

FISICA DEI SEMICONDUTTORI

1.1) Introduzione

Per descrivere le caratteristiche di un materiale semiconduttore è necessario introdurre il concetto di struttura a bande dei livelli energetici di un solido.

Supponiamo di avere due atomi identici ad una distanza R , per effetto dell'interazione coulombiana dei protoni all'interno del nucleo, i livelli di energia permessi si sdoppiano in due livelli, e la differenza energetica fra i due aumenta al diminuire della distanza fra i due atomi. Se abbiamo N atomi ogni livello si separa in N livelli, i livelli sono così fitti che possiamo considerarli come un continuo d'energie che chiamiamo banda energetica[1].

I semiconduttori sono materiali caratterizzati dal fatto di avere due bande d'energie permesse, una di valenza e una di conduzione, separate da una proibita, detta gap energetico. Un materiale semiconduttore viene rappresentato come un cristallo con una struttura tridimensionale, detta reticolo, in cui gli atomi del materiale sono dei punti ideali equispaziati fra loro, la distanza fra un atomo e l'altro è definita periodicità del cristallo[2].

La relazione che lega l'energia ed il momento di un elettrone, all'interno di una struttura a bande, si ottiene risolvendo l'equazione di Schrödinger (k è l'indice di degenerazione)[3].

Eq1.1)

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U(r) \right] \Psi_k(r) = E_k \Psi_k(r)$$

Per il teorema di Bloch se il potenziale è periodico con la stessa periodicità del cristallo e le soluzioni saranno della forma:

Eq1.2)

$$\Psi_k(r) = e^{ikr} u_k(r)$$

Periodiche in r con la periodicità del reticolo.

Per rappresentare tutte le forze d'interazione che agiscono su un elettrone all'interno di un reticolo cristallino s'introduce il concetto di massa efficace. Dalla legge di Newton:

Eq1.3)

$$m a = -eE + \text{Forze d'interazione con nuclei ed elettroni del reticolo}$$

Eq1.4)

$$m^* a = -eE$$

Dove m^* è definita come massa efficace, pertanto il moto di un elettrone si riconduce a quello di una particella libera sottoposta al solo campo esterno. Analizzandone la velocità di gruppo:

Eq1.5)

$$v_g = \frac{dw}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

Dalla relazione di Plank $E=h\nu$ si ottiene:

Eq1.6)

$$\partial E = h \partial \mathbf{n} = h v_g \partial k = -e E v_g \partial t \quad -eE = \hbar \frac{dk}{dt}$$

Eq1.7)

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} (-eE)$$

Confrontando con l'equazione 3 si ottiene:

Eq1.8)

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}$$

In un sistema tridimensionale si esprime come:

Eq1.9)

$$m_{ij}^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_i \partial k_j}$$

1.2) Semiconduttori intrinseci e estrinseci

Un semiconduttore si dice intrinseco quando è privo d'impurezze, in altre parole quando al processo di conduzione partecipano solo gli elettroni del suo cristallo. La densità totale d'elettroni in banda di conduzione si ottiene moltiplicando la funzione densità di stati $g(E)$ per la probabilità d'occupazione data dalla distribuzione di Fermi [4].

Eq1.10)

$$n = \int_{E_c}^{E_{\max}} g(E) f_D(E) dE \quad f_D(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT}}$$

Supponendo che la concentrazione d'elettroni non sia troppo elevata, rispetto agli stati disponibili, si può trascurare il principio d'esclusione di Pauli e sostituire la distribuzione di Fermi con quella più semplice di Boltzmann e approssimare $g(E)$ con la densità di stati disponibili vicino al minimo della banda di conduzione, da cui risulta:

Eq1.11)

$$n = N_C e^{\left(-\frac{E_c - E_F}{kT} \right)} \quad N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

Quando un elettrone lascia la banda di valenza per entrare in conduzione si crea una lacuna in banda di valenza, la lacuna si muove dalla banda di conduzione a quella di valenza, partecipando

anch'essa alla conduzione per questo da considerazioni analoghe a quelle fatte per gli elettroni si ottiene:

Eq1.12)

$$p = N_V e^{\left(\frac{E_V - E_F}{kT}\right)} \quad N_V = 2 \left(\frac{2\mathbf{p}^* m_p kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

Nel caso di un semiconduttore intrinseco vale la legge dell'azione di massa, che afferma: il numero d'elettroni in banda di conduzione è uguale a quello delle lacune in banda di valenza.

