

Medición del Band-Gap del Silicio, mediante el estudio de la dependencia de su resistividad con la temperatura.

Francisco Di Lorenzo y Alejandro Lazarte
Laboratorio 5 - 1er Cuatrimestre del 2000

En el presente trabajo determinamos la energía de la banda prohibida o band-gap del silicio. Para ello estudiaremos el comportamiento de la resistividad de una muestra de ese material en función de la temperatura utilizando la técnica de Van der Pauw. El valor medido resulta un 10 % menor al valor hallado en la bibliografía.

I. Introducción

Algunos materiales, tales como el silicio y el germanio, no se comportan como conductores ni como aisladores eléctricos, se los llama semiconductores. Su conductividad varía mucho en función de las condiciones a las que se somete el material tales como la temperatura. Los electrones de estos materiales, tienen un comportamiento altamente cuántico, se disponen en bandas de energía definidas separadas por bandas inaccesibles. En el estado fundamental los electrones llenan la banda de menor energía, denominada de valencia. La siguiente banda de energía permitida, la de conducción, se encuentra vacía. Los electrones de la banda de valencia no tienen movilidad por lo que para tener conducción eléctrica debemos tener electrones en la banda de conducción. Para ello es necesario que los electrones superen la diferencia de energía entre las bandas llamada band-gap.

En el caso del silicio, material que estudiamos, se pueden generar electrones libres en la banda de conducción y huecos en la banda de valencia, que los podemos considerar, como partículas clásicas, correspondientes a lugares en donde faltan electrones. La creación de estos pares de electrones-huecos, pueden generarse de manera diferente, nosotros nos centraremos en la dependencia de su número con la temperatura.

Suponiendo al material en un estado de alta pureza, podemos considerar que la conductividad del material estará determinada por la cantidad de pares electrón-huecos. Por lo tanto, la dependencia de la conductividad con la temperatura, tendrá la siguiente forma (ver referencia 1):

$$s = C \cdot e^{-\frac{E_g}{kT}} \quad (1)$$

Siendo E_g , la energía de band-gap, C una constante (que relaciona carga, movilidad, densidad de portadores y frecuencia de choques), k la constante de Boltzman, y T la temperatura. Esta fórmula es válida mientras el aporte de las impurezas a la conductividad sea despreciable frente al aporte de los pares electrón-hueco, a temperatura ambiente esto no se cumple pero, como el número de impurezas es constante y

la cantidad de pares aumenta rápidamente con la temperatura, la fórmula es aplicable a partir de los 400 °K.

Para el cálculo de la energía de band-gap, se realiza un ajuste lineal a la recta resultante de graficar el $\ln(\sigma)$ en función de $1/2kT$. La pendiente obtenida es $-E_g$.

II. Consideraciones previas a la medición

1. Método de medición

La conductividad del material es la inversa de la resistividad, por lo tanto es equivalente medir cualquiera de las dos. Medimos ésta última utilizando la técnica de van der Pauw².

Como la muestra a estudiar, es una lámina delgada de espesor d , que supongamos constante, se procede de la siguiente manera. Se disponen cuatro contactos sobre la muestra en forma periférica. Se inyecta corriente por dos de ellos y se mide la caída de potencial entre los otros dos. Ver figura 1.

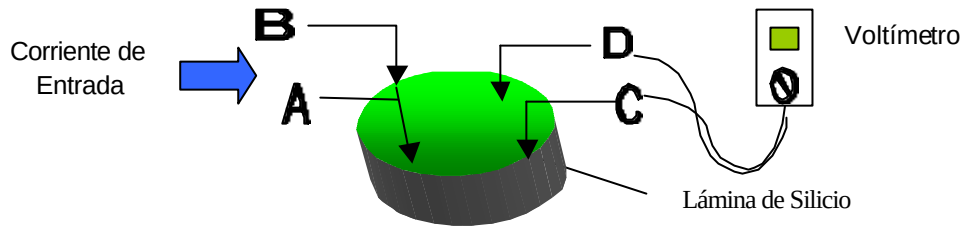


Figura 1: Esquema de los contactos utilizados en la técnica de Van der Pauw

Es necesario realizar esta medición en dos configuraciones distintas. Por ejemplo, si llamamos a los contactos A B C y D, como en la figura 1, se puede medir primero la caída de potencia entre C y D al circular corriente entre A y B, y luego la caída entre A y C al circular corriente entre B y D. Entonces, se definen las siguientes resistencias:

$$R_{ABCD} = \frac{V_{CD}}{I_{AB}} \text{ y } R_{BDCA} = \frac{V_{AC}}{I_{BD}} \quad (2)$$

Con las relaciones anteriores, puede verse que se satisface (ver referencia 2):

$$\frac{-R_{ABCD} dp}{e^r} + \frac{-R_{BDCA} dp}{e^r} = 1 \quad (3)$$

Donde p es la resistividad que se desea calcular.

