

# Determinación del Band-gap en Si

Pablo Pérez y Mariana Zeller

[pablperrez@yahoo.com](mailto:pablperrez@yahoo.com), [marianzeller@hotmail.com](mailto:marianzeller@hotmail.com)

Laboratorio 5-FCEN-UBA-Curso de verano 2002

*En el presente trabajo se determinó el band-gap o ancho de banda prohibida de una muestra de Silicio mediante el estudio de su resistividad en función de la temperatura utilizando el método de Van der Pauw con un simple dispositivo que puede construirse con un bajo costo y con elementos usualmente encontrados en un laboratorio para estudiantes. Se encontró que dicho valor es de 1,25 eV.*

## Introducción

Según la teoría de bandas existen bandas de conducción y bandas de valencia. Estas bandas son grupos de estados cuánticos que corresponden a los niveles de energía más altos del cristal.

El intervalo de energía entre la banda de conducción y la de valencia es el denominado band-gap. El band-gap es la energía necesaria para llevar un electrón de la banda de valencia a la de conducción.

Dependiendo de cuántos electrones haya en cada una de las bandas los materiales se comportarán como aislantes, conductores o semiconductores.

En el caso del silicio ( material semiconductor ), existen electrones en la banda de conducción y huecos en la de valencia. El número de pares huecos-electrones varía con la temperatura. En este caso, la conductividad del material viene dada por :

$$\sigma = c \cdot \exp\left(\frac{-E_g}{2KT}\right) \quad (1)$$

donde  $E_g$  es la energía del band-gap; K la constante de Boltzman; T la temperatura; y c una constante que puede considerarse independiente de la temperatura si  $E_g \gg KT$ .

La fórmula (1) es aplicable cuando el grado de impurezas e imperfecciones en la red no es muy alto, pues entonces la movilidad está determinada principalmente por la dispersión de los portadores de carga debido a oscilaciones acústicas de la red para temperaturas superiores a 400K. También sabemos que

$$\rho = 1/\sigma \quad (2)$$

donde  $\rho$  es la resistividad.

Si graficamos  $\ln \sigma$  en función de  $-\frac{1}{2KT}$  encontramos una recta cuya pendiente es  $E_g$ .

## Desarrollo experimental

El experimento consistió en determinar la variación de la resistividad de una muestra de silicio hiperpuro en función de la temperatura.

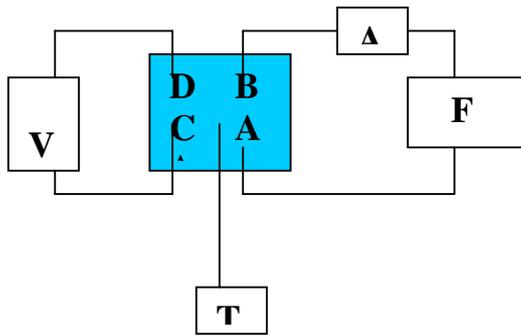
Se calculó la resistividad de una muestra de geometría plano paralela ,de espesor d, mediante la técnica de van der Pauw. La técnica consiste en enviar corriente por dos de los cuatro electrodos que posee la muestra conectados a sus bordes y medir la diferencia de potencial por los otros dos , para dos configuraciones distintas. Con ellas se pueden definir:

$$R_{AB,CD} = V_{DC} / I_{AB} \text{ y } R_{BC,DA} = V_{AD} / I_{BC} \quad (3)$$

y ellas están relacionadas con  $\rho$  mediante la siguiente fórmula (4)

$$\exp\left(-\pi R_{AB,CD} d / \rho\right) + \exp\left(-\pi R_{BC,DA} d / \rho\right) = 1$$

donde  $d$  es el espesor de la muestra,  $\rho$  la resistividad y  $R_{ij,kl}$  las resistencias calculadas. Se introdujo, para ello, la muestra en un horno eléctrico y se varió la temperatura utilizando un variac; controlando la misma con una termocupla tipo K y un voltímetro. (ver figura 1)



**Figura 1:** V: voltímetro; T: termocupla tipo K, F: fuente de tensión, A: amperímetro. En azul la muestra de silicio.

Manteniendo la temperatura constante se midieron  $V_{DC}$ ;  $V_{AD}$ ;  $I_{AB}$  y  $I_{BC}$  y se calcularon  $R_{AB,CD}$  y  $R_{BC,DA}$ .

Para eliminar potenciales termoelectrónicos y de contacto en el circuito ( $V_{TyC}$ ) se midieron además  $V_{mult.}(I)$  y  $V_{mult.}(-I)$ , pues:

$$\begin{aligned} V_{mult.}(I) &= V_{muestra} + V_{TyC} \\ V_{mult.}(-I) &= -V_{muestra} + V_{TyC} \end{aligned} \quad (5)$$

Entonces, para anular dichos efectos:

$$V_{muestra} = \frac{V_{mult.}(I) - V_{mult.}(-I)}{2} \quad (6)$$

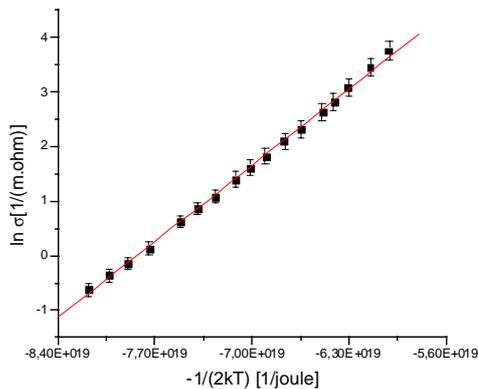
Con los datos obtenidos se resolvió numéricamente la ecuación (4) y se obtuvo  $\rho$  para distintas temperaturas.