Eq1.13)

$$n = p = n_i \quad np = n_i^2$$

Eq1.14)

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{(E_V - E_C / kT)} = \sqrt{N_C N_V} e^{\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)}$$

Dove n_i è la concentrazione dei portatori intrinseci ed E_g è il gap d'energia della banda proibita.

Eq1.15)

$$E_F = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{N_C}{N_V} \right)$$

Tabella1.1)

Gap Energy (eV,300K)		
Ge	Si	GaAs
0.67	1.124	1.43

Tenendo conto che $2kT = 52\text{meV}$ a 300K è molto minore dell'energia necessaria per passare dalla banda di valenza a quella di conduzione per qualsiasi tipo di semiconduttore elencato nella tabella 1 i semiconduttori intrinseci sia temperatura ambiente che a temperature criogeniche si comportano come degli isolanti. Prendiamo ora in considerazione i semiconduttori estrinseci.

Un semiconduttore estrinseco è caratterizzato dal fatto che la sua struttura cristallina è alterata dalla presenza d'impurità dette droganti. I droganti sono degli atomi che hanno un elettrone di valenza in più (donori) o in meno (accettori) nell'atomo del reticolo che va a sostituire. Un semiconduttore del III gruppo, come il Si avrà sostanze droganti del II e IV gruppo, mentre un composto come GaAs del III eV gruppo avrà droganti del II e VI gruppo.

I droganti introducono degli stati elettronici localizzati vicino alla banda di conduzione per i donori e a quella di valenza per gli accettori, che aumentano la conducibilità dei materiali agendo come centri di ricombinazione non radiativi.

La nuova condizione d'equilibrio diviene ora:

Eq1.16)

$$n + N_A = p + N_D$$

E la concentrazione dei portatori di carica diviene:

Eq1.17)

$$n_n = \frac{1}{2} \left[N_D - N_A + \sqrt{(N_D - N_A)^2 + 4n_i^2} \right] \quad n_p = \frac{n_i^2}{p_p}$$

Eq1.18)

$$p_p = \frac{1}{2} \left[N_A - N_D + \sqrt{(N_A - N_D)^2 + 4n_i^2} \right] \quad p_n = \frac{n_i^2}{n_n}$$

Nel caso di semiconduttori poco drogati il numero di stati in banda di conduzione è molto maggiore rispetto al numero d'elettroni aggiunti, è ancora possibile trascurare il principio di Pauli e applicare la statistica di Boltzmann.

Eq1.19)

$$np = N_C N_V e^{\left(\frac{E_g}{kT} \right)} \quad n \cong p$$

Nel caso di un semiconduttore di tipo n più drogato il numero di elettroni è differente da quello delle lacune ed il livello di Fermi non è più al centro della banda proibita ma si sposta verso la banda di conduzione (di valenza per i p) per compensare i nuovi livelli aggiunti (figura1.1), tuttavia vale ancora la legge dell'azione di massa e le concentrazioni n e p si possono esprimere in funzione del nuovo livello di Fermi e del livello intrinseco n_i .

