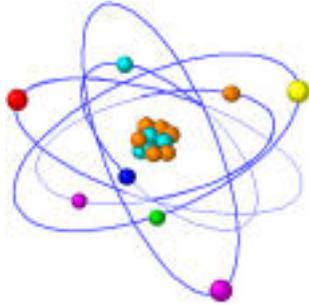


Tema 1: Electrones, energía, átomos y sólidos

K. Kano: cap. 1 y cap. 2

- El modelo de Bohr
- Mecánica cuántica. Dualidad onda corpúsculo. Ecuación de Schrödinger en un átomo hidrogenoide. Números cuánticos
- Formación de la estructura de bandas de energía en un sólido
- Modelo de enlace covalente
- Metales, aislantes y semiconductores
- Materiales usados en electrónica. Cristales. Crecimiento de cristales

Átomos



El átomo

Hay dos razones para empezar con el átomo:

- Es el principal constituyente de la materia
- Su descripción cualitativa es similar a la de un sólido

Modelo cuantizado de Bohr:

Introduce en la descripción atómica el concepto de **energía cuantizada**

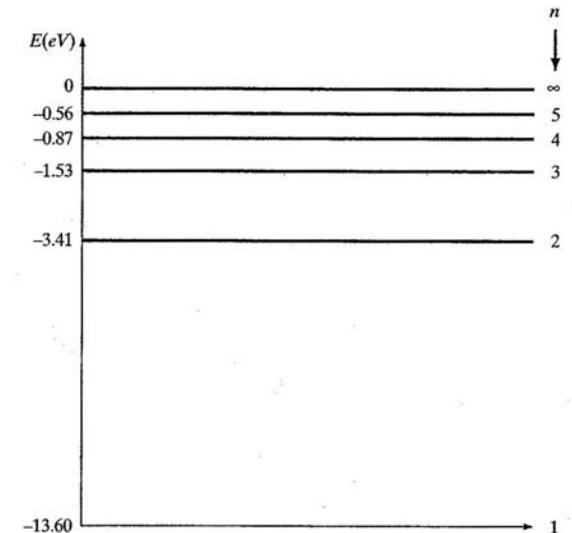
Postulados:

- Los electrones giran alrededor del núcleo en ciertas órbitas circulares definidas, asociadas a niveles de energía. En estas órbitas, estacionarias, los electrones no intercambian energía
- La transferencia de un electrón de una órbita a otra, con distinta energía, requiere absorción o emisión de energía

$$E_2 - E_1 = h\nu$$

- Las únicas órbitas posibles son aquellas en el momento angular electrónico está cuantizado

$$mvr_n = nh/2\pi \Rightarrow E_n = -\frac{q^4 m}{8n^2 h^2 \epsilon_0^2}$$



Un poco de mecánica cuántica

Dualidad onda corpúsculo

Se realizaron experimentos que probaban comportamientos ondulatorios en los electrones.

Las relaciones entre las propiedades mecánicas (partícula) y ondulatorias son:

$$E = h\nu \quad ; \quad p = mv = h/\lambda$$

Ecuación de Schrödinger

Recoge todos los conceptos cuánticos para la descripción del átomo de hidrógeno

$$\nabla^2\Psi + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E - V)\Psi = 0$$

Postulados:

- Cada estado está determinado por su Ψ y por sus números cuánticos: n, l, m, s
- La probabilidad de encontrar un electrón en una posición está determinada por Ψ
- **Principio de exclusión (Pauli):** Dos electrones no pueden compartir un mismo estado.
- **Principio de incertidumbre (Heisenberg):** es imposible conocer la situación exacta de un electrón

Números cuánticos

Resolución de la ecuación de Schrödinger

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = E \Psi$$

Solución:

