

Introduzione al corso di Fisica dei Semiconduttori

Mara Bruzzi

27 settembre 2017

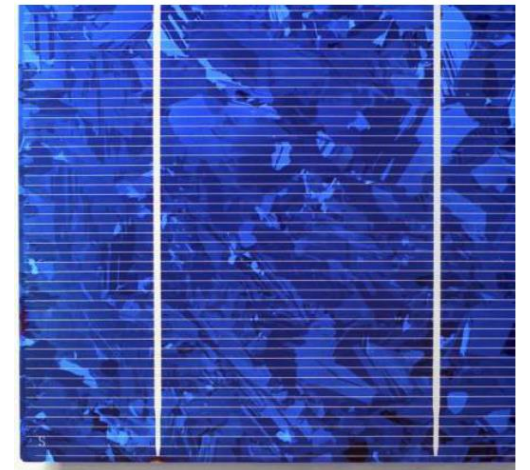
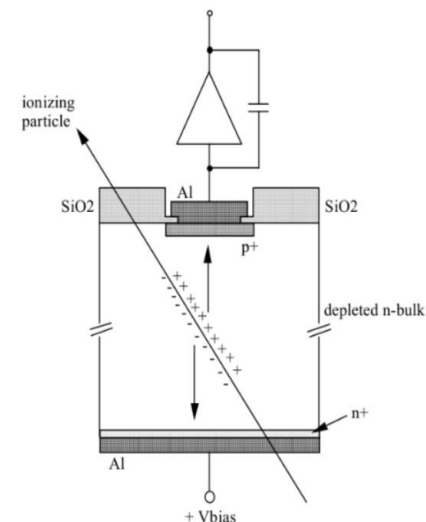
Semiconduttori

Che cosa sono?

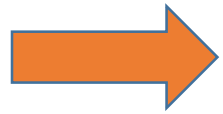
- Conducibilità elettrica intermedia tra quella di un buon conduttore e quella di un buon isolante;
- Resistività che diminuisce all'aumentare della temperatura (semiconduttore intrinseco) , contrariamente al caso dei metalli in cui essa aumenta;
- Conduzione elettrica dovuta sia agli elettroni di conduzione che alle lacune (assenza di elettroni) in banda di valenza) - nei conduttori si considerano solo gli elettroni liberi;
- Materiali la cui conducibilità elettrica può essere variata a piacimento con inserimento intenzionale di atomi di diversi elementi (semiconduttore estrinseco)

Quali sono le applicazioni più importanti ?

- Dispositivi a semiconduttore:
diodi, transistors, sensori, LED, laser, celle solari



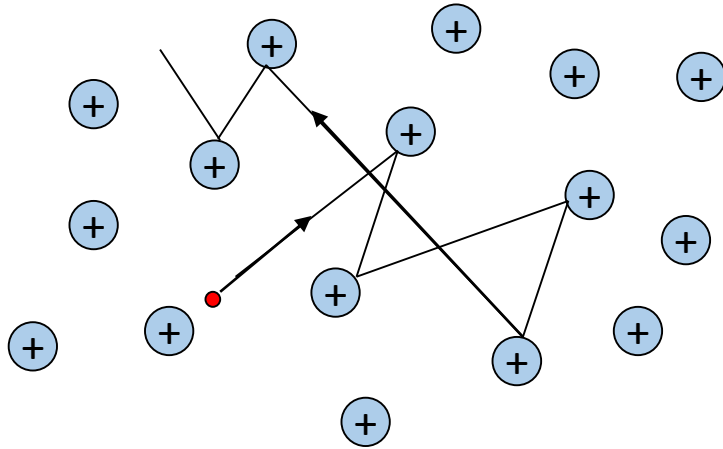
Problema: la fisica classica in generale non fornisce una descrizione adeguata del comportamento dei semiconduttori.



E' necessario affrontare l'argomento acquisendo nozioni di fisica quantistica.

La fisica quantistica diviene anche fondamentale per comprendere il funzionamento dei moderni dispositivi a semiconduttore

Modello classico della conduzione elettrica: Drude (1900)



In questo modello semplificato l'elettrone di conduzione interagisce con gli ioni mediante collisioni: eventi istantanei che cambiano bruscamente la sua velocità .

Assunzioni del modello:

1. Ioni nel reticolo fissi e disposti casualmente .
2. Nel tempo che intercorre tra collisioni successive si trascurano le interazioni tra ione ed elettrone (approssimazione di elettrone libero) e tra elettrone ed elettrone (approssimazione di elettrone indipendente).
3. La probabilità che l'elettrone non abbia avuto collisione nel tempo t è pari a:
$$P = e^{-\frac{t}{\tau}}$$
 con τ = tempo medio tra due collisioni successive.
4. La velocità di uscita dalla collisione ha direzione casuale e non correlata alla velocità prima della collisione e modulo correlato con la temperatura locale .

Legge di Ohm nel modello di Drude

Applico campo elettrico esterno: sugli elettroni di conduzione agirà la forza:

$$\underline{F} = -e\underline{E} \quad \text{Per la legge di Newton: } \frac{d\underline{v}}{dt} = \underline{a} = \frac{\underline{F}}{m} \quad \text{la velocità}$$

varia, tra collisioni successive, con legge

$$\underline{v} - \underline{v}_0 = \int_0^t -\frac{e\underline{E}}{m} dt = -\frac{e\underline{E}}{m} t$$

Facendo la media otteniamo:

$$\langle \underline{v} \rangle = \langle \underline{v}_0 \rangle - \frac{e\underline{E}}{m} \langle t \rangle = -\frac{e\underline{E}}{m} \tau .$$

avendo posto, per le assunzioni già viste, $\langle \underline{v}_0 \rangle = 0$ e $\langle t \rangle = \tau$.

Definiamo mobilità $\mu = \left| \frac{e\tau}{m} \right|$ coefficiente di proporzionalità tra campo

elettrico e velocità media. Poiché la densità di corrente per conduzione elettronica è: $\underline{J} = -ne \langle \underline{v} \rangle$

Otteniamo: $\underline{J} = \frac{ne^2\tau}{m} \underline{E} \Rightarrow \underline{J} = \sigma \underline{E}$

Definiamo conducibilità elettrica del materiale: $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$ (resistività: $\rho = \frac{1}{\sigma}$)

La conducibilità elettrica: $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$ nei metalli a T ambiente è, tipicamente: $\sigma \approx 10^8 \frac{1}{\Omega m}$

La concentrazione di elettroni di conduzione nei metalli si valuta nel modo seguente (esempio rame):

$$n = \frac{N}{V} = \frac{m}{A} N_{AV} \frac{z}{V} = \frac{\rho N_{AV} z}{A} = \frac{6.022 \cdot 10^{23} \cdot 8.96}{63.55} = 8.49 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

z = numero di elettroni di conduzione per atomo (z = 1 per il rame)

Valutazione del tempo medio di collisione:

$$\tau = \frac{m}{ne^2} \sigma = \frac{0.911 \cdot 10^{-30}}{8.49 \cdot 10^{22} \cdot 10^6 \cdot (1.6 \cdot 10^{-19})^2} 10^8 \approx 10^{-14} \text{ s}$$

Drude utilizza la statistica di Maxwell Boltzmann per valutare la velocità termica dell'elettrone:

$$v_{th} = \sqrt{\frac{3K_B T}{m}} = \sqrt{\frac{3 \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}{0.911 \cdot 10^{-30}}} \approx 10^5 \frac{m}{s}$$