Eq1.20)

n)

p)

$$E_c - E_F = kT \ln \left(\frac{N_C}{N_D} \right)$$

$$E_F - E_V = kT \ln \left(\frac{N_V}{N_A} \right)$$

Eq1.21)

$$n = n_i e^{\left(\frac{E_F - E_i}{kT} \right)}$$

$$p = n_i e^{\left(- \frac{E_F - E_i}{kT} \right)}$$

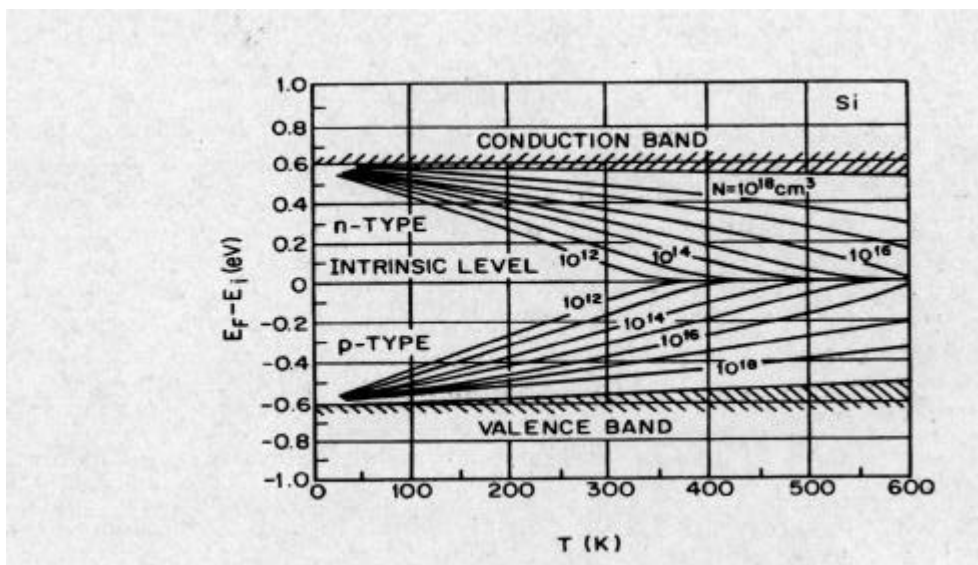


Figura1.1) [4]Andamento del livello di Fermi e della larghezza di Banda proibita in funzione della temperatura

1.3) Semiconduttori a temperature criogeniche

Al variare della temperatura ci sono due effetti concomitanti che variano le caratteristiche fisiche di un semiconduttore, da un lato il gap energetico aumenta al diminuire della temperatura, dall'altro il livello di Fermi si sposta verso il centro banda all'aumentare della temperatura.

Dalla figura 1.1 si vede come varia la larghezza di banda in funzione della temperatura come deducibile dall'equazione 1.15, ed inoltre mostra come varia il livello di Fermi. Per temperature elevate il livello di Fermi coincide con il livello intrinseco ed il semiconduttore estrinseco degenera in uno intrinseco, mentre, a basse temperature e per i semiconduttori fortemente drogati, può entrare nella banda di conduzione, come nel caso dei metalli e le loro proprietà elettroniche degenerano in quelle dei metalli, questi semiconduttori sono detti degeneri.

La figura 1.2 mostra, la densità degli elettroni in funzione dell'inverso della temperatura, per temperature basse si assiste al fenomeno del congelamento della cariche "freezeout" in cui l'energia termica non è sufficiente a ionizzare tutti i donori presenti, e la densità dei portatori di carica è minore della concentrazione dei droganti.

I semiconduttori si dicono compensati se $N_d > 3N_A$, per semiconduttori di tipo n, le densità di carica si possono esprimere come [5]:

Eq1.22)

$$p = \left[\frac{2N_c}{N_d - N_a} \right]^{1/2} N_v e^{\left(\frac{E_d - E_D/2}{kT} \right)}$$

Eq1.23)

$$n = \left[\frac{(N_d - N_a)}{2} N_c \right]^{1/2} e^{\left(\frac{E_d}{2kT} \right)}$$

Aumentando la temperatura si raggiunge la condizione di completa ionizzazione in cui $n_i \geq N_D$ e sono nella regione estrinseca mentre se aumento troppo la temperatura come si vede dall'equazione 17 $n_i > N_D$ e n_i tende a n_i ed il semiconduttore entra nella regione intrinseca [6].

