

7 - Semiconductores

Clasificación de materiales a **nivel macroscópico** atendiendo a sus propiedades conductoras.

- **Superconductores**
- **Conductores**
- **Semiconductores**
- **Aislantes**

Materiales con cargas libres en su estructura atómica de forma que estas pueden moverse ante la aplicación de campos eléctricos externos.

Materiales que dependiendo de otras condiciones diferentes de las eléctricas (energías térmica o radiación) pueden comportarse como conductores o aislantes.

Materiales que no tienen cargas libres y ante campos eléctricos sólo se producen pequeños desplazamientos de las cargas dentro de los átomos que constituyen el material.

- Las propiedades conductoras de los materiales se explican mediante la teoría de bandas (Mecánica Cuántica).
- Mecánica Cuántica: el estado de los electrones en un átomo viene determinado por tres números cuánticos n , l , m , donde $0 \leq l \leq n-1$ y $-l \leq m \leq l$.

La energía de cada estado viene determinada por el valor de número cuántico principal n .

Esto hace que aparezcan diferentes estados con la misma energía (estados degenerados).

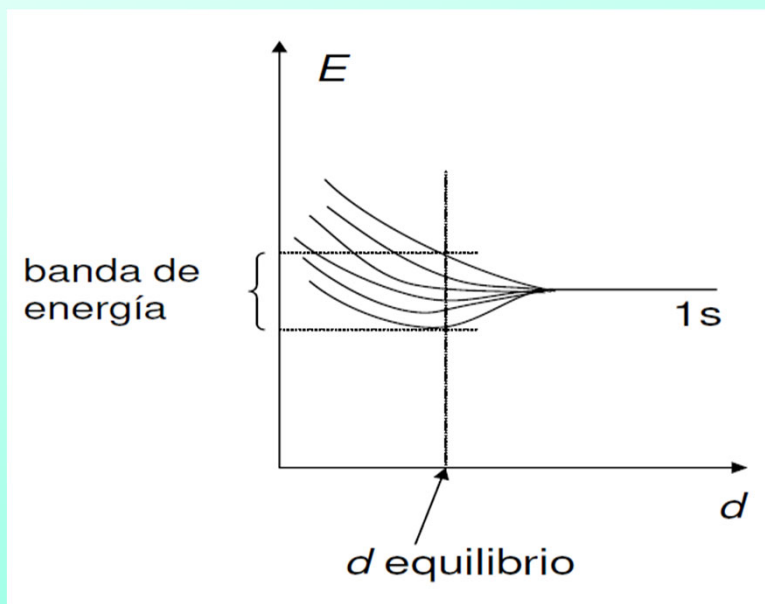
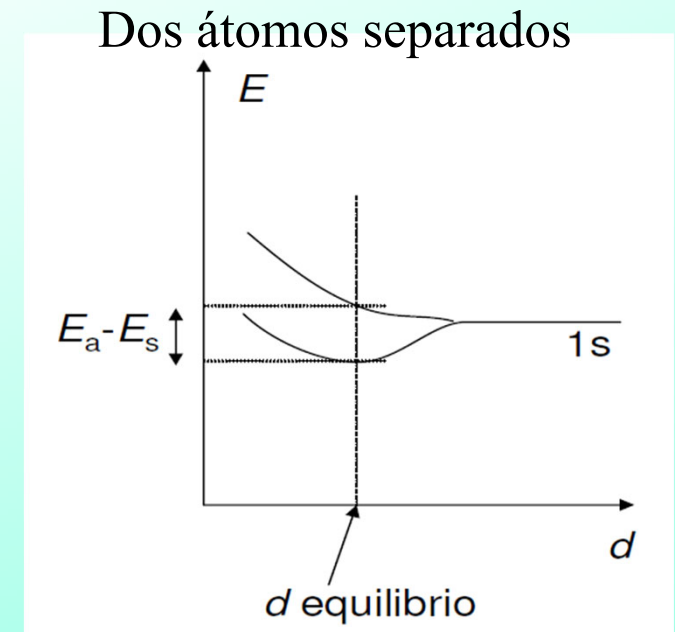
n	l	Tipo de orbital	m	g_n	E_n
1	0	s	0	1	$-e^2/(2a_0)$
2	0	s	0	4	$-e^2/(8a_0)$
2	1	p	-1,0,1		
3	0	s	0	9	$-e^2/(18a_0)$
3	1	p	-1,0,1		
3	2	d	-2,-1,0,1,2		
4	0	s	0	16	$-e^2/(32a_0)$
4	1	p	-1,0,1		
4	2	d	-2,-1,0,1,2		
4	3	f	-3,-2,-1,0,1,2,3		
5	0	s	0	25	$-e^2/(50a_0)$
5	1	p	-1,0,1		
5	2	d	-2,-1,0,1,2		
5	3	f	-3,-2,-1,0,1,2,3		
5	4	g	-4,-3,-2,-1,0,1,2,3,4		

En la tabla se muestran los primeros estados cuánticos y sus energías para el átomo de hidrógeno que predice el modelo de Born.

