las integrales explícitas.* Consecuentemente, estamos ante un semiconductor degenerado. *Introducir imagen para las bandas*.

Solución del ejercicio 1.2 en la página 12:

- a) Tenemos primero que ver si está degenerado, sin embargo sabemos que para esta temperatura y el nivel de dopamiento no debería estar degenerado, y por tanto podríamos usar la ley de acción de masas junto con la condición de electroneutralidad para despejar n en función de N_D , N_A y n_i . Se puede obtener, dado que $N_D \gg n_i, N_A$, tenemos que

$$n \approx N_D = 6 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} \quad n \cdot p = n_i^2 \Rightarrow p = 1.67 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-3} \quad (1.8.13)$$

- b) Nos dicen que a $T = 470\text{K}$ y que $E_G = 1.08\text{eV}$. Lo único que no cambio es N_D . Lógicamente el número de portadores intrínsecos n_i cambia al aumentar la temperatura: a mayor energía térmica promocionan más electrones, mas electrones van a poder excitarse desde la banda de valencia. Calculamos n_i a partir de

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-E_g/2kT} \quad (1.8.14)$$

Luego solo tenemos que hacer

$$N_{c,v} = 4.829 \cdot 10^{15} T^{3/2} \left(\frac{m_{n,p}^*}{m_e} \right) \quad (1.8.15)$$

A esta temperatura tenemos entonces que:

$$N_c = 6.3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \quad N_v = 3.6 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \quad (1.8.16)$$

Y por tanto

$$n_i = 7.74 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad (1.8.17)$$

De lo que se deduce, de nuevo, aplicando la ley de acción de masas:

$$n = 6.001 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} \quad p = 9.98 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3} \quad (1.8.18)$$

c) Determina la posición del nivel de Fermi intrínseco. Es sencillo que:

$$E_i = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \left(\frac{m_p^*}{m_n^*} \right) \quad (1.8.19)$$

Una vez tenemos E_i para cada una de las temperaturas, calculamos la temperatura final

$$E_F = E_i + kT \ln \left(\frac{n}{n_i} \right) \quad (1.8.20)$$

Introducir imagen

d)

e)

Solución del ejercicio 1.3 en la página 12:

a) La solución es $T = 536.206\text{K}$. Para esto tenemos que usar la relación

$$T = \frac{E_F - E_c}{k} \frac{1}{\ln(N_D/N_c)} = \frac{-E_g}{3k} \frac{1}{\ln(N_D/N_c)} \quad (1.8.21)$$

donde $N_c = 3.22 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

b) Queremos calcular la posición del nivel de Fermi. Usamos la fórmula

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/kT}} \quad (1.8.22)$$

y usando lo que nos da el enunciado:

$$f(kT + E_c) = \frac{1}{1 + e^{(kT+E_c-E_F)/kT}} = \frac{1}{e^{10}} \quad (1.8.23)$$

Tenemos entonces que

$$1 + e^{\frac{kT+E_c-E_f}{kT}} = e^{10} \quad (1.8.24)$$

De lo que se deduce que $E_F = E_c + 9kT$.

- c) ¿Cuál es la probabilidad de que un estado de energía kT por debajo del nivel de Fermi esté ocupado por un hueco? Tenemos que

$$1 - f(E_F - kT) = 1 - \frac{1}{1 + e^{-1}} \simeq 0.2689 \rightarrow 26.89\% \quad (1.8.25)$$

La probabilidad es no nula y por tanto... (preguntar a Elisa Casal).