La larghezza della regione intrinseca dipende dalla concentrazione dei droganti mentre la temperatura che porta al freeze out è fortemente dipendente dall'energia di ionizzazione delle sostanze droganti (eq20) Tabella 1.2.

Tabella 1.2)

E_D meV	Si	Ge	GaAs
Donori	50	10	3
Accettori	50	10	20

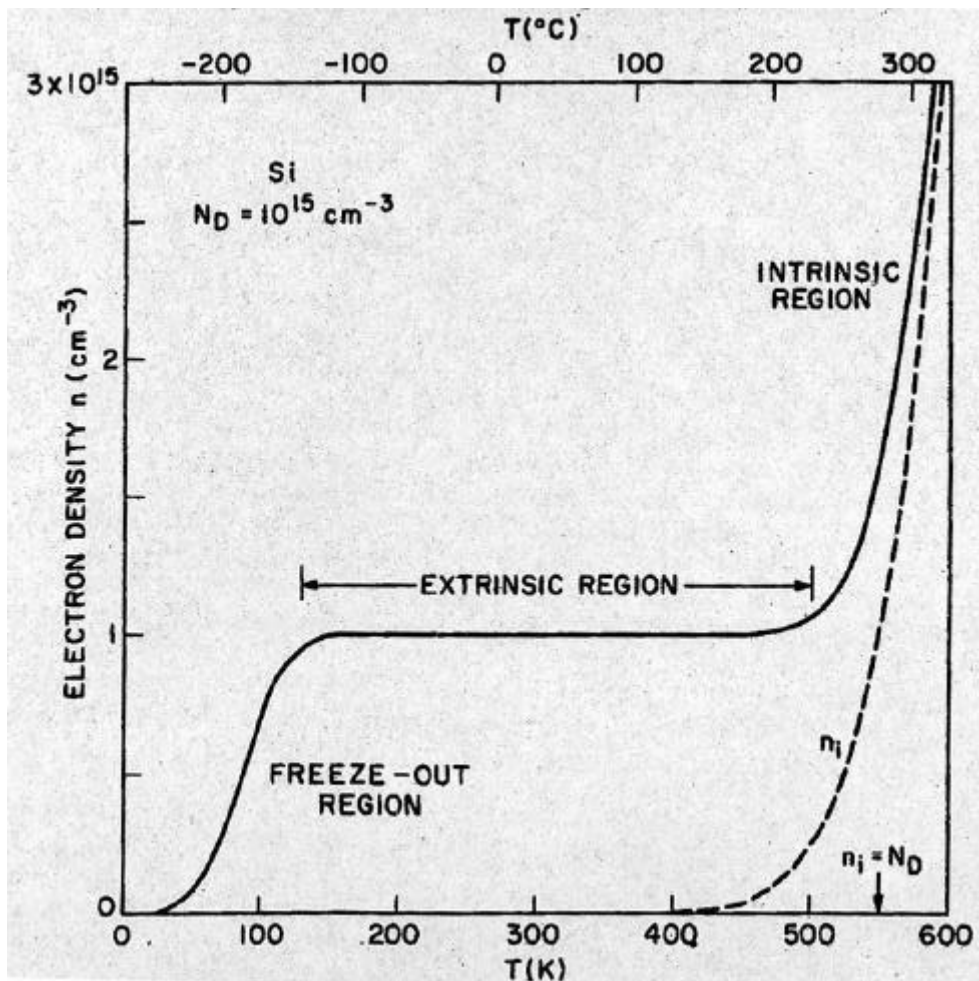


Figura1.2) Concentrazione dei portatori di carica in funzione della temperatura

A temperature molto basse E_D l'energia di ionizzazione, per il silicio è molto grande rispetto a $2kT$ (a 4 Kelvin è 0.72 meV) la densità dei minoritari è pressoché trascurabile ed i portatori liberi di carica tendono al congelamento, questo limita l'utilizzo di dispositivi al silicio a temperature sotto i 70K. Per il germanio, che ha un'energia di ionizzazione inferiore rispetto al silicio, il fenomeno del congelamento dei portatori di carica interviene sotto i 10K, questo permette ai dispositivi al germanio da 300K-4K con prestazioni ottimali tra i 40K e 50K in cui siamo lontani dalla regione di freeze-out[6].

