DENSITÀ DI PORTATORI DERIVANTI DALLA PRESENZA DI IMPUREZZE IN UN SEMICONDUTTORE

PIERFRANCESCO URBANI

1. Drogaggio tipo n

Si vuole dimostrare che, in un semiconduttore drogato n, la densità di portatori nella banda di conduzione, derivanti dall'eccitazione termica dello stato idrogenoide dell'impurità, è dato da

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1+2e^{\beta(\mu-\epsilon_D)}} \tag{1}$$

dove N_D è la densità di donori, μ il potenziale chimico e ϵ_D l'energia del livello idrogenoide.

Dimostrazione. Partiamo dalla funzione di partizione grancanonica definita da

$$\mathcal{Z} = \sum_N z^N Q_N(V,T) \tag{2}$$

dove $z = e^{\beta\mu}$ e $Q_N(V,T)$ è la funzione di partizione canonica per il sistema composto da N particelle contenute in un volume V ad una temperatura T definita da

$$Q_N(V,T) = \sum_{\{\epsilon\}} g\left[\{\epsilon\}\right] e^{-\beta\epsilon}\,. \tag{3}$$

Specifichiamo in dettaglio la notazione. La scrittura $\sum_{\{\epsilon\}}$ è da intendersi come somma su tutti gli stati energetici del sistema accessibili alle N particelle e $g\left[\{\epsilon\}\right]$ sta ad indicare la degenerazione di ogni singola configurazione ad energia ϵ. Applichiamo questo formalismo alla situazione fisica in considerazione. Calcoliamo prima di tutto la funzione di partizione canonica per il sistema con N particelle. Si ha che

$$Q_N(V,T) = \sum_{\{\epsilon\}} g\left[\{\epsilon\}\right] e^{-\beta\epsilon} = \sum_{\{\epsilon_1\}} g\left[\{\epsilon_1\}\right] e^{-\beta\epsilon_1} + 2e^{-\beta\epsilon_D} \sum_{\{\tilde\epsilon_1\}} g\left[\{\tilde\epsilon_1\}\right] e^{-\beta\tilde\epsilon_1} \tag{4}$$

dove intendiamo con $\{\epsilon_1\}$ l'insieme delle configurazioni in cui tutti gli elettroni sono nella banda di conduzione mentre con $\{\tilde\epsilon_1\}$ l'insieme delle configurazioni in cui solo $N-1$ elettroni sono in banda di conduzione visto che un elettrone è rimasto nel livello idrogenoide [1]. Il fattore 2 nella formula (4) deriva dalle due possibili configurazioni di spin dell'elettrone nello stato idrogenoide. Calcoliamo ora la funzione di granpartizione

$$\mathcal{Z} = \sum_N z^N \left[\sum_{\{\epsilon_1\}} g\left[\{\epsilon_1\}\right] e^{-\beta\epsilon_1} + 2e^{-\beta\epsilon_D} \sum_{\{\tilde\epsilon_1\}} g\left[\{\tilde\epsilon_1\}\right] e^{-\beta\tilde\epsilon_1}\right] = \tag{5}$$

$$= \sum_N z^N \sum_{\{\epsilon_1\}} g\left[\{\epsilon_1\}\right] e^{-\beta\epsilon_1} + 2ze^{-\beta\epsilon_D} \sum_N z^{N-1} \sum_{\{\tilde\epsilon_1\}} g\left[\{\tilde\epsilon_1\}\right] e^{-\beta\tilde\epsilon_1} = \tag{6}$$

$$= \mathcal{Z}_1\left(1+2ze^{-\beta\epsilon_D}\right) \tag{7}$$

dove è stata indicata con $\mathcal{Z}_1$ la funzione di granpartizione relativa al sistema in cui non è presente il livello idrogenoide. Calcoliamo quindi il numero medio di eletroni presenti nel sistema:

$$\bar N = z\frac{\partial}{\partial z}\ln\mathcal{Z} = z\frac{\partial}{\partial z}\ln\mathcal{Z}_1 + \frac{2ze^{-\beta\epsilon_D}}{1+2ze^{-\beta\epsilon_D}} = \bar N_1 + \frac{1}{1+\frac{1}{2}z^{-1}e^{\beta\epsilon_D}} \tag{8}$$

Interpretiamo quest'ultimo termine. Il primo addendo $\bar N_1$ dà il numero medio di elettroni presenti in banda di conduzione (cumulati su ogni valore del vettore k) mentre il secondo addendo

$$\frac{1}{1+\frac{1}{2}z^{-1}e^{\beta\epsilon_D}} \tag{9}$$

dà il numero di eletroni che rimangono nello stato idrogenoide. Ovviamente questo termine è una densità percentuale. Se volgliamo il numero medio di elettroni provenienti dal livello idrogenoide che si trovano in bada di conduzione questo è dato da

$$N_D^+ = N_D\left[1 - \frac{1}{1+\frac{1}{2}z^{-1}e^{\beta\epsilon_D}}\right] = \frac{N_D}{1+2e^{\beta(\mu-\epsilon_D)}} \tag{10}$$

[1] Alla formula (4) dovremmo aggiungere anche un termine in cui due elettroni poggiano sullo stesso sito idrogenoide cioè sono in uno stato che assomiglia ad uno ione negativo. Tuttavia è presumibilmente vero che l'energia di uno stato così fatto risulti molto maggiore di KT per cui il fattore di Boltzmann rende tale termine del tutto trascurabile.

