

Halbleiterbauelemente

Vorlesung von Prof. Dr. Christian Koos¹
Institut für Photonik und Quantenelektronik (IPQ)
Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
76131 Karlsruhe

2. November 2015

¹Nicht zur Veröffentlichung. Eine Vervielfältigung dieses Typoskripts ist nicht gestattet.

Inhaltsverzeichnis

1	Grundlegende Eigenschaften von Halbleitern	3
1.1	Halbleitermaterialien	3
1.2	Kristallstruktur von Halbleitern	4
1.2.1	Chemische Bindungen in Halbleitern	4
1.2.2	Innere Strukturen von Festkörpern	6
1.2.3	Bravais-Gitter	7
1.2.4	Einheitszelle	7
1.2.5	Kristallstrukturen von Halbleitern	8
1.2.6	Kristallrichtungen und Millersche Indizes	9
1.3	Energiebänder in Halbleitern	10
1.3.1	Vom Einzelatom zum Kristall	10
1.3.2	Bandstrukturen und Bandlücke	13
1.3.3	Leitungselektronen, Löcher und Leitfähigkeit	15
2	Bandstruktur von Halbleitern	17
2.1	Quantenmechanische Grundlagen	17
2.1.1	Grundzüge der Quantenmechanik und Schrödinger-Gleichung	17
2.1.2	Zeitabhängige und zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung	19
2.1.3	Das freie Elektron	19
2.2	Das Elektron im Festkörper	21
2.2.1	Das Elektron im dreidimensionalen Potentialkasten (Sommerfeld-Modell)	22
2.2.2	Elektronen im eindimensionalen periodischen Potential	24
2.2.3	Semi-klassische Bewegungsgleichungen und effektive Masse	28
2.2.4	Bloch-Oszillationen	30
2.2.5	Elektronen im idealen dreidimensionalen Kristall	31
2.2.6	Direkte und indirekte Halbleiter	32
2.2.7	Parabolische Näherung der Bandstruktur	35
3	Eigenhalbleiter und dotierte Halbleiter	38
3.1	Eigenhalbleiter	38
3.1.1	Die Fermi-Dirac-Verteilung	39
3.1.2	Ladungsträgerkonzentrationen und effektive Zustandsdichten	39
3.1.3	Massenwirkungsgesetz	41
3.1.4	Lage des Fermi-Niveaus beim intrinsischen Halbleiter	41
3.2	Dotierte Halbleiter	42
3.2.1	Donatoren und Akzeptoren	42
3.2.2	Lage der Energieniveaus bei verschiedenen Dotanden	43
3.2.3	Besetzungswahrscheinlichkeiten von Störstellen	44
3.2.4	Konzentration der Ladungsträger bei dotierten Halbleitern	46

4	Ladungsträgertransport im Halbleiter	53
4.1	Driftstrom	53
4.1.1	Beweglichkeit der Ladungsträger	54
4.1.2	Einfluss von Dotierungen und Temperatur auf die Beweglichkeit	55
4.1.3	Einfluss von hohen Feldern auf die Beweglichkeit	55
4.1.4	Messung der Beweglichkeiten und Ladungsträgerkonzentrationen: Hall-Effekt	57
4.2	Diffusionsstrom	59
4.2.1	Herleitung der Beziehungen für den Diffusionsstrom	59
4.2.2	Die Diffusionskonstante: die Einstein-Beziehungen	60
4.2.3	Thermisches Gleichgewicht im HL mit Konzentrationsgradient (Gleichgewicht zwischen Drift- und Diffusionsstrom)	60
4.3	Einschuss von Ladungsträgern	63
4.4	Generation und Rekombination	64
4.4.1	Das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts	64
4.4.2	Die Generations- und Rekombinationsmechanismen	67
4.4.3	Trägerlebensdauer	70
4.4.4	Photoleitung und Photoleiter	74
4.5	Die Kontinuitätsgleichung	76
5	Die Grund-Gleichungen des Halbleiters	78
5.1	Die drei Halbleitergleichungen	78
5.1.1	Poisson-Gleichung	78
5.1.2	Die drei Halbleiter-Gleichungen in der Übersicht	79
5.1.3	Halbleiter-Gleichungen bei schwacher Injektion	79
5.2	Quasi-Fermi-Niveaus - ein Konzept zur Beschreibung des Nicht-Gleichgewichts	80
5.2.1	Ladungsträgerkonzentrationen und äquivalente Spannung	82
5.3	Bahngebiete	83
5.4	Zeitlicher Abbau von Ladungsträgerdichtestörungen und dielektrische Relaxation	85
5.4.1	Minoritätsträgerdichtestörung	85
5.4.2	Majoritätsträgerdichtestörung:	86
5.5	Räumlicher Abbau von positiven/negativen Ladungsträgerdichtestörungen - Debye-Länge	88
5.6	Räumlicher Abbau von neutralen Ladungsträgerdichte\störungen - Diffusionszone	91
5.6.1	Diffusionsströme und Diffusionslänge	92
5.6.2	Kurze Diffusionszone	93
5.6.3	Bandverlauf in der Diffusionszone	94
5.6.4	Wechselstromverhalten:	95
5.6.5	Diffusionskapazität	98
5.7	Zusammenfassung	99
6	Der pn-Übergang	101
6.1	Einleitung	101
6.2	Der pn-Übergang im Gleichgewicht	101
6.3	Der pn-Übergang im Nichtgleichgewicht (Stromfluss)	108
6.3.1	Fall: $U > 0$ in Flussrichtung (Forward-Biased)	109
6.3.2	Fall: $U < 0$ in Sperrrichtung (Reverse-Biased)	109
6.3.3	Ströme	112
6.4	Reale Dioden-Kennlinien	116
6.4.1	Diskussion der Hochinjektionszone	118
6.4.2	Diskussion der Generations- und Rekombinationsströme in der RLZ	120
6.4.3	Durchbruchmechanismen in pn-Übergängen	122
6.5	Schaltverhalten von Dioden	127
6.6	pin-Diode	129

7	Spezielle pn-Dioden	133
7.1	Durchbruchdioden	133
7.1.1	Temperaturabhängige Diode	133
7.1.2	Zener Diode	133
7.1.3	Transorb (Suppressor Dioden)	134
7.1.4	Varistor	135
7.2	Varaktor-Diode	136
7.3	p^+n^+ -Leistungsgleichrichter	138
7.4	Photodiode	139
7.4.1	Wirkungsweise der Photodiode	140
7.4.2	Die pin-Photodiode	141
7.4.3	Empfindlichkeit und Quantenwirkungsgrad	143
7.4.4	Photodioden-Modulationsgeschwindigkeit	146
7.4.5	Beispiel: 40 Gb/s pin-Heterostruktur-Photodiode	149
7.5	Lawinen-Photodiode	150
7.6	Uni-Traveling-Carrier PhotoDiode (UTC PD)	151
7.7	Solarzelle	151
7.8	Lumineszenzdiode (LED) und Laserdiode (LD)	156
7.8.1	Voraussetzungen zur Lichtemission	156
7.8.2	LED und LD	160
7.9	Mikrowellendioden	161
7.9.1	Tunneldiode	161
7.9.2	Lawinen-Laufzeit- oder IMPATT-Diode	162
7.9.3	Gunn-Diode	165
7.9.4	Stop-Recovery Diode (Speicher Varaktor)	167
8	Bipolartransistoren	169
8.1	Aufbau und Wirkungsweise	170
8.2	Quantitative Aussagen zum Ladungsträgertransport	172
8.2.1	Diffusionsströme	175
8.2.2	Emitter-, Basis- und Kollektorströme	178
8.3	Ebers-Moll Modell	180
8.4	Betriebszustände des Transistors	182
8.5	Kennlinienfeld des npn-Bipolartransistors	184
8.5.1	Basisschaltung	185
8.5.2	Emitterschaltung	188
8.6	Durchbruchverhalten	192
8.7	Emitterwirkungsgrad, Basistransportfaktor und Stromverstärkungen	192
8.7.1	Die Vorwärtsstromverstärkung	193
8.7.2	Die Rückwärtsstromverstärkung	194
8.8	Kleinsignal-Ersatzschaltbilder	194
8.8.1	Einfaches Niederfrequenzersatzschaltbild	195
8.8.2	Ladungsspeicher- und Basisweitenmodulations Effekte	196
8.8.3	Bahnwiderstände	201
8.8.4	Vollständiges Ersatzschaltbild nach Giacoletto	204
8.8.5	Grenzfrequenzen	205
8.8.6	Schaltverhalten	206
8.9	Das Gummel-Poon-Modell und SPICE	206
8.10	Hetero-Bipolartransistoren (HBT)	210

9	Halbleiter-Grenzschichten	213
9.1	Die Metall-Isolator-Halbleiter-Struktur	215
9.1.1	Klassifikation der Randschichten	215
9.1.2	Grundgleichungen	217
9.1.3	Die Anreicherungsrandschicht	221
9.1.4	Die Verarmungsrandschicht	223
9.1.5	Die Inversionsrandschicht	224
9.1.6	Der MIS-Kondensator	227
9.1.7	Der CCD-Bildsensor	228
9.2	Der Metall-Halbleiterkontakt	229
9.2.1	Die Austrittsarbeit	229
9.2.2	Schottky-Diode	233
9.2.3	Ohmscher Kontakt	237
10	Feldeffekttransistoren	239
10.1	Der MIS-Feldeffekttransistor (MOSFET)	240
10.1.1	Kennlinienfeld des p-Kanal-MOSFET	240
10.1.2	Der optimale MISFET	241
10.1.3	Klassifikation der MOSFET	243
10.1.4	Kleinsignal-Modell des MOSFET und Grenzfrequenzen	243
10.2	Sperrschicht-FET (Junction-FET, JFET)	245
10.3	Der Metall-Halbleiter-FET (MESFET)	245
10.3.1	Struktur und Arbeitsprinzip	246
10.3.2	Kennlinien des MESFET (und JFET)	246
10.4	Der High-Electron-Mobility-Transistor (HEMT)	248
10.5	Schlussbemerkungen	249
10.5.1	CMOS	249
10.5.2	Grenzfrequenzen von Transistoren	249
10.5.3	Symbole für JFET und MOSFET	250
A	Symbole, Materialparameter und Naturkonstanten	IX
A.1	Farbcodierung von Widerständen	IX
A.2	Materialparameter	X
A.3	Naturkonstanten	XI
A.4	Verschiedenes	XII

Einleitung

Ziel der Vorlesung „Halbleiterbauelemente“ ist es, einerseits die physikalischen Grundlagen und die Wirkungsweise einschlägiger Halbleiterbauelemente zu vermitteln und zum andern einen Überblick über die Vielzahl der heute gebräuchlichen Bauteile zu geben. Der Schwerpunkt dieser Vorlesung liegt auf dem Erarbeiten von Bauelementmodellen unterschiedlicher Komplexität. Die Anwendung ausgefeilter Computermodele wird hier nicht angestrebt, da diese, so wichtig sie für den tatsächlichen Schaltungsentwurf sind, in der Regel keine tiefere Einsicht in die Bauelementfunktion und die prinzipiellen Grenzen der Bauelementanwendung erlauben.

Die Vorlesung ist wie folgt aufgebaut: In den Kapiteln 1 bis 5 werden die für die Halbleiterbauelemente wichtigen festkörperphysikalischen Grundlagen zusammengestellt. Diese Teile wurden auch schon weitgehend in der Vorlesung Festkörperelektronik behandelt und dienen hier nur der Auffrischung. Darauf aufbauend befassen sich die Kapitel 6 bis 10 mit der Wirkungsweise des pn-Überganges, verschiedenen Arten von Dioden, Bipolartransistoren, sowie mit Halbleiter-Grenzschichten und Feldeffekttransistoren. Die Vorlesung lehnt sich an die von den Vorgängern Prof. Grau, Prof. Kärtner und Prof. Leuthold am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) gehaltenen Vorlesungen an. Weitere Inhalte wurden aus Lehrbüchern entnommen; die entsprechenden Quellen sind im Text angegeben.

Literaturempfehlungen

Literaturempfehlungen zur Vertiefung und Ergänzung des Vorlesungsstoffes sind nachstehend aufgelistet. Begleitend zur Vorlesung bieten sich insbesondere die Lehrbücher von Sze und Ng, Sze und Lee, Streetman und Banerjee sowie das Lehrbuch von Pierret an. Das Buch von Sze und Ng beschreibt eine große Anzahl von Halbleiterbauelementen sehr ausführlich. Die Bücher von Ashcroft und Kittel vermitteln einen tieferen Einblick in die Physik der Halbleiter, geben aber keinen Überblick über Halbleiterbauelemente.

Einführende Literatur:

- Sze, S. M. und Ng, Kwok K.: „Physics of Semiconductor Devices“, Third Edition, John Wiley, 2006.
- Sze, S. M. und Lee, M. K.: „Semiconductor Devices, Physics and Technology“, Third Edition, John Wiley, 2012.
- Streetman, B.G. und Banerjee, S.K.: „Solid State Electronic Devices“, 6th ed., Pearson Prentice Hall, 2006.
- Pierret, R.F.: „Semiconductor Device Fundamentals“. Addison Wesley, 1996.
- Reisch, M.: „Halbleiter-Bauelemente“. Berlin-Heidelberg, Springer-Verlag, 2005.
- Thuselt, F.: „Physik der Halbleiterbauelemente“: Springer-Verlag, 2. Auflage, 2011.
- Müller, R.: „Grundlagen der Halbleiter-Elektronik“, Springer-Verlag, 7. Auflage, 1995.

