

EL NIVEL FERMI EN SEMICONDUCTORES DOPADOS

Casio Oré

1. Introducción

El conocimiento del valor del nivel Fermi es importante en metales y semiconductores pues permite, entre otros, conocer las concentraciones de portadores y con ellas la conductividad de los materiales.

La Teoría del Electrón Libre, complementado con el Principio de Exclusión y la distribución de Fermi-Dirac permite en forma sencilla obtener el nivel Fermi en metales. En el caso de semiconductores un procedimiento similar conduce a una integral que para un semiconductor puro puede ejecutarse invocando el hecho que a temperaturas usuales el comportamiento de los electrones puede ser descrito por la distribución clásica de Maxwell-Boltzmann.

En semiconductores dopados el caso se complica. Ya no puede usarse la distribución clásica, o en el mejor de los casos, su validez queda muy restringida. Pese a ello se insiste en su uso y, lo que es más lamentable, se le

emplea reiteradamente. Al final no se sabe en qué región o regiones son válidas las expresiones obtenidas. La dificultad reside en la complejidad funcional de la distribución Fermi-Dirac. Su presencia no permite una solución analítica al problema.

Afortunadamente, la masificación de calculadoras y computadoras personales posibilitan en la actualidad enfrentar numéricamente las integrales y obtener resultados concretos eliminando de paso aproximaciones de carácter dudoso.

En el presente trabajo se reporta el cálculo del nivel Fermi para una muestra de silicio dopado con arsénico para diversos rangos de temperaturas y concentraciones de impurezas. Se ha usado para ello la calculadora FX 720 CASIO programable, muy popular entre el estudiantado.

2. Teoría

La concentración de electrones n en la banda de conducción (BC) y la de vacancias p en la banda de valencia (BV) están dadas por [1, 2]:

$$n = \int_{E_g}^{E_s} g(E) F(E) dE \quad (1)$$

$$p = \int_{E_i}^0 g_v(E) (1-F(E)) dE \quad (2)$$

Se ha elegido como cero de la escala de energías al tope de la BV. E_s y E_i son las energías del tope de la BC y del mínimo de la BV, respectivamente.

$F(E)$ es la distribución de Fermi-Dirac

$$F(E) = 1 / \left(e^{\beta(E-\mu)} + 1 \right) \quad (3)$$

donde β es la inversa de la energía térmica kT y μ es el nivel Fermi.

Las densidades de estado por rango de energía para electrones y vacancias están dadas por

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_g)^{1/2} \quad (4)$$

$$g_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_v^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (-E)^{1/2} \quad (5)$$

donde m_e^* y m_v^* son las masas efectivas de los electrones y vacancias, respectivamente. Al respecto, en sustancias pertenecientes a la columna IV de la tabla periódica (Si y Ge, entre otras) las superficies de energías constantes están dadas por elipsoides múltiples, esto es, requieren la presencia de 3 masas efectivas para los electrones y 3 para las vacancias. Sin embargo, para zonas próximas al borde inferior de la BC y superior de la BV estas superficies de energías constantes pueden ser consideradas como esféricas [3, 4] requiriendo por lo tanto de una sola masa efectiva $m^* = (m_1 m_2 m_3)^{1/3}$ y son las que se usarán en las expresiones 4 y 5.

El ancho de la banda prohibida E_g es temperatura dependiente. Para el caso específico del silicio los datos experimentales permiten consignar 2 tipos de dependencia. Una cuadrática para temperaturas inferiores a 200 K y otra lineal para temperaturas superiores a 200 K [5, 6].

Un semiconductor dopado tipo n contiene átomos de impurezas donantes. Para concentraciones N_D no muy altas de estas impurezas (un máximo de 1 impureza por 10^4 de Si) los electrones adicionales aportados por estos átomos ocupan niveles en la banda prohibida muy próximos al borde inferior de la BC, niveles que poseen una energía E_D de manera que $E_g - E_D$ es la energía de ionización de las impurezas. Figura 1.