□

2. Drogaggio tipo p

Supponiamo ora di avere un semiconduttore drogato tipo p. Un sistema così fatto può essere descritto come una lacuna che orbita attorno ad un centro attrattore carico negativamente. Guardato da questo punto di vista, il diagramma dei livelli è esattamente equivalente a quello relativo allo schema con i donori. Tuttavia bisogna tenere conto del fatto che

$$\varepsilon_b = -\varepsilon_e \qquad \mu_b = -\mu_e = -\mu \tag{11}$$

dove i pedici e e b stanno ad indicare rispettivamente il fatto che la quantità in esame si riferisce agli elettroni o alle lacune. Lo schema dei livelli per le lacune sarà quindi composto da un livello ad energia $-\varepsilon_a$ e dalla banda di valenza che, trattandosi di lacune, assume la forma con la concavità rivolta verso l'alto. Calcoliamo ora la funzione di partizione canonica per un sistema in cui sono presenti N lacune

$$Q_N(V,T) = \sum_{\{\sigma_N\}} g\left[\{\sigma_N\}\right] e^{-\beta E[\{\sigma_N\}]} + 2e^{\beta\varepsilon_a} \sum_{\{\sigma_{N-1}\}} g\left[\{\sigma_{N-1}\}\right] e^{-\beta E\left[\{\sigma_{N-1}\}\right]} \tag{12}$$

dove si è indicato con $\{\sigma_N\}$ una configurazione del sistema in cui le N lacune sono tutte in banda di valenza e con $\{\sigma_{N-1}\}$ una configurazione in cui una lacuna sta sul livello accettore e $N-1$ sono in banda di valenza. Dalla funzione di partizione è stato escluso il contributo derivante dalla presenza (in linea di principio possibile) di due lacune sul livello accettore. Tale configurazione risulta molto sfavorita dal fatto che essa rappresenta una situazione in cui un elettrone dell'atomo dell'impurezza è stato eccitato in banda di conduzione (visto che la banda di valenza è occupata) e questo stato risulta sfavorito se la gap di energia tra il livello accettore e l'energia minima della banda di conduzione risulta molto più grande dell'energia termica in gioco. Notiamo inoltre che nel secondo addendo è stata indicata esplicitamente la molteplicità del livello in cui è presente una lacuna. Fisicamente il fattore 2 sta ad indicare che l'elettrone sull'impurezza può trovarsi in due stati di spin differenti. Notiamo infine il segno anomalo all'esponente del secondo addendo dovuto al fatto che per le lacune valono le relazioni (11). Calcoliamo ora la funzione di partizione grancanonica

$$\mathcal{Z} = \sum_N z^N \left[\sum_{\{\sigma_N\}} g\left[\{\sigma_N\}\right] e^{-\beta E[\{\sigma_N\}]} + 2e^{\beta\varepsilon_a} \sum_{\{\sigma_{N-1}\}} g\left[\{\sigma_{N-1}\}\right] e^{-\beta E\left[\{\sigma_{N-1}\}\right]} \right] = \tag{13}$$

$$= \sum_N \left(z^N \sum_{\{\sigma_N\}} g\left[\{\sigma_N\}\right] e^{-\beta E[\{\sigma_N\}]} \right) + \sum_N \left(2z^N e^{\beta\varepsilon_a} \sum_{\{\sigma_{N-1}\}} g\left[\{\sigma_{N-1}\}\right] e^{-\beta E\left[\{\sigma_{N-1}\}\right]} \right) = \tag{14}$$

$$= \sum_N \left(z^N \sum_{\{\sigma_N\}} g\left[\{\sigma_N\}\right] e^{-\beta E[\{\sigma_N\}]} \right) + 2ze^{\beta\varepsilon_a} \sum_{N-1} \left(z^{N-1} \sum_{\{\sigma_{N-1}\}} g\left[\{\sigma_{N-1}\}\right] e^{-\beta E\left[\{\sigma_{N-1}\}\right]} \right) = \tag{15}$$

$$= \mathcal{Z}_V \left(1 + 2ze^{\beta\varepsilon_a} \right) \tag{16}$$

dove è stata indicata con

$$\mathcal{Z}_V = \sum_N \left(z^N \sum_{\{\sigma_N\}} g\left[\{\sigma_N\}\right] e^{-\beta E[\{\sigma_N\}]} \right) \tag{17}$$

la funzione di granpartizione per un sistema in cui è presente la sola banda di conduzione senza il livello accettore. Il numero medio di lacune sarà dato quindi da:

$$l = z\frac{\partial}{\partial z} \ln \mathcal{Z} = z\frac{\partial}{\partial z} \ln \mathcal{Z}_1 + \frac{2ze^{\beta\varepsilon_a}}{1+2ze^{\beta\varepsilon_a}} \tag{18}$$

il secondo addendo nell'ultima formula dà il numero di lacune presenti sul livello accettore. Ne consegue che il numero di lacune che risulta termicamente eccitato in banda di valenza è

$$N_A^- = N_A \left[1 - \frac{2ze^{\beta\varepsilon_a}}{1+2ze^{\beta\varepsilon_a}} \right] = \frac{N_A}{1+2e^{\beta(\varepsilon_a-\mu)}} \tag{19}$$

che è una formula analoga a quella per gli stati donori.