Solución del ejercicio 1.4 en la página 12:

- a) La diferencia radica en la masa efectiva, que se expresa en la movilidad:

$$\rho = \frac{1}{q(n\mu_n + p\mu_p)} \quad (1.8.26)$$

Cuando $\mu_n > \mu_p \Rightarrow \rho_n < \rho_p$. Y esto siempre ocurre. Las movilidades dependen de la temperatura y la cantidad que esté dopado, por lo que puede ser diferente. Para un semiconductor dopado tipo N:

$$\rho_N = \frac{1}{qn\mu_n} = \frac{1}{1.6 \cdot 10^{19} \cdot 10^{17} \cdot 1350} = 0.0463 \Omega \text{cm} \quad (1.8.27)$$

Y para un tipo P:

$$\rho_N = \frac{1}{1.6 \cdot 10^{19} \cdot 10^{17} \cdot 480} = 0.13 \Omega \text{cm} \quad (1.8.28)$$

(valores de movilidad sacados de la Wikipedia). Ahora podemos calcular la corriente de arrastre (usamos que $J = qnN\epsilon$, donde $\epsilon = 10^5 \text{ eV}$)

$$J_N = 2.16 \cdot 10^6 \text{ A cm}^{-2} \quad J_p = 7.68 \cdot 10^3 \text{ A cm}^{-2} \quad (1.8.29)$$

- b) Ahora lo que hacemos es considerar que el número de impurezas es igual al número de huecos (están todas completamente ionizadas). Lo que nos queda entonces es:

$$N_A = \frac{1}{q\rho\mu_p} = \frac{1}{1.6 \cdot 10^{19} \cdot 0.1 \cdot 480} = 1.3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \quad (1.8.30)$$

Podemos calcular con a_0 el número de átomos de silicio por unidad de volumen:

$$N_{Si} = 5 \cdot 10^{22} \text{ at cm}^{-3} \quad (1.8.31)$$

Y solo tenemos, para calcular la proporción:

$$\frac{N_A}{N_{Si}} = 2.6 \cdot 10^{-6} = 2.6 \text{ ppm} \quad (1.8.32)$$

Para acabar necesitamos calcular la relación de Einstein (solo usable en semiconductores no degenerados). Así tenemos que

$$D_p = \frac{kT}{q}\mu_p = 12.4 \text{ cm}^2/\text{s} \quad (1.8.33)$$

Capítulo 2

Fenómenos de transporte en semiconductores

2.1. Fenómeno de transporte

2.1.1. Movilidad

La movilidad decrece con la temperatura. Por contra, cuando la temperatura empieza a ser mayor, el efecto de las impurezas ionizadas deja de ser relevante, y comienza a ser relevante la debida a las vibraciones de la red cristalina (fonones). Para altas temperaturas μ cae como $T^{-3/2}$, a la inversa de lo que crece el número de fonones.

2.1.2. Difusión

La difusión es un proceso por el cual las partículas tienden a dispersarse o redistribuirse como resultado de su alta concentración en ciertas zonas del sólido o bajas concentraciones en otra zona a temperatura no nula.

Las corrientes de difusión son directamente proporcionales a los gradientes de concentración de partículas (ley de Fick):

2.2. Procesos de generación y recombinación

Cuando un semiconductor es perturbado de su estado de equilibrio, el semiconductor responde modificando el número de portadores que hay en el mismo. La recombinación-generación (denotada por RG o R-G) es el mecanismo con el que describimos el proceso por el cual un exceso o deficiencia de portadores se estabiliza (si la perturbación se mantiene en el tiempo) o es eliminada (si la perturbación es temporal). Dado que durante la perturbación el sistema está bajo condiciones de no equilibrio, muchas de los fenómenos que aparecen en el semiconductor no puedan ser descritos a través de los procesos RG.

2.2.1. Introducción

En un semiconductor definimos como **recombinación** al proceso por el cual electrones y huecos son aniquilados/destruidos, mientras que la **generación** es el proceso por el cual electrones

y huecos son creados. Esta descripción así hecha es muy general, y por tanto varios tipos de procesos podrían incluirse en lo que llamamos RG. Generalmente se usan las gráficas de banda energética para describir visualmente cuales son los posibles procesos RG, aunque sea solo para entender su naturaleza. También se suele describir que papel tiene la energía y que tipo de energía se emite/absorbe en estos procesos.