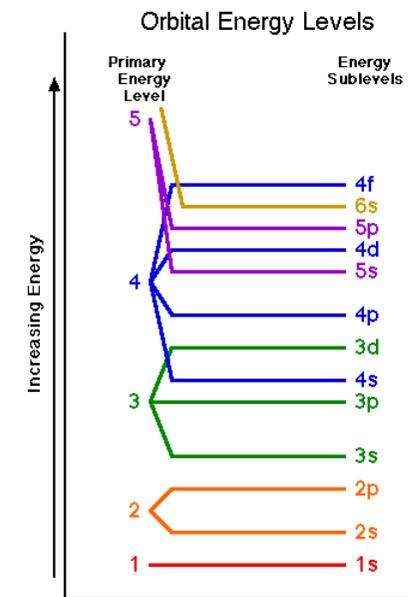
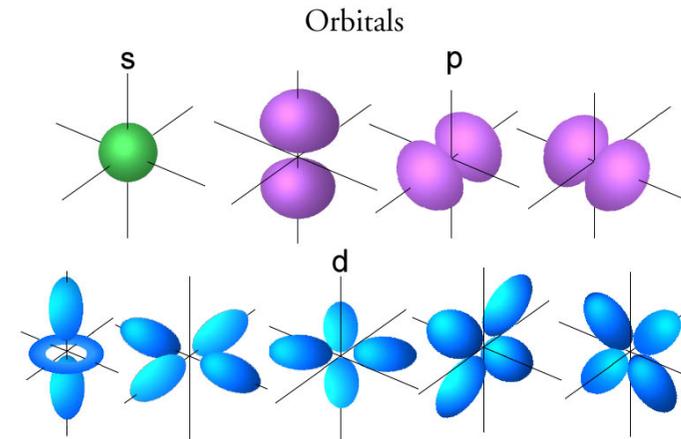
función de onda:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)H(\theta)I(\phi)$$

números cuánticos (\rightarrow configuración electrónica):

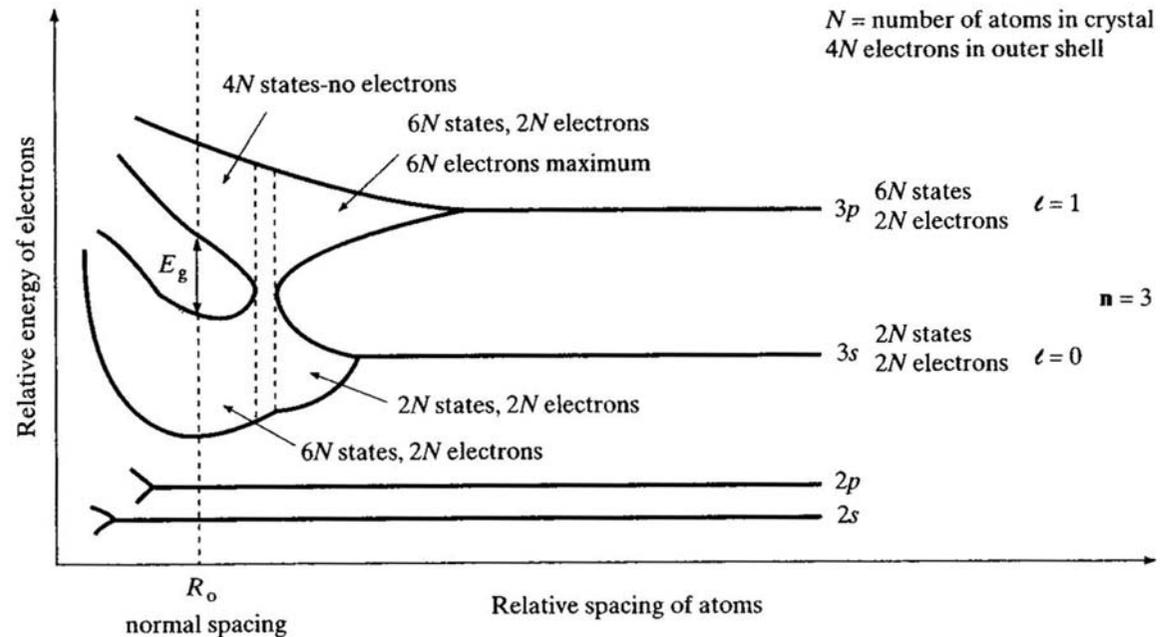
Capa	$n > 0$	$0 \leq l \leq n-1$	$-l \leq m \leq l$	$s = \pm 1/2$	niveles	N máx.
	n	l	m	s		
K	1	0	0	$\pm 1/2$	1s	2
					2s	2
L	2	1	0	$\pm 1/2$	2p	6
			-1	$\pm 1/2$		
			+1	$\pm 1/2$		
M					3s	2
					3p	6
					3d	10