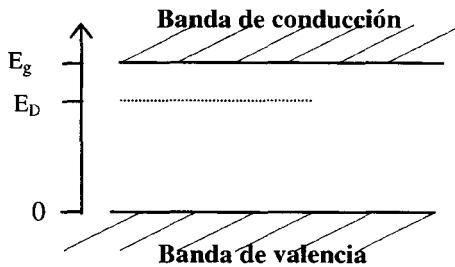


Figura 1: Niveles de impurezas

Una mayor concentración de impurezas ocasiona bandas de impurezas que pueden superponerse a la BC en cuyo caso el material adquiere características metálicas.

A la temperatura T la energía térmica media kT permite que parte de estos electrones pasen a la BC, formándose simultáneamente átomos ionizados con una concentración N_D^+ en igual número. Se tiene, entonces, la igualdad

$$n = p + N_D^+ \quad (6)$$

ecuación que manifiesta que la concentración de electrones en la BC es debida a electrones que de la BV pasan a la BC y a electrones que de los niveles de impurezas pasan asimismo a la BC.

La probabilidad que un átomo de impureza se ionice y, por lo tanto, su electrón pase a la BC a la temperatura T es dada por [7].

$$1 - 1 / \left(\frac{1}{2} e^{\beta(E_D - \mu)} + 1 \right) \quad (7)$$

Escrita en detalle la expresión 6 toma la forma

$$\frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_g}^{E_s} \frac{(E - E_g)^{1/2}}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} dE = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_v^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_i}^0 (-E)^{1/2} \left[1 - \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \right] dE + N_D \left(1 - \frac{1}{2} \frac{1}{e^{\beta(E_D - \mu)} + 1} \right) \quad (8)$$

Es ésta la ecuación que se utilizará para calcular el valor del nivel Fermi μ para diversas concentraciones de impurezas N_D y temperaturas T .

3. Cálculo del Nivel Fermi

Como el nivel Fermi se encuentra por lo general en la banda prohibida, la función $F(E)$ disminuye muy rápidamente en la BC y la función $1 - F(E)$ en la BV, de modo que no se cometerá error alguno si E_s y E_i son reemplazados por ∞ y $-\infty$, respectivamente, en (1) y (2).

En semiconductores puros el nivel μ está alrededor del centro de la banda prohibida BP, esto es, cercano a $E_g/2$. Luego, en este caso, $E - \mu \gg kT$ aún para temperaturas tan altas como 1000 K. Puede entonces cambiarse la función Fermi-Dirac por la función clásica de Maxwell-Boltzmann como ordinariamente se hace y con ello las integrales (1) y (2) son fácilmente efectuadas

$$n = 2 \left(\frac{2\pi kT m_e^*}{h^2} \right)^{3/2} e^{\beta(\mu - E_g)}$$

$$p = 2 \left(\frac{2\pi kT m_v^*}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\beta\mu} \quad (9)$$

En semiconductores dopados tipo n , el nivel μ se desplaza hacia E_g y por lo tanto ya no es del todo cierto que $E - \mu \gg kT$. No son válidas entonces las expresiones (9) y, por consiguiente, es erróneo reemplazar (9) en (8). No queda otra alternativa que recurrir a la integración numérica para obtener tanto n como p . No es tampoco cierto que $E_D - \mu \gg kT$, tomando más exigente el cálculo numérico. Los textos usuales no toman en cuenta estas limitaciones proporcionando aproximaciones no muy confiables [1, 3].

Puede sin embargo aliviarse la doble integración invocando la ley de acción de masas que muestra que debe cumplirse $n_i p_i = np$ donde el subíndice i es usada para semiconductores intrínsecos (puros). Bastaría efectuar la integración para n , evaluar n_i con (9) y así tener $p = n_i^2 / n$. Este es el camino que se ha optado en el presente trabajo y reduce bastante el tiempo de integración que debe efectuar la calculadora FX 720.