Esto es así cuando tenemos un gas y los átomos no interaccionan entre si.

- En un sólido cristalino los átomos están muy próximos entre sí, los niveles de energía de los átomos individuales se ven **alterados**.

Cuando la distancia es del orden de $1 \text{ \AA}$, se produce un desdoblamiento de los niveles de energía, relacionado con las dos funciones de onda, simétrica y antisimétrica, soluciones de la ecuación de Schrödinger.



- Para una red de N átomos, los estados individuales dan lugar a N estados de energías diferentes.

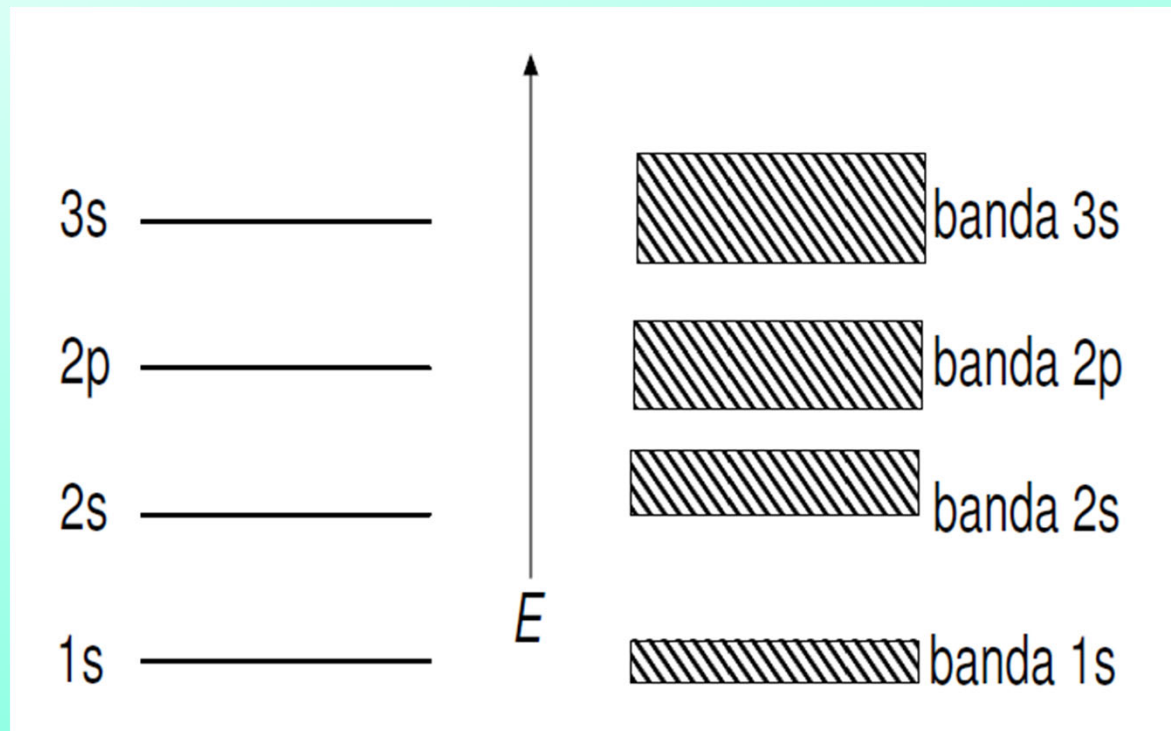
La diferencia de energía entre niveles consecutivos disminuye con N . Cuando N es del orden del número de Avogadro, la diferencia de energía es insignificante entre niveles adyacentes ($\sim 10^{-23} \text{ eV}$), se dice que tenemos una banda de energía cuasicontinua.

($1 \text{ eV} = 10^{-19} \text{ Julios}$)

- En un sólido multiatómico cada nivel energético se amplia a una **Banda Energética**.