L'energia di ionizzazione dell'arsenuro di gallio permette ai dispositivi in questo materiale di operare alla temperatura dell'elio liquido senza essere affetti da freezeout, questo è dovuto al fatto che la massa efficace degli elettroni è piccola e quindi il raggio di Bohr associato sia grande, ciò permette anche con basse concentrazioni di donori ($\approx 10^{14} \text{ cm}^{-3}$) che la banda energetica delle impurità si sovrapponga con il minimo della banda di conduzione conferendo all'arsenuro di gallio un carattere semimetallico.

1.4) Processi di generazione –ricombinazione

Un semiconduttore cui non è applicato nessun campo elettrico esterno si trova in condizione d'equilibrio termodinamico, questo vuol dire che i processi di generazione, transizione di un elettrone dalla banda di valenza a quella di conduzione (figura 1.3), e di ricombinazione, transizione inversa, sono in equilibrio. In entrambi i processi devono essere rispettate le leggi di conservazione dell'energia e della quantità di moto.

In un semiconduttore come l'Arseniuro di Gallio [7], un elettrone nel minimo della banda di conduzione ed una lacuna nel massimo della banda di valenza hanno lo stesso momento, questo vuol dire che una transizione diretta, attraverso l'intervallo proibito, conserva l'energia ed il momento. La transizione diretta è un'interazione che coinvolge solo due particelle, lacune ed elettroni, semiconduttori con queste caratteristiche sono detti a gap diretto.

Per semiconduttori come Germanio e Silicio la transizione tra banda di valenza e di conduzione è un fenomeno che coinvolge tre particelle; elettroni lacune e fononi.

Poiché il momento di un elettrone nel minimo delle bande di conduzione è diverso da quello di una lacuna nel massimo della banda di valenza, i processi di generazione-ricombinazione devono essere fonone-assistiti (figura 1.4).

Nei componenti a gap diretto domina la ricombinazione Auger [3], in cui l'energia che deriva dalla ricombinazione di un elettrone con una lacuna è trasferita ad un elettrone (lacuna) libero, meno probabile è quella radiativa in cui l'energia è emessa sotto forma di fotone.

Nei componenti a gap indiretto la transizione avviene tramite degli stati localizzati nel gap energetico dovuti ad imperfezioni reticolari e impurezze, che agiscono come stati intermedi attraverso i quali compiere l'attraversamento della banda proibita.

In un processo di generazione un elettrone proveniente dalla banda di conduzione si può portare in uno di questi stati localizzati per poi cadere in uno stato vuoto della banda di valenza ricombinandosi con una lacuna.

All'interno di semiconduttori come Ge e Si questi stati sono sempre presenti in numero sufficiente da dominare la generazione-ricombinazione dei portatori di carica, questo processo è indicato come ricombinazione Shockley-Read-Hall (SRH) [8][9].

A temperature vicino al freezout un altro fenomeno legato ai livelli energetici introdotti nel gap dalle impurezze del reticolo cristallino diviene particolarmente importante, l'intrappolamento, definito come la cattura ed il rilascio di un portatore di carica nella banda da cui proveniva, da parte di un centro donore o accettore.

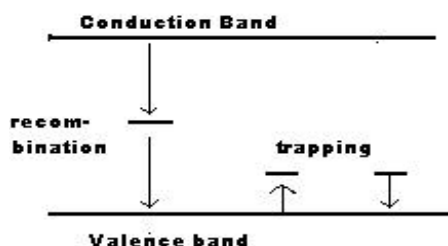


Figura 1.3) *Processi di generazione –ricombinazione e trapping*

Il tempo d'intrappolamento è proporzionale ad $\text{Exp}(-E_t/kT)$ dove E_t è l'energia d'attivazione della trappola, mentre a temperatura ambiente l'agitazione termica fornisce energia sufficiente per liberare le cariche.