Valutazione del libero cammino medio dell'elettrone di conduzione:

$$l = v_{th} \cdot \tau \sim 10 \text{ \AA}$$

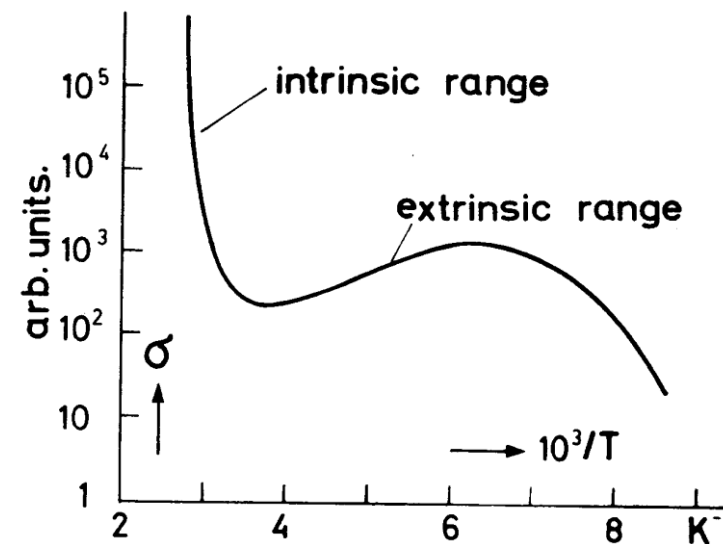
Resistività elettrica nel metallo:
aumenta all'aumentare della temperatura

$$\rho = \rho_{20}(1 + \alpha(t - 20))$$

materiale	ρ_{20} [Ohm m]	α [°C ⁻¹]
Argento	$1.59 \cdot 10^{-8}$	$4.1 \cdot 10^{-3}$
Rame	$1.67 \cdot 10^{-8}$	$6.8 \cdot 10^{-3}$
Oro	$2.35 \cdot 10^{-8}$	$4.0 \cdot 10^{-3}$
Alluminio	$2.65 \cdot 10^{-8}$	$4.3 \cdot 10^{-3}$
Tungsteno	$5.65 \cdot 10^{-8}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$
Zinco	$5.92 \cdot 10^{-8}$	$4.2 \cdot 10^{-3}$
Platino	$10.6 \cdot 10^{-8}$	$3.9 \cdot 10^{-3}$
Ferro	$9.71 \cdot 10^{-8}$	$6.5 \cdot 10^{-3}$
Piombo	$20.7 \cdot 10^{-8}$	$3.4 \cdot 10^{-3}$

Conducibilità elettrica in un semiconduttore drogato:

- diminuisce in un range intermedio (estrinseco)
- aumenta esponenzialmente a basse / alte T



Questo effetto è di solito impiegato per la costruzione di termometri a resistenza (e.g. al platino, germanio, silicio).

Valutazione del coefficiente di Hall

Applico campo magnetico esterno costante B lungo la direzione y e mantengo una densità di corrente costante \underline{J} lungo la direzione x . Sia q la carica responsabile della conduzione. Su di essa agisce la forza di Lorentz:

$$\underline{F}_L = q\underline{v} \times \underline{B}$$

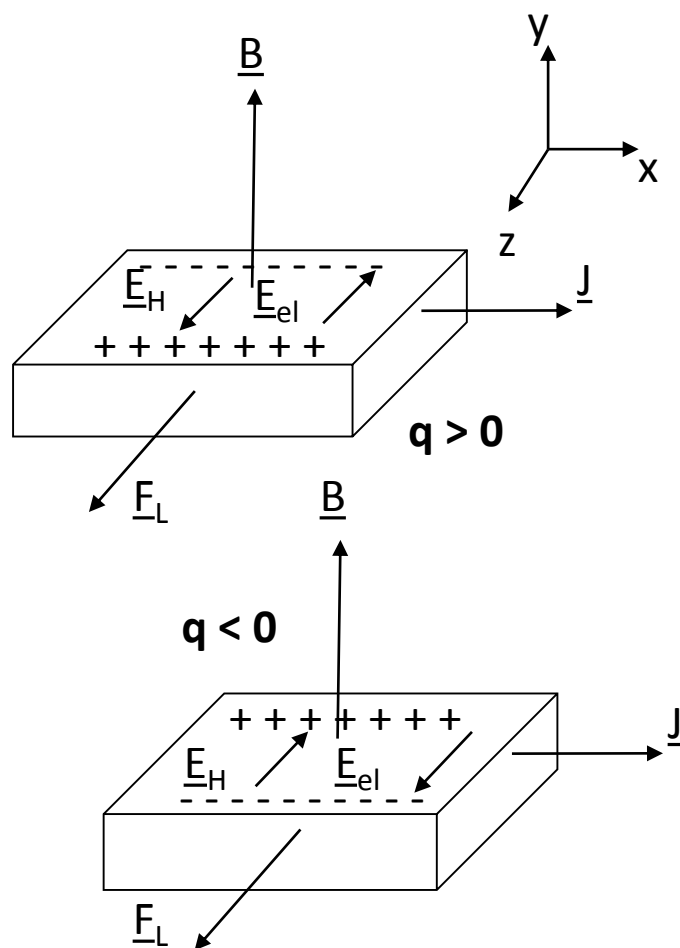
La forza per unità di carica può essere espressa come campo elettromotore:

$$\underline{E}_H = \frac{\underline{F}_L}{q} = \underline{v} \times \underline{B} \quad \text{campo di Hall.}$$

Se $q > 0$ \underline{E}_H risulta concorde all'asse z , mentre ha verso opposto se $q < 0$. All'equilibrio compare un campo elettrostatico \underline{E}_{el} uguale ed opposto ad \underline{E}_H :

$$\underline{E}_H + \underline{E}_{el} = 0$$

Esso si può spiegare considerando che \underline{E}_H provochi una deflessione nel moto delle cariche, tendendo ad accumulare cariche di segno opposto sulle due facce ortogonali a \underline{E}_H stesso.



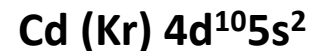
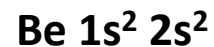
Nel caso la conduzione sia dovuta ad elettroni, ricordando che: $\underline{J} = -nev\underline{v}$
 otteniamo $\underline{E}_H = -\frac{1}{ne}\underline{J} \times \underline{B}$ Si definisce coefficiente di Hall : $R_H = \frac{E_H}{J_x B_y} = -\frac{1}{ne}$

Validità del modello: confronto tra coefficiente di Hall misurato e calcolato dalla teoria di Drude

$$R_H(\text{teorico}) = -\frac{1}{ne}$$

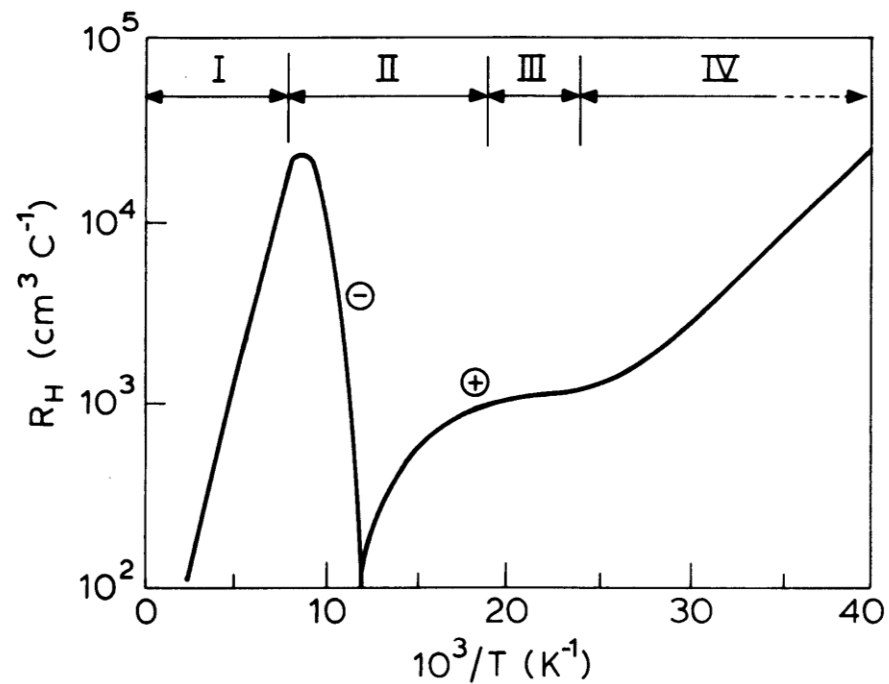
$$R_H(\text{sperim}) = \frac{E_y}{B_z J_x}$$