Los niveles cuánticos mono-atómicos 1s, 2s, 2p, 3s,... dan lugar a bandas en el sólido: banda 1s, banda 2s, banda 2p, banda 3s,...

La anchura de la banda es mayor donde haya más solapamiento, esto es, para los niveles correspondientes a electrones más externos.



- Teoría de Bandas (sólidos): Aislante – Conductor – Semiconductor.

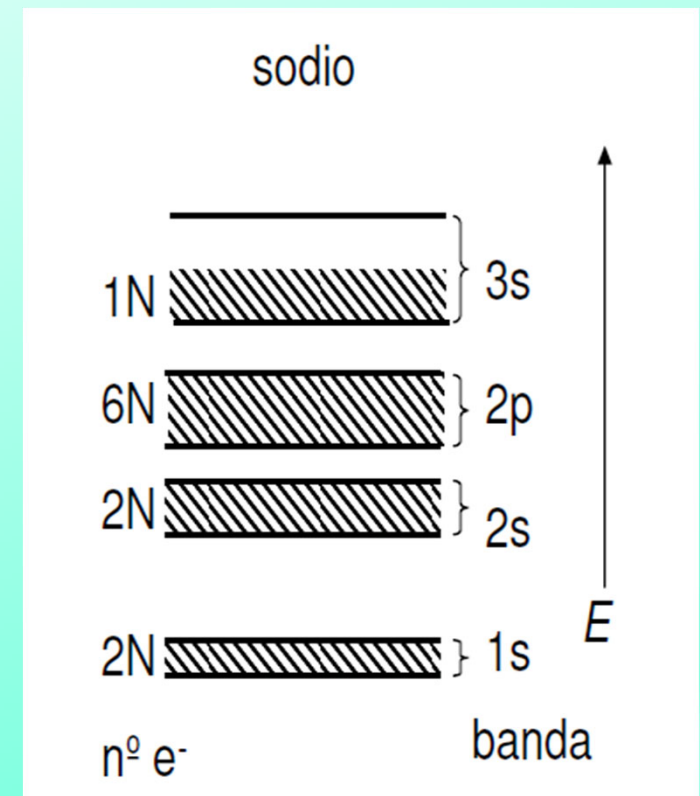
Para que un electrón contribuya a la corriente eléctrica, ha de poder moverse en la presencia de un campo eléctrico. Para que esto suceda, debe poder moverse a un nivel de energía superior desocupado, o sea, la banda no puede estar llena.

Por ejemplo: **Sodio** ^{11}Na ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$)

Para T cercanas a 0 K los electrones ocupan los niveles más bajos de energía y al tener la banda más energética, 3s, a medio llenar el sodio es un conductor. Lo mismo le sucede a los elementos de su misma columna en la tabla periódica, como el Li, K, Rb, Cs.

- La banda de energías más alta conteniendo electrones es la **banda de valencia** (BV), la siguiente es la **banda de conducción** (BC).

Si la banda de valencia está parcialmente llena, entonces es también la banda de conducción.

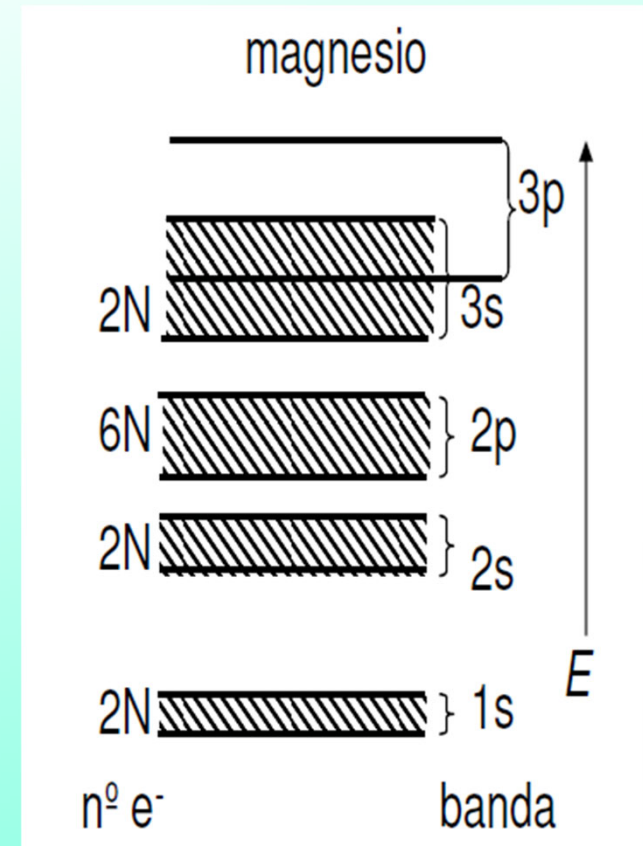


Magnesio ^{12}Mg ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$)

debería ser un aislante, al tener la banda 3s completamente llena.