2. Potenciales de contactos y termoelectricos

Para una mayor precisión en los cálculos a realizarse, debemos eliminar potenciales de contacto y termoelectricos. Éstos se deben a los contactos entre la lámina de silicio y los electrodos colocados sobre ella. La eliminación requiere medir primero la diferencia de potencial entre los electrodos al pasar corriente en un sentido, y luego medirla al pasar corriente en el otro sentido. Esto se puede hacer con usando corriente continua mediante una llave inversora o usando corriente alterna. El método de eliminación también depende del tipo de fuente utilizada.

Si se utiliza una fuente de corriente, el valor “real” de tensión sobre la muestra, $V_{muestra}$, se obtendrá promediando los valores de tensión “leídos por el voltímetro” en uno y otro sentido de la corriente aplicada. Resultando ser:

$$V_{muestra} = \frac{V_{leido}(I) - V_{leido}(-I)}{2} \quad (4)$$

Cada V_{leido} está dado la temperatura a la que se encuentra la muestra al ser leído. Por ello, aceptaremos sólo las lecturas que difieran en no más del 10 % como máximo. De esta forma eliminamos los potenciales de contacto y termoelectricos.

Debido a la alta resistencia de la muestra a temperatura ambiente, no nos es posible utilizar una fuente de corriente ya que no tienen potencia suficiente. En su lugar utilizamos una fuente de voltaje. El problema al hacer este cambio radica en que las corrientes en un sentido y en el otro no son las mismas, es decir no tenemos $I_1 = I_2$. Por lo tanto es necesario utilizar una fórmula distinta para determinar $R_{AB,CD}$. Plantando el problema igual que antes pero suponiendo I_1 distinto de I_2 se llega a la fórmula 5 (ver apéndice A).

$$R_{AB,CD} = R_1 - \frac{R_2 - R_1}{\frac{I_1}{I_2} - 1} \quad (5)$$

Donde $R=V/I$ y los subíndices indican los sentidos de la corriente.

III. Aplicación de la técnica

Para alimentar la muestra utilizamos una fuente de Voltaje de 7,00 Volts. La corriente de entrada fue medida colocando una resistencia conocida, de $20K\Omega$, en serie con los electrodos A y B y midiendo la caída de potencial sobre ella utilizando la placa adquisidora de datos de la PC. (Ver figura 2).

La temperatura de la muestra la determinamos usando una termocupla de Chromel- Alumel (T). Como los valores de potencial que se registran son pequeños, fue necesario amplificarlos antes de tomarlos con la PC. (Ver figura 2). Para calibrar la termocupla usamos un multímetro calibrado de fábrica.

La tensión de salida, en los contactos C y D, fue medida directamente por la PC.

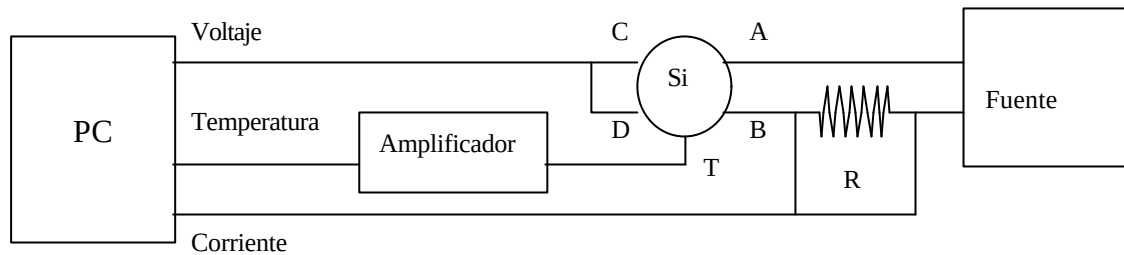


Figura 2: Esquema del dispositivo utilizado para determinar la conductividad.

