

MEDICIÓN DE LA BANDA PROHIBIDA DEL SILICIO

Amador Ana y Rausch Fernando

Departamento de física, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

Nuestro trabajo consistió en medir el ancho de la banda prohibida del Silicio. Para realizar nuestra experiencia utilizamos la técnica de Van Der Pauw⁽³⁾ en una muestra del material, estudiando el comportamiento de la resistividad en función de la temperatura. Obtuvimos un valor de (1.26 ± 0.01) eV en un rango de temperatura de 380 a 507 k.

I. Introducción

Una propiedad importante de los sólidos es su conductividad eléctrica. Algunos materiales, conocidos tradicionalmente como aislantes, son muy malos conductores de electricidad. Dentro de esta clasificación se encuentran el diamante y el cuarzo. Otros sólidos son muy buenos conductores de electricidad. En este grupo están los metales como el cobre y la plata. Como una medida cualitativa de su diferencia, la conductividad eléctrica del cobre a temperatura ambiente es de 10^{20} veces mayor que la del cuarzo. Entre estos dos extremos hay una tercera clase de sólidos, llamados *semiconductores*. Aunque los semiconductores son conductores eléctricos mucho más pobres que los metales, es un hecho experimental que su conductividad aumenta con la temperatura, mientras que la de los metales disminuye con la temperatura.

Los electrones de los átomos pueden ocupar sólo ciertos niveles de energía. En una red, sin embargo, los niveles de energía están modificados y los electrones se mueven dentro de ciertas *bandas de energía*. Los buenos conductores de electricidad son aquellos sólidos cuya banda superior (banda de conducción) sólo está ocupada parcialmente. Mientras que en los aislantes la banda de menor energía (banda de valencia) está completa y separada de la siguiente banda vacía por una banda prohibida

de unos cuantos eV de energía (por ejemplo en el diamante es de alrededor 6 eV).

La misma idea se aplica a los semiconductores. Éstos al igual que los aislantes tienen la banda de valencia completa. Sin embargo, la banda prohibida que hay entre la banda de valencia y la de conducción es mucho menor que en los aislantes (alrededor de 1 eV). Esta separación pequeña hace que sea mucho más fácil excitar térmicamente los electrones de la banda de valencia a la banda de conducción. A medida que aumenta la temperatura, hay más electrones capaces de “saltar” a la banda siguiente. Al ocupar parcialmente la banda de conducción los electrones se comportan como en los metales y en la banda de valencia los estados vacíos o huecos, actúan de modo parecido pero como si se tratara de electrones positivos. Así se obtiene conducción eléctrica de los electrones excitados en la banda de conducción y de los huecos de la banda de valencia. En consecuencia la conductividad aumenta rápidamente con la temperatura. Suponiendo que el grado de impurezas de la muestra no es muy alto la dependencia de la conductividad con la temperatura

$$\sigma = A \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (1)$$

puede expresarse mediante la siguiente ecuación

donde E_g es el ancho de la banda prohibida de energía (band-gap), k la constante de Boltzman, T la temperatura y A una constante. Mediante un fito lineal al gráfico del $\ln(\sigma)$ en función de $1/T$ se obtiene como pendiente $-E_g/2k$, de donde obtenemos el valor de E_g .

Debido a que el ancho de la banda prohibida tiene un comportamiento lineal con la temperatura (sólo a temperaturas muy bajas se observa un comportamiento cuadrático. Ver figura 1) se tiene que $E_g(T) = E_g(0) + m \cdot T$. Al reemplazar en la ecuación 1 resulta:

$$\sigma = A * e^{\frac{E_g(0)}{2k} \frac{1}{T}} e^{\frac{m}{2k} T} = A' e^{\frac{E_g(0)}{2k} \frac{1}{T}}$$

o sea,

$$\sigma(T) = A' e^{\frac{E_g(0)}{2k} \frac{1}{T}}$$

Con esto aclaramos que el valor obtenido de E_g es una extrapolación lineal a 0K, que es levemente mayor que su valor real, como puede observarse en la figura 1.

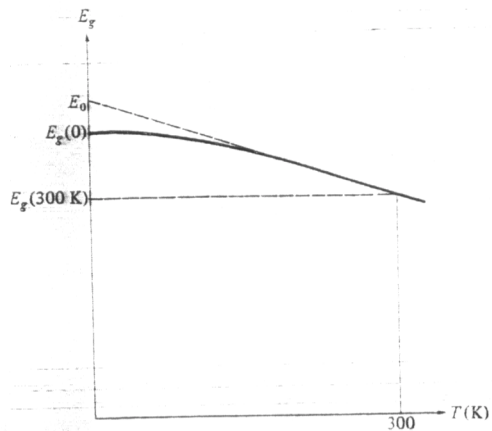


Figura 1: Comportamiento típico del band-gap con la temperatura en un semiconductor

II. Descripción del experimento

Para obtener la conductividad lo que hicimos fue medir la resistividad, que es su inversa multiplicativa, para lo cual utilizamos la

técnica de Van der Pauw. Colocamos una muestra del material con cuatro contactos como se observa en la figura 2. Inyectamos corriente por dos de ellos y medimos la caída de tensión sobre los otros dos. Para esto usamos una continua de 30 Volts.