Buon accordo per metalli monovalenti (alcalini e nobili). **Per Be, Cd, W* il segno dell'effetto Hall è positivo, opposto a quello previsto per conduzione di elettroni.** Notiamo che le configurazioni elettroniche esterne vedono in Be, Cd, W un numero di elettroni pari negli orbitali s. Questo problema viene risolto utilizzando la teoria delle bande, introducendo il concetto di lacune.



	$R_H(\text{sperim}) / R_H(\text{teorico})$
Li	+ 1.3
Na	+ 0.9
Cu	+ 0.8
Ag	+ 0.8
Au	+ 0.7
Be	- 5.0
Cd	- 0.5
W	- 1.2

Andamento di R_H per un semiconduttore tipo p (conduzione di lacune) in funzione della temperatura. Si osservano regimi distinti di conduzione, in cui R_H varia esponenzialmente con $1/T$, cambiando anche segno.



Problemi nel modello di Drude

Il modello non spiega:

1. la grande variabilità della conducibilità elettrica osservata sperimentalmente tra i diversi materiali

Resistività (Ωcm)	Materiale
$\rho < 10^{-3}$	Metalli
$10^{-3} < \rho < 10^5$	Semiconduttori
$\rho > 10^5$	Isolanti

2. come certi materiali possano avere valori positivi di R_H
3. il diverso comportamento elettrico tra metalli, semiconduttori ed isolanti al variare della temperatura:

- Metalli. La conducibilità diminuisce con la temperatura.
- Semiconduttori. Allo zero assoluto non c'è conducibilità elettrica, la conducibilità cresce con la temperatura, la conducibilità è fortemente dipendente dalla presenza di impurezze;
- Isolanti. Conducibilità elettrica trascurabile in un ampio intervallo di temperature.

Conduzione elettrica nel semiconduttore

- a. Gli elettroni devono essere descritti come **onde** confinate all'interno del materiale;
- b. Gli elettroni obbediscono al principio di esclusione di Pauli, perciò devono essere descritti mediante la **statistica quantistica di Fermi-Dirac**.
- c. E' necessario tenere conto dell'energia potenziale elettrostatica tra gli elettroni e gli ioni del **reticolo ordinato** costituito dagli atomi;
- d. E' necessario tener conto dell'effetto delle vibrazioni di tale reticolo;
- e. Le collisioni da considerare sono quelle tra elettroni e imperfezioni del cristallo (impurezze atomiche / vibrazioni reticolari).

Approccio alla Fisica dei Semiconduttori

Lo studio della fisica dei semiconduttori è necessario ai fini di una corretta comprensione del funzionamento dei dispositivi a semiconduttore

Per la comprensione della fisica dei semiconduttori è necessaria la conoscenza delle nozioni di base di:

- **fisica quantistica:** introdurre e capire il significato del dualismo onda - particella
- **statistica classica e quantistica:** descrivere il comportamento di sistemi di particelle che obbediscono o meno al principio di esclusione di Pauli ;
- **fisica dello stato solido:**
 - descrivere la disposizione atomica ordinata nel materiale (reticolo cristallino) e come questa interagisce con le onde (reticolo reciproco); come descrivere le vibrazioni reticolari (fononi);
 - Discutere un diagramma a bande di energia : imparare il significato di banda proibita, bande di energia e diagrammi energia vs vettor d'onda.

Con questi strumenti, si potrà quindi discutere in dettaglio le proprietà elettroniche e di trasporto dei semiconduttori intrinseci e di quelli drogati .

Si forniranno quindi utili conoscenze di base di semiconduttori e avanzati: quaternari , nanostrutturati e di come affrontare dispositivi avanzati quali eterostrutture e celle solari a multigiunzion e nanostrutturate.

Nozioni di base di fisica quantistica

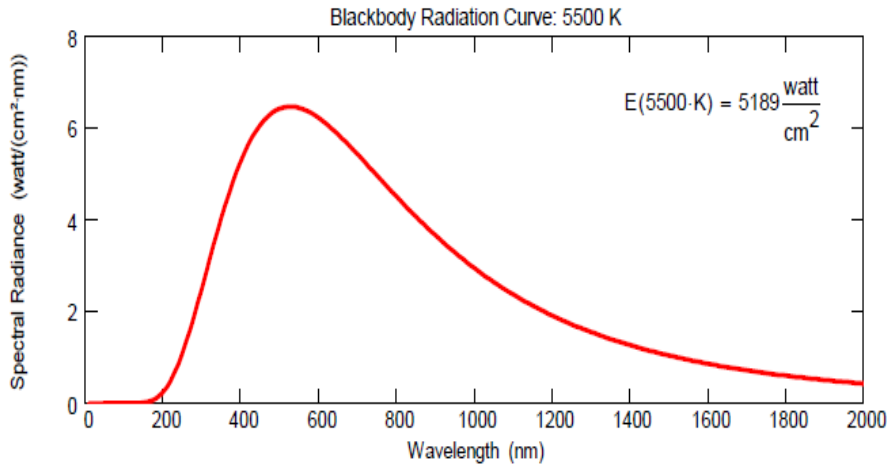
Lezione 1: La crisi della meccanica classica

- a. L'ipotesi di Planck e il corpo nero**
- b. Effetto Fotoelettrico**
- c. Primi modelli atomici - Atomo di Bohr**
- d. Elettroni come Onde di Materia**
- e. Principio di Indeterminazione di Heisenberg**
- f. Particella come pacchetto d'onda**
- g. L'equazione di Schroedinger**
- h. Applicazioni dell'equazione di Schroedinger**