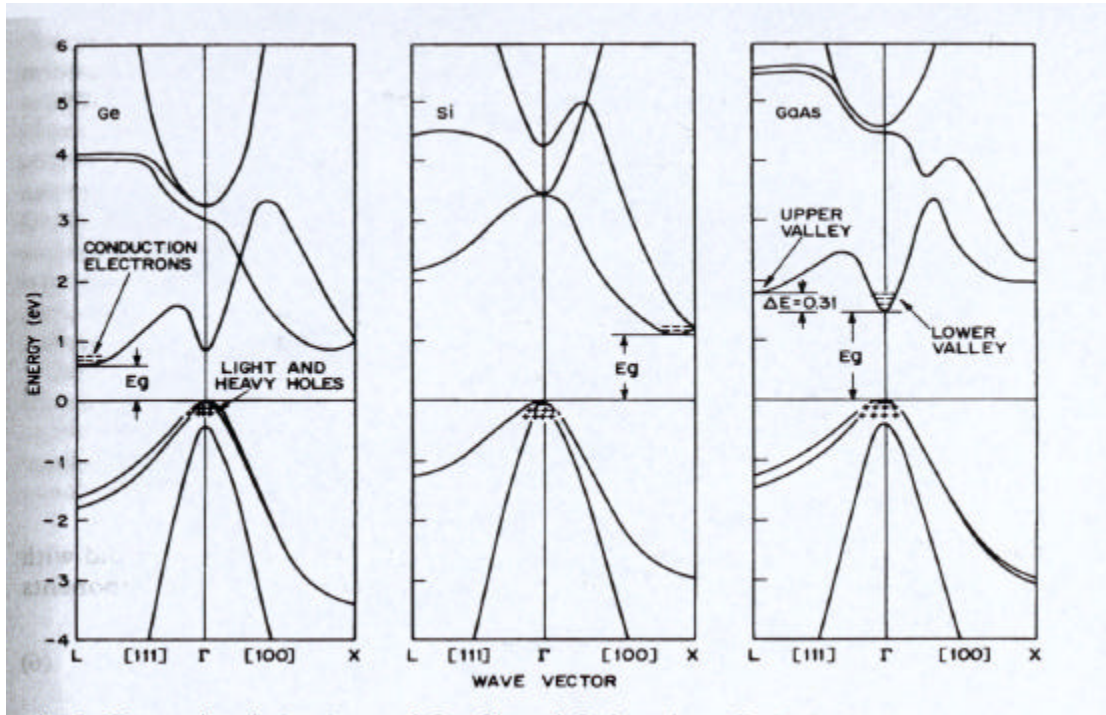


Figura 1.4) [4] Buche di potenziale di Silicio Germanio e Arsenuro di Gallio

1.5) Mobilità elettronica

In condizioni d'equilibrio termico, quando non vi sia applicato un campo elettrico, il moto degli elettroni all'interno di un semiconduttore è casuale e la corrente totale è nulla. In presenza di un campo elettrico i portatori di carica si muovono nella direzione del campo, la velocità risultante è chiamata velocità di trascinamento o di deriva (drift). La forza esercitata su un elettrone in un campo elettrico E è esprimibile come:

Eq1.24)

$$F = \frac{dP}{dt} \quad F = -qE$$

Eq1.25)

$$\Delta P = m_n^* \Delta v \quad \Delta t = t$$

Con l'equazione che lega il momento alla massa efficace si ottiene che[4]:

Eq1.26)

$$-qE = m_n^* \frac{v_d}{t}$$

Eq1.27)

$$v_d = -\frac{qEt}{m_n^*} = \mu_n E \quad \mu_n = \frac{qt}{m_n^*}$$

Come per la mobilità elettronica μ_n può essere definita una mobilità per le lacune, in generale la mobilità dei portatori di carica dipende da due fenomeni di scattering; uno con i fononi del reticolo μ_i , ed uno con le impurezze ionizzate μ .