Procesos de recombinación

Existen varios tipos de procesos de recombinación:

- **Recombinación directa.** Es el tipo más simple de recombinación. En este hay una aniquilación directa entre un hueco en la banda de valencia y un electrón en la banda de conducción, en el que el electrón «cae» a la banda de valencia. Es un proceso típicamente radiativo, en el que el exceso de energía se convierte en un fotón de luz.
- **Recombinación de centro RG.** Recordemos que las impurezas generan niveles energéticos en la región del gap de energía. Los defectos cristalinos, particularmente las impurezas atómicas, pueden generar niveles energéticos en medio del gap. En este proceso de recombinación, los llamados centros RG con energía E_T actúan como intermediarios. Existen varios tipos de recombinaciones de centro RG. En la primera de ellas tanto el electrón en la BC y el hueco en la BV se ven atraídos al mismo centro RG, aniquilándose. Otra posibilidad es que un portador salte a la banda contrario usando el centro RG como mediador. A este proceso se le llama *recombinación termal*, ya que no es un proceso radiativo (no emite fotones), emitiendo calor, o, en su defecto, fonones. También existen recombinaciones de centro RG usando como centros RG los niveles energéticos de los dadores y aceptores (que recordemos están muy cerca de los niveles energéticos de las bandas), aunque no son tan comunes. Estos procesos son radiativos, pero poco probables, y se denominan *recombinación a través de niveles profundos*. No son tan probables porque, a temperaturas ambientales, la probabilidad de que vuelvan a excitarse al nivel de la banda de conducción es altamente probable.
- **Recombinación Auger** En el proceso Auger lo que ocurre es que una recombinación directa/de centro RG ocurre simultáneamente con la colisión de dos portadores. Consecuentemente, estos portadores altamente energéticos se «termalizan» (pierden energía en pasos pequeños mediante pequeñas colisiones con la red cristalina). La dispersión posterior del electrón que se lleva toda la energía sucede a través de diferentes pasos, como una «escalera», lo cual sucede porque la relajación del portador energético no es un proceso instantáneo, sino que sucede en varias etapas debido a la dispersión con fonones. Los fonones (vibraciones cuánticas de la red cristalina) tienen energías discretas, lo que significa que el portador pierde energía en múltiplos de estas energías fonónicas. En semiconductores típicos, los fonones ópticos tienen energías del orden de decenas de meV, por lo que un electrón altamente excitado no puede perder toda su energía de golpe, sino que la va cediendo en ‘saltos’ discretos al emitir fonones ópticos uno tras otro.
- **Recombinación superficial:**

Importante colocar las imágenes

Procesos de generación

Existen varios tipos de generación, uno por cada uno de los procesos de recombinación. Así pues, existe generación directa, la cual necesita energía térmica o electromagnética (a través de fotones); generación por centros RG (energía térmica), y en último lugar la generación a través de impactos ionizantes (proceso inverso a la recombinación Auger). En estos últimos, el par de portadores se genera como consecuencia del impacto de un portador con un átomo cristalino. La generación de portadores a través de impacto ionizante ocurre recurrentemente cuando hay regiones con un campo eléctrico \mathcal{E} muy alto, y es el responsable de los fenómenos de avalancha de las uniones pn .

2.2.2. Consideraciones acerca los procesos RG

Los procesos de recombinación y generación ocurren permanentemente, incluso en el equilibrio termodinámico, siendo el principal problema de los procesos RG el cálculo del ratio de producción de los diferentes procesos. Típicamente, uno solo necesita centrarse en el proceso principal (el que mayor ratio de producción tiene). En los semiconductores dopados no degenerados a una temperatura ambiente, uno espera que los procesos dominantes sean procesos directos o de centro RG.