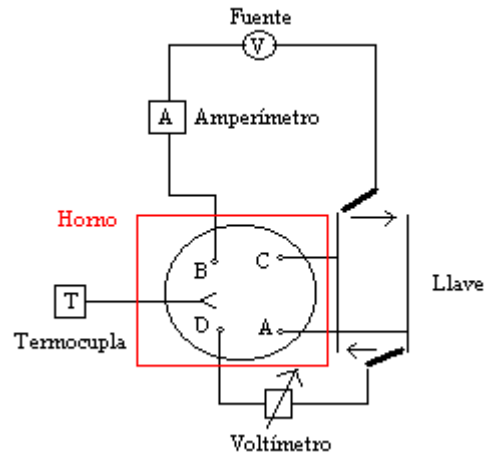


Figura 2: Dispositivo experimental utilizado para la medición de ρ (técnica de Van der Pauw)

Repetimos la medición sobre otra configuración haciendo uso de una llave que invertía los contactos. Realizando esto podemos definir dos resistencias:

$$R_{AB,CD} = \frac{V_{CD}}{I_{AB}} \quad R_{BC,AD} = \frac{V_{DA}}{I_{BC}} \quad (2)$$

Éstas relaciones satisfacen la siguiente ecuación (ver Referencia [1]):

$$e^{\frac{R_{AB,CD} \cdot d \cdot \pi}{\rho}} + e^{\frac{R_{BC,AD} \cdot d \cdot \pi}{\rho}} = 1 \quad (3)$$

En la ecuación anterior d es el espesor de la muestra y ρ es la resistividad que debemos calcular.

Para eliminar los potenciales de contacto de V_{CD} y V_{DA} pasamos corriente en ambos sentidos, ya que el potencial leído no es el de la muestra.

Luego como

$$V_{leído}(\pm I) = V_{muestra}(\pm I) + V_{contacto} \quad (4)$$

obtenemos $V_{muestra}$ como:

$$V_{muestra} = \frac{V_{leído}(I) - V_{leído}(-I)}{2} \quad (5)$$

III. Resultados y análisis

Una vez eliminados los potenciales de contacto de $R_{AB,CD}$ y $R_{BD, AC}$ determinamos la resistividad en función de la temperatura resolviendo la ecuación 3 con el Solver de Microsoft Excel.

Si bien la ecuación (1) utiliza la conductividad σ , es más conveniente utilizar $\rho = 1/\sigma$ para obtener un valor de la banda prohibida de energía (E_g), siendo éste un camino más directo. Si se utiliza $\sigma = 1/\rho$, entonces $\Delta\sigma = 1/\rho^2 \cdot \Delta\rho$, por lo cual hay una gran propagación de error para valores pequeños de ρ .

Para calcular E_g teníamos dos opciones:

1. graficar $\ln(\rho)$ vs $1/T$ y ajustar esto con una función lineal, donde la pendiente es $E_g/2k$.
2. graficar ρ vs $1/T$ y ajustar esto con una función exponencial de la forma

$$\rho = \rho_{\infty} + e^{\frac{E_g}{2kT}}$$

Al comparar los valores obtenidos según las dos opciones vemos que difieren en un 27,7%, que ya no las hace comparables y nos obliga a decidir cuál de los dos ajustes es el más adecuado y/o confiable. Para comparar los ajustes, en primer lugar tomamos los valores

adquiridos por el ajuste lineal y los transformamos en los valores correspondientes del ajuste exponencial, con los que construimos la figura 3.

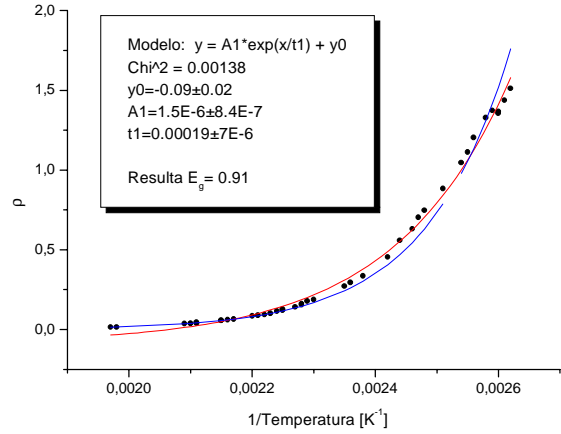


Figura 3: Comparación de los valores entregados por el ajuste lineal (azul) y exponencial (rojo).

En la figura 3 puede observarse que los datos entregados por el ajuste lineal se convierten en un mejor ajuste que el exponencial, fundamentalmente para temperaturas altas (valores bajos de $1/T$), zona donde las alteraciones de las impurezas del material se vuelven despreciables, y por lo tanto, esta es la zona de mayor interés.