Weiterführende Literatur, insbesondere zu festkörperphysikalischen Grundlagen:

- Ashcroft, N. W.; Mermin, N. D.: „Solid State Physics“, Saunders College, 1976.
- Kittel, Ch.: „Einführung in die Festkörperphysik“, 7. Auflage, Oldenburg Verlag, 1988.
- Ibach, H. und Lüth, H.: „Festkörperphysik“, Springer, 2002

Kapitel 1

Grundlegende Eigenschaften von Halbleitern

In diesem Kapitel sollen die grundlegenden Eigenschaften von Halbleitern eingeführt werden. Wir werden zunächst den Aufbau von Halbleiterkristallen diskutieren und darauf aufbauend die zugehörigen Halbleiterbandstrukturen untersuchen.

1.1 Halbleitermaterialien

Festkörper kann man in Abhängigkeit von der elektrischen Leitfähigkeit in drei große Klassen unterteilen: Isolatoren, Halbleiter und Leiter (Metalle). Als **Halbleiter (engl. semiconductor)** werden diejenigen Elemente bzw. Verbindungen von Elementen bezeichnet, deren Leitfähigkeit bei Zimmertemperatur und bei höchster Reinheit zwischen jener der Metalle und jener von Isolatoren liegt. In Abb. 1.1 sind die elektrische Leitfähigkeit σ und der spezifische Widerstand ($\rho = \frac{1}{\sigma}$) für Halbleiter, Isolatoren und Metalle abgebildet. Bei Halbleitern hängt die Leitfähigkeit empfindlich vom Reinheitsgrad des Materials ab und kann sich dementsprechend über mehrere Dekaden ändern – angedeutet durch ausgedehnte Balken in der Abbildung. Ein wichtiges Unterscheidungsmerkmal zwischen Halbleitern und Metallen besteht darin, dass die Leitfähigkeit von Halbleitern mit steigender Temperatur zunimmt, während bei Metallen die Leitfähigkeit mit zunehmender Temperatur sinkt. In den nachfolgenden Kapiteln werden wir die Ursache hierfür noch eingehender untersuchen.

Man unterscheidet zwischen **Element-Halbleitern** wie z.B. Silizium (Si) oder Germanium (Ge), und sogenannten **Verbindungshalbleitern** (engl. „compound semiconductors“) wie z.B. Galliumarsenid (GaAs) oder Galliumphosphid (GaP). Element-Halbleiter sind eine Untergruppe der Halbmetalle, und stehen im Periodensystem der Elemente zwischen den Metallen und Nichtmetallen, siehe Abbildung 1.2. Die gebräuchlichsten Elementhalbleiter Si und Ge stehen in der IV. Gruppe des Periodensystems. Verbindungshalbleiter gehen aus Verbindungen von Elementen der IV. Hauptgruppe (sog. IV-IV-Verbindungshalbleiter, z.B. SiGe), aus Verbindungen von Elementen der III. mit der V. Hauptgruppe (III-V-Halbleiter, z.B. GaAs) oder aus Verbindungen von Elementen der II. mit der VI. Gruppe (II-VI-Halbleiter, z.B. CdS) hervor. Die wichtigsten Halbleiter sind in der in Abb. 1.3 gezeigten Tabelle zusammengestellt.

Aus zwei Elementen bestehende Verbindungshalbleiter wie z.B. GaAs nennt man **binäre Halbleiter**. Verbindungshalbleiter aus drei Elementen heißen dementsprechenden **ternäre Halbleiter**; dazu zählen z.B. $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ oder $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$, das zwei verschiedene Elemente der III. Hauptgruppe (Al, Ga) und ein Element der V. Hauptgruppe enthält. Enthält der Verbindungshalbleiter vier verschiedene Elemente, so spricht man dementsprechend von **quaternären Halbleitern**. Ein Beispiel für einen quaternären Halbleiter ist das Material $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_{1-y}\text{P}_y$, das zwei Elemente der III. Hauptgruppe (In, Ga) mit zwei Elementen der V. Hauptgruppe (As, P) verbindet. III-V-Verbindungshalbleiter eignen sich oft sehr gut zur Emission von Licht und sind daher in der

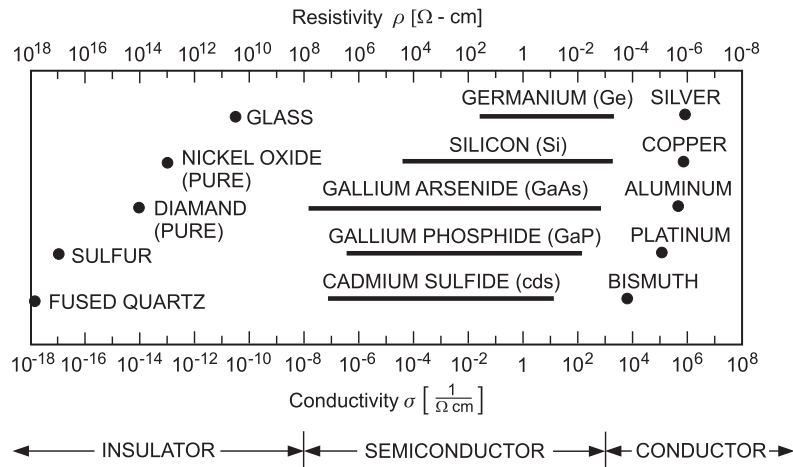


Abbildung 1.1: Spezifische Leitfähigkeit (untere Skala) bzw. spezifischer Widerstand (obere Skala) von typischen Isolatoren (links), Halbleitern (Mitte) und Metallen (rechts) bei Zimmertemperatur. Die Leitfähigkeit von Halbleitern ändert sich sehr stark mit dem Reinheitsgrad der Materialien und kann über viele Dekaden variieren.

Optoelektronik von großer Bedeutung.

1.2 Kristallstruktur von Halbleitern

Die halbleitenden Eigenschaften eines Materials hängen stark mit dessen Kristallstruktur, also mit den chemischen Bindungen und der dreidimensionalen Anordnung der Atome im Raum zusammen. Anorganische Halbleiter werden oft in ihrer einkristallinen oder polykristallinen Form genutzt. Dieser Abschnitt wiederholt kurz die Grundlagen chemischer Bindungen und wendet sich dann den Kristallstrukturen typischer Element- und Verbindungshalbleiter zu.

1.2.1 Chemische Bindungen in Halbleitern

Die elektrischen Eigenschaften von Festkörpern hängen davon ab, welche Bindungen zwischen den Atomen des Festkörpers vorliegen. Grundsätzlich lassen sich drei Arten von chemischen Bindungen unterscheiden:

- **Ionische Bindung:** Die ionische Bindung beruht auf der elektrostatischen Anziehung positiv und negativ geladener Ionen. Ionische Bindungen treten auf, wenn die Bindungspartner stark unterschiedliche Elektronegativitäten¹ aufweisen – der Bindungspartner mit der geringeren Elektronegativität (links im Periodensystem) gibt dabei Elektronen an den Partner mit höherer Elektronegativität (rechts im Periodensystem) ab. Dadurch entstehen einfach oder mehrfach positiv geladene Kationen sowie einfach oder mehrfach negativ geladene Anionen, die sich elektrostatisch anziehen. Materialien mit ionischen Bindungen weisen keine freien Elektronen auf und sind daher eher schlechte thermische und elektrische Leiter. Die Bindungen sind stabil und schlecht verformbar; die resultierenden Materialien sind also sehr hart und spröde. Ionische Bindungen treten typischerweise in Salzen auf.
- **Kovalente Bindung:** Bei der kovalenten Bindung (auch Atombindung oder Elektronenpaarbindung) teilen sich die Bindungspartner ein Elektronenpaar und gelangen so zu einer abgeschlossenen Elektronenschale (Edelgaskonfiguration). Dabei durchdringen sich die

¹Die Elektronegativität beschreibt die Fähigkeit eines Atoms, in einer chemischen Bindung Elektronenpaare an sich zu ziehen. Sie hängt unter anderem von der Kernladung und vom Atomradius ab. Die Elektronegativität kann daher als Anhaltspunkt für die Polarität und den ionischen Charakter einer Bindung genommen werden: Je höher der Unterschied in der Elektronegativität der gebundenen Elemente, desto polarer ist die Bindung; bei sehr großen Unterschieden geht das Elektron komplett auf den elektronegativeren Partner über und es liegt eine ionische Bindung vor.

Das Periodensystem der Elemente																		Hauptgruppen										
Perioden	Hauptgruppen I																											
	I	II																	III	IV	V	VI	VII	VIII				
1	1																		5	6	7	8	9	10				
2	3	4																	B	C	N	O	F	He				
3	11	12	Nebengruppen																13	14	15	16	17	18				
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36										
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54										
6	55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86										
7	87	88	89	104	105	Wasserstoff												Alkalimetalle		Erdalkalimetalle		Metalle						
						Halbmetalle												Nichtmetalle		Edelgase		radioaktiv						
						Halbleiter																						
Lanthanoide				58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71											
				Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu											
Actinoide				90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103											
				Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr											

Abbildung 1.2: Periodensystem der Elemente: Die Element-Halbleiter bilden eine Untergruppe der Halbmatalle, die zwischen den Metallen und Nichtmetallen zu finden sind. Verbindungshalbleiter können aus der Verbindung zwischen Metallen, Halbmetallen und Nichtmetallen hervorgehen, siehe Abb. 1.3.

General Classification	Semiconductor	
	Symbol	Name
Element	Si	Silicon
	Ge	Germanium
Binary compound		
IV-IV -----	SiC	Silicon carbide
III-V -----	AlP	Aluminum phosphide
	AlAs	Aluminum arsenide
	AlSb	Aluminum antimonide
	GaN	Gallium nitride
	GaP	Gallium phosphide
	GaAs	Gallium arsenide
	GaSb	Gallium antimonide
	InP	Indium phosphide
	InAs	Indium arsenide
	InSb	Indium antimonide
II-VI -----	ZnO	Zinc oxide
	ZnS	Zinc sulfide
	ZnSe	Zinc selenide
	ZnTe	Zinc telluride
	CdS	Cadmium sulfide
	CdSe	Cadmium selenide
	CdTe	Cadmium telluride
	HgS	Mercury sulfide
IV-VI -----	PbS	Lead sulfide
	PbSe	Lead selenide
	PbTe	Lead telluride
Ternary compound	Al _x Ga _{1-x} As	Aluminum gallium arsenide
	Al _x In _{1-x} As	Aluminum indium arsenide
	GaAs _{1-x} P _x	Gallium arsenic phosphide
	Ga _x In _{1-x} N	Gallium indium nitride
	Ga _x In _{1-x} As	Gallium indium arsenide
	Ga _x In _{1-x} P	Gallium indium phosphide
Quaternary compound	Al _x Ga _{1-x} As _y Sb _{1-y}	Aluminum gallium arsenic antimonide
	Ga _x In _{1-x} As _y P _{1-y}	Gallium indium arsenic phosphide

Abbildung 1.3: Verbindungshalbleiter bestehen aus Verbindungen von Elementen der IV. Hauptgruppe, Elementen der III. und der V. Hauptgruppe, oder von Elementen der II. und VI. Hauptgruppe. Abbildung entnommen aus [8].

Atomorbitale benachbarter Atome gegenseitig und führen zur Bildung von Molekülorbitalen. Die Bindungen sind stabil, die Stoffe sind hart und schwer verformbar. Festkörper, die auf kovalenten Bindungen beruhen, sind meist der Gruppe der Halbleiter oder Isolatoren zuzuordnen. In Halbleitersystemen schlagen sich kovalente Bindungen in charakteristischen Kristallstrukturen nieder.

- **Metallische Bindung:** Bei metallischen Bindungen geben die beteiligten Atome schwach gebundene Elektronen der äußeren Schale in das Kristallgitter ab und es bildet sich ein Elektronengas, in dem sich Elektronen frei bewegen können. Dieses quasi-freie Elektronengas führt zu einer starken Bindung innerhalb des Kristallgitters, indem es eine Anziehungskraft der positiv geladenen Atomrümpfe und des dazwischenliegenden negativ geladenen Elektronengases bewirkt. Metallische Bindungen sind im Gegensatz zu kovalenten Bindungen ungerichtet und gut verformbar. Aufgrund der hohen Zahl delocalisierter Elektronen führen metallische Bindungen zu Materialien mit sehr guter thermischer und elektrischer Leitfähigkeit.

Die vorstehend genannten Bindungen treten in der Natur häufig kombiniert in Form sog. Mischbindungen auf. Dies trifft beispielsweise auf ionische Bindungen zu, die oft in Verbindung mit kovalenten, stark polaren Bindungen auftreten. Bei NaCl beträgt der Ionenbindungsanteil beispielsweise 75 %. Mitunter werden schwache Wechselwirkungen, wie z.B. Van-der-Waals-Wechselwirkungen², Dipol-Wechselwirkungen und die Wasserstoffbrückenbindung zu den chemischen Bindungen gezählt. Jedoch sind dies keine festen chemischen Bindungen, sondern physikalische Anziehungskräfte, die zwischen einzelnen Molekülen wirken.