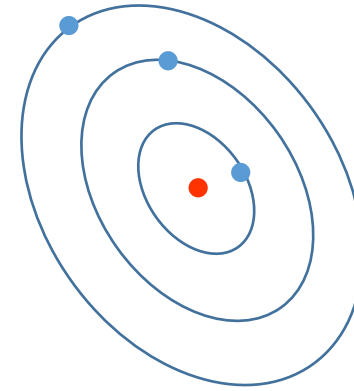
Il periodo storico ≈ 1900-1930

$$E = mc^2 = c\sqrt{m_0^2c^2 + p^2}$$

La teoria della relatività

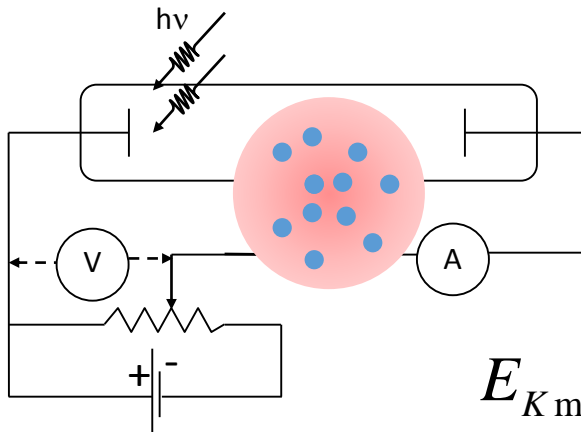


Primi modelli atomici

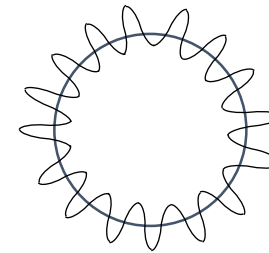


Il corpo nero e l'ipotesi di Planck

Elettroni come onde di materia



$$E_{K \max} = eV_s = h\nu - \phi$$



Il principio di indeterminazione di Heisenberg

l'effetto fotoelettrico ed il fotone come quanto di energia elettromagnetica

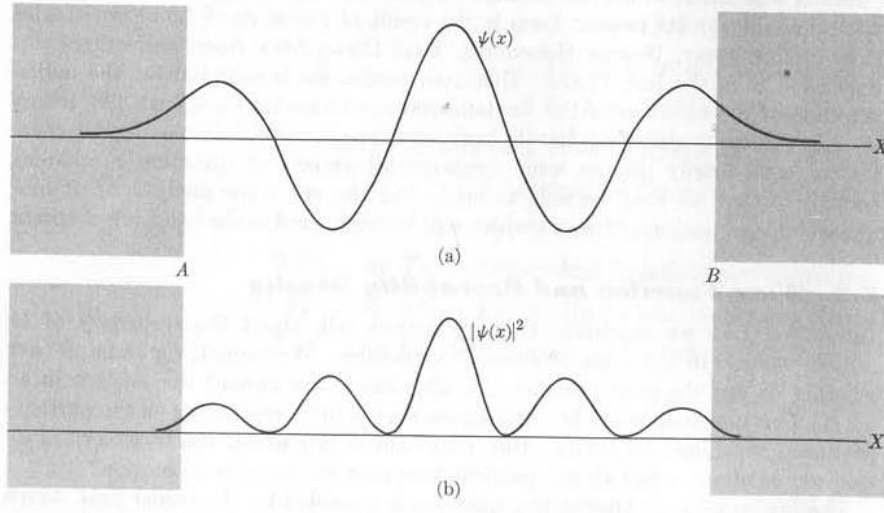
$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Lezione 2: Cenni di meccanica quantistica

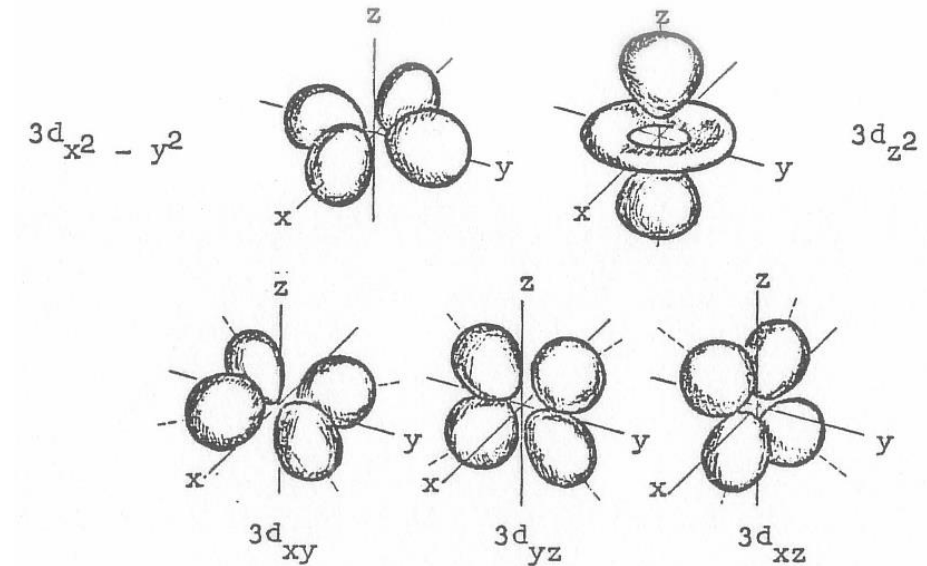
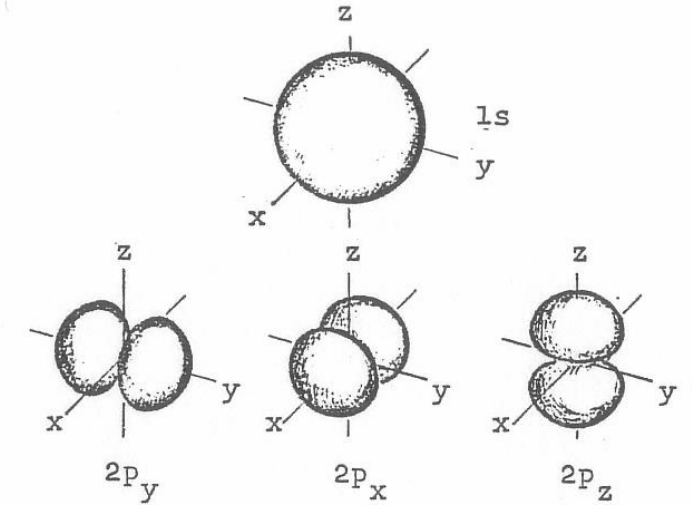
1. Funzioni d'onda e densità di probabilità
 2. L'equazione di Schroedinger
 3. Operatori in meccanica quantistica
 4. Principi della meccanica quantistica
 5. Esempi di calcolo dell'equazione di Schroedinger
 - a) particella libera;
 - b) particella in buca di potenziale monodimensionale;
 - c) particella in buca di potenziale tridimensionale;
 - d) oscillatore armonico;
 - e) atomo ad un solo elettrone: numero quantico principale, quantizzazione del momento angolare, quantizzazione spaziale ed effetto Zeeman, quantizzazione di Spin ed esperimento di Stern-Gerlach.
 7. Gradino di potenziale
 8. Penetrazione di una barriera: effetto Tunnel
- Approfondimenti

Funzioni d'onda e densità di probabilità

Orbitali molecolari e tavola periodica degli elementi



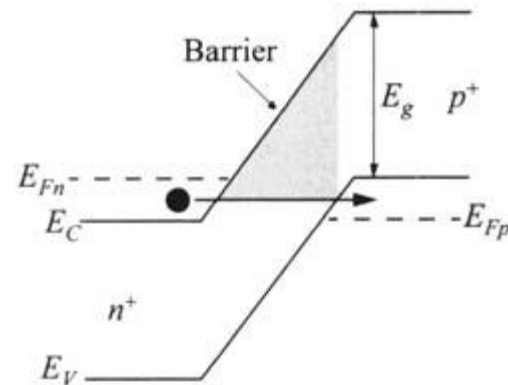
$$P_V = \int_V |\phi(x, y, z)|^2 dx dy dz$$