La mobilità dovuta all'interazione fononica dei portatori di carica con il reticolo cristallino del semiconduttore è esprimibile come:

Eq1.28)

$$\mathbf{m}_i = \frac{\sqrt{8pq}\hbar^4 C_{11}}{3E_{ds} m^{*5/2} (kT)^{3/2}} \approx (m^*)^5 T^{-3/2}$$

Dove C_{11} è la costante elastica longitudinale del semiconduttore, E_{ds} la variazione d'energia della banda di conduzione per unità di dilatazione del reticolo e m^* la massa efficace dei portatori di carica.

L'equazione 1.28 mostra come la mobilità decresca al crescere della temperatura.

Il calcolo della mobilità considerando lo *scattering* con le impurezze ionizzate è invece esprimibile da:

Eq1.29)

$$\mathbf{m}_i = \frac{64\sqrt{pe_s^2}(2kT)^{3/2}}{N_I q^3 \sqrt{m^*}} \left\{ \ln \left[1 + \left(\frac{12pe_s kT}{q^2 N_I^{1/3}} \right)^2 \right] \right\}^{-1} \approx (m^*)^{-1/2} N_I^{-1} T^{3/2}$$

Dove N_I è la densità delle impurezze ionizzate e e_s la permittività dielettrica del semiconduttore in esame, l'equazione 1.29 mostra come la mobilità dovuta allo scattering con le impurezze ionizzate cresca al crescere della temperatura.

La mobilità totale combinazione dei due effetti è [10]:

Eq1.30)

$$\mathbf{m} = \left(\frac{1}{\mathbf{m}_i} + \frac{1}{\mathbf{m}_n} \right)^{-1}$$

La mobilità elettronica cresce al crescere della temperatura fino a quando il fenomeno prevalente è lo *scattering* con le impurezze, raggiunge un punto d'equilibrio quando vi è un bilanciamento dei due effetti, per poi decrescere all'aumentare della temperatura (figura 1.5) quando il fenomeno predominante è lo *scattering* fononico reticolare. La mobilità totale è inversamente proporzionale alla concentrazione delle impurità e alla massa efficace.

Per il Silicio a temperature sopra i 100K prevale lo scattering con il reticolo, mentre a temperature più basse prevale quello con le impurezze ionizzate.

Dalla mobilità di entrambi i portatori di carica si definisce la conducibilità come:

Eq1.31)

$$\mathbf{S} = q(\mathbf{m}_n n + \mathbf{m}_p p)$$

Per materiali come il Silicio ed il Germanio è la concentrazione dei portatori di carica che domina la dipendenza della conducibilità dalla temperatura, mentre per l'Arsenuro di Gallio il termine dominante è rappresentato dal coefficiente di mobilità [5].