Una expresión alternativa para el valor de n_i , independiente del valor de μ , se obtiene multiplicando las 2 expresiones (9) e invocando el hecho que en semiconductores intrínsecos n_i debe ser igual a p_i . Se tiene entonces

$$n_i = 2 \frac{(2\pi k T m)^{3/2}}{h^3} \left(\frac{m_e^*}{m} \frac{m_v^*}{m} \right)^{3/4} e^{-\beta \frac{E_g}{2}} \quad (10)$$

Diversas fuentes [3, 4] consignan diferentes valores para las masas efectivas aunque cercanos entre sí. En este reporte han sido usados.

$$m_e^* = 1,1 m \quad m_v^* = 0,57 m \quad (11)$$

donde m es la masa del electrón libre.

Los datos experimentales proporcionados por ref. [5, 6] permiten obtener luego de emplear el procedimiento de mínimos cuadrados

$$\begin{aligned} E_g &= 1,16873 - 5,7554 \times 10^{-7} T^2, & T < 200 K \\ &= 1,205 - 2,84 \times 10^{-4} T, & T > 200 K \end{aligned} \quad (12)$$

Con estos valores, la expresión (10) adquiere la forma

$$n_i = 3,4312 \times 10^{21} T^{3/2} e^{-E_g / 1,725 \times 10^{-4} T} \quad (13)$$

Proporcionando valores a T , esta última expresión permite hallar la concentración de electrones (y de vacancias) n_i en semiconductores intrínsecos. Los valores obtenidos se consignan en las figuras 2, 3 y 4.

Aún contando con estas ayudas, la búsqueda del valor de μ que satisfaga (8) contando con la ayuda de la FX 720 demandó mucho tiempo. Sin embargo, dada la naturaleza de la expresión (8) resulta más sencillo proporcionar valores a μ y T y hallar los valores respectivos de N_D que satisfagan la ecuación. Este es el camino adoptado y con los valores obtenidos pueden luego construirse relaciones μ vs. T para diversos valores de las concentraciones.

Como impureza fue elegido el arsénico cuya energía de ionización es $0,049 \text{ eV}$ de manera que el nivel E_D de la impureza es $E_g - 0,049$. Esta expresión fue mantenida en todos los cálculos.

La energía térmica juega un valor importante en (8), el límite superior en la integración, así como el intervalo entre pasos sucesivos de la energía fueron puestos en función de ella. Para el límite superior se consideró 15 kT . Con este valor, la función $F(E)$ se convierte en 3×10^{-7} cifra muy pequeña comparada con su valor máximo que es de 1. El intervalo entre pasos sucesivos efectuados en el eje de la energía fue $kT/35$.

Los valores consignados conducen a que n adquiera la forma

$$n = 7,9242 \times 10^{27} \int_{E_g}^{E_g + 15kT} \frac{(E - E_g)^{1/2}}{e^{\beta(E - \mu)} + 1} dE \quad (14)$$

donde los valores de la energía deben ser dados en eV .

A su vez, el último término de (8) puede ponerse en la forma

$$\frac{N_D}{1 + 2 e^{-\beta(E_D - \mu)}} \quad (15)$$

Con las expresiones anotadas, la ecuación (8) adquiere la forma

$$n = \frac{n_i^2}{n} + \frac{N_D}{1 + 2 e^{-\beta(E_D - \mu)}} \quad (16)$$

El programa BASIC elaborado para la FX 720 es

```

4 INPUT T
5 M = 0.049
6 K = 0.00008625xT : D = K/35
7 G = 1.205 - 0.000284xT (6 1.16873 - 5.7554x10-7xT2)
8 M = G - M
9 INPUT F, J
10 S = 0
11 E = G
12 B = (E - F) / K: C = E - G
13 A = SQR C / (EXPB + 1)
14 E = E + D: H = 15xK: S = S + A
15 IFC < H THEN 12
16 I = SxDx7.9242x1027
20 P = -Gx10000 / (1.725xT)
25 N = 3.4312xT1.5xEXP Px1021
30 PRINT T, F
31 PRINT I
32 L = I - NXN / I
40 R = (F - M) / K
45 Q = Lx (2xEXPR + 1)
50 PRINT Q
55 F = F - J
60 GOTO 10