Bei Halbleitern dominiert die kovalente Bindung zwischen benachbarten Atomen. Abb. 1.4 zeigt beispielhaft die Elektronenkonfigurationen von Si und Ge. Die abgeschlossenen Elektronenschalen bilden zusammen mit dem Atomkern den sog. Atomrumpf, wohingegen die Elektronen in den nicht abgeschlossenen äußeren Schalen für Bindungen mit anderen Atomen zu Verfügung stehen. Wie man der Anordnung der Elektronenkonfigurationen in Abb. 1.4 entnehmen kann, haben sowohl Ge als auch Si in den äußeren s- und p- Orbitalen 4 Elektronen. Durch das Eingehen von kovalenten Bindungen mit benachbarten Atomen kann sich eine stabile Verbindung mit abgeschlossenen s- und p- Orbitalen bilden.

Ganz ähnlich wie bei Si und Ge aus der vierten Hauptgruppe lassen sich durch Auffüllen der Schalen stabile Verbindungen aus Elementen der III. und V. (III-V-Halbleiter) oder II. und VI. Gruppen (II-VI-Halbleiter) bilden. Bild 1.5 zeigt die Elektronenkonfiguration des dreiwertigen Ga und des fünfwertigen As, die den Verbindungshalbleiter GaAs bilden. Die verschiedenen Elektronenkonfigurationen der Bindungspartner führen zu charakteristischen Kristallstrukturen für die verschiedenen Typen von Halbleitern, die im folgenden Abschnitt näher beschrieben werden.

1.2.2 Innere Strukturen von Festkörpern

Elektrische Eigenschaften von Festkörpern hängen nicht nur von der Art der Bindungen ab, die die Atome untereinander eingehen, sondern auch von der inneren Struktur des Festkörpers und insbesondere davon, ob eine Fernordnung oder nur eine Nahordnung zwischen den Atomen bzw. Molekülen vorliegt. Dies wird durch die Kristallstruktur des Festkörpers beschrieben. Verschiedene Arten von inneren Strukturen sind in Bild 1.6 schematisch skizziert. Amorphe Materialien bestehen aus Atomen oder Molekülen, die keine geordneten Strukturen sondern ein unregelmäßiges Muster bilden und damit lediglich über eine Nahordnung, nicht aber über eine Fernordnung verfügen. Bei kristallinen Festkörpern sind die Bausteine nicht zufällig, sondern regelmäßig in einer Kristallstruktur angeordnet und weisen damit eine Nah- und Fernordnung auf. Unter einem Polykristall versteht man einen Festkörper, der aus vielen kleinen Einzelkristallen (Kristalliten) besteht, die

²Van-der-Waals-Wechselwirkungen beruhen auf relativ schwachen Anziehungskräften zwischen Atomen oder Molekülen. Bei sehr kleinen Abständen zwischen den Wechselwirkungspartnern kommt es zu Influenzladungen, durch die sich temporäre Dipole bilden, die zur Anziehung führen. Van-der-Waals-Wechselwirkungen treten vornehmlich bei Makromolekülen mit vielen Elektronen auf, in denen sich verhältnismäßig starke Dipole induzieren lassen. Es handelt sich dabei um eine schwache Bindungsart, die nur bei hinreichend tiefen Temperaturen beobachtbar ist.

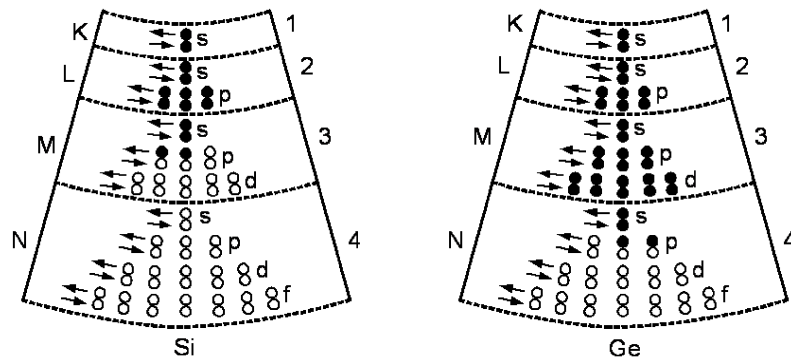


Abbildung 1.4: Elektronenkonfiguration von Silizium (Si) und Germanium (Ge). Die Elektronenschalen sind durch die Großbuchstaben K, L, M und N und die dazugehörigen Hauptquantenzahlen 1, 2, 3 und 4 gekennzeichnet; die Kleinbuchstaben s, p, d und f bezeichnen die in jeder Schale enthaltenen Molekülorbitale („Unterschalen“). Die Pfeile geben die Spinorientierung der Zustände an. Schwarze Punkte bezeichnen besetzte Elektronenzustände; Kreise repräsentieren unbesetzte Zustände. Die abgeschlossenen Elektronenschalen (K und L bei Si; K, L und M bei Ge) bilden zusammen mit dem Atomkern den sog. Atomrumpf, wohingegen die Elektronen in den nur unvollständig aufgefüllten äußeren Schalen (M bei Si; N bei Ge) für Bindungen mit anderen Atomen zu Verfügung stehen. Sowohl Ge als auch Si haben in den äußeren s- und p- Orbitalen vier Elektronen und vier unbesetzte Zustände. Durch das Eingehen von kovalenten Bindungen mit benachbarten Atomen kann sich eine stabile Verbindung mit abgeschlossenen s- und p-Orbitalen („Edelgaskonfiguration“) bilden. Dabei entstehen aus dem s-Orbital und den drei p-Orbitalen vier gleichwertige sp^3 -Hybridorbitale, die zu einer tetraedrischen Grundstruktur im Kristallgitter von Si und Ge führen, siehe Abschnitt 1.2.5. (Bildquelle: [5])

durch Korngrenzen voneinander getrennt werden. Polykristalline Festkörper weisen also eine Fernordnung auf, allerdings ist die Reichweite dieser Fernordnung durch die Größe der Kristallite begrenzt. Abhängig davon, ob die Fernordnung über Größenskalen im Mikrometerbereich oder über Größenskalen im Nanometerbereich aufrecht erhalten wird, spricht man auch von mikrokristallinen oder nanokristallinen Festkörpern.

1.2.3 Bravais-Gitter

Ein grundlegendes Konzept zur Beschreibung eines kristallinen Festkörpers stellen die sog. Bravais-Gitter dar. Ein Bravais-Gitter im dreidimensionalen Raum umfasst alle Punkte $\mathbf{r}$, die sich durch eine Linearkombination von drei Basisvektoren $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, und $\mathbf{a}_3$ mit ganzzahligen Koeffizienten m_1 , m_2 und m_3 gebildet werden können,

$$\mathbf{r} = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3. \quad (1.1)$$

Die Vektoren $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, und $\mathbf{a}_3$ werden als Gittervektoren oder primitive Vektoren bezeichnet. Einfacher formuliert ist ein Bravais-Gitter dadurch gekennzeichnet, dass man immer die gleiche Umgebung „sieht“, wenn man sich gedanklich auf einen Gitterpunkt „stellt“ und in eine bestimmte Richtung „schaut“. Bravais-Gitter werden auch als Translationsgitter bezeichnet. In drei Dimensionen gibt es 14 verschiedene Arten von Bravais-Gittern; diese sind in Abb. 1.7 zusammengestellt. Kristallgitter sind nicht notwendigerweise Bravaisgitter, lassen sich aber immer durch Translation einer sog. Einheitszelle auf einem Bravais-Gitter beschreiben. Eine weiterführende Beschreibung von Bravais-Gittern und Kristallgittern findet sich in [12].

1.2.4 Einheitszelle

Unter einer Einheitszelle oder Elementarzelle (engl. unit cell) versteht man eine Volumeneinheit des Gitters, aus welcher sich das gesamte Gitter durch einfache Translationsoperationen aufbauen lässt. Die Einheitszelle weist bereits sämtliche Symmetrieeigenschaften des Kristallgitters auf. Ist die Einheitszelle gerade so gewählt, dass sie durch Translation mit den Vektoren des Bravais-Gitters gerade den gesamten Raum ohne Überlappungen oder Hohlräume ausfüllt, so spricht man

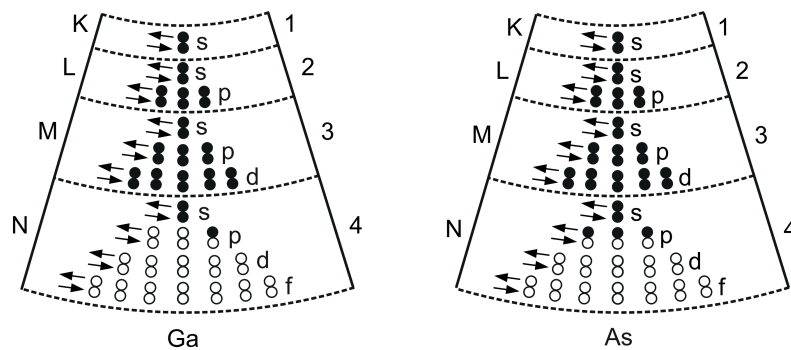


Abbildung 1.5: Elektronenanordnung der Elemente Ga und As. Die Elektronenschalen sind durch die Großbuchstaben K, L, M und N und die dazugehörigen Hauptquantenzahlen 1, 2, 3 und 4 gekennzeichnet; die Kleinbuchstaben s, p, d und f bezeichnen die in jeder Schale enthaltenen Molekülorbitale („Unterschalen“). Die Pfeile geben die Spinorientierung der Zustände an. Schwarze Punkte bezeichnen besetzte Elektronenzustände; Kreise repräsentieren unbesetzte Zustände. Bei Ga sind von den 8 möglichen Zuständen der 4s- und 4p-Orbitale nur drei besetzt, bei As fünf. Im Verbindungshalbleiter GaAs teilen sich die Bindungspartner die insgesamt 8 Außenelektronen so, dass sowohl für Ga als auch für As vollständig abgeschlossene Unterschalen („Edelgaszustand“) entstehen. (Bildquelle: [5])

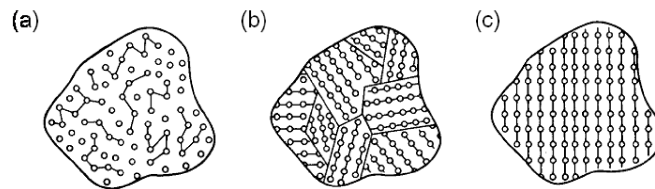


Abbildung 1.6: (a) Amorphe, (b) polykristalline und (c) kristalline Festkörper. Amorphe Festkörper weisen lediglich eine Nah-, jedoch keine Fernbindung auf. Kristalline Festkörper verfügen über eine Fern- und eine Nahordnung. Bei polykristallinen Festkörpern ist die Reichweite dieser Fernordnung begrenzt - sie bestehen aus vielen Einzelkristallen („Kristalliten“), die durch Korngrenzen voneinander getrennt sind.

von der primitiven Einheitszelle. Für ein gegebenes Kristallgitter sind weder die Einheitszelle noch die primitive Einheitszelle eindeutig bestimmt - weitere Ausführungen zur Wahl verschiedener Einheitszellen finden sich in [12]. Für einfache Kristalle stimmt das Kristallgitter mit dem zugehörigen Bravais-Gitter überein. In diesem Fall enthält die einfachste Einheitszelle nur ein einzelnes Atom - ein entsprechendes einfaches Beispiel ist in Abb. 1.8 skizziert. Da die Einheitszelle bereits alle Eigenschaften des Gesamtgitters enthält, lassen sich aus ihr bereits viele wichtige physikalische Eigenschaften des Halbleiters ableiten, so z.B. die Dichte oder die elektronischen Eigenschaften.

1.2.5 Kristallstrukturen von Halbleitern

Im Falle der Elementhalbleiter Silizium und Germanium geht jedes Atom eine kovalente Bindung mit vier Nachbaratomen ein, so dass sich zusammen mit den Elektronen der Bindungspartner vollständig abgeschlossene 3s- und 3p- bzw. 4s- und 4p-Orbitale ergeben. Wie beim ebenfalls vierwertigen Kohlenstoff bilden sich dabei sog. $3sp^3$ - bzw. $4sp^3$ -Hybridorbitale, die sich tetraedrisch im Raum mit Winkeln von $109,5^\circ$ zueinander ausrichten, siehe Abb. 1.9.