L'equazione di Schroedinger e le sue applicazioni

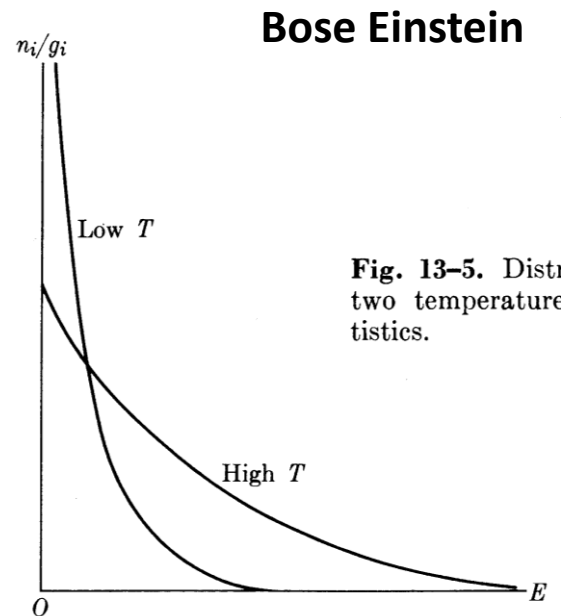
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\underline{r}, t) \right) \psi(\underline{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t}$$

L'effetto Tunnel

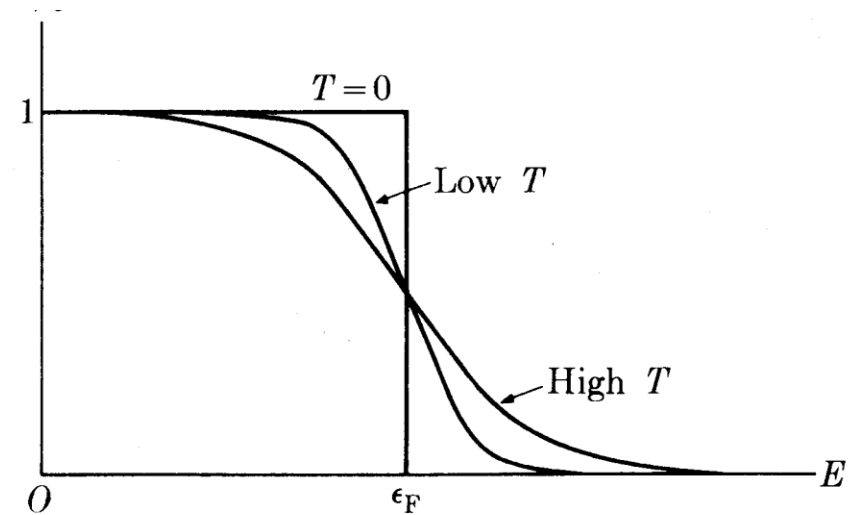


Lezione 3: Cenni di meccanica statistica classica e quantistica

1. Equilibrio statistico
2. Probabilità di una distribuzione
3. La statistica di Maxwell Boltzmann
4. La statistica di Fermi Dirac
5. La statistica di Bose Einstein

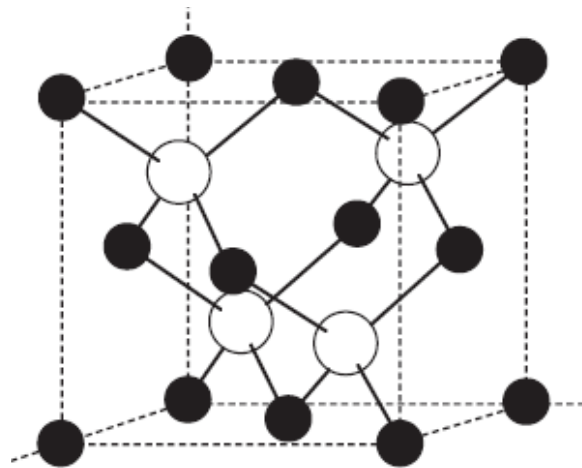
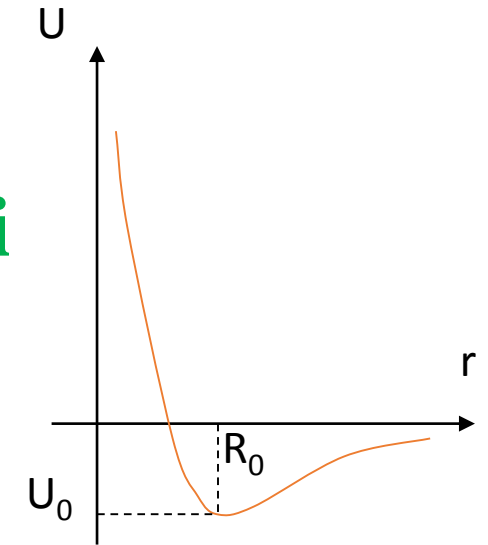


Fermi Dirac

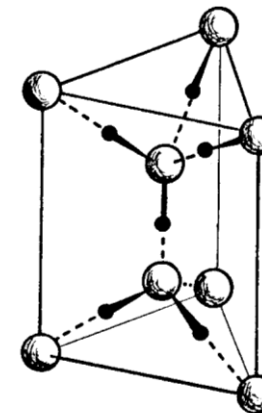


Fisica dello stato solido

Lezione n. 4 : legami nei solidi, reticoli cristallini



Reticolo cristallino del GaAs



Ghiaccio I_h cristallo a simmetria esagonale con angoli di legame quasi tetraedrici.

Fisica dello stato solido

Lezione n. 5 : reticolo reciproco

IL RETICOLO DIRETTO corrisponde alla struttura reticolare reale, che descrive la struttura ordinata e periodica con cui sono disposti gli atomi nello spazio

RETICOLO RECIPROCO determina come la struttura periodica del reticolo diretto **INTERAGISCE CON LE ONDE**.

Tutti i vettori del reticolo reciproco, \mathbf{K} , sono definiti dalla condizione:

$$e^{\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} = 1 \quad \mathbf{K} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n \quad n \text{ intero}$$

con \mathbf{R} vettore del reticolo diretto. Questa espressione può essere soddisfatta se \mathbf{K} è espresso a partire dai vettori primitivi di reticolo reciproco A_1, A_2, A_3 .

<http://www.youtube.com/watch?v=DFFU39A3fPY>

Lezione n. 6: Diagramma a bande nei semiconduttori

Derivazione dei diagrammi a bande nei semiconduttori a partire dal modello quantistico in presenza del potenziale periodico dovuto agli atomi presenti nei siti reticolari

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \varphi(x) = \varepsilon \varphi(x)$$