```


4. Resultados obtenidos

La figura 2 muestra los valores del nivel Fermi para diversas concentraciones de impurezas y diferentes temperaturas. Se observará que para cada temperatura un incremento en la concentración de impurezas ocasiona que el nivel Fermi aumente también, aproximándose al borde inferior de la BC, E_g . Este comportamiento lo hace en forma distinta para distintas temperaturas. Para temperaturas muy bajas, μ está muy próxima a E_g para cualquier N_D , mientras que a altas temperaturas la aproximación a E_g se realiza recién a partir de un determinado valor de N_D . Así, por ejemplo, a 300 K, el nivel Fermi se mantiene igual al de un semiconductor intrínseco hasta una concentración de impurezas igual a 10^{15} m^{-3} , recién entonces empieza a aumentar. Esto contrasta fuertemente con el comportamiento a muy bajas temperaturas donde una mínima presencia de impurezas hace elevar bruscamente el valor de μ para luego ir lentamente acercándose a E_g a medida que N_D aumenta. Este incremento brusco de μ es para permitir que electrones de los niveles de impureza puedan trasladarse a la BC, pero como la temperatura es muy baja, este pasaje debe ser pequeño en número. A medida que la temperatura va incrementándose, mayor número debe trasladarse y esto se consigue con valores de μ inferiores. A 300 K, por ejemplo, todas las impurezas deben estar ionizadas esto hace que se mantenga el valor de μ_i , salvo que la concentración de impurezas sea muy grande ($>10^{15} \text{ m}^{-3}$).

¿Por qué sube μ a medida que N_D aumenta? La explicación más apropiada puede encontrarse en el papel que suele darse al nivel μ_i en semiconductores intrínsecos. En ellos μ_i se halla aproximadamente en la mitad de la banda prohibida [1, 2]. Esta ubicación permite que los valores de $f(E)$ en la BC y de $1 - f(E)$ en la BV sean iguales, situación que finalmente conduce a $n_i = p_i$. Puede luego decirse que μ es el medio entre una BC vacía y un depósito de electrones BV. En el caso de semiconductores dopados tipo n , el nivel de impurezas se convierte en un nuevo depósito de electrones y por lo tanto μ debería estar entre E_g y E_D . El mayor o menor grado con el que este papel es desempeñado depende de la concentración de impurezas y de la temperatura. Cuanto mayor sea N_D más pronunciado es

este efecto a cualquier temperatura como lo muestra la figura 2. A bajas temperaturas este papel se cumple parcialmente a no ser que la temperatura sea también demasiado baja, pues en estas circunstancias el desplazamiento de electrones hacia la BC es insignificante. Situación completamente distinta ocurre a concentraciones bajas y temperaturas elevadas, pues en éstos el nivel Fermi coincide con μ_i . Esto es debido a que en estas temperaturas todas las impurezas están ionizadas y eso requiere $E_D - \mu \gg kT$.

La figura 3 muestra cómo cambia μ con T a diferentes concentraciones de impurezas. Se observa que a temperaturas muy bajas, el nivel Fermi está próximo a $\frac{E_g + E_D}{2}$ para cualquier N_D , pero luego los valores van disminuyendo a medida que aumenta la temperatura. Hay un constante acercamiento al valor del semiconductor intrínseco μ_i , notándose que los de menor N_D se aproximan más rápidamente. Puede notarse que un semiconductor dopado con $N_D = 10^{20} m^{-3}$ adquiere las características de un intrínseco a 460 K mientras que el de 10^{24} aun no lo hace a 500 K. Es de advertir que en los cálculos efectuados no se sobrepasó los 500 K debido a que las mayores utilizaciones de los semiconductores es efectuada a temperaturas más bien bajas.