Setzt man die tetraedrische Grundstruktur von Abb. 1.9 (a) periodisch fort, so erhält man ein sog. Diamantgitter als Grundstruktur des idealen Si- bzw. Ge-Kristalls, siehe Abb. 1.9 (b). Der Name rührt daher, dass Kohlenstoff, der in elementarer Form ebenfalls vier ungepaarte Elektronen in den äußeren Molekülorbitalen aufweist, in einkristalliner Form dasselbe Kristallgitter einnimmt. Einkristalliner Kohlenstoff wird auch als Diamant bezeichnet. Neben Kohlenstoff und Diamant kristallisiert auch Ge im Diamantgitter. Im Falle von Silizium beträgt die Kantenlänge a der Einheitszelle (sog. „Gitterkonstante“) ungefähr $5,43\text{\AA}$. Daraus lässt sich bereits ableiten, dass ein Si-Einkristall ca. 5×10^{22} Si-Atome pro Kubikzentimeter aufweisen muss. Man kann sich das Diamantgitter aus zwei, sich gegenseitig durchdringenden, kubisch-flächenzentrierten Gittern

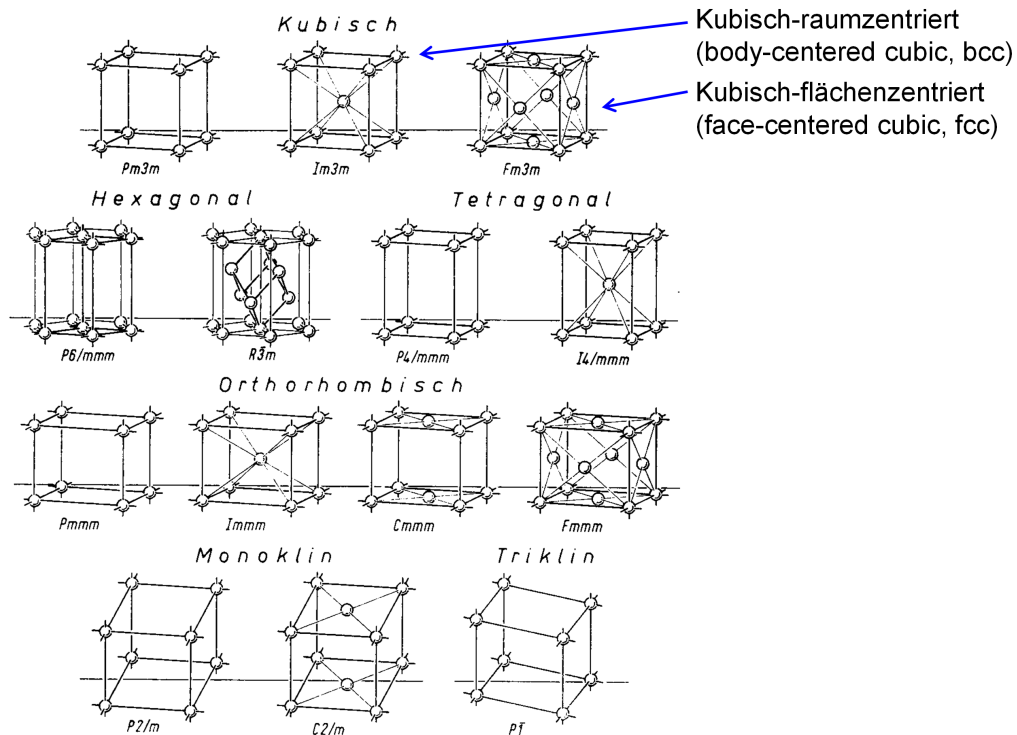


Abbildung 1.7: Die 14 Bravais-Gitter (Translationsgitter), die sich durch ganzzahlige Linearkombinationen von drei Gittervektoren im Raum aufbauen lassen. Kristallgitter lassen sich durch Translation einer sog. Einheitszelle auf einem Bravais-Gitter beschreiben (Bildquelle: <http://positron.physik.uni-halle.de>)

(engl. face-centered cubic, fcc) zusammengesetzt vorstellen, wobei ein fcc-Gitter gegenüber dem anderen um ein Viertel der Raumdiagonale entlang dieser verschoben ist. Dieser Sachverhalt ist nochmals in den Bildern 1.10(a) und 1.10(b) dargestellt.

Auf ähnliche Weise lassen sich die Kristallgitter anderer Halbleiter konstruieren. Im Falle des III-V-Verbindungshalbleiters GaAs sind gleiche Anzahlen von Ga- und As-Atomen so auf einem Diamantgitter verteilt, dass jedes Atom vier Nachbarn der jeweils anderen Art hat. Dies führt zur sog. Zinkblendestruktur, Abb. 1.11 (a), der typischen Struktur für III-V-Halbleiter wie z.B. GaAs, InP. Die zugehörigen ternären oder quaternären Verbindungshalbleiter wie z.B. $In_{1-x}Ga_xAs$, oder $In_{1-x}Ga_xAs_{1-y}P_y$ bilden ebenfalls ein Zinkblendegitter, wobei jedes der Untergitter durch unterschiedliche Atome im entsprechenden Mengenverhältnis besetzt werden kann. Die in Abb. 1.12 gezeigte Tabelle gibt einen Überblick über die Kristallstrukturen, Gitterparameter und Dichten verschiedener III-V Verbindungshalbleiter.

II-VI Verbindungshalbleiter haben in der Regel Zinkblende- oder Wurtzitstruktur. So weist ZnSe beispielsweise Zinkblendestruktur auf, wohingegen ZnO und CdS in der Wurtzitstruktur kristallisieren. Das Wurtzitgitter ist am Beispiel des Verbindungshalbleiters CdS in Abb. 1.11. Die Wurtzitstruktur besteht aus zwei Hexagonalgittern, bei dem das zweite Gitter gegenüber dem ersten Gitter um $1/3$ der Gitterkonstanten in Richtung der Längsachse verschoben ist. Bei CdS besteht das erste Hexagonalgitter aus Cadmium (Cd) und das zweite aus Schwefel (S). Weiterführende Informationen zu Verbindungshalbleitern und deren Kristallgitter ist in [7] zu finden.

1.2.6 Kristallrichtungen und Millersche Indizes

Da sich die Eigenschaften eines Kristalls je nach Kristallrichtung ändern, ist es wichtig, dass man schon bei der Herstellung von Halbleiterbauelementen auf die Ausrichtung des Kristalls und der Bauteile gegenüber den Kristallachsen achtet. Per Konvention werden Kristallausrichtungen mit

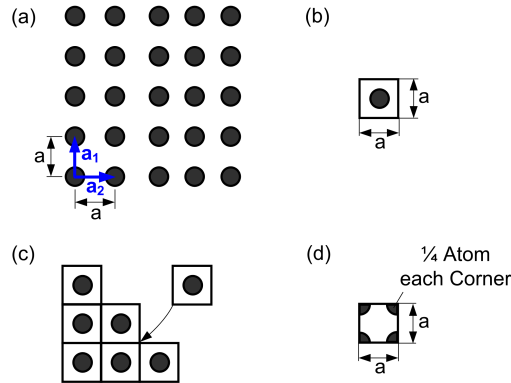


Abbildung 1.8: Beispiel zur Einheitszelle auf Basis eines zweidimensionalen Kristalls: (a) Zwei-dimensionaler Kristall, dessen Atome sich auf einem quadratischen Gitter mit Seitenlänge a befinden. Die Basisvektoren $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ entsprechen gerade der Translation um eine Gitterkonstante in vertikaler bzw. horizontaler Richtung. (b) Primitive Einheitszelle der Seitenlänge a , die in diesem Fall aus lediglich einem einzigen Gitterpunkt besteht. (c) Der Kristall kann aus der Einheitszelle durch periodische Wiederholung aufgebaut werden, die sich aus der Translation mit ganzzahligen Linearkombinationen der Basisvektoren $\mathbf{a}_1$ und $\mathbf{a}_2$ des Bravais-Gitters ergibt. (d) Alternative Wahl einer primitiven Einheitszelle – die primitive Einheitszelle ist für ein gegebenes Kristallgitter nicht eindeutig bestimmt.

den sogenannten Millerschen Indizes angegeben. Millerscher Indizes sind Tripel von ganzen Zahlen, die die Raumrichtungen im Kristall auf Basis der zugrundeliegenden Einheitszelle definieren. In einem kubische Gitter bezeichnen die Millerschen Indizes $[1,1,1]$, $[1,1,-1]$, $[1,-1,1]$ und $[-1,1,1]$ beispielsweise die verschiedenen Raumdiagonalen der Einheitszelle. Oft werden die Kommata in der Notation weggelassen und negative Zahlen durch einen Überstrich bezeichnet, also $[1\bar{1}\bar{1}]$ anstelle von $[1,1,-1]$. Eckige Klammern beschreiben Raumrichtungen; runde Klammern die zu diesen Raumrichtungen orthogonalen Ebenen. So beschreibt (100) beispielsweise die (y,z)-Ebene im Koordinatensystem der Einheitszelle. Abb. 1.13 zeigt am Beispiel eines kubischen Gitters weitere Ebenen und deren Notation.

Aufgrund der Kristallsymmetrie sind verschiedene Gitterebenen bzw. Raumrichtungen äquivalent, d.h. sie weisen dieselben physikalischen Eigenschaften auf. Im Falle von Raumrichtungen wird dies durch eckige Klammern angedeutet. Beim Diamantgitter beinhaltet $\{100\}$ beispielsweise alle zu $[100]$ äquivalenten Raumrichtungen, also $[100]$, $[010]$, und $[001]$. Analog dazu wird bei der Bezeichnung von Ebenen vorgegangen - hier werden geschweifte Klammern $\{.\}$ verwendet, um die Gesamtheit einer zu einer bestimmten Kristallebene äquivalenten Ebenenschar zu beschreiben. Beim Diamantgitter beinhaltet $\{100\}$ beispielsweise alle zu (100) äquivalenten Kristallebenen, also (100) , (010) , und (001) .

1.3 Energiebänder in Halbleitern

1.3.1 Vom Einzelatom zum Kristall

Isolierte Atome weisen diskrete Energiezustände auf, die sich beispielsweise nach dem Bohrschen Atommodell unter Annahme der Quantisierung des Bahndrehimpulses berechnen lassen. Im Falle eines Kristalls, der aus unendlich vielen kovalent gebundenen Atomen besteht, spalten sich diese diskreten Energiezustände zu quasi-kontinuierlichen Energiebändern auf. Dies ist in Abb. 1.14 illustriert. Im Falle von zwei Atomen führt die Annäherung zu einer Kopplung der Wellenfunktionen der äußeren Valenzelektronen und damit zu einer Aufspaltung der Energieniveaus in einen niederenergetischen „bindenden“ und einen höherenergetischen „antibindenden“ Zustand, Abb. 1.14 (a). Die Energiebeträge dieser Auffächerung nehmen mit kleiner werdendem interatomaren Abstand zu. Wenn wir N Atome zusammenbringen, dann spalten sich diese in N Niveaus auf, Abb. 1.14 (b). Bei einer steigenden Anzahl von Atomen bilden sich um die isolierten Energieniveaus des Einzelatoms immer feinere Aufspaltungen, bis man letztlich nur noch von „Energiebändern“ spricht, die als ein

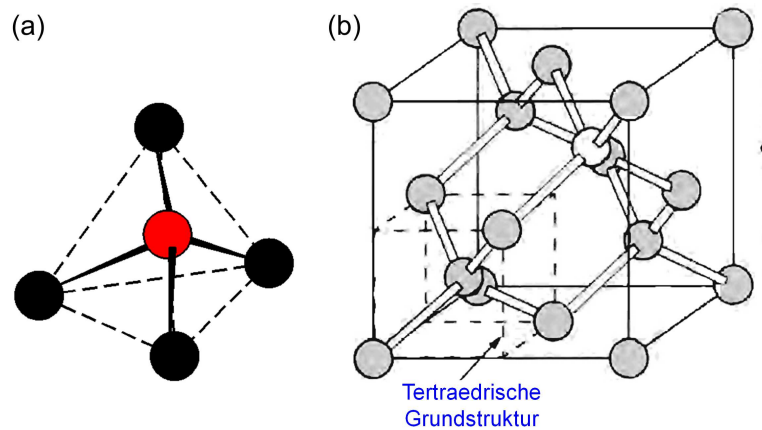


Abbildung 1.9: Grundbaustein und Einheitszelle des Kristallgitters von Silizium (Diamantgitter). (a) Tetraedrischer Grundbaustein: Die vier $3sp^3$ -Hybridorbitale von Silizium richten sich beim Aufbau des Gitters in gleichem Winkel zueinander aus. Legt man gedanklich ein Silizium-Atom (rot) in den Schwerpunkt eines Tetraeders, so ordnen sich die direkt benachbarten Bindungspartner (schwarz) auf den Ecken des Tetraeders an. (b) Einheitszelle des Kristallgitters von Silizium (Diamantgitter): Durch Aneinanderhängen der tetraedrischen Grundbausteine entsteht das sog. Diamantgitter – der tetraedrische Grundbaustein befindet sich innerhalb des gestrichelt eingezeichneten Würfels. Der Name rührt daher, dass Kohlenstoff, der in elementarer Form ebenfalls vier ungepaarte Elektronen in den äußeren Molekülorbitalen aufweist, in einkristalliner Form (Diamant) dasselbe Kristallgitter einnimmt. Die Elementhalbleiter Silizium und Germanium weisen ein Kristallgitter auf. Bei Silizium beträgt der Gitterabstand ungefähr $5,43\text{\AA}$ [10]. (Bildquelle: [10])