Conociendo la forma de las bandas de energía (más concretamente, cual es el valor de k para el cual la energía de la banda de conducción es mínima) podremos dilucidar cual de los procesos es dominante: o de tipo directo o de centro RG. ¿Cómo? Pues es bien sencillo: los fotones, al ser partículas sin masa, son capaces de llevar muy poco momento, y por tanto las transiciones son casi verticales, es decir, solo son capaces de describir los semiconductores de tipo directo (mínimo BC y máximo de BV en $k = 0$). Por otro lado, los fonones pueden trasmitir momentos y energía mucho más grandes, por lo que son capaces de describir tanto los procesos en los semiconductores directos e indirectos, aunque en el caso de los directos no es un proceso dominante. Los procesos térmicos están relacionados con la recombinación de centro RG y los procesos fotónicos con la recombinación directa, y por tanto podemos diferenciar cuando uno y otro son dominantes.

2.3. Recombinación directa en semiconductores de gap directo

Definimos como G (R) el número de pares electrones (huecos) generados /cm³s. Estas tasas de recombinación y generación dependen en general del número de huecos y electrones que haya en el medio, por lo que en general:

$$R = \beta np \quad G = \alpha np \quad (2.3.1)$$

Para un conductor en equilibrio termodinámico $G_{th} = R_{th}$ (siendo estas las tasas de generación/combinación en el equilibrio), manteniéndose n y p constantes. En el equilibrio $R = G = \beta n_{n0} p_{n0}$. Ahora bien, cuando iluminamos uno de estos semiconductores aumenta su generación en un término G_L , tal que ahora $G = G_L + G_{th}$. Consecuentemente tenemos que se incrementa en un número determinado el número de portadores en el semiconductor Δn y Δp ($\Delta n = \Delta p$, neutralidad de carga). Así pues tenemos que la tasa:

$$\frac{dp_n}{dt} = G - R = G_L + G_{th} - R \quad R = \beta n_n p_n = \beta(n_{n0} + \Delta n)(p_{n0} + \Delta p) \quad (2.3.2)$$

Una vez llegamos al estado estacionario, podemos obtener entonces lo que llamamos el *ratio de recombinación* $U = R - G_{th}$, esto es:

$$U = R - G_{th} = \beta(n_{n0} + p_{n0} + \Delta p)\Delta p \quad (2.3.3)$$

Cuando tenemos $p_{n0} \ll n_{n0}$ (bajo nivel de inyección tipo N), tenemos que:

$$U = \beta n_{n0}\Delta p = \frac{p_n - p_{n0}}{\frac{1}{\beta n_{n0}}} = \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} \quad (2.3.4)$$

Importante colocar las imágenes

2.4. Recombinación indirecta en semiconductores de gap indirecto: procesos RG.

2.4.1. Definición de términos

La estadística RG es el nombre que se le da a la caracterización matemática de los procesos de recombinación y generación. Dado que los procesos RG cambian las concentraciones de los portadores con el tiempo, la «caracterización matemática» de estos procesos no es más que la definición de las relaciones entre $\partial n/\partial t$ y $\partial p/\partial t$. Recordemos que los procesos RG lo que hacen es insertar una banda energética E_T en la posición central del gap de bandas. Así pues definimos:

- Variación de n debida a procesos RG: $\left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{RG}$.
- Variación de p debida a procesos RG: $\left. \frac{\partial p}{\partial t} \right|_{RG}$.
- Número de centros RG llenos de electrones por cm^3 : n_T .
- Número de centros RG llenos de huecos por cm^3 : p_T
- Número total de centros RG por cm^3 : N_T

Es importante que quede muy claro que $\partial n/\partial t|_{RG}$ y $\partial p/\partial t|_{RG}$ son tasas netas, teniendo en cuenta tanto los procesos de recombinación como los procesos de generación. Cuando $\partial n/\partial t|_{RG}$ es negativo, la tasa de neta de electrones es negativa $R > G$; y si es positiva, la tasa de electrones es positiva $G > R$. La desigualdad de $|_{RG}$ no denota otra cosa que «tasa de cambio producida por los procesos RG». Esto es importante, ya que pueden ocurrir otros procesos además de estos.