Una vez conocidos los valores de μ para diversas concentraciones de impurezas y temperaturas y como un corolario sumamente importante se tiene el cálculo ahora sencillo de la concentración de electrones n en la BC. La figura 4 nos da una espléndida visión de la ocurrencia de cosas. Observamos que para una muestra de *Si* puro, n recién empieza tener valores a la temperatura de 120 K para luego ir aumentando paulatinamente hasta alcanzar el valor de $10^{20} m^{-3}$ a 500 K. Se observará que para temperaturas menores a 120 K en semiconductores dopados ya no es cero y que los valores que adquiere depende de la concentración de impurezas. La ionización completa de las impurezas se logra muy rápidamente: para 10^{10} , 20 K; para 10^{24} , el 90 % está ionizado si $T = 100K$. En el otro extremo de temperatura se advierte que los semiconductores dopados se convierten en puros a diversas temperaturas. El que posee $N_D = 10^{10} m^{-3}$ lo hace a 200K; para $10^{16} m^{-3}$ se requiere 300K. Se notará asimismo que 500 K no son aun suficientes para que la muestra con $N_D = 10^{24} m^{-3}$ adquiera las características de un semiconductor intrínseco. Una vez que toda la impureza

haya sido ionizada, un posterior aumento de temperatura no cambia el valor de n situación que se mantiene hasta alcanzar la temperatura necesaria que permita al semiconductor adquirir las propiedades intrínsecas.

5. Conclusión

Se ha mostrado que una calculadora programable personal muy utilizada por estudiantes de ciencias e ingeniería es suficiente para calcular el nivel Fermi en semiconductores dopados. Tradicionalmente se eludía este tipo de cálculo debido a la complejidad de las expresiones matemáticas involucradas. El hallazgo del nivel Fermi y, a partir de él, de la concentración de electrones en la banda de conducción para diferentes temperaturas y concentraciones de impurezas proporciona un sólido conocimiento del papel que le corresponde a las impurezas en dispositivos semiconductores.

No está demás añadir que procedimientos similares pueden utilizarse para otros tipos de semiconductores o de impurezas, incluyendo a semiconductores del tipo p .