## Análisis de resultados

Se realizó una serie de mediciones cubriendo un rango de temperaturas entre 126 y 341°C. Según la teoría para bajas temperaturas, por debajo de los 100°C aproximadamente, la resistividad aumenta al aumentar la temperatura debido a la mayor agitación térmica de los electrones del material. Si se sigue aumentando la temperatura comienza a verse el efecto de pasaje de electrones de la banda de valencia a la de conducción, reduciendo así la resistividad. Este último efecto se comenzó a ver a partir de los 120°C aproximadamente. Sin embargo, recién a partir de los 170°C la conductividad aumentaba (con el aumento de la temperatura) siguiendo la teoría de la fórmula (1) expuesta en la introducción. Esta variación del comportamiento de la conductividad para bajas y altas temperaturas se comprobó al tomar mediciones entre 40 y 340°C con un espaciado aproximado de 10°C.

En cada medición se fijó la temperatura y se procedió a medir las resistencias  $R_{ab,cd}$  y  $R_{bc,da}$  utilizando el método de la inversión de la corriente descrito en las ecuaciones (5) y (6) para eliminar las resistencias de los contactos. Los errores obtenidos para estas resistencias fueron menores al 5%. El espesor  $d=(3,5\pm 0,1)$ mm de la pastilla circular de silicio junto con las resistencias antes mencionadas sirvieron para resolver numéricamente la ecuación (4). Para ello se utilizó un método iterativo numérico implementado con un sencillo programa en

una PC, obteniéndose finalmente la conductividad correspondiente a cada valor de temperatura. Siguiendo la fórmula (1) se grafica  $\ln \sigma$  vs  $-\frac{1}{2KT}$  de forma que la pendiente del gráfico sea la  $E_g$  buscada.



**Gráfico 1:** la pendiente de la recta que ajusta los puntos es la energía  $E_g$  de la banda prohibida. La correlación en el ajuste es de  $R=0,99933$ .

Tras ajustar los puntos con una recta se obtuvo el valor del ancho de la banda prohibida que resultó ser

$$E_g = (2,01 \pm 0,02) \cdot 10^{-19} \text{ joules} \\ = (1,25 \pm 0,02) \text{ eV,}$$

que se halla dentro del rango de valores encontrados en la bibliografía asociada al tema.

## Conclusiones

Es posible mejorar varias cosas del arreglo experimental empleado para mejorar las mediciones. En esta experiencia no se contó con ningún dispositivo que autorregulara la temperatura. Era necesario fijar el variac que alimentaba la resistencia del horno a un voltaje fijo y esperar a que se estabilizara la temperatura, para luego subir o bajar nuevamente el

variac hasta obtener la temperatura deseada. Este proceso habitualmente era muy trabajoso y obligaba a realizar las mediciones rápidamente antes de que se modificara la temperatura. Esta inestabilidad se acentúa aún más al trabajar con temperaturas altas (superiores a  $300^\circ\text{C}$ ). Al aumentar la temperatura aumenta la conductividad exponencialmente, por lo que para altas temperaturas la conductividad toma valores muy altos. En estas condiciones una vez que se lograba fijar el valor de la temperatura, pequeñas variaciones del voltaje entre los bornes (A, B, C y D) producía grandes variaciones de la corriente de prueba y ésta misma corriente entre los bornes lograba calentar la muestra desequilibrándola. Por lo tanto por encima de  $300^\circ\text{C}$ , la temperatura del silicio es un equilibrio entre el calentamiento producido por la resistencia del horno y la corriente de prueba. Esta estrecha dependencia dinámica entre los voltajes, las corrientes y la temperatura hacía que estos valores oscilaran mucho en el tiempo, dificultando así lograr una estabilidad adecuada como para realizar la medición. En consecuencia, para estudiar este fenómeno físico a altas temperaturas es necesario contar con un buen sistema de control térmico y dispositivos confiables con los que medir los voltajes y corrientes.

Por otra parte, se observó cierta asimetría entre las resistencias  $R_{AB,CD}$  y  $R_{BC,DA}$ , siendo la segunda veinte veces la primera en iguales condiciones de temperatura. Como ya se mencionó, la muestra de silicio era una pastilla circular con los contactos A, B, C y D dispuestos en forma aproximadamente simétrica sobre sus bordes. Si bien esto no contradice la técnica de Van der Pauw, podría indicar alguna falla en las conexiones que, de existir, no fue posible encontrar.

Debido a que las soldaduras y el soporte que sujetaba a la pastilla no eran de fácil desarmado, su integridad no fue verificada; así como tampoco se verificó concienzudamente la perfecta limpieza y ausencia de melladuras en la muestra. Es necesario tener todas estas consideraciones para mejorar futuras mediciones.

## **Bibliografía**

1- N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, "Solid State Physics" (Saunders College Publishing, 1976) pág 562-587.

2- D.K. de Vries and A.D. Wieck, "Potential distribution in the van der Pauw technique", Am. J. Phys. 63, 1074-1078 (1995).

3- L.J. van der Pauw, "A method for measuring specific resistivity and Hall effect of discs of arbitrary shape", Phillips Res. Report 13, 1-9 (1958).