Para variar la temperatura, usamos la resistencia de una plancha alimentada por un variac. Para que el calentamiento fuera homogéneo, la muestra, la termocupla y el calentador se colocaron en el interior de un horno de ladrillo.

Para eliminar los potenciales de contacto procedimos de dos formas. Primero usamos corriente continua, esto nos obligó a hacer dos mediciones una con la corriente en el sentido AB y otra en sentido BA. Luego utilizamos corriente alterna lo que nos permitió, al utilizar una onda cuadrada, eliminar los potenciales de contacto comparando las mediciones en una mitad del ciclo con la otra.

Una vez realizada la medición en esta configuración dejamos enfriar la muestra, intercambiamos los electrodos A y D y repetimos el experimento en la nueva configuración.

Las mediciones con corriente continua no presentaron mayores problemas técnicos, en cambio, para realizar la medición con corriente alterna fue necesario determinar varios parámetros: la velocidad de calentamiento, la frecuencia de la onda, y la velocidad de muestreo de la placa adquisidora de datos. La frecuencia fue elegida de modo que pudiéramos tomar varias mediciones dentro de un ciclo y así poder eliminar el ruido promediando esas mediciones. La duración del experimento está determinada por la velocidad de calentamiento y el rango de temperaturas a estudiar. Necesitamos que la temperatura no varíe mucho dentro de un ciclo para poder realizar el promediado, pero también necesitábamos barrer un rango amplio de temperatura (de los 400 °K a los 600 °K). Probamos varias veces hasta que encontramos que alimentando el calentador con 220 V, la muestra tardaba unos 10 minutos en calentarse. Esto nos permitía una velocidad de muestreo de 12 Hz que, para una frecuencia de 1 Hz nos permitía tomar promedios entre 6 valores. Además a lo largo de un ciclo, la temperatura no variaba más de medio grado lo que nos permitía considerar la temperatura constante al promediar.

III. Análisis y Resultados

La principal dificultad en el análisis de los datos radica en que es necesario correlacionar los datos de varias series de mediciones: en el caso de corriente continua, 4 series, y en el de corriente alterna, 2 series. Esto es complicado porque el calentamiento de la muestra en las distintas mediciones es distinto. A pesar de que empezábamos las mediciones a los 100 °C y que siempre aplicábamos la misma tensión

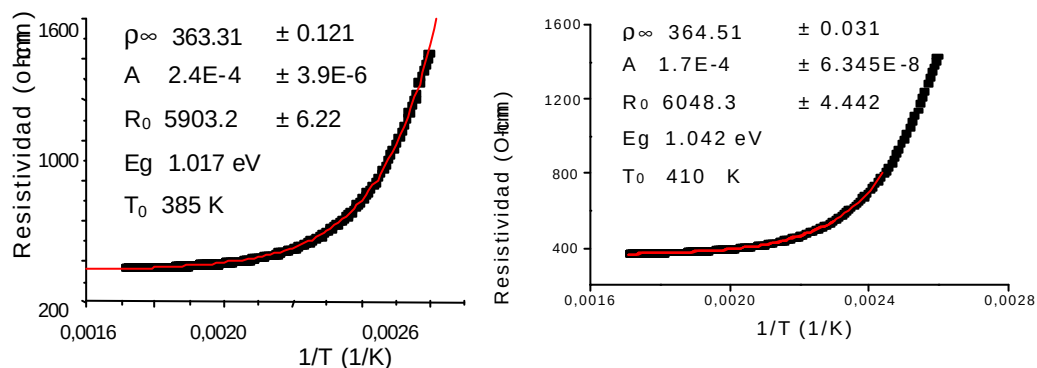
al calentador, la temperatura en función del tiempo varía en cada caso. Esto se debe a la forma exponencial del calentamiento cuando se entrega una potencia constante, pequeñas variaciones en la temperatura inicial y la potencia entregada hacen que la curva cambie bastante.