Para el caso del Si: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$



Formación de las bandas de energía en los sólidos

Las interacciones entre electrones y el principio de exclusión de Pauli provocan un **desdoblamiento** de los niveles energéticos:
 N átomos \rightarrow N niveles



Los niveles $3s$ ($2N$ estados/ $2N$ e-) y $3p$ ($6N$ estados/ $2N$ e-) se transforman en dos bandas continuas con $4N$ estados cada una.

La banda superior se llama **banda de conducción**

La banda inferior se llama **banda de valencia**

Se forma una **banda prohibida** o **gap** entre las dos anteriores

La anchura del *gap* depende del parámetro de red, de la temperatura, ...

A la temperatura de cero absoluto ($0K$), los e- ocupan los niveles inferiores

Modelo de enlace covalente

Es una representación bidimensional de la estructura sólida. Complementa el diagrama de bandas de energía

Las líneas representan electrones y los círculos representan los núcleos (y los electrones interiores)

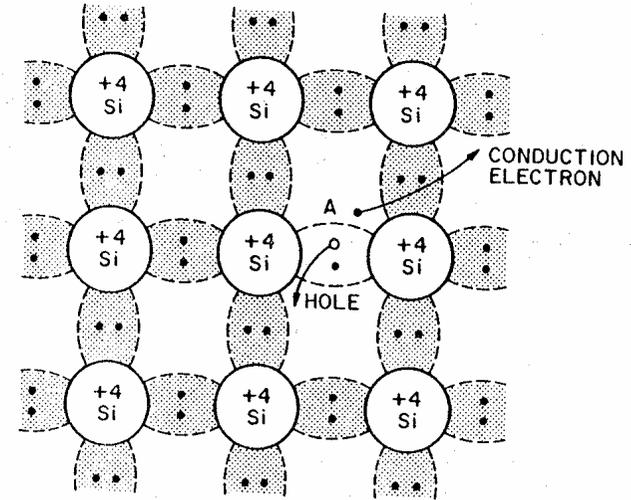
En el caso del Si (IV), es un **enlace covalente**, formado por **compartición** de los 4 electrones exteriores, el que da cohesión a la estructura

A 0K, los electrones de valencia permanecen unidos a sus núcleos, y ocupan los niveles más bajos en el diagrama de bandas de energía

A 300K (temperatura ambiente), muchos de los electrones pasan de la parte superior de la banda de valencia a la parte inferior de la banda de conducción, y se transforman en **electrones quasi libres**. Se crea así un **par electrón-hueco**

Estos electrones *quasi* libres se comportan como electrones libres con **masa efectiva m^*** .

A temperatura ambiente, un semiconductor tiene unos 10^{10}cm^{-3} electrones libres. Un metal tiene unos 10^{20}cm^{-3} .