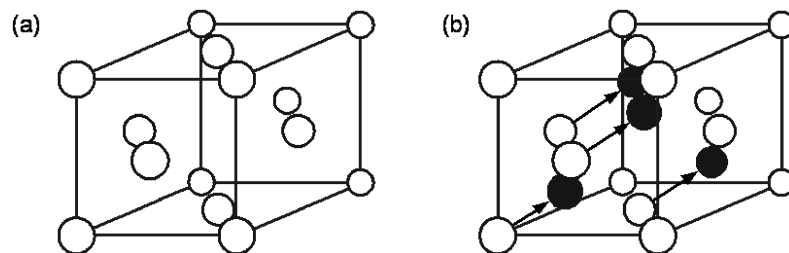


Abbildung 1.10: Ableitung des Diamantgitters aus einem kubisch flächenzentrierten (face-centered cubic, fcc) Gitter. (a) Einheitszelle eines fcc-Kristallgitters. (b) Einheitszelle des Diamantgitters, zusammengesetzt aus zwei gegeneinander verschobenen fcc-Gittern. Beim Diamantgitter sind beide Untergitter aus denselben Atomen zusammengesetzt. Bestehen die Untergitter aus verschiedenen Materialien, so wird die Gesamtstruktur als Zinkblende-Gitter bezeichnet. Zinkblende-Strukturen ergeben sich beispielsweise für gängige III-V-Verbindungshalbleiter wie z.B. GaAs oder InP sowie für die entsprechenden ternären oder quaternären Verbindungen. In (b) sind nur die Atome des ersten Gitters (schwarz) eingezeichnet, welche in die Elementarzelle des ersten Gitters fallen. [10]

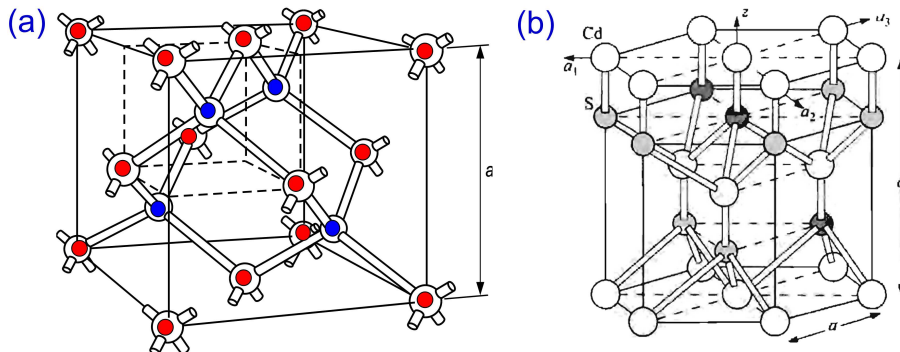


Abbildung 1.11: (a) Zinkblende-Gitter eines typischen III-V-Verbindungshalbleiters wie z.B. GaAs. Die Zinkblende-Struktur entspricht der Diamantstruktur nach Abb. 1.5 mit dem Unterschied, dass die Gitterplätze abwechselnd durch Ga oder As besetzt sind. (b) Illustration des Wurtzit-Gitters am Beispiel des II-VI-Verbindungshalbleiters CdS. Die Wurtzitstruktur besteht aus zwei Hexagonalgittern, bei dem das zweite Gitter gegenüber dem ersten Gitter um $1/3$ der Gitterkonstanten in Richtung der Längsachse verschoben ist. Bei CdS besteht das erste Hexagonalgitter aus Cadmium (Cd) und das zweite aus Schwefel (S). (Bildquelle: [7])

Compound	Structure	Lattice parameter (Å)	Density (g/cm ³)
AlN	wurtzite	$a = 3.11(1), c = 4.98(1)$	3.255
AlP	zinc blende	$a = 5.4635(4)$	2.40(1)
AlAs	zinc blende	$a = 5.660$	3.760
AlSb	zinc blende	$a = 6.1355(1)$	4.26
GaN	wurtzite	$a = 3.190, c = 5.187$	
GaP	zinc blende	$a = 5.4505(2)$	4.138
GaAs	zinc blende	$a = 5.65325(2)$	5.3176(3)
InN	wurtzite	$a = 3.5446, c = 5.7034$	6.81
InP	zinc blende	$a = 5.868(1)$	4.81
InAs	zinc blende	$a = 6.0583$	5.667
InSb	zinc blende	$a = 6.47937$	5.7747(4)

Abbildung 1.12: Kristallstrukturen, Gitterparameter und Dichten verschiedener III-V Verbindungshalbleiter (zinc blende = Zinkblende-Struktur; wurtzite = Wurtzit-Struktur). Die eingeklammerten Nachkommastellen deuten die Genauigkeit der Messungen an (Bild basierend auf Material von <http://cnx.org>)

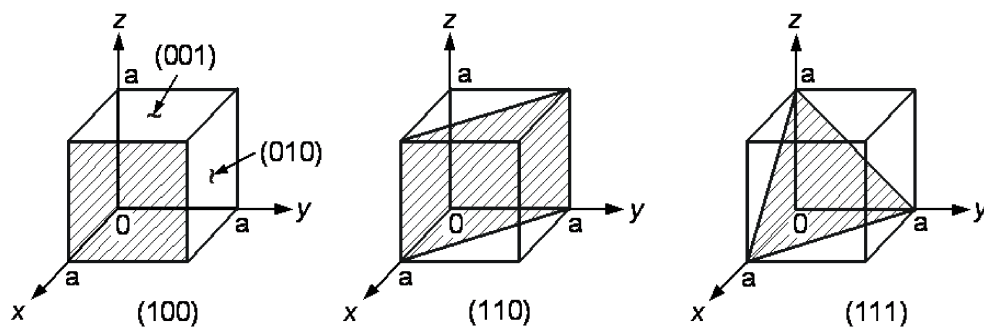


Abbildung 1.13: Illustration der Bezeichnung verschiedener Kristallebenen mit Hilfe von Millerschen Indizes am Beispiel eines kubischen Gitters. Die schraffierten Ebenen sind (100), (110) und (111) Ebenen.

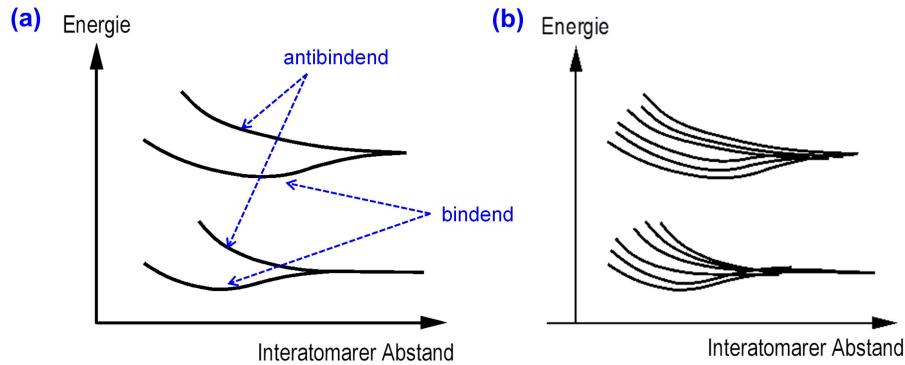


Abbildung 1.14: (a) Aufspalten von Energiezuständen zweier Atome als Funktion des Abstandes: Mit kleiner werdenden Abständen spalten sich diskrete Energieniveaus in jeweils einen niederenergetischen bindenden und einen höherenergetischen antibindenden Zustand auf. Der energetische Abstand des bindenden und des antibindenden Zustandes wird mit abnehmendem atomaren Abstand größer. (b) Bei der Annäherung vieler nominell identischer Elektronen innerhalb eines Ensembles spalten sich die Energieniveaus in entsprechend der Anzahl der Elektronen auf. Im Grenzfall eines aus sehr vielen Atomen bestehenden Kristallgitters ergeben sich daraus immer feinere Aufspaltungen, bis man letztlich nur noch von „Energiebändern“ spricht, die als ein Kontinuum von Zuständen behandelt werden können.

Kontinuum von Zuständen behandelt werden können. Die Auffächerung der Energieniveaus lässt sich auch vor dem Hintergrund der Fermi-Natur der Elektronen interpretieren: Das Pauli-Verbot gilt nicht nur innerhalb der Atome, sondern muss auf alle sich überlappenden Teilchen angewendet werden und damit auf alle Elektronen innerhalb des gleichen Festkörpers. Aus den energetisch identischen Zuständen der isolierten Einzelatome muss also ein Kontinuum an unterscheidbaren Zuständen entstehen, die durch Elektronen unter Einhaltung des Pauli'sches Ausschlussprinzips besetzt werden können.

In Figur 1.15 ist beispielhaft die Aufspaltung der Atomorbitale in Silizium als Funktion des interatomaren Abstandes aufgezeichnet. Zufälligerweise bildet sich beim sich einstellenden Atomabstand von $r_0 = 0.234 \text{ nm}$ zwischen Bändern gerade eine Energielücke aus, so dass man zwischen dem energetisch tieferen Valenzband und dem energetisch höheren Leitungsband unterscheiden kann. In einem isolierten Si-Atom sind nur vier der acht möglichen Zustände der 3s- und 3p-Orbitale besetzt. Dementsprechend sind auch nach der Aufspaltung nur die Hälfte der möglichen Bandzustände besetzt, was zu einem vollständig besetzten Valenz- und zu einem unbesetzten Leitungsband führt. Zur Analyse der elektrischen Eigenschaften von Festkörpern werden diese Bandschemata herangezogen.

1.3.2 Bandstrukturen und Bandlücke

Die elektrischen Eigenschaften von Isolatoren, Halbleitern und Metallen lassen sich vereinfacht anhand des sog. Bandschemas erklären, Abb. 1.16. Im Falle eines Halbleiters oder eines Isolators wird das bei der Temperatur $T = 0 \text{ K}$ energetisch höchste vollbesetzte Band als Valenzband und das energetisch tiefste unbesetzte Band als Leitungsband bezeichnet. Unbesetzte Bänder tragen nicht zur Leitfähigkeit bei. Dasselbe gilt auch für vollständig besetzte Bänder, in denen die Elektronen in Ermangelung freier Energiezustände keine kinetische Energie aus einem angelegten elektrischen Feld aufnehmen und daher auch keinen Ladungstransport oder einen Netto-Stromfluss bewirken können. Die höchste Energie für ein Elektron im Valenzband bestimmt die sog. Valenzbandkante W_V . Der darauf folgende Bereich, die sog. Bandlücke, bietet keine möglichen Plätze für Elektronen bis zur Leitungsbandkante W_L . Die Größe

$$W_G = W_L - W_V > 0 \quad (1.2)$$

wird als Bandabstand bezeichnet. Höher liegende Bänder, die das Leitungsband überkreuzen und zu höheren Energien $W > W_L$ durchgehend Plätze für Elektronen anbieten, sind in Abb. 1.16 der Einfachheit halber nicht eingezeichnet.

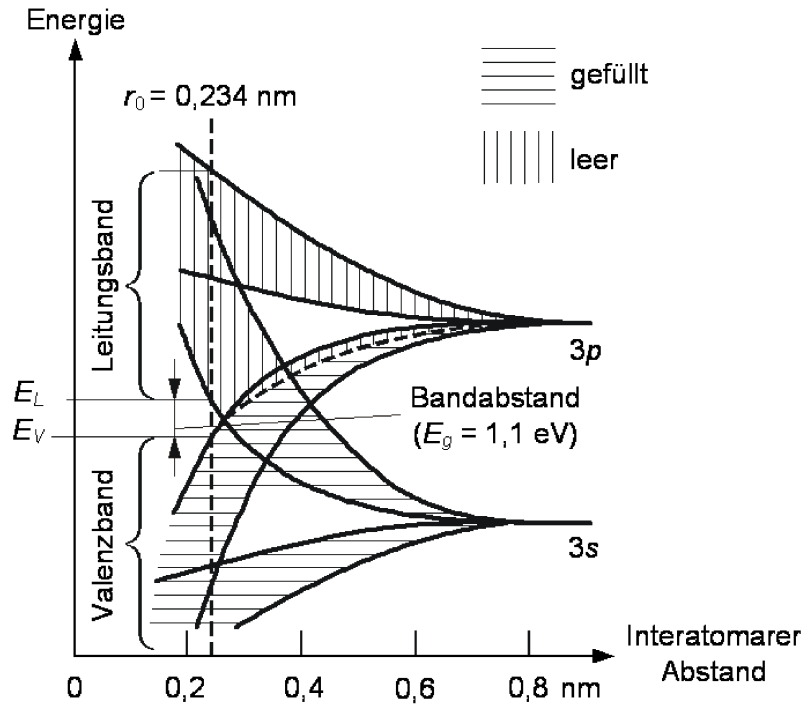


Abbildung 1.15: Aufspaltung der Energiebänder in Silizium als Funktion des interatomaren Abstands. Bei dem sich im Kristallgitter von Si einstellenden Atomabstand von $r_0 = 0,234 \text{ nm}$ bildet sich zwischen Bändern gerade eine Energielücke aus, so dass man zwischen dem energetisch tieferen, weitgehend mit Elektronen besetzten Valenzband und dem energetisch höheren, weitgehend unbesetzten Leitungsband unterscheiden kann.