2.4.2. Obtención de las tasas de producción

Existiendo 4 tipos de transiciones RG, que son:

- **Captura de un electrón en un centro RG.** Se define c_n como el *coeficiente de captura de electrones* (cm^3/s) con signo positivo.
- **Emisión de un electrón por un centro RG.** Se define e_n como el *coeficiente de emisión de electrones* (cm^3/s) con signo positivo.
- **Captura de un hueco en un centro de RG** (o un electrón de un RG cae a BV). Se define c_p como el *coeficiente de captura de huecos* (cm^3/s) con signo positivo.

- **Emisión de un hueco por un centro de RG** (o un electrón de BV cae a RG). Se define e_p como el *coeficiente de emisión de electrones* (cm^3/s) con signo positivo.

Una vez entendemos esto, es claro que las ecuaciones que rigen los procesos RG son (no pueden ser de otra forma)

$$r_N = \frac{\partial n}{\partial t} \Big|_{R_G} = e_n n_T - c_n n p_T \quad r_P = \frac{\partial p}{\partial t} \Big|_{R_G} = e_p p_T - c_p p n_T \quad (2.4.1)$$

2.5. Simplificaciones

Existen varias simplificaciones. La más típica de todas es aquella en la que se aplica el **principio de balance detallado**. Este nos dice que bajo condiciones de equilibrio cada proceso fundamental y su inverso se autobalancean independientemente de cualquier otro proceso que pueda ocurrir en el interior del semiconductor. Así pues, en el equilibrio se cumple que $r_N = r_P = 0$. En este caso podemos deducir las expresiones

Capítulo 3

La unión PN

Capítulo 4

El transistor bipolar de unión

Capítulo 5

El transistor MOSFET

Apéndice A

Apéndice

A.1. Densidad de Estados y Estadística de Fermi-Dirac

A.1.1. Niveles de energía

El comportamiento de los electrones viene determinado por la función de ondas del mismo, obtenida (a no ser que las energías de estos sean ultrarrelativistas) mediante la ecuación de Schrödinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (\text{A.1.1})$$

Si tomamos que $\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \Psi(\mathbf{r})$ donde E es la energía del estado tenemos que la ecuación se transforma en la llamada *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (\text{A.1.2})$$

En función del potencial que usemos para describir el comportamiento de los electrones obtendremos una teoría u otra. La *teoría de los electrones libres* es la mas sencilla de todas, ya que supone que $V(\mathbf{r}) = 0$, es decir, que los electrones no experimentan ningún tipo de potencial en el metal (ni con otros electrones, ni vibraciones, ni con los átomos...). Es evidente que una teoría que quisiera ser más realista debería incluir algún tipo de potencial, pero como veremos es suficiente como para predecir algunos valores experimentales (aunque sea en orden de magnitud). En ese caso la ecuación se transforma en:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (\text{A.1.3})$$

Que como podemos ver no es más que una ecuación de onda, por lo que la solución mas general puede ser descrita en función de exponentiales complejas

$$\Psi(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{A.1.4})$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda que debe verificar que:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (\text{A.1.5})$$

Esta solución, aunque viola los principios de la mecánica cuántica (la integral en el espacio de $|\Psi|^2$ es infinita, teniendo que ser 1) y no describe estados reales (energía y momento perfectamente definidos, partícula que podría estar en cualquier parte del universo con la misma probabilidad...), es bastante funcional. Si ahora al electrón lo encerramos en una caja de volumen $V = L_x L_y L_z$ y exigimos que la función de ondas sea igual en todo el borde $\Psi(0) = \Psi(L_i)$ ($i = x, y, z$) tenemos que el momento se discretiza (ya no todos los valores son iguales), tal que:

$$k_i = \frac{2\pi}{L_i} n_i \quad n_i = 1, 2, 3 \dots \quad (\text{A.1.6})$$

para $i = x, y, z$. Supongamos de ahora en adelante que los 3 lados son iguales y que por tanto $V = L^3$. Como podemos ver esto significa que a un \mathbf{k}_n concreto se le asocia un volumen en el espacio de los momentos k de volumen $8\pi^3/L^3$. En realidad a cada uno de estos volúmenes podremos asociar dos estados de electron: uno con espín \uparrow y otro con espín \downarrow . De este hecho podemos obtener un valor para el número de estados posibles N encerrados en una esfera de radio k_F en el espacio de momentos:

$$N = 2 \times \frac{1}{8\pi^3/L^3} \iint_0^{k_F} k_F^2 dk d\Omega \quad (\text{A.1.7})$$