Modelo de enlace covalente del silicio

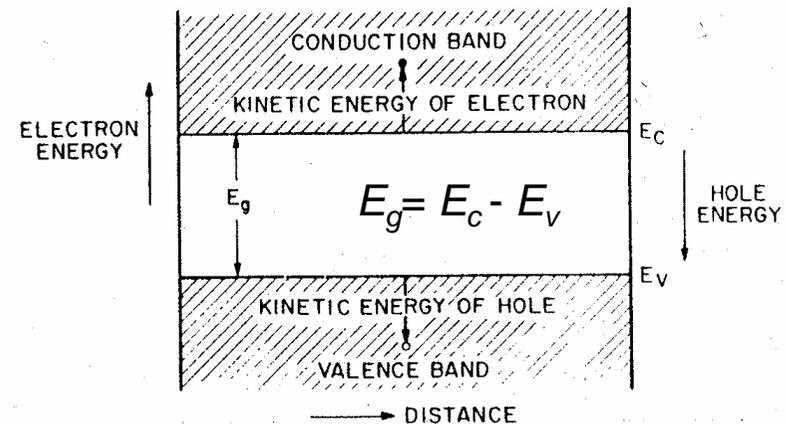
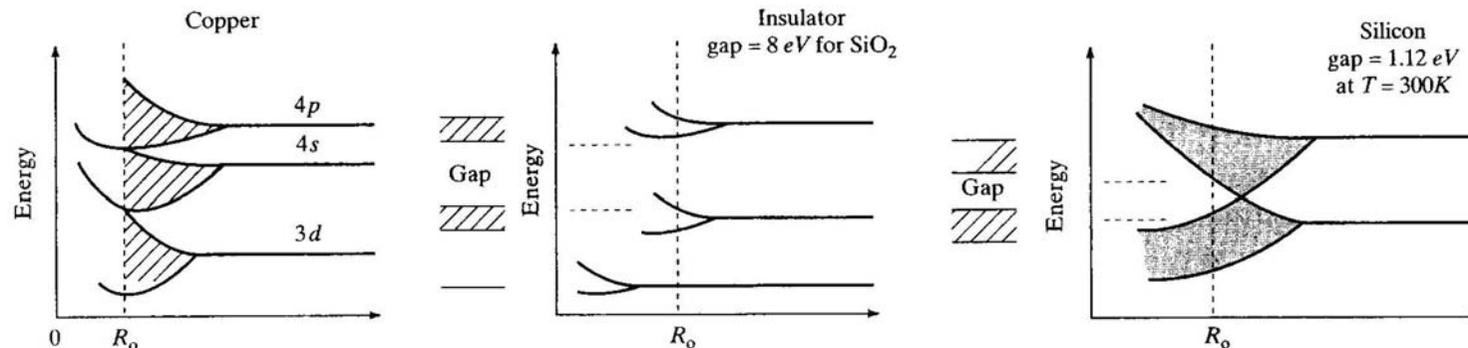
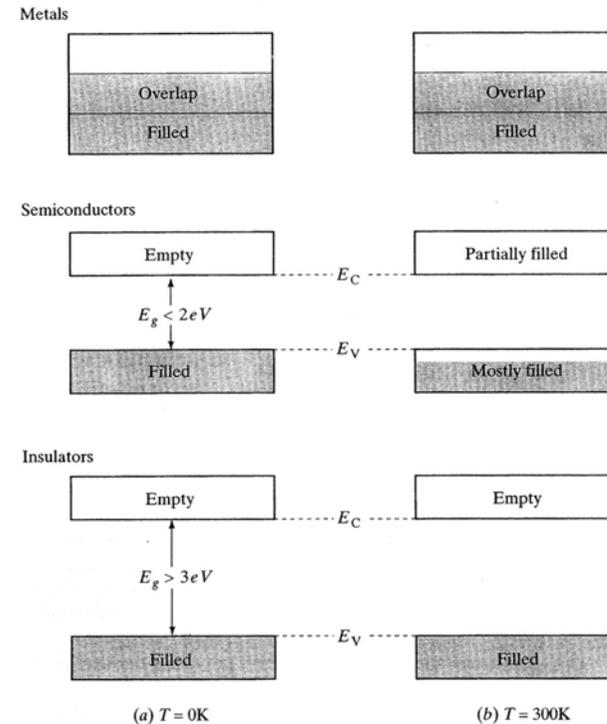
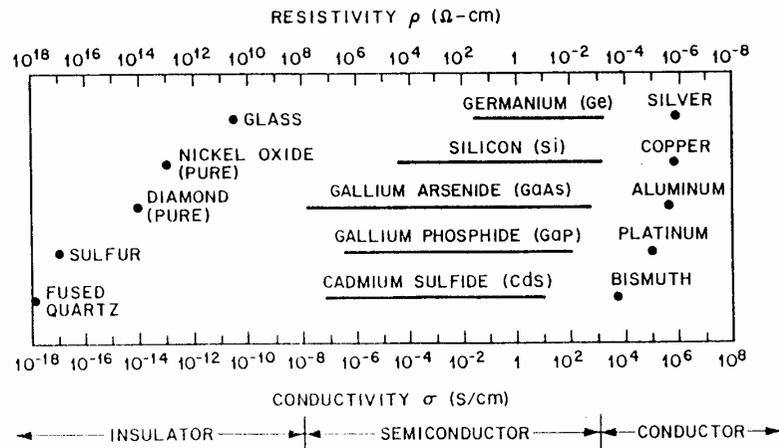