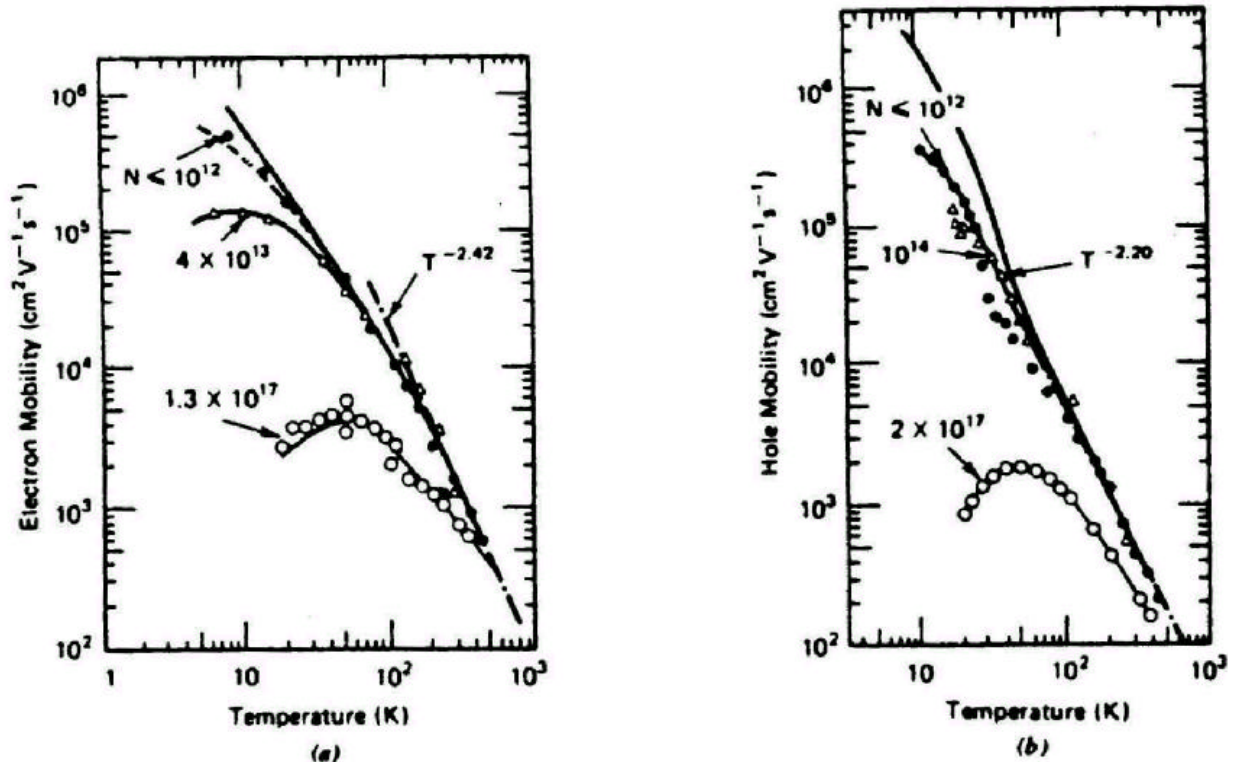


Figura 1.5) Mobilità elettronica in funzione della temperatura per Si, Ge [5]

Bibliografia

- [1] Cohen-Tannoudji “QUANTUM MECHANICS” John Wiley and Sons (1977)
- [2] Shur “PHYSICS OF SEMICONDUCTOR DEVICES” Prentice Hall (1990)
- [3] Richtmyer, F. K.; Kennard, E. H.; Cooper, John N.” INTRODUCTION TO MODERN PHYSICS” Tata McGraw-Hill (1995)
- [4] S.M. Sze “PHYSICS OF SEMICONDUCTOR DEVICES” John Wiley and Sons(1981)
- [5] B.Lengeler “SEMICONDUCTOR DEVICES SUITABLE FOR USE IN CRYOGENIC ENVIRONMENTS” Criogenics (1974) pg 439-447
- [6] S.M. Sze “SEMICONDUCTOR DEVICES : PHYSICS AND TECHNOLOGY” John Wiley and Sons (1985)
- [7] A.K.. Jonscher” SEMICONDUCTORS AT CRYOGENIC TEMPERATURE” Proceedings of IEEE (1964) pg1092-1104
- [8] W.Shockley; W.T.Read “STATISTICS OF THE RECOMBINATIONS OF HOLE AND ELECTROS” Physical Review (1952) pg 835-842
- [9] R.N.Hall “ELECTRON-HOLE RECOMBINATION IN GERMANIUM” Physical Review (1952) pg 387
- [10] E. Conwell, V.F. Weisskopf ”THEORY OF IMPURITY SCATTERING IN SEMICONDUCTORS” Physical Review (1950) pg 388