Isolatoren und Halbleiter unterscheiden sich durch die Größe der Bandlücke W_G : Sie liegt beim Halbleiter in der Größenordnung von $W_G \approx 1 \text{ eV}$ so dass es manchen Elektronen im Valenzband gelingt, durch thermische Anregung die Bandlücke zu überwinden. Ein Halbleiter weist also immer eine gewisse Leitfähigkeit auf, die mit der Temperatur zunimmt, da dann eine größere Zahl von Elektronen in der Lage ist, die Bandlücke zu überwinden. Im Gegensatz dazu besitzt ein Isolator eine Bandlücke W_G in der Größenordnung von ca. 10 eV , so dass bei Raumtemperatur keine thermisch angeregten Elektronen vom Valenz- ins Leitungsband gelangen können und daher auch keine merkliche Leitfähigkeit vorhanden ist. Bei Metallen, Bild 1.16, hingegen ist das energetisch am höchsten liegende nicht leere Band nur teilweise besetzt („teilweise gefülltes Leitungsband“), so dass sehr viele Ladungsträger kinetische Energie aus einem von außen angelegten elektrischen Feld aufnehmen und zum Stromtransport beitragen können. Dies führt zu einer für Metalle typischen hohen Leitfähigkeit. Diese Leitfähigkeit nimmt bei steigender Temperatur in der Regel ab, da die Zahl der freien Elektronen konstant bleibt, die Bewegung der Elektronen allerdings durch die Wechselwirkung mit thermisch induzierten Gitterschwingungen beeinträchtigt wird.

Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass die Bandlücke W_G selbst eine Funktion der Temperatur ist, was in Abb. 1.17 dargestellt ist. Bei Raumtemperatur T_0 ist eine lineare Approximation der Bandlücke oftmals ausreichend

$$W_G(T) = W_G(T_0) + \left. \frac{dW_G}{dT} \right|_{T=T_0} (T - T_0). \quad (1.3)$$

In Bild 1.17 sind verschiedene Werte für $W_G(T_0)$ und dW_G/dT aufgeführt. Bei größeren Temperaturschwankungen empfiehlt es sich, ein parabolisches Modell für die Abhängigkeit der Bandlücke von der Temperatur zu verwenden, das neben der ersten Ableitung auch noch die zweite berücksichtigt.

Die in Abb. 1.17 skizzierten Bandlücken werden mit zunehmender Temperatur kleiner. Dies lässt sich auch anhand von Abb. 1.15 nachvollziehen: Bei zunehmender Temperatur rücken die

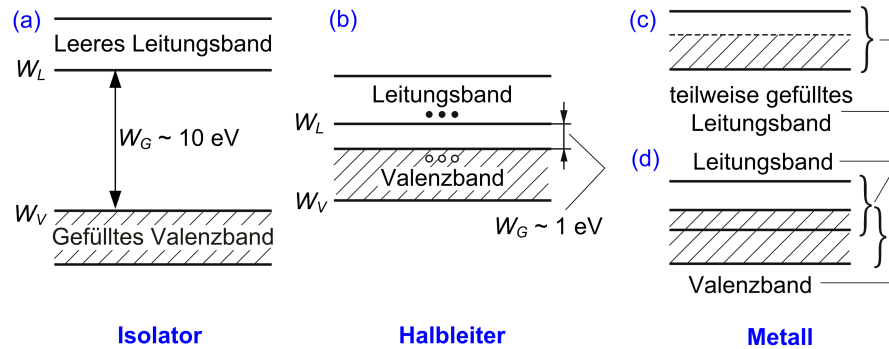


Abbildung 1.16: Schematische Darstellung von Bandstrukturen verschiedener Materialien (a) Isolator: Leitungsband und Valenzband sind durch eine ausgeprägte und energetisch sehr breite Bandlücke W_G in der Größenordnung von 10 eV voneinander getrennt. Aufgrund der großen Bandlücke ist es für Elektronen praktisch unmöglich, durch thermische Anregung vom Valenz- ins Leitungsband zu gelangen. Dies führt zu einer sehr geringen Leitfähigkeit; das Material verhält sich also als Isolator. (b) Halbleiter: Auch hier sind Leitungsband und Valenzband durch eine Bandlücke voneinander getrennt. Allerdings ist diese energetisch kleiner als im Falle des Isolators. Als Folge davon ist es möglich, dass Elektronen durch thermische Anregung vom Valenz- ins Leitungsband gelangen und dort zur Leitfähigkeit des Halbleiters beitragen. (c) Metall: Das energetisch höchste Band ist nur teilweise gefüllt, so dass sich Elektronen frei bewegen können. Metalle weisen dementsprechend eine hohe Leitfähigkeit auf.

Kristallatome im Mittel weiter auseinander, was zu einer weniger starken Aufspaltung der Energieniveaus und damit zur einer abnehmenden Bandlücke führt.

1.3.3 Leitungselektronen, Löcher und Leitfähigkeit

Die im vorstehenden Abschnitt getroffenen Aussagen zu Energiebändern, Bandlücke und Leitfähigkeit lassen sich auf die Ebene einzelner Bindungselektronen übertragen. Dies ist in Bild 1.18 dargestellt. Im perfekten Kristall sind bei tiefen Temperaturen alle Elektronen in kovalente Bindungen ortsfest eingebaut. Da es keine freien Ladungsträger gibt, kann in diesem Fall auch keine Stromleitung stattfinden. Bei höheren Temperaturen können thermische Schwingungen dazu führen, dass kovalente Bindungen aufbrechen. Damit bilden sich nun zwei „Teilchen“, die zum Stromfluss beitragen können:

1. Ein freies Elektron, welches energetisch nicht mehr an ein Molekülorbital gebunden ist und sich somit als freies Leitungselektron am Stromfluss beteiligen kann.
2. Ein Loch (engl. hole) in einer kovalenten Bindung. Unter Einwirkung eines externen Feldes kann sich dieses Loch innerhalb der Atomorbitale gleicher Energie verschieben. Genauer gesagt verschiebt sich nicht das Loch, sondern ein anderes Elektron von einem Orbital gleicher oder ähnlicher Energie kann die Stelle des Lochs einnehmen und an einer andern Stelle ein Loch hinterlassen. Dies führt zu einem zusätzlichen Beitrag zum Stromfluss. In einer quantenmechanischen Betrachtungsweise kann das Loch wie ein eigenständiges Quasi-Teilchen mit positiver Ladung behandelt werden, das in Richtung des externen elektrischen Feldes driftet.

Elektronen und Löcher haben unterschiedliche Beweglichkeiten und tragen daher unterschiedlich stark zum Stromfluss bei. Damit ein Kristall den Strom überhaupt leiten kann, darf die zur Erzeugung freier Elektronen notwendige Energie nicht zu hoch, die Bandlücke also nicht zu groß sein. Die Zahl der freien Elektronen und Löcher nimmt mit der Temperatur zu; dementsprechend steigt auch die Leitfähigkeit mit der Temperatur. Die hier qualitativ beschriebenen Mechanismen lassen sich quantitativ beschreiben, indem die Schrödinger-Gleichung im periodischen Potenzial des Kristallgitters gelöst wird. Dies wird im folgenden Kapitel näher beschrieben.

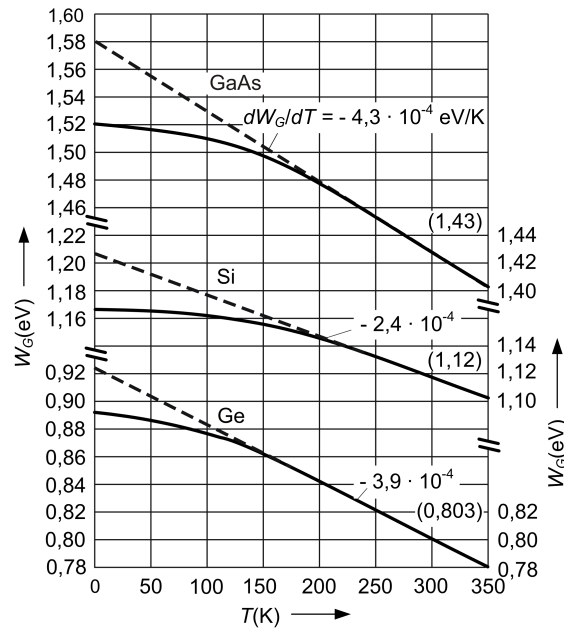


Abbildung 1.17: Bandabstand von Ge, Si und GaAs als Funktion der Temperatur. Die gestrichelten Linien entsprechen der linearen Näherung bei Raumtemperatur ($T_0 = 300\text{ K}$). Die in Klammern angegebenen Werte beschreiben den Bandabstand (in eV) bei $T_0 = 300\text{ K}$. Für Ge ist der Bandabstand der direkten Bandlücke angegeben, siehe auch Abschnitt 2.2.6. Bei der Darstellung wurden auf der vertikalen Achse für Si, Ge und GaAs jeweils eigene Energieskalen verwendet, die jeweils auf der rechten Seite des Diagramms beginnen und auf der linken Seite weitergeführt werden. Die Übergänge sind jeweils durch Unterbrechungen gekennzeichnet.

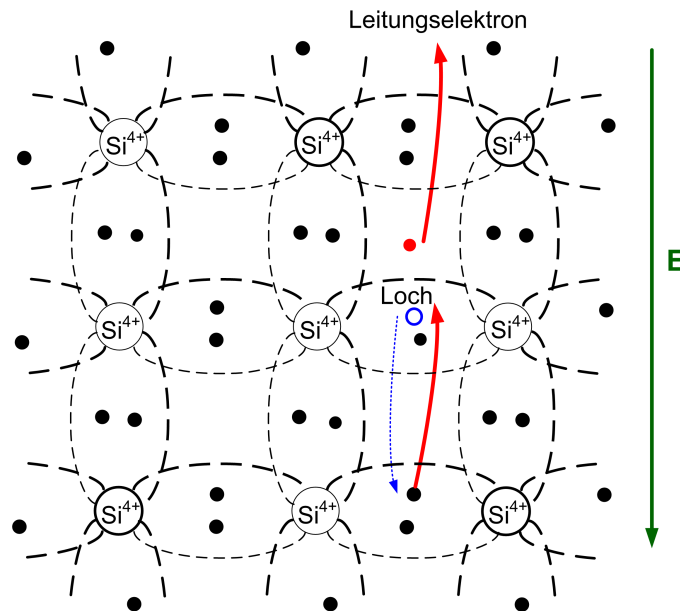


Abbildung 1.18: Vereinfachte Erklärung der elektrischen Leitung im Halbleiter: Der positiv geladene Atomrumpf ist von Elektronenwolken umgeben. Zur Vereinfachung sind nur die äußeren Elektronen als Punkte eingezeichnet, die die kovalenten Bindungen zwischen benachbarten Gitteratomen bilden. Ebenso beinhaltet die beim Atomrumpf eingezeichnete vierfach positive Ladung nur diejenigen Ladungen, die zur Kompensation der Außenelektronen benötigt werden. Im Bild ist eine kovalente Bindung aufgebrochen. Es bildet sich ein freies Elektron (rot), welches sich im Halbleiter unter Einwirkung eines externen Feldes bewegen und damit zum Stromfluss beitragen kann. Das Elektron hinterlässt ein Loch (blauer Kreis) in einer kovalenten Bindung. Benachbarte Elektronen können unter Einwirkung eines externen elektrischen Feldes in dieses Loch gelangen und tragen so zur Leitfähigkeit des Materials bei.

Kapitel 2

Bandstruktur von Halbleitern

Im Folgenden wollen wir ein tieferes Verständnis der Energieniveaus und insbesondere der Bandstrukturen in Halbleitern gewinnen. Während wir die Entstehung von Bändern im vorhergehenden Kapitel eher qualitativ diskutiert haben, so möchten wir in diesem Kapitel den quantenmechanischen Hintergrund erläutern. Die behandelten Verfahren sind nicht nur auf Halbleiter beschränkt, sondern geben einen Einblick in allgemeingültige Modelle der Festkörperphysik.