Diagrama de energía simplificado del silicio

Metales, aislantes y semiconductores

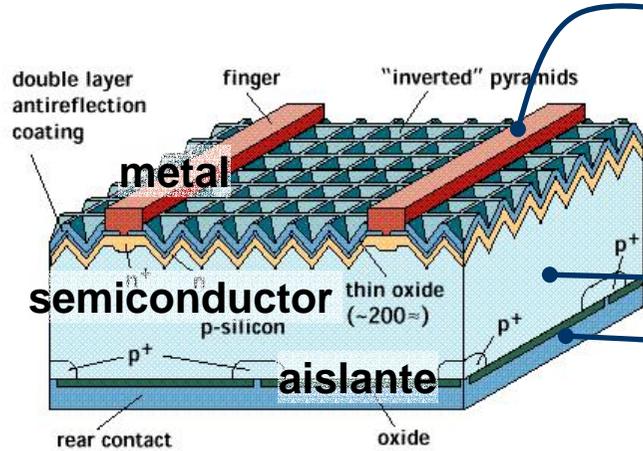
La anchura de la banda prohibida determina las características de conducción de los materiales

aislantes: $E_g > 4\text{eV} ; \rho > 10^8 \Omega \cdot \text{cm}$
 semiconductores: $4\text{eV} > E_g > 0 \text{ eV} ;$
 $10^8 \Omega \cdot \text{cm} > \rho > 10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$
 metales: $0\text{eV} > E_g ; 10^{-3} \Omega \cdot \text{cm} > \rho$