Sin embargo, un nuevo fenómeno, el solapamiento de la banda 3s con la 3p, hace que sea un conductor. Esto mismo sucede para el Berilio, Calcio, Bario.

Para estos elementos la BV y la BC están solapadas.



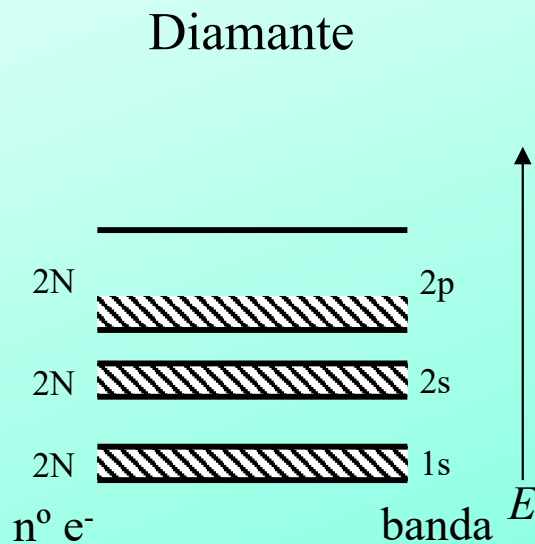
- Este **solapamiento**, también llamado **hibridación**, también se produce por la interacción entre átomos vecinos y depende de la distancia entre átomos de la red cristalina.

Consideremos ahora el ^{12}C en la estructura de diamante.

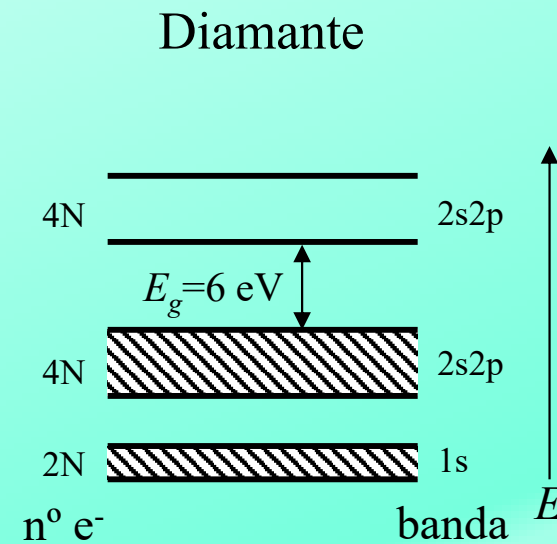
Esquema esperado: la banda 2p estaría parcialmente llena y podría conducir. Habría $2N$ electrones para $6N$ niveles energéticos posibles.

Sin embargo, se produce el solapamiento de la banda 2s con la 2p dando lugar a $8N$ niveles separados en dos bandas de $4N$ niveles cada una.

Entre estas bandas se establece un gap de energía E_g de 6 eV. De este modo aparece una banda de valencia completamente llena separada de una banda de conducción. El diamante es, por tanto, un aislante.