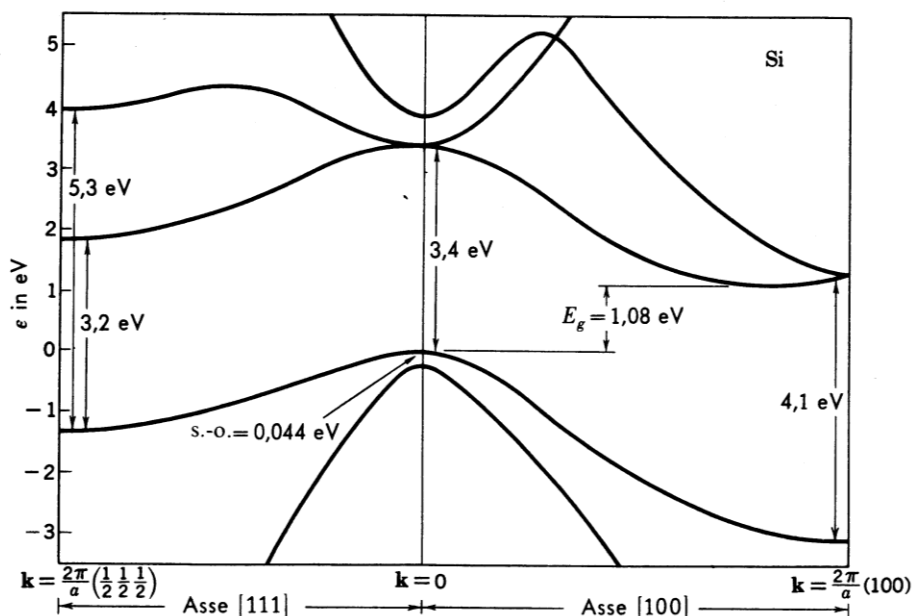
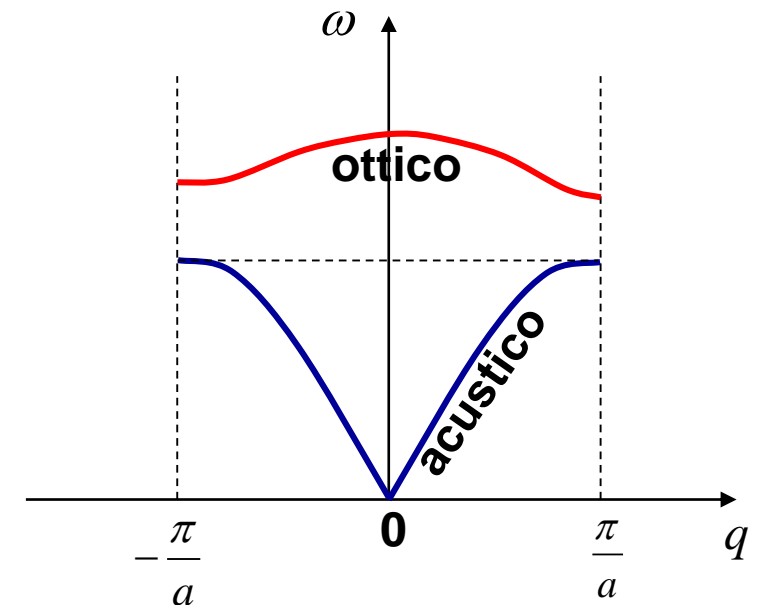
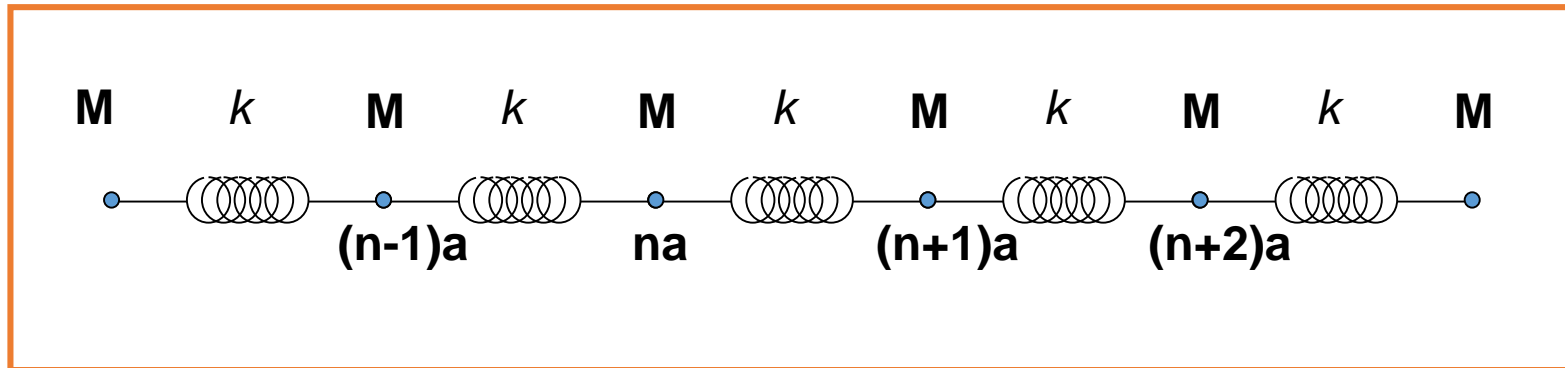


Figura 12 La struttura a bande del silicio vicino al gap. La separazione spin-orbita (s.-o.) della banda di valenza a $k=0$ è dilatata rispetto alla scala. La struttura a bande calcolata da M. L. Cohen e T. K. Bergstresser è stata lievemente modificata per potersi accordare con i valori sperimentali delle separazioni. Lo zero dell'energia è stato posto sulla cima della banda di valenza.

Lezione 7: vibrazioni reticolari e fononi

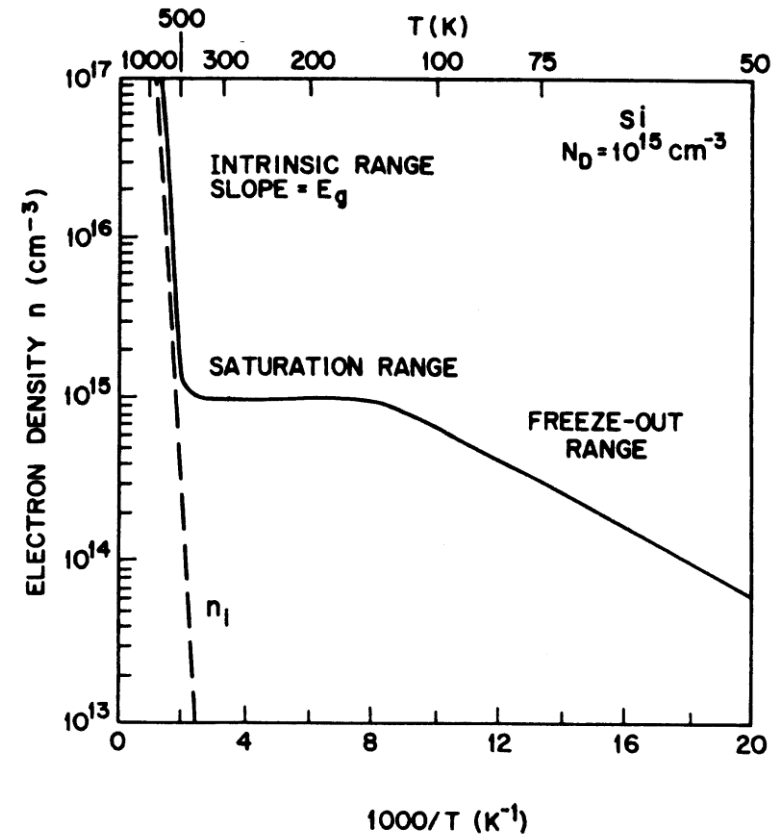
Energia potenziale del reticolo – reticolo monoatomico monodimensionale – reticolo monodimensionale con base 2 – curve di dispersione — modi di vibrazione del reticolo : acustico e ottico – fononi come quanti di vibrazione reticolare



Lezione 8: Proprietà dei materiali semiconduttori

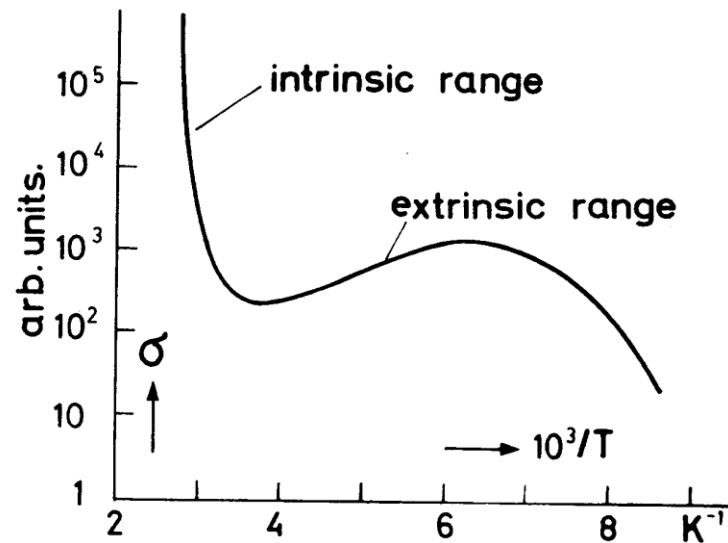
semiconduttori intrinseci ed estrinseci

Descrizione delle proprietà elettroniche dei semiconduttori a partire dal modello a bande e da nozioni di statistica dei semiconduttori