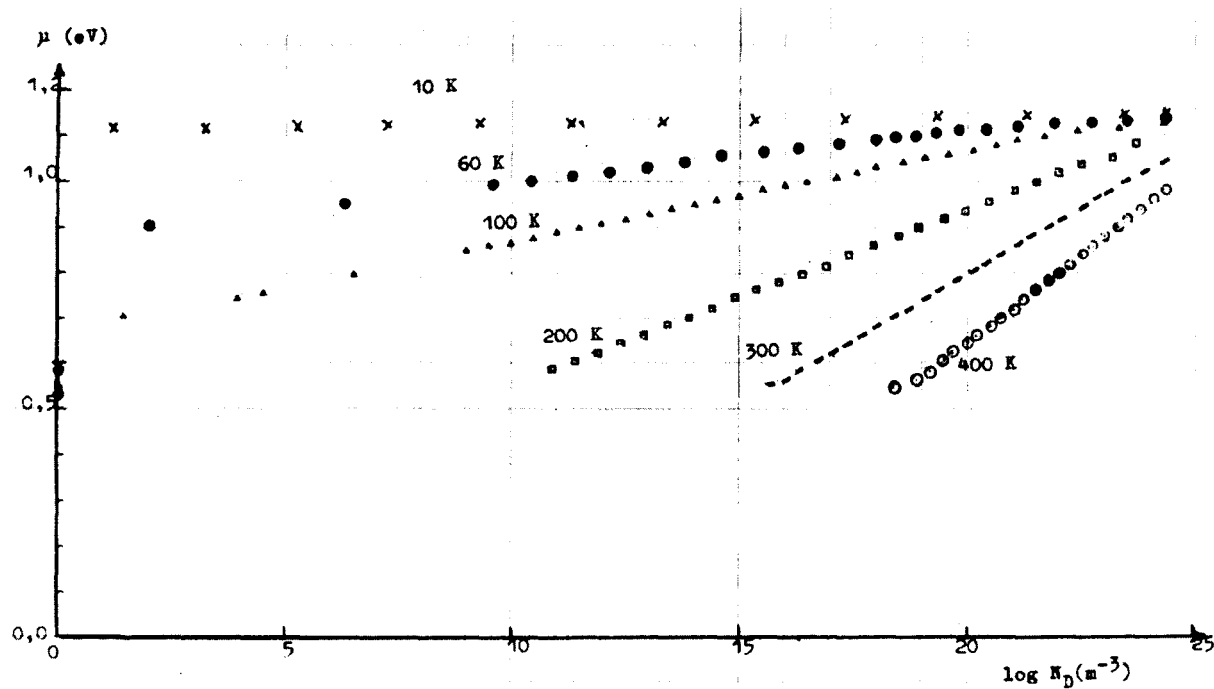


Figura 2: Nivel Fermi μ para diversas concentraciones de impurezas donantes N_D y diferentes temperaturas. En el eje μ se han consignado valores de μ_i para las temperaturas mostradas.

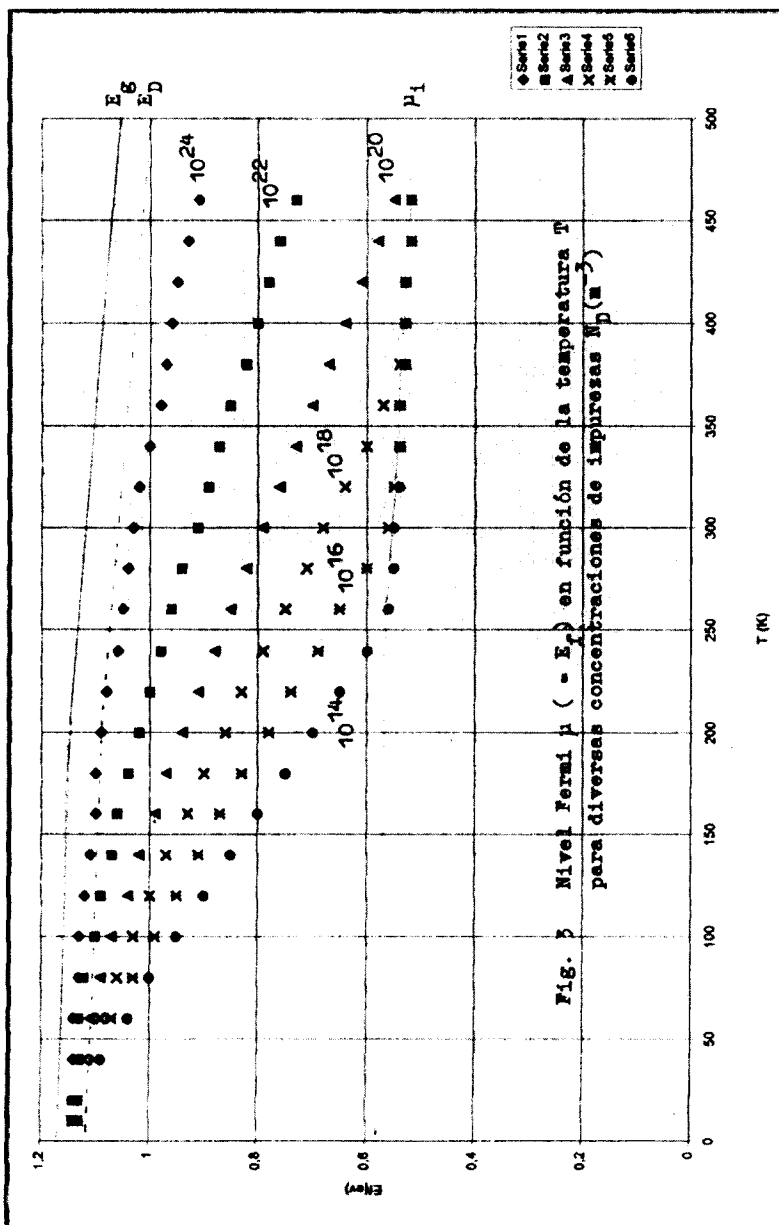


Fig. 3 Nivel Fermi μ ($= E_F$) en función de la temperatura T para diversas concentraciones de impurezas N_D (m^{-3})