Sólidos cristalinos

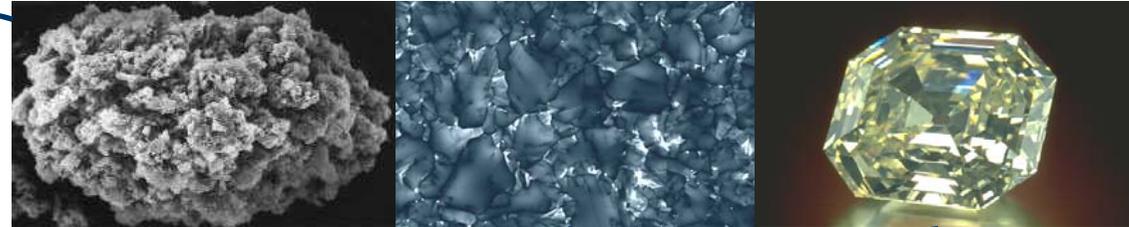
Ejemplo: célula solar



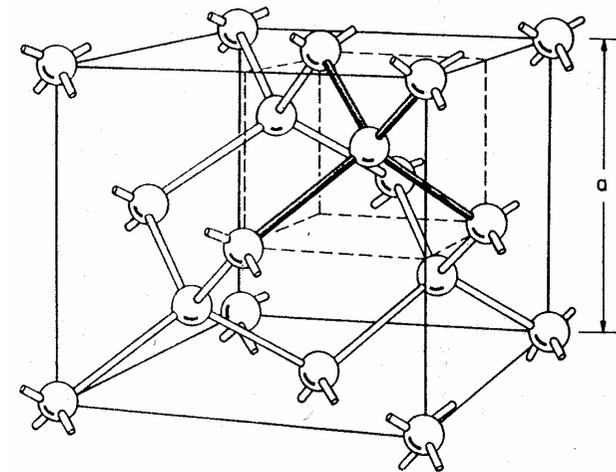
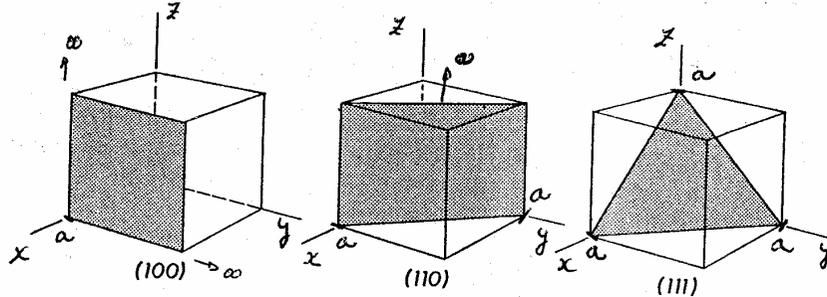
amorfo

policristalino

cristalino

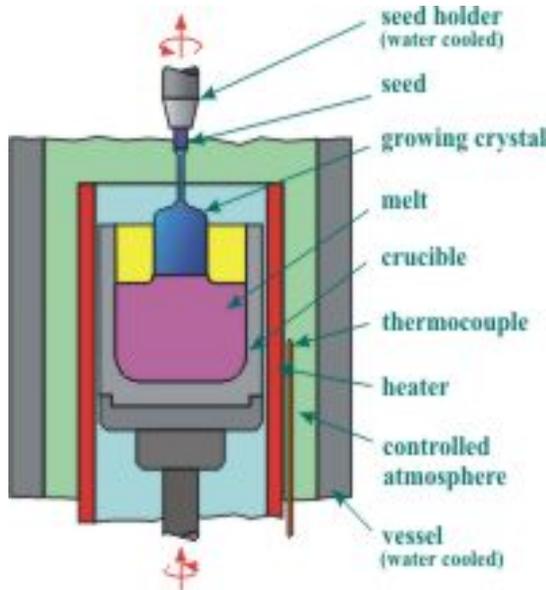


Muchos semiconductores son cristalinos por naturaleza
 La unidad básica de un cristal se llama **celda unidad**, que se repite espacialmente
 Los átomos de silicio y de germanio se disponen formando una **red de diamante**
 Los índices de Miller describen la orientación de un cristal



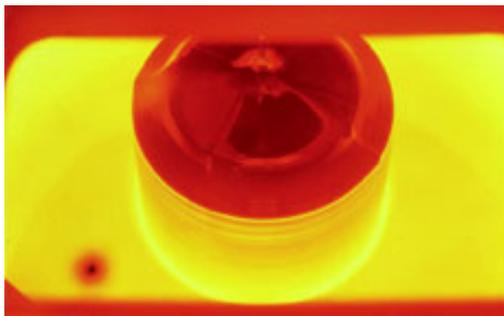
Celda unidad de la estructura de diamante del silicio

Crecimiento de cristales



Sistema de crecimiento de Czochralski

crecimiento cristalino de un lingote de silicio



Es el proceso de obtención de material cristalino a partir de su fase amorfa o policristalina

El material de partida se somete a tratamientos previos de purificación

Se lleva a cabo en **hornos** especiales
El crecimiento puede ser **en volumen** o **epitaxial**.