Para cuantificar este hecho cualitativo calculamos, punto a punto, la diferencia del valor de la resistividad ρ y el valor de los ajustes. En la figura 4 se muestran estas diferencias, siendo las del ajuste lineal en general más pequeñas que las del ajuste exponencial. Tomando un promedio obtenemos que el ajuste exponencial tiene una diferencia promedio de 0,058 y el ajuste lineal sólo de 0,042. Esto refleja lo observado en la figura 4.

Concluimos que el mejor ajuste es el lineal (opción 1) con el que obtenemos el siguiente valor para el ancho de banda prohibida del Silicio a una temperatura de 0K:

$$E_g = (1.26 \pm 0.01) \text{ eV}$$

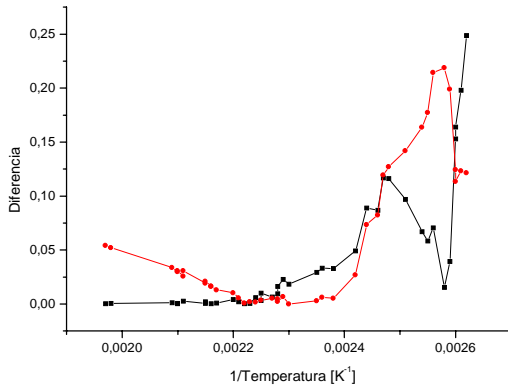


Figura 4: Diferencia del valor de la resistividad ρ y el valor del ajuste lineal (negro) y exponencial (rojo).

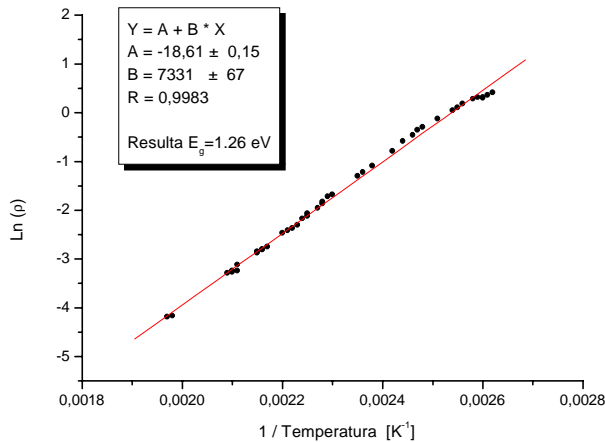


Figura 5: Ajuste lineal de $\ln(\rho)$ vs. $1/T$

El valor tabulado del E_g del Silicio a 0 K es de 1.17 eV y el tabulado de una extrapolación del comportamiento lineal es de 1.2 eV. La diferencia con el valor medido se debe a un error sistemático en la toma de mediciones, ya que al analizar los datos como se ve en la figura 5, se obtiene un comportamiento lineal que está de acuerdo con el modelo utilizado. Consideramos que este error sistemático se encuentra al tomar las mediciones para cada unidad de temperatura,

ya que esta no era fija sino que variaba. Para cada Kelvin se tomaron ocho mediciones de corriente y caída de tensión. Entre la primera y la última medición la temperatura de la muestra aumentaba 0.8 K, siendo lo óptimo que la temperatura no varíe. Esta diferencia de temperatura entre la primera y la octava medición fue arrastrada a lo largo de toda la toma de mediciones.

Nosotros proponemos dos soluciones para evitar este error sistemático. La primera es elevar la temperatura de la muestra de manera más lenta, esto llevaría a estar todo un día para tomar las mismas mediciones. La segunda es utilizar como fuente corriente alterna con una onda cuadrada. Esto evita hacer uso de la llave para invertir el sentido de la corriente pudiéndose tomar las mediciones a una mayor velocidad.

V. Conclusiones

El valor obtenido de la banda prohibida del Silicio es de (1.26 ± 0.01) eV para una temperatura de 0K.

El valor obtenido es mayor al valor real (1.17eV) ya que estamos utilizando un modelo lineal para E_g , que no es el que mejor ajusta a bajas temperaturas donde se observa un comportamiento cuadrático.

La diferencia con el valor tabulado de la extrapolación a 0K (1.2 eV) se debe a un error sistemático cometido en la toma de mediciones.

A pesar de esto la técnica de Van der Pauw y el sistema utilizado para obtener la conductividad del material es eficiente siempre y cuando se controle la velocidad a la que se eleva la temperatura de la muestra.

Proponemos dos soluciones para no cometer el error sistemático mencionado. La primera es tomar las mediciones aumentando la temperatura de la muestra de una manera más gradual. Esto significa elevar la temperatura de la misma de manera tal que aumente un Kelvin cada cinco minutos. La segunda solución que proponemos es utilizar como fuente corriente alterna

con una onda cuadrada de esta manera la toma de mediciones es más rápida.

VI. Referencias

- 1- D. K. de Vries y A. D. Wieck, "Potential distribution in the van der Pauw technique", American Journal of physics, vol. 63, nro. 12, diciembre 1995, páginas 1074-1078.
- 2- N. W. Ashcroft and D. Mermin, "Solid state Physics" – cap.28, Saunders College Publishing, 1976
- 3- L. J. Van der Pauw. Phillips Reserch Report, 13 L (1958)