En palabras esta ecuación se traduce como: el número de estados totales para dicha esfera es el volumen de la esfera entre el volumen al que asociamos un estado posible. De este modo tenemos que:

$$N = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 \quad (\text{A.1.8})$$

En el cero absoluto, los electrones tratarán de colocarse en los niveles con menos energía posible (es decir, con menor k), por lo que si en tenemos N partículas posibles (es decir, tenemos que asignar N estados posibles, tal que $N \rightarrow N$ en la ec. anterior). Así el valor de k_F adquiere el significado de “máximo valor posible de k para un electrón”, y tiene el valor de:

$$k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{1/3} \quad (\text{A.1.9})$$

donde $n = N/V$ es la *densidad de partículas*. Lógicamente valores de $k > k_F$ no son posibles, ya que eso significaría que esa partícula tiene disponible un estado con menor energía que no está ocupando, lo cual es imposible si estamos en el cero absoluto. Entonces la superficie de la esfera citada antes adquiere un significado más profundo, ya que es la separación entre *los estados ocupados y desocupados* del sistema, denominándose **superficie de Fermi**. De aquí podemos deducir otros muchos términos (como la energía máxima, velocidad máxima...). A todos estos términos los llamamos “de Fermi”. Así tenemos, en resumen:

- **Vector de onda de Fermi (3D):**

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (n \equiv N/V) \quad (\text{A.1.10})$$

- **Vector de onda de Fermi (2D):**

$$k_F = \sqrt{2\pi n} \quad (\text{A.1.11})$$

- **Energía de Fermi:**

$$\varepsilon_F \equiv \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (\text{A.1.12})$$

■ **Velocidad de Fermi:**

$$v_F \equiv \sqrt{2\varepsilon_F/m} \quad (\text{A.1.13})$$

■ **Temperatura de Fermi:**

$$T_F \equiv \varepsilon_F/k_B \quad (\text{A.1.14})$$

Ahora otra pregunta que nos podemos hacer es: ¿Cuántos estados hay en un intervalo de energías ε y $\varepsilon + d\varepsilon$? Para calcularlos esto solo tenemos que saber cuántos estados hay entre k y $K + dk$ y hacer el cambio de variable. Entonces en un intervalo ε y $\varepsilon + d\varepsilon$ habrá

$$\mathcal{N}(k + dk) - \mathcal{N}(k) = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left((\varepsilon + d\varepsilon)^{3/2} - (\varepsilon)^{3/2} \right)$$

si ahora $d\varepsilon \rightarrow 0$ tal que $\mathcal{N}(k + dk) - \mathcal{N}(k) = d\mathcal{N}$ tenemos que

$$d\mathcal{N} = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left((\varepsilon + d\varepsilon)^{3/2} - (\varepsilon)^{3/2} \right) = \frac{V}{3\pi^2} \varepsilon^{3/2} \left((1 + d\varepsilon/\varepsilon)^{3/2} - (1)^{3/2} \right)$$

donde hemos usado que $\sqrt{1+x} \approx 1 + x/2$ y cogido el término lineal con $d\varepsilon$, de tal modo que:

$$d\mathcal{N} = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{\varepsilon^{3/2} V}{3\pi^2} \frac{3}{2} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \quad (\text{A.1.15})$$

Si definimos la **densidad de estados** como $D(\varepsilon) = d\mathcal{N}/d\varepsilon$ tenemos que:

$$D(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \quad (\text{A.1.16})$$

Teniendo en cuenta que $2m/\hbar^2 = k_F^2/\varepsilon_F$, y que $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ tenemos que la densidad de estados se puede escribir como

$$D(\varepsilon) = \frac{3}{2} \frac{N}{\varepsilon_F} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F} \right)^{1/2} \quad (\text{A.1.17})$$