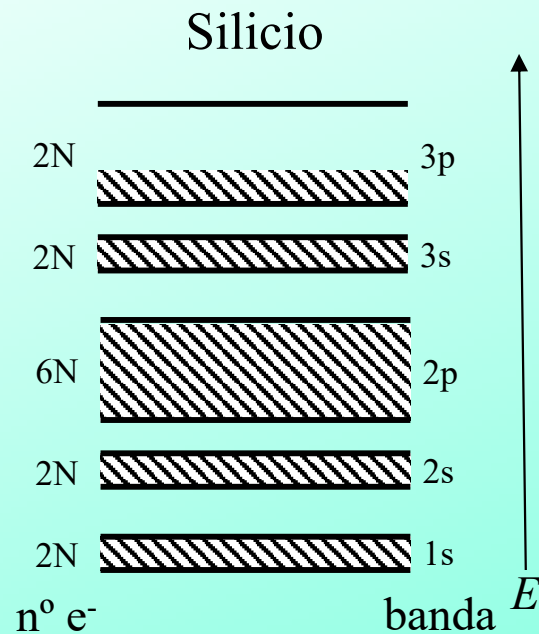
Ocupación esperada



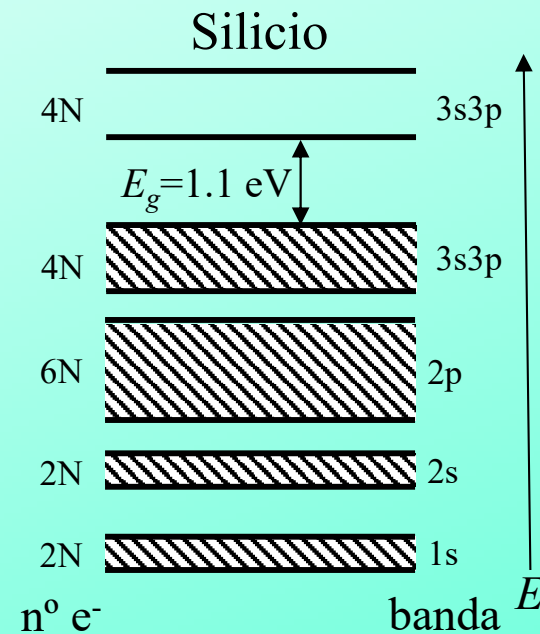
Ocupación real

Este mismo fenómeno tiene lugar para los elementos del grupo IV: **Si** y **Ge**.

En el caso del Si la hibridación se da entre las bandas 3s y 3p y el valor del gap de energía es $E_g(\text{Si}) = 1,1 \text{ eV}$, por tanto, aislante.



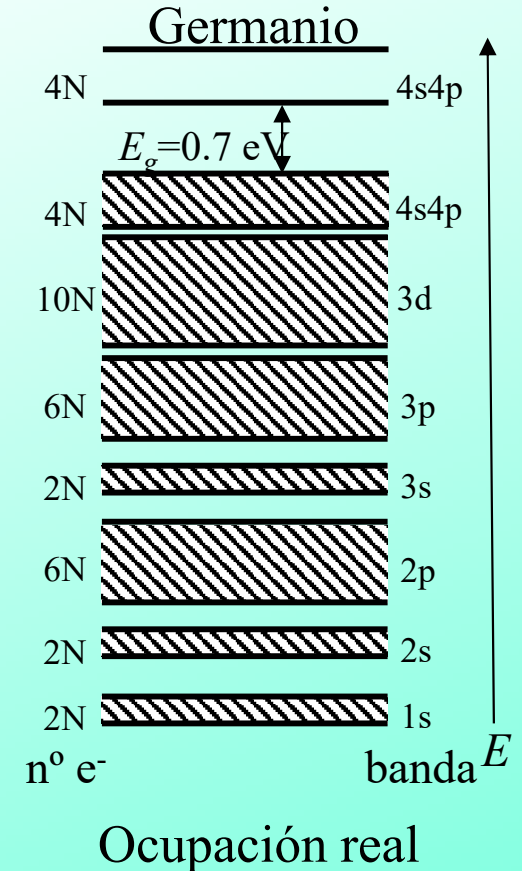
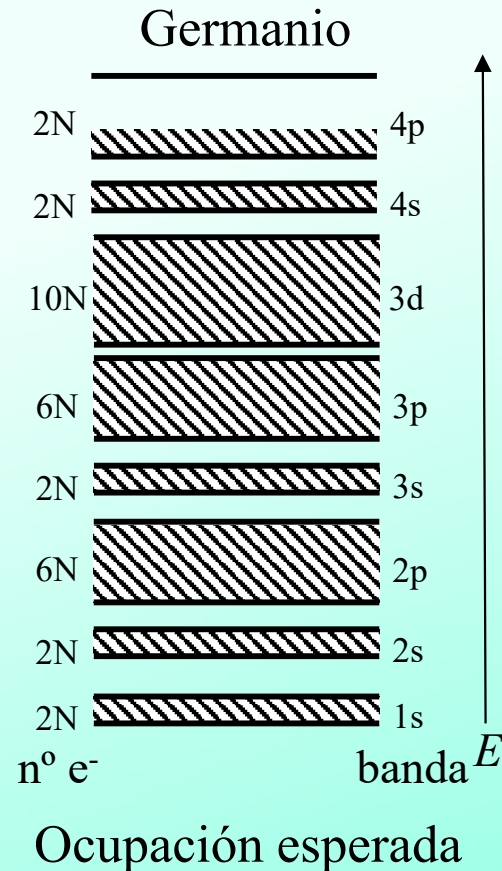
Ocupación esperada



Ocupación real

La hibridación en el Ge se da entre las bandas 4s y 4p y el gap de energía tiene un valor $E_g(\text{Ge}) = 0,7 \text{ eV}$. Aislante.