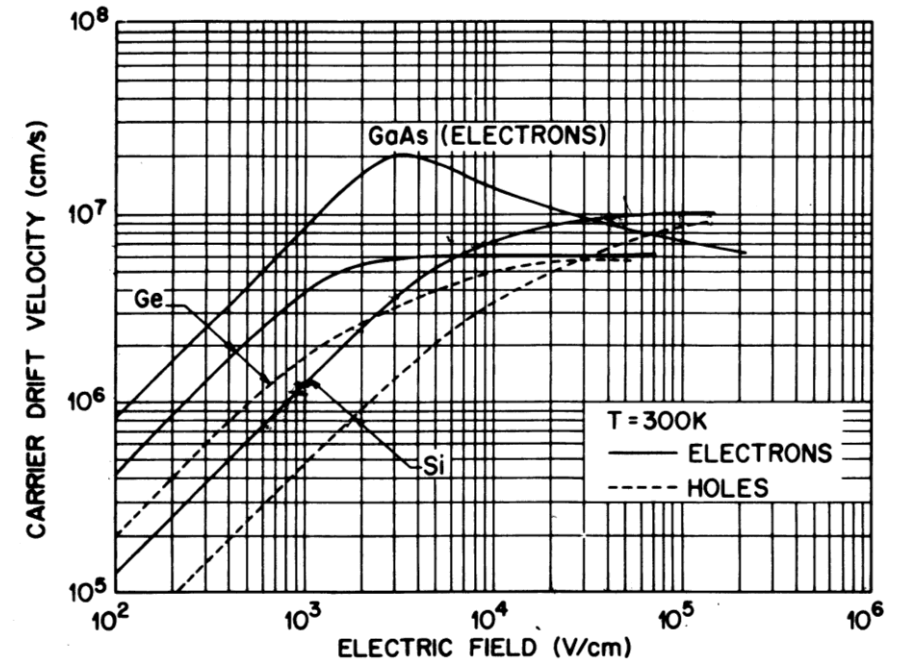


Lezione n. 9: Proprietà di trasporto nei semiconduttori

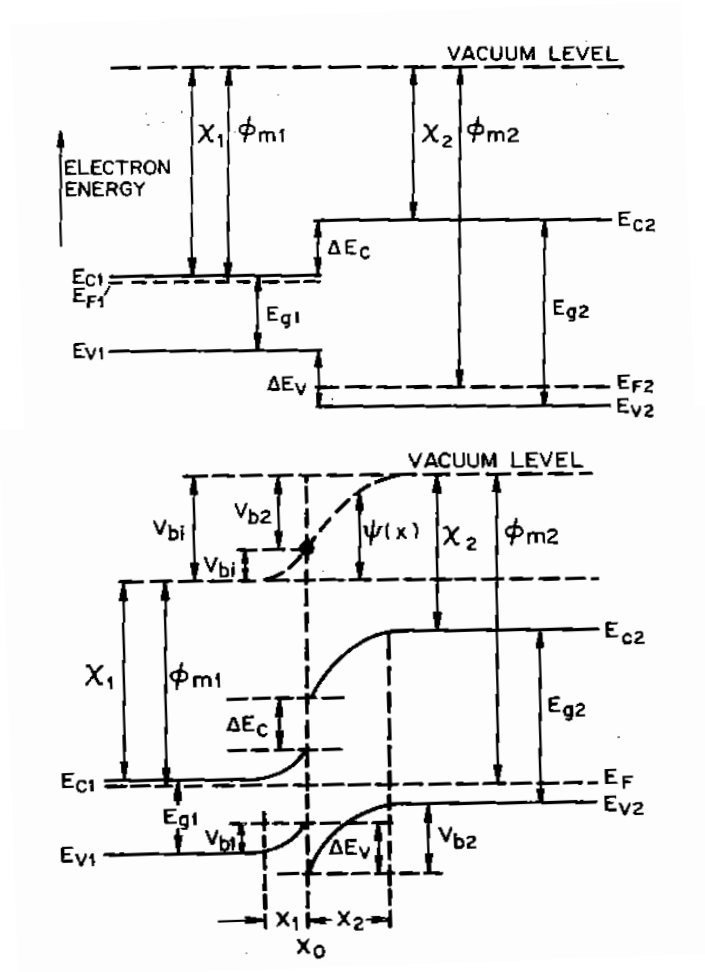
conducibilità elettrica del semiconduttore in funzione della temperatura