De lo que se puede deducir la expresión de densidad de estados por unidad de volumen $d(\varepsilon) = D(\varepsilon)/V$. Teniendo en cuenta todo lo anterior no es muy difícil deducir que:

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{A.1.18})$$

que sólo es válido para temperaturas $T = 0$, ya que estamos asumiendo que la probabilidad de que el estado con $\varepsilon < \varepsilon_F$ esté ocupado es del 100 %. Sin embargo a temperaturas finitas esta probabilidad dependerá de una función llamada la función de Fermi, que como veremos en el siguiente apartado modificará sustancialmente esta ecuación.

A.1.2. Estadística de Fermi-Dirac

Dado un sistema de electrones libres (es decir, no están sometidos bajo ningún tipo de potencial), la probabilidad de que un estado con energía E esté ocupado viene dado por el factor de Fermi, también llamado **distribución de Fermi-Dirac**:

$$f_{FD}(E, T) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} \quad (\text{A.1.19})$$

donde μ es el llamado *potencial químico*, aunque en realidad la razón por la cual aparece en la ecuación es en cantidad de constante de integración, de multiplicador de lagrange fruto de la derivación matemática. A bajas energías la función de Fermi se convierte en la función escalón, mientras que a altas temperaturas esta función escalón se va difundiendo. Como podremos ver esta estará relacionada con la energía de Fermi.

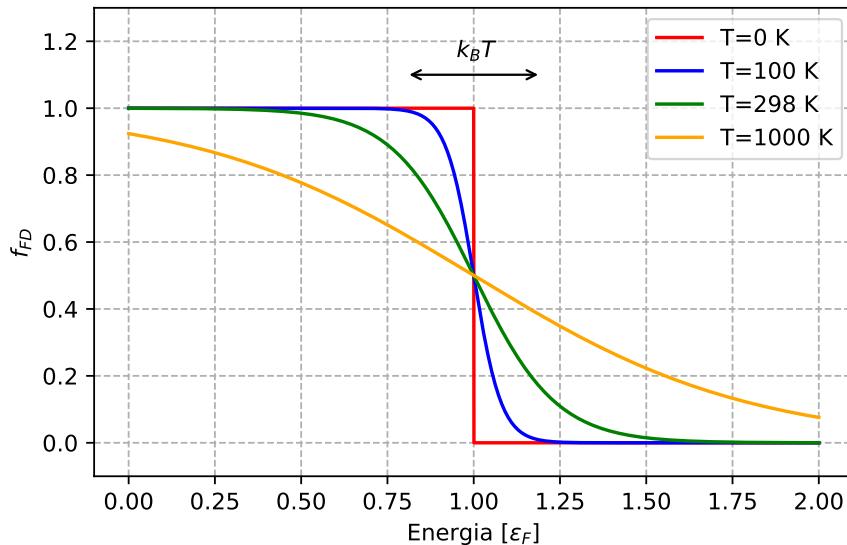


Figura A.1: Distribución de Fermi-Dirac.

Cuando $T \neq 0$ la probabilidad de que este ocupado un estado de energía $\varepsilon > \varepsilon_F$ ya no es cero, de tal modo que el número de estados viene dado por:

$$N = \int_0^{\infty} f_{FD}(\varepsilon, T) D(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{A.1.20})$$

Si $T = 0$ tenemos que la ecuación () se recupera verificándose que $\mu = \varepsilon_F$ dadas las definiciones previas. Sin embargo para temperaturas $T \neq 0$ no se verifica que sean iguales ($\mu(T \neq 0) \neq \varepsilon_F$). De hecho el valor de μ depende en última instancia de la ligadura (A.1.20), de tal modo que para $T \ll T_F$ se verifica que:

$$\mu(T) \approx \varepsilon_F \left[1 - \frac{1}{3} \left(\frac{\pi T}{2T_F} \right)^2 \right] \quad (\text{A.1.21})$$

que se deduce de la expansión de Sommerfeld.