A bajas temperaturas los tres sólidos se comportan de forma idéntica, son aislantes.

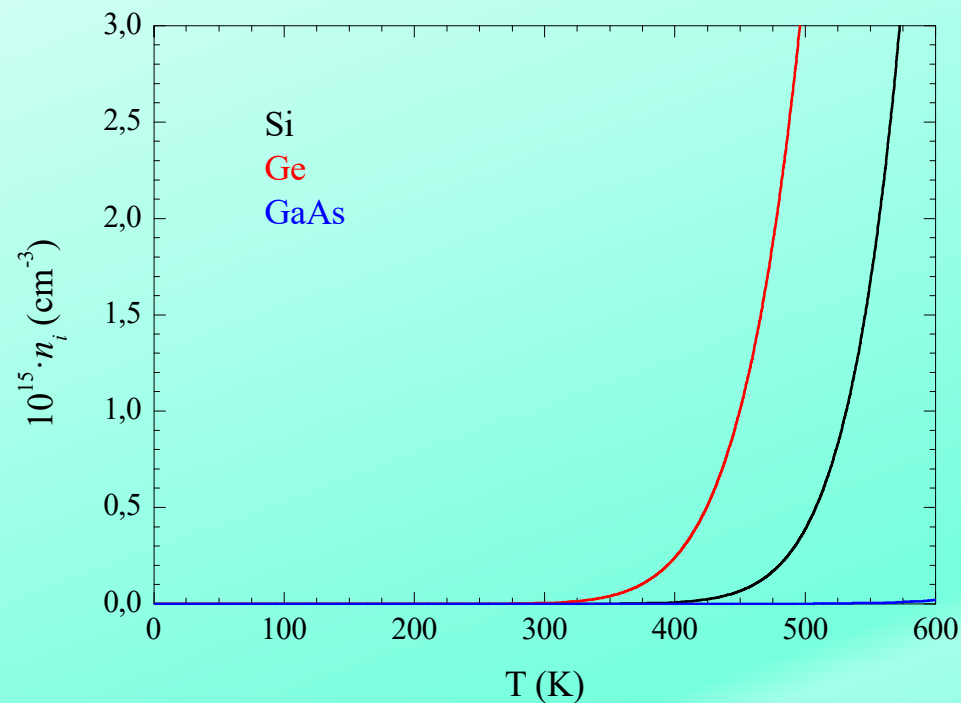
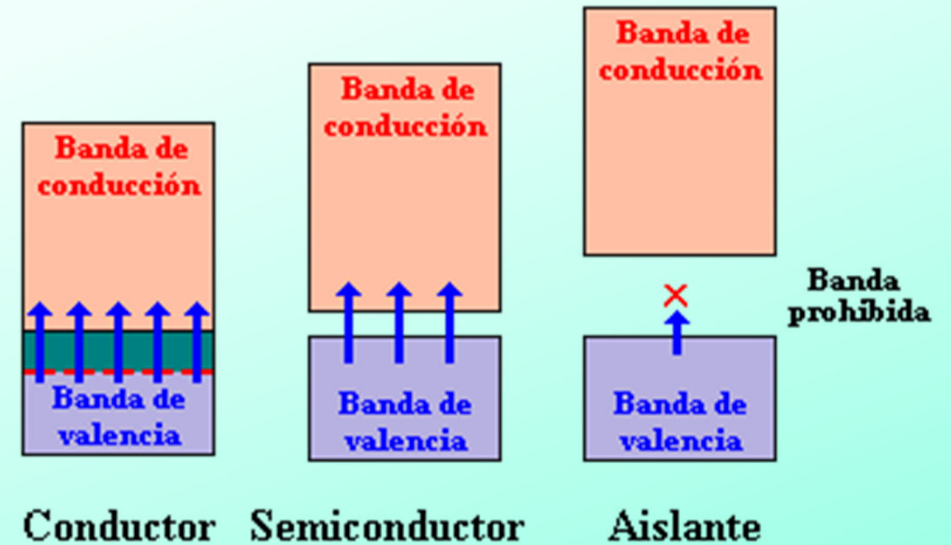


A temperatura ambiente, los electrones ganan energía térmica y pueden saltar de la banda de valencia a la de conducción. Cuanto mayor sea T o menor sea E_g mayor será el número de electrones que pueden pasar a la banda de conducción.