2.1 Quantenmechanische Grundlagen

2.1.1 Grundzüge der Quantenmechanik und Schrödinger-Gleichung

In der Quantenmechanik werden Partikel in einem System durch die Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ beschrieben. Die zugehörige Wellengleichung ist die Schrödinger-Gleichung; sie bildet eine wichtige Grundlage der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Die Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ ist im allgemeinen komplexwertig und stellt eine sog. Wahrscheinlichkeitsdichteamplitude dar. Wir werden hier kurz einige grundlegende Postulate der Quantenmechanik wiederholen, aus denen sich die Schrödinger-Gleichung ergibt:

1. Jedes Partikel in einem System wird durch eine Wellenfunktion $\Psi(x, y, z, t)$ beschrieben. Diese Funktion ist stetig, endlich und wohldefiniert.
2. Die Wahrscheinlichkeit, das durch die Wellenfunktion $\Psi(x, y, z, t)$ beschriebene Partikel zur Zeit t im Volumenelement $dx dy dz$ am Ort $\mathbf{r} = (x, y, z)$ anzutreffen, ist gegeben durch $|\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz$. Die Größe $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ repräsentiert also eine Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte; $\Psi(x, y, z, t)$ ist die sogenannte Wahrscheinlichkeitsdichteamplitude. Dies führt zu einer Normierung gemäß

$$\iiint |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dx dy dz = 1. \quad (2.1)$$

3. Klassische physikalische Größen wie z.B. die Energie W (in der englischsprachigen Literatur oft auch als E bezeichnet), die Ortskoordinaten (x, y, z) oder der Impuls p entsprechen einem abstrakten quantenmechanischen Operatoren, siehe Tabelle 2.1. Für die Messgröße und den ihr zugeordneten Operator wird in der Quantenmechanik oft der Begriff „Observable“ verwendet.
4. Für einen bestimmten Quantenzustand können im allgemeinen keine eindeutig bestimmten physikalischen Messgrößen mehr angegeben werden, sondern nur noch Wahrscheinlichkeiten, mit denen bei einer Messung bestimmte Messwerte erzielt werden. Der Erwartungswert $\langle Q \rangle$ für eine Observable Q lässt sich aus der Wellenfunktion $\Psi(x, y, z, t)$ mit Hilfe des zugehörigen,

Klassische Größe	Klassische Variable Q	Quantenmechanischer Operator $\mathbf{Q}_{\text{op}}$
Ort	x	x
	$f(x)$	$f(x)$
Impuls	$\mathbf{p}(x)$	$-\mathrm{j}\hbar\nabla$
Energie	W	$\mathrm{j}\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

Tabelle 2.1: Klassische Variablen Q und zugehörige Operatoren $\mathbf{Q}_{\text{op}}$ der Quantenmechanik. $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$ bezeichnet den sog. Nabla-Operator.

unter 3. definierten Operators $\mathbf{Q}_{\text{op}}$ berechnen,

$$\langle Q \rangle = \iiint \Psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{Q}_{\text{op}} \Psi(\mathbf{r}, t) \, dx \, dy \, dz. \quad (2.2)$$

5. Es gibt zu jeder Observablen Q einen Satz von speziellen Zuständen Ψ_Q , bei denen das Ergebnis einer Messung eindeutig feststeht. Ein solcher Zustand wird „Eigenzustand“ der betreffenden Observablen genannt, und das zugehörige Messergebnis ist einer der „Eigenwerte“ des zur Observablen gehörenden Operators $\mathbf{Q}_{\text{op}}$,

$$\mathbf{Q}_{\text{op}} \Psi_Q = Q \Psi_Q. \quad (2.3)$$

Ein bekanntes Beispiel für die unter 4. beschriebene Unschärfe von Messergebnissen ist die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation, nach der sich beispielsweise Ort x und der Impuls p eines Teilchens nicht gleichzeitig beliebig genau messen lassen. Die jeweiligen Messunsicherheiten σ_x für den Ort und σ_p für den Impuls erfüllen dabei stets die folgende Ungleichung

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.4)$$

Mit diesen Postulaten wurde allerdings noch keine Aussage darüber getroffen, wie sich die Wellenfunktion $\Psi(x, y, z, t)$ eines Teilchens nun tatsächlich berechnen lässt. Diese Frage wird durch die 1926 von Erwin Schrödinger für quantenmechanische Teilchen entwickelte Wellengleichung, die sog. Schrödinger-Gleichung, gelöst. Die Schrödinger-Gleichung ergibt sich direkt aus der Eigenwertgleichung für die Gesamtenergie des Systems. Die Gesamtenergie eines Systems von Teilchen als Funktion der Orte und des Impulses der Teilchen wird durch die sog. Hamiltonfunktion¹ $H(\mathbf{r}, t)$ des Systems beschrieben. Für ein einfaches Teilchen, das sich in einem ortsabhängigen Potentialfeld $W_{\text{pot}}(\mathbf{r})$ bewegt, erhält man die Hamiltonfunktion einfach durch die Addition der kinetischen Energie $W_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m}$ und der ortsabhängigen potentiellen Energie $W_{\text{pot}}(\mathbf{r})$,

$$H(\mathbf{r}, t) = \frac{p^2}{2m} + W_{\text{pot}}(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

Der zur Hamilton-Funktion gehörende Operator $\mathbf{Q}$ lässt sich nach Tabelle 2.1 schreiben als

$$\mathbf{Q} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + W_{\text{pot}}(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.6)$$

wobei $\Delta = \nabla^T \nabla$ den Laplace-Operator bezeichnet. Gleichzeitig lässt sich die Gesamtenergie nach Tabelle 2.1 durch den quantenmechanischen Operator $\mathrm{j}\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ ausdrücken. Gleichsetzen der beiden Operatoren führt zur sog. zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + W_{\text{pot}}(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathrm{j}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.7)$$

¹Unter der Hamiltonfunktion eines Teilchens oder eines Systems von Teilchen versteht man eine Vorschrift, mit der die Gesamtenergie des Systems als Funktion der Orte und Impulse der Teilchen ausgedrückt werden kann.

2.1.2 Zeitabhängige und zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Die in Gl. (2.7) formulierte Form der Schrödinger-Gleichung weist sowohl eine Orts- als auch eine Zeitabhängigkeit auf. Diese Abhängigkeiten werden üblicherweise separat berechnet und anschließend wieder kombiniert. Darüber hinaus sind viele Probleme zeitunabhängig, und man ist nur an der Ortsabhängigkeit interessiert. Es ist dann üblich, einen Separationsansatz für die Wahrscheinlichkeitsdichte $\Psi(\mathbf{r}, t)$ zu verwenden,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(x)\phi(t). \quad (2.8)$$

Dieser Ansatz führt zu einer harmonischen Zeitabhängigkeit der Form

$$\phi(t) = \phi_0 e^{-j \frac{W}{\hbar} t}, \quad (2.9)$$

wobei die Separationskonstante W der Gesamtenergie des Partikels entspricht. Die Ortsabhängigkeit ist dann durch die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung gegeben,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + W_{\text{pot}}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = W \psi(\mathbf{r}). \quad (2.10)$$

Diese Gleichung wird für das Verhalten von Elektronen im Halbleiter von großer Bedeutung sein.

Zeitvariante Vorgänge wie z.B. die Bewegung eines Elektrons lassen sich durch eine entsprechende Überlagerung stationärer Zustände darstellen. Zu diesem Zweck zerlegt man zunächst die Zeitabhängigkeit $\phi(t)$ durch eine Fourier-Transformation in die zugehörigen spektralen Komponenten und berechnet dann nach Gl. (2.10) die zeitunabhängigen Lösungen. Durch Überlagerung der zugehörigen Lösungsfunktionen und Rücktransformation ergibt sich daraus die zeitabhängige Lösung.

2.1.3 Das freie Elektron

Zur Illustration wesentlicher Konzepte des Elektronentransportes in Halbleitern betrachten wir zunächst die Propagation eines freien Elektrons. Dazu stellen wir die entsprechende Schrödinger-Gleichung auf und lösen sie.

Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

Wir betrachten ein Elektron mit Gesamtenergie W in einem unendlich ausgedehnten räumlich konstanten Potenzialfeld mit potentieller Energie W_0 . Als Basis der Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung erhält man

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 e^{j\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (2.11)$$

Die zugehörige Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung lautet

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi_0 e^{j(\mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{W(\mathbf{k})}{\hbar} t)}, \quad (2.12)$$

wobei der Zusammenhang zwischen der Gesamtenergie W und der Wellenzahl $\mathbf{k}$ bzw. dem Impuls $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ gegeben ist durch die sogenannte Dispersionsrelation

$$W(\mathbf{k}) = W_0 + \frac{(\hbar\mathbf{k})^2}{2m}. \quad (2.13)$$

Man könnte nun versucht sein, zu fragen, wo sich das Elektron auf der x -Achse befindet. Dazu betrachtet man die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ und gelangt zu dem Ergebnis, dass diese entlang der x -Achse einen konstanten Wert annimmt und das Elektron daher als vollständig delokalisiert betrachtet werden muss. Dieses Ergebnis ist eine Konsequenz der Orts-Impuls-Unschärfe, nach dem Ort und Impuls eines Teilchens nie gleichzeitig mit beliebiger

Genauigkeit ermittelt werden können. Das Produkt der Messunsicherheiten σ_x für den Ort und σ_p für den Impuls erfüllen dabei stets die in Gl. 2.4 beschriebene Beziehung. Im vorliegenden Beispiel waren wir von einem Zustand mit fest vorgegebener Wellenzahl $\mathbf{k}$ ausgegangen ($\sigma_p = 0$), die dann unweigerlich zu einer maximalen Unschärfe im Ort ($\sigma_x \rightarrow \infty$). Umgekehrt gilt, dass ein lokalisiertes Elektron einen unscharfen Impuls aufweisen muss, damit man dem Teilchen überhaupt einen Aufenthaltsort zuweisen kann. Ein lokalisiertes Elektron mit mittlerem Impuls $\hbar k_0$ lässt sich also nur darstellen durch ein Wellenpaket mit mittlerem Wellenvektor k und einer zeitlich-örtlich Einhüllenden $a(x, t)$.

Gruppengeschwindigkeit

Wir wollen nun untersuchen, wie sich die Bewegung eines lokalisierten Elektrons anhand der Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ beschreiben lässt. Zur Vereinfachung nehmen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit ein Koordinatensystem an, dessen x-Achse parallel zum Impuls $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ des Teilchens ausgerichtet ist, so dass wir unsere Betrachtung ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf ein eindimensionales, nur von x abhängiges Problem reduzieren können. Das lokalisierte Elektron lässt sich darstellen durch ein Wellenpaket mit mittlerer Wellenzahl k_0 und einer zeitlich-örtlichen Einhüllenden $a(x, t)$,

$$\Psi(x, t) = a(x, t) e^{j(k_0 x - \frac{W(k_0)}{\hbar} t)}. \quad (2.14)$$

Für $t = 0$ sei der Aufenthaltsort des Elektrons bekannt und durch die Einhüllende $a(x, 0)$ beschrieben,

$$\Psi(x, 0) = a(x, 0) e^{jk_0 x}. \quad (2.15)$$

Gesucht ist nun die durch $a(x, t)$ beschriebene Position des Elektrons für $t > 0$. Die zeitliche Entwicklung für eine bestimmte Komponente der Raumfrequenz k ist durch Gl. 2.12 gegeben. Um diese Beziehung anwenden zu können, müssen wir das Wellenpaket nach Gl. 2.15 zunächst in seine Raumfrequenzkomponenten bzgl. des Ortes zerlegen. Das geschieht durch eine Fourier-Transformation bzgl. x ,

$$\tilde{\Psi}(k, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{-jkx} dx = \tilde{a}(k - k_0, 0), \quad (2.16)$$

wobei die Tilde ($\tilde{}$) die Fourier-Transformierte der jeweiligen Funktion bzgl. des Ortes x bezeichnet. Für jede k -Komponente lässt sich die zeitliche Entwicklung beschreiben durch einen Faktor $e^{-j\frac{W(k)}{\hbar}t}$. Für das Raumfrequenzspektrum zum Zeitpunkt t ergibt sich daraus die Beziehung

$$\tilde{\Psi}(k, t) = \tilde{a}(k - k_0, t) e^{-j\frac{W(k)}{\hbar}t}. \quad (2.17)$$

Um die zeitliche Entwicklung zu kennen, muss man also die Dispersionsrelation $W(k)$ kennen. Für den Fall eines freien Elektrons ist diese noch recht einfach, siehe Gl. 2.13. Wir werden im nächsten Abschnitt jedoch auch Fälle mit komplizierteren Dispersionsrelationen betrachten, die sich beispielsweise aus der Wechselwirkung mit einem periodischen Potenzial ergeben und sich nicht mehr analytisch darstellen lassen. Zur Vereinfachung entwickelt man die Dispersionsrelation in eine Potenzreihe um die mittlere Raumfrequenz k_0 des Wellenpaketes:

$$W(k) = W(k_0) + \left. \frac{\partial W}{\partial k} \right|_{k=k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 W}{\partial k^2} \right|_{k=k_0} (k - k_0)^2. \quad (2.18)$$

Bricht man nach dem linearen Term ab, so erhält man durch Einsetzen von Gl. 25 in Gl. 24 und Rücktransformation die Lösung für $t > 0$:

$$\Psi(x, t) = a\left(x - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial W}{\partial k} t, 0\right) e^{j(k_0 x - \frac{W(k_0)}{\hbar} t)} = a(x - v_g t, 0) e^{j(k_0 x - \frac{W(k_0)}{\hbar} t)}. \quad (2.19)$$

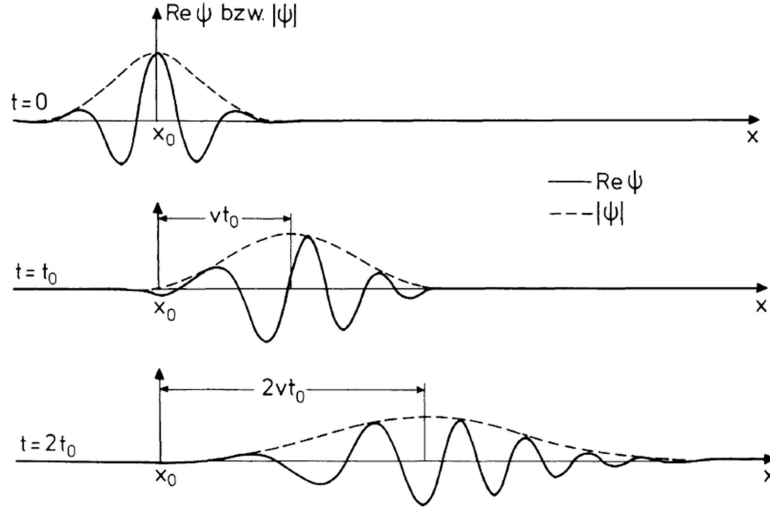


Abbildung 2.1: Bewegung eines lokalisierten Wellenpakets entlang der x -Richtung. Die zugehörige Gruppengeschwindigkeit ist gegeben durch die erste Ableitung der Dispersionsrelation $W(k)$. Ableitungen zweiter und höherer Ordnung führen zum „Zerfließen“ des Pulses mit der Zeit. Eine anschauliche Erklärung baut auf der Tatsache auf, dass das lokalisierte Elektron per Definition ein breites Spektrum an Impulsen $\hbar k$ annehmen kann. Damit ist bereits die anfängliche Geschwindigkeit unbestimmt, was im weiteren zeitlichen Verlauf zu einer mit der Zeit immer stärker anwachsenden Unsicherheit des Aufenthaltsortes und damit zu einem Zerfließen des zum Elektron gehörenden Wellenpakets führt.