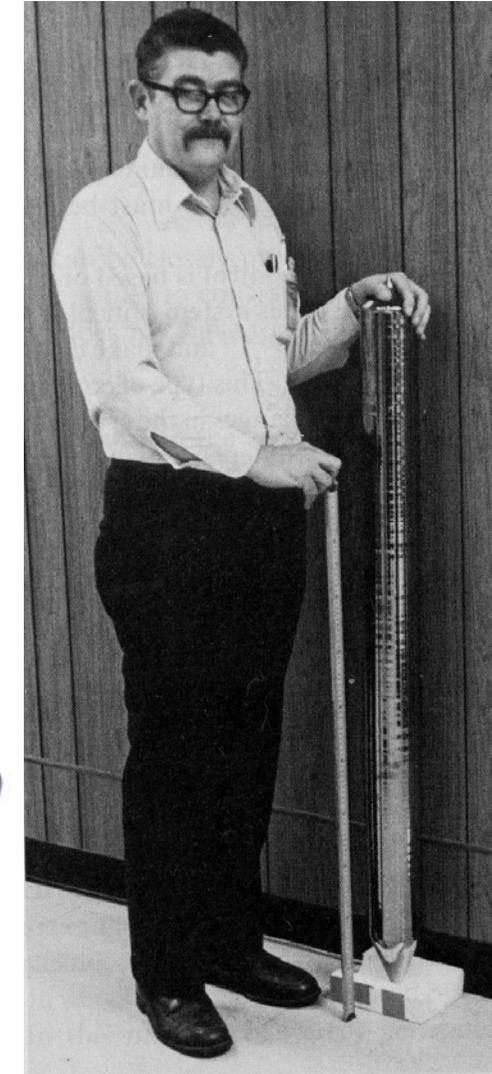
Existen varias técnicas. Para el silicio se suele usar el método **Czochralski**. Se trata de un método de crecimiento a partir del fundido

Los **lingotes**, con una orientación cristalina determinada, se cortan en obleas (**wafers**)

wafers de silicio



lingotes de silicio



Ejemplos numéricos

¿Cuántos átomos de silicio hay en un Pentium IV?

El volumen de un Pentium IV es aproximadamente

$$14 \times 14 \times 0.5 \text{ mm}^3 \approx 100 \text{ mm}^3 = 0.1 \text{ cm}^3$$

Como: $\rho(\text{Si}) = 2.33 \text{ g/cm}^3 \Rightarrow m = \rho \times V = 0.233 \text{ g}$

$M_r(\text{Si}) = 28$, con lo que:

$$N = N_A \times m / M_r \approx 5 \times 10^{21} \text{ átomos}$$

Recordemos que un Pentium IV tiene unos 40 millones de transistores



¿De qué color es un cristal con un *gap* de 2.6eV? ¿y de 1.12eV?

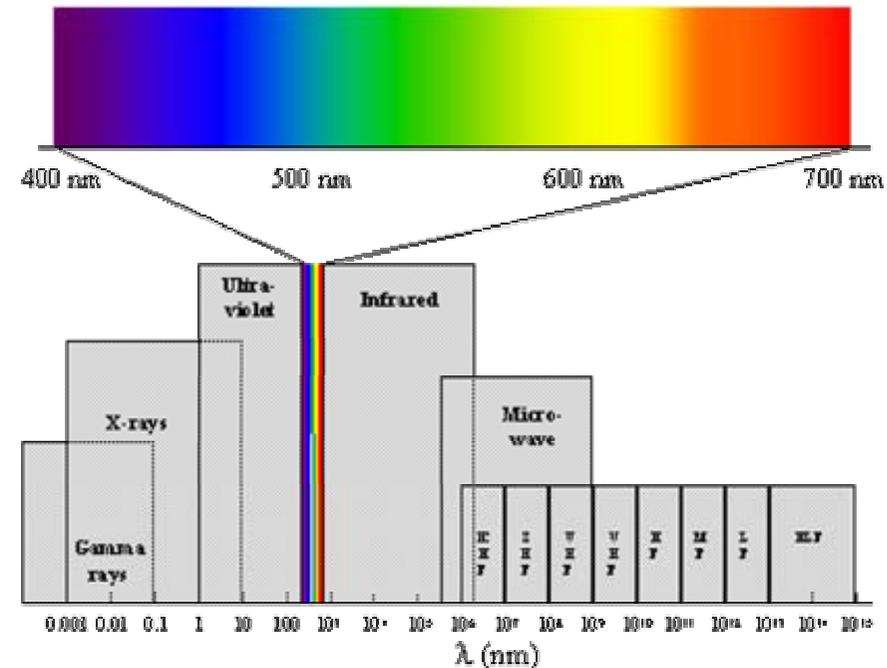
$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{E} = \frac{(6.6 \times 10^{-34}) \cdot (3 \times 10^8)}{(1.6 \times 10^{-19}) \cdot E[\text{eV}]} = \frac{1.24 \times 10^{-6}}{E[\text{eV}]}$$