Este es el motivo por el que el Si y el Ge conducen a temperatura ambiente y el diamante sigue siendo aislante.

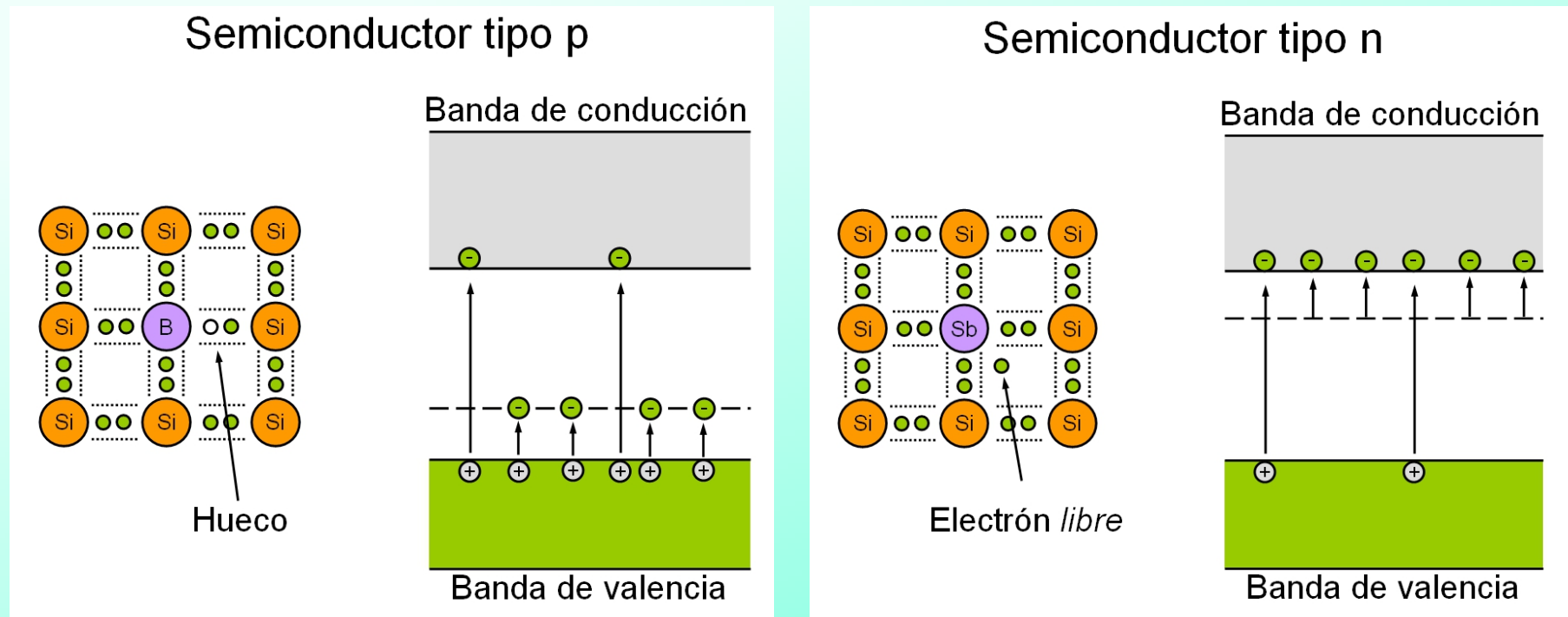
▪ **Semiconductor intrínseco:**

la agitación térmica, radiación EM o campo E pueden hacer saltar electrones a la banda de conducción.



▪ **Semiconductor extrínseco:**

se añaden impurezas (átomos de otro tipo) a la red cristalina para añadir niveles energéticos dentro de la Banda Prohibida para reducir el gap.



Esta técnica se denomina Dopado:

- **tipo p** con átomos con un electrón menos.
- **tipo n** con átomos con un electrón más.