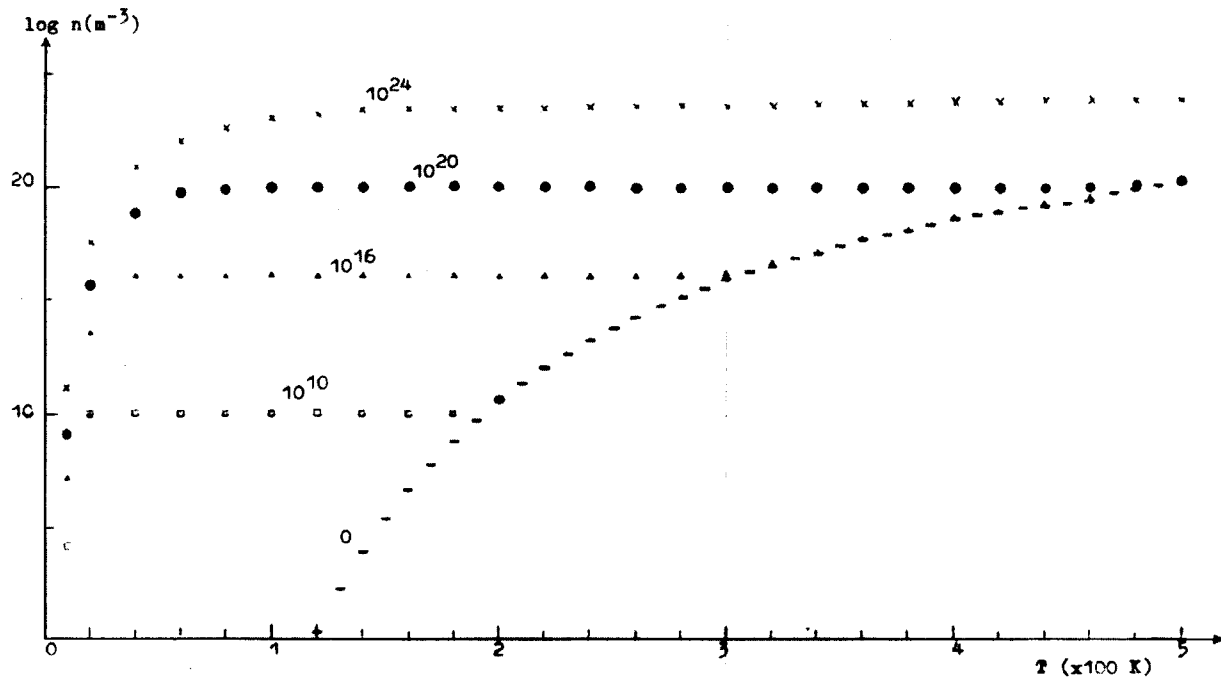


Figura 4: Concentración de electrones n en la banda de conducción en función de la temperatura T para diversas concentraciones de impurezas donantes $N_D \text{ (m}^{-3}\text{)}$

6. Bibliografía

- [1] Kittel, C. *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley.
- [2] Ashcroft, N.W. *Solid State Physics*. Holton. New York.
- [3] Shalimova, K.V. *Física de los semiconductores*. MIR. Moscú.
- [4] Jonscher A. J. *Principles of semiconductor devices operation*. Bell and Sons. London.
- [5] Long, D. *Energy bands in semiconductors*. John Wiley, New York.
- [6] Seeger, K. *Semiconductor Physics*. Springer, Berlín.
- [7] McKelvey, J.P. *Física del Estado Sólido y de Semiconductores*. Limusa. México.

Casio R. Oré
core@pucp.edu.pe