Esto nos obligó a seleccionar las mediciones de las distintas series que tuvieran temperatura similar. El problema es que al no corresponder todas las mediciones a la misma temperatura esto nos introduce un error en el cálculo difícil de estimar. Aunque es evidente que en el caso de la corriente continua la incerteza será mayor ya que se necesitan más mediciones para determinar la resistividad y por lo tanto la incertidumbre acerca de la temperatura de la medición es mayor.

Una vez eliminados los potenciales de contacto y correlacionadas las mediciones 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. A continuación, para calcular el Band Gap, graficamos ρ vs $1/T$ y lo ajustamos con una función exponencial de la forma:

$$r = r_{\infty} + A * e^{\frac{E_g}{2K} \frac{1}{T}}$$

donde ρ infinito corresponde a la resistividad a temperatura infinita (ya que A resulta mucho menor que ella) y E_g se calcula como el exponente de la exponencial por 2K. El ajuste lo realizamos de esta forma ya que se cometen menos errores al no tener que realizar un ajuste en escala logarítmica.



Gráficos 1 y 2: Ajustes de la resistividad en función de la inversa de la temperatura absoluta. R_0 es el coeficiente de la exponencial y es igual a $E_g/2K$. T_0 es la temperatura a partir de la que se realiza el ajuste. Ambos gráficos corresponden a las mediciones realizadas con corriente alterna, se observa que el valor de E_g varía con la temperatura de corte del ajuste.

Al ajustar la medición realizada con corriente continua obtuvimos un valor para el Band Gap entre 0,85 y 0,92 eV según desde qué temperatura iniciamos el ajuste. Mientras que con las mediciones de corriente alterna obtuvimos valores entre 1,01 y 1,043 eV. En general al considerar una temperatura inicial más alta el valor del exponente, y por lo tanto de E_g , aumentaba hasta estabilizarse al alcanzar una temperatura inicial de 400 K. No sólo consideramos que los cálculos con mayor temperatura inicial son más precisos debido a las condiciones de validez de la fórmula 1, sino

que también hay que tener en cuenta que la variación de temperatura es más rápida al principio de la medición. Esto dificulta la correlación de datos y resta validez a la suposición de que en un período de la corriente alterna la temperatura es constante. Todas estas consideraciones concuerdan con que el hecho de que el valor aceptado del band-gap del silicio es de 1,12 eV (ver referencia 1, página 566) a temperatura ambiente.

IV. Conclusiones

El comportamiento de la resistividad del silicio en función de la temperatura resultó ser el esperado, aunque el valor calculado para el band-gap es menor que la cifra aceptada. El comportamiento de los valores del ajuste sugiere que esta discrepancia se debe a la incerteza introducida al tener que relacionar los datos de las mediciones en distintas configuraciones. Debido a que esto es un elemento fundamental de la técnica de Van der Pauw, necesario para independizarse de la geometría de la muestra, no es posible evitarlo. Sin embargo es posible disminuir el error al utilizar corriente alterna ya que es necesario realizar y comparar menos mediciones. Otro resultado que confirma el modelo es que al eliminar los puntos de menor temperatura el resultado del ajuste se acerca al valor correcto. Esto indica que el aporte de las impurezas a los portadores de carga disminuye con la temperatura tal como habíamos supuesto. Aunque la presencia de dichas impurezas puede contribuir a que el resultado sea menor al esperado, esto se debe a que éstas disminuyen el ancho de la banda prohibida al introducir nuevos niveles electrónicos. En nuestro caso, impurezas de B en Si, la disminución es de 0,046 eV (ver referencia 1 Pág. 580) aproximadamente la mitad de la discrepancia observada. Podemos concluir que la técnica de Van der Pauw es un buen método para determinar la resistividad de un material. La incerteza al determinar ρ resultó ser menor al 10%, siendo la principal causa de error las dificultades encontradas al no calentarse la muestra de la misma manera en las distintas mediciones relacionadas. Para disminuir este problema convendría variar linealmente la temperatura del material en el tiempo ya que esto facilitaría el análisis de los datos. Asimismo sería conveniente que la variación fuera lo más lenta posible, para asegurar la homogeneidad de temperatura en la muestra.

VI. Referencias

1. N. W. Ashcroft and D. Mermin, “Solid State Physics”, Saunders College Publishing, 1976 562-587.
2. D. K. De Vrles and A. D. Wieck, “Potential distribution in the van der Pauw technique”. Am. J. Physics 63 (12), December 1995.