$$\lambda = \frac{1.24 \mu\text{m}}{E[\text{eV}]}$$

$$\lambda(E = 2.6 \text{ eV}) = 0.477 \mu\text{m} = 477 \text{ nm (azul)}$$

$$\lambda(E = 1.12 \text{ eV}) = 1.11 \mu\text{m} = 1110 \text{ nm (negro)}$$



Hoja de datos

1.1

Constantes importantes

$$h = 6.6 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

$$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$N_A = 6.023 \times 10^{23}$$

$$\varepsilon_0 = 8.8 \times 10^{-12} \text{ F/m}$$

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N/A}^2$$

$$\varepsilon_r(\text{Si}) = 11.8$$

$$\varepsilon_r(\text{SiO}_2) = 3.9$$

$$\rho(\text{Si}) = 2.33 \text{ g/cm}^3$$

$$T_f(\text{Si}) = 1440^\circ\text{C}$$

$$\rho(\text{SiO}_2) = 2.53 \text{ g/cm}^3$$

$$T_f(\text{SiO}_2) = 1710^\circ\text{C}$$

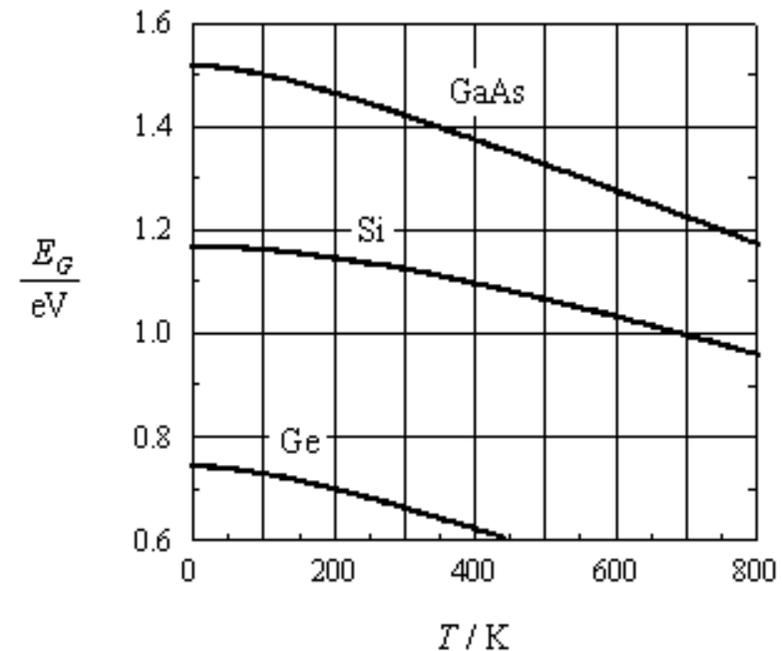
$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K} = 8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$$

Masa efectiva

	Ge	Si	GaAs
m_n^*	$0.55 m_0$	$1.1 m_0$	$0.067 m_0$
m_p^*	$0.37 m_0$	$0.56 m_0$	$0.48 m_0$

Dependencia del *gap* con la temperatura



Tema 2: Semiconductores intrínsecos y extrínsecos

Cap. 3: K. Kano

- Introducción
- Densidad de Estados (DeE)
- Función de distribución de Fermi-Dirac
- Densidad de portadores (en semiconductores intrínsecos)
- Semiconductores extrínsecos: tipo p y tipo n
- Concepto de equilibrio térmico
- Densidad de portadores en semiconductores extrínsecos
- Nivel de Fermi en semiconductores extrínsecos
- ¿Cómo obtener un semiconductor dopado?