velocità del portatore in funzione del campo elettrico

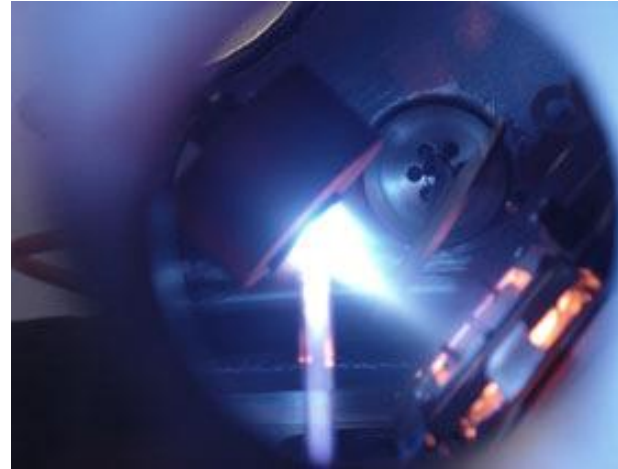


Lezione 10: leghe di semiconduttori - interfacce tra semiconduttori

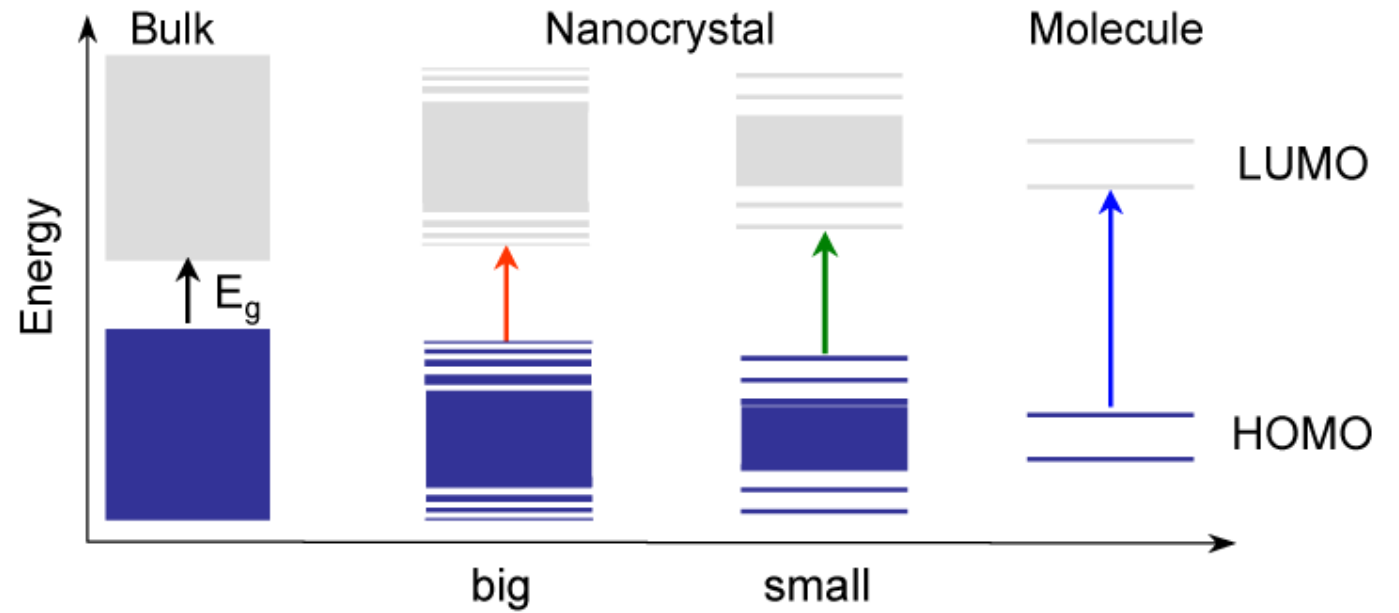
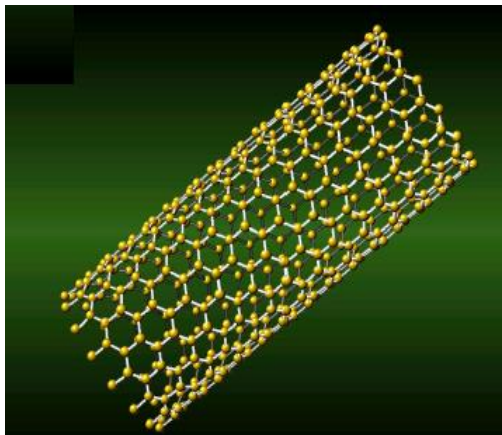
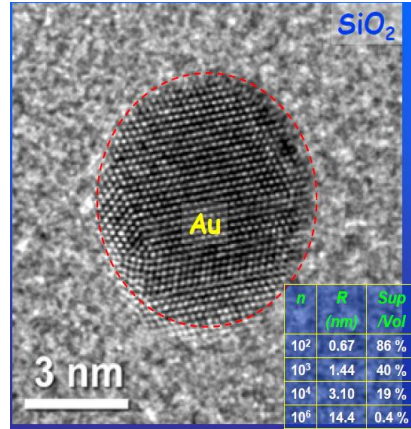


Introduzione ai film sottili ed ai dispositivi a omo- ed etero-giunzione

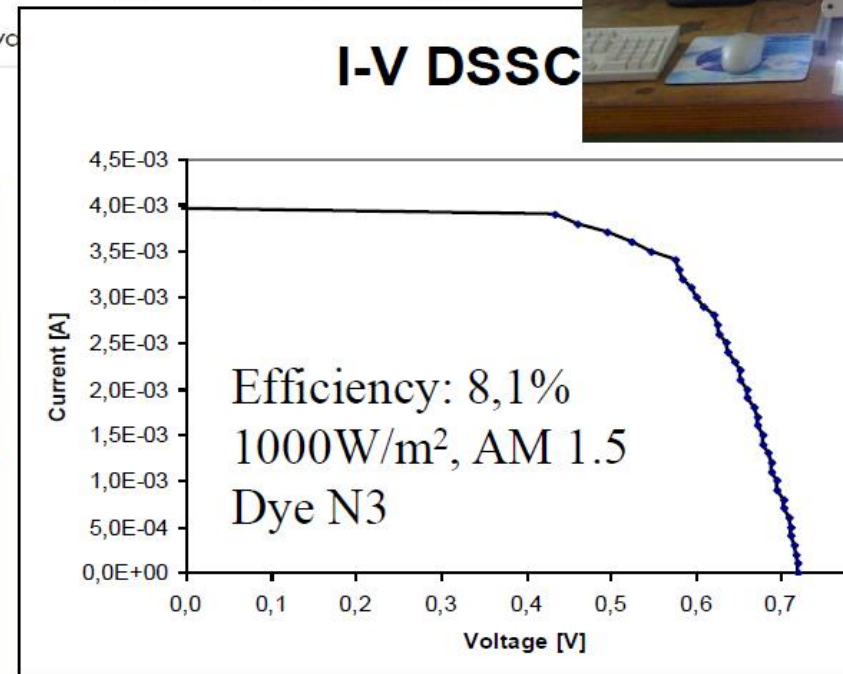
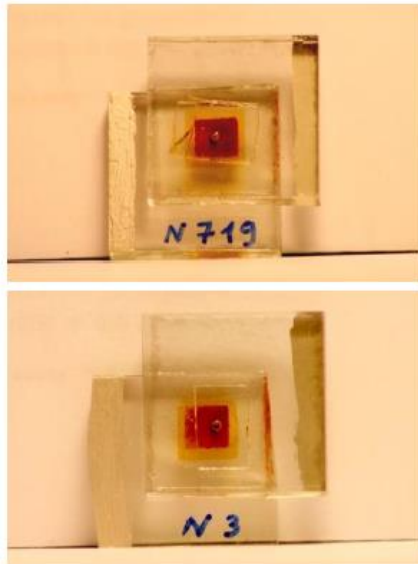
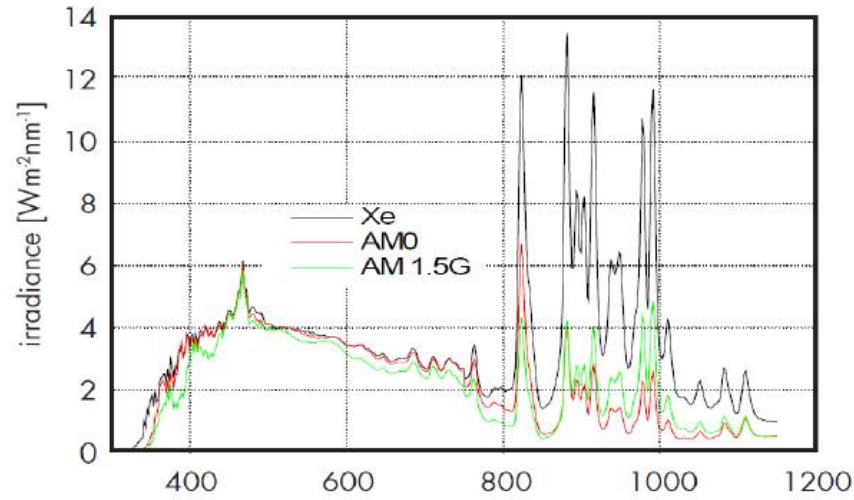
Film sottili a semiconduttore: metodi di crescita, proprietà e applicazioni



Lezione 11: Semiconduttori nelle nanotecnologie



Laboratorio: caratterizzazione elettrica di vari dispositivi a semiconduttore (celle solari, sensori)



Celle Solari di nuova generazione

Bibliografia del corso

Testo del corso:

- **Principi di Fisica dei Semiconduttori** , Mario Guzzi, Hoepli Ed. (2013), eBook scaricabile da Google Play Libri
- **Appunti del corso scaricabili sul sito** <http://www2.de.unifi.it/Fisica/Bruzzi/fss.html>

Altri testi consigliati:

- **Introduzione alla Fisica dello Stato Solido**, Kittel, Casa Editrice Ambrosiana, 2008
- **Physics of Semiconductor Devices**, S.M.Sze, Wiley, New York, 2007
- **Introduction to Solid State Physics**, Oxford University Press, 2015
- **Fundamental University Physics** , Volume III Quantum and Statistical Physics, Alons Finn Addison Wesley, 1968
- **Materials Concepts for Solar Cells** Thoma Dittrich, Imperial College Press (2015) (laboratorio)