Das Wellenpaket hat sich also in der Zeit t um die Strecke $\frac{1}{\hbar} \frac{\partial W}{\partial k} \Big|_{k=k_0} t$ weiterbewegt. Die Gruppengeschwindigkeit v_g beträgt also

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial W}{\partial k} \Big|_{k=k_0}. \quad (2.20)$$

Gl. (2.20) kann auch als Ableitung der Gesamtenergie W nach dem Impuls $p = \hbar k$ interpretiert werden und ist konsistent mit dem klassischen Modell - auch hier ergibt sich die Geschwindigkeit $v = \frac{p}{m}$ aus der Ableitung der Energie $W = \frac{p^2}{2m} + W_{\text{pot}}$ nach dem Impuls p .

Höhere Ableitungen in Gl. (2.18) führen zum Zerfließen des Wellenpaketes, siehe Abb. 2.1. Dies ist auch anschaulich klar: Ein lokalisiertes Elektron besteht aufgrund der Impulsunschärfe aus einer Überlagerung vieler Zustände mit verschiedenen Impulsen, die sich also unterschiedlich schnell fortbewegen. Dies führt für $t > 0$ dazu, dass das anfangs lokalisierte Wellenpaket zunehmend delokalisiert wird und „zerfließt“.

Die vorstehenden Betrachtungen wurde für den eindimensionalen Fall abgeleitet, lassen sich aber auf drei Dimensionen verallgemeinern. Die Gruppengeschwindigkeit eines Wellenpakets ergibt sich dann aus dem Gradienten der Dispersionsrelation bzgl. $\mathbf{k}$,

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} W(\mathbf{k}). \quad (2.21)$$

2.2 Das Elektron im Festkörper

Nachdem im vorhergehenden Abschnitt freie Elektronen betrachtet wurden, wollen wir uns nun dem Verhalten von Elektronen im Festkörper zuwenden. Ein schematisches Modell eines Halbleiterkristalls ist in Abb. 2.2 skizziert. Der Kristall wird im Inneren durch ein statisches Potential $W_{\text{pot}}(\mathbf{r})$ beschrieben, das vom periodischen Gitter der positiv geladenen Atomrümpfe herrührt und dementsprechend dieselbe Periodizität aufweist wie das Kristallgitter,

$$W_{\text{pot}}(\mathbf{r}) = W_{\text{pot}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (2.22)$$

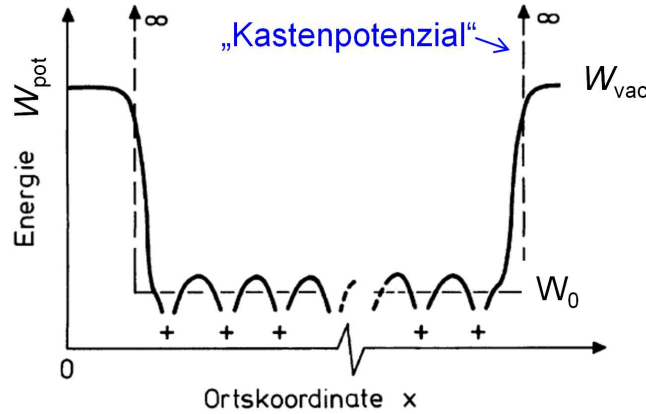


Abbildung 2.2: Schematisches Modell eines Halbleiterkristalls: Der Kristall wird im Inneren durch ein statisches Potential $W_{\text{pot}}(\mathbf{r})$ beschrieben, das vom periodischen Gitter der positiv geladenen Atomrümpfe herrührt und dementsprechend dieselbe Periodizität aufweist wie das Kristallgitter. W_{vac} bezeichnet das Vakuum-Energieniveau, auf das ein Elektron gebracht werden muss, wenn es aus dem Kristall entfernt werden soll. In einem stark vereinfachten Modell wird der Halbleiterkristall durch ein Kastenpotential (gestrichelt) beschrieben, das an der Oberfläche unendlich hohe Energiebarrieren aufweist. Dieses Kastenpotential weist im Inneren des Festkörpers eine über dem Ort x konstante potentielle Energie W_0 auf, so dass sich die Elektronen dort genauso verhalten wie freie Elektronen im Vakuum (quasi-freies Elektronengas). (Bildquelle: [3])

wobei es sich bei $\mathbf{R}$ um einen Gittervektor handelt, also um einen Translationsvektor, der das Kristallgitter des Halbleiters in sich selbst überführt, siehe Abschnitt 1.2. W_{vac} bezeichnet das Vakuum-Energieniveau, auf das ein Elektron gebracht werden muss, wenn es aus dem Kristall entfernt werden soll. Zunächst wird ein stark vereinfachtes Modell betrachtet, in dem der Halbleiterkristall durch ein Kastenpotential angenähert wird (sog. Sommerfeld-Modell). Aus diesem sehr einfachen Modell lassen sich bereits wichtige Größen wie z.B. die Zustandsdichte im Inneren des Halbleiters ableiten. Darauf aufbauend wird dann mit Hilfe des Bloch Theorems ein Modell entwickelt, das das periodische Potential im Inneren des Halbleiters bei der Dispersionsrelation der Elektronen berücksichtigt.

2.2.1 Das Elektron im dreidimensionalen Potentialkasten (Sommerfeld-Modell)

Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

Zunächst wird ein stark vereinfachtes Modell betrachtet, in dem der Halbleiterkristall durch ein Kastenpotential beschrieben wird, das im Inneren des Festkörpers eine über dem Ort x konstante potentielle Energie W_0 aufweist und das an der Oberfläche unendlich hohe Energiebarrieren besitzt, siehe Abb. 2.2. Der Halbleiterkristall sei quaderförmig mit Kantenlängen L_x , L_y , und L_z in x -, y - und z -Richtung. Die zugehörige potentielle Energie $W_{\text{pot}}(\mathbf{r})$ lässt sich also schreiben als

$$W_{\text{pot}}(\mathbf{r}) \begin{cases} = W_0 & \text{falls } 0 < x < L_x \wedge 0 < y < L_y \wedge 0 < z < L_z \\ \rightarrow \infty & \text{sonst} \end{cases} . \quad (2.23)$$

Die Elektronen im Inneren des Festkörpers werden sich also genauso verhalten wie freie Elektronen im Vakuum (quasi-freies Elektronengas), sind aber durch die Energiebarrieren an der Oberfläche strikt auf das Volumen des Halbleiters begrenzt. Die zeitunabhängige Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ der Elektronen muss also auf der Oberfläche und im Außenraum des Halbleiters den Wert Null annehmen, während sie im Inneren des Halbleiters die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung, Gl. (2.10)

mit konstantem Potenzial W_0 erfüllt,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) = (W - W_0)\psi(\mathbf{r}). \quad (2.24)$$

Die entsprechenden Lösungen $\psi(\mathbf{r})$ ergeben sich nach Normierung gemäß Gl. (2.1) zu

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) & \text{falls } 0 < x, y, z < L \\ \rightarrow \infty & \text{sonst} \end{cases}, \quad (2.25)$$

wobei die Wellenzahlen k_x , k_y und k_z aufgrund der Randbedingungen an der Oberfläche des Halbleiterkristalls die folgenden Beziehungen erfüllen müssen:

$$k_x L_x = n_x \pi, \quad k_y L_y = n_y \pi, \quad k_z L_z = n_z \pi; \quad n_{x,y,z} \in \mathbb{N}. \quad (2.26)$$

Dabei ist zu beachten, dass k_x , k_y und k_z nur positive Werte annehmen – negative Werte führen gemäß Gl. (2.25) lediglich zu einer Änderung des Vorzeichens von $\psi(\mathbf{r})$, was keiner neuen Lösung und auch keinem neuen, durch weitere Elektronen besetzbaren Quantenzustand entspricht. Die zugehörige Dispersionsrelation entspricht der eines freien Elektrons,

$$W = W_0 + \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m}, \quad (2.27)$$

wobei

$$|\mathbf{k}|^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2, \quad (2.28)$$

und wobei nach Gl.(2.26) eben nur bestimmte Wellenzahlen k_x , k_y , k_z und damit auch nur bestimmte diskrete Energieniveaus überhaupt zulässig sind.

Zustandsdichte

Die Quantisierung der zulässigen Energieniveaus gemäß Gl. (2.26), Gl. (2.27) und Gl. (2.28) führt in Verbindung mit dem Pauli-Prinzip dazu, dass innerhalb des Halbleiters für einen gegebene maximale Energie W nur eine bestimmte Zahl von besetzbaren elektronischen Zuständen $N(W)$ überhaupt vorhanden ist. Die Anzahl der besetzbaren Zustände pro Energieintervall und pro Volumen lassen sich durch die sog. Zustandsdichte $\rho(W) = \frac{1}{V} \frac{dN}{dW}$ beschreiben. Zur Berechnung der Zustandsdichte veranschaulichen wir uns zunächst die Zustände mit maximaler Energie W im durch k_x , k_y und k_z aufgespannten reziproken Raum („k-Raum“), siehe Abb. (2.3). Die Energie W ist nach Gl.(2.27) proportional zu $|\mathbf{k}|^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$; die Zustände mit maximaler Energie W liegen also innerhalb einer Kugel mit einem von W abhängigen Radius $|\mathbf{k}| = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (W - W_0)}$. Nach Gl. (2.26) sind innerhalb dieser Kugel nur diskrete Werte zulässig, die sich in k_x -, k_y -, und k_z -Richtung um $\frac{\pi}{L_x}$, $\frac{\pi}{L_y}$ und $\frac{\pi}{L_z}$ unterscheiden. Ein einzelner Zustand nimmt also im k-Raum das Volumen $\Delta V_k = \frac{\pi^3}{V}$ ein, wobei $V = L_x L_y L_z$ das Volumen des quaderförmigen Halbleiters beschreibt. Zusätzlich kommen gemäß Gl. (2.25) nur positive Werte von k_x , k_y und k_z in Frage; das im k-Raum besetzbare Volumen beschränkt sich also auf eine Achtelkugel im ersten Oktanten des k-Raumes. Das Volumen dieser Achtelkugel im k-Raum beträgt

$$V_k = \frac{1}{6} \pi \left(\frac{2m}{\hbar^2} (W - W_0) \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.29)$$

Berücksichtigt man zusätzlich, dass jeder Quantenzustand aufgrund der Spinartung von maximal zwei Elektronen besetzt werden kann, so ergibt sich die Zahl der für eine gegebene maximale Energie besetzbaren elektronischen Zuständen zu

$$N(W) = 2 \frac{V_k}{\Delta V_k} = \frac{8}{3} \pi V \frac{(2m)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} (W - W_0)^{\frac{3}{2}}. \quad (2.30)$$

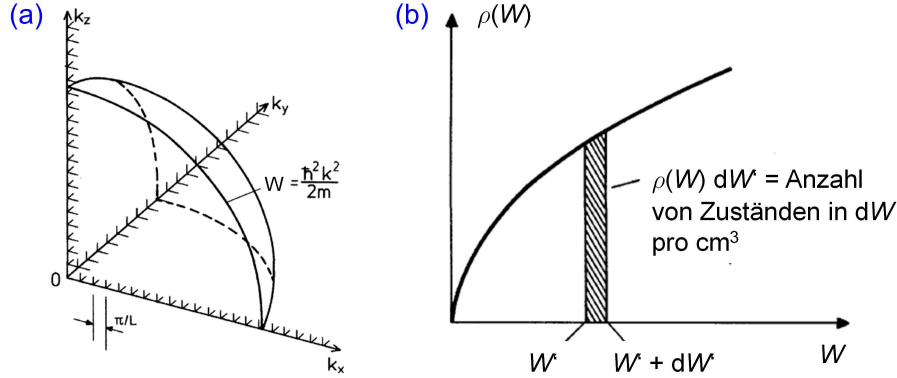


Abbildung 2.3: Berechnung der Zustandsdichte des freien Elektronengases. (a) Zunächst wird die Anzahl $N(W)$ der Zustände mit maximaler Energie W im durch k_x , k_y und k_z aufgespannten reziproken Raum („k-Raum“) ermittelt. Die Energie W ist proportional zu $|\mathbf{k}|^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, wobei k_x , k_y und k_z nur positive Werte annehmen dürfen. Die Zustände mit maximaler Energie W liegen also innerhalb einer Achtelkugel mit einem von W abhängigen Radius $|\mathbf{k}| = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (W - W_0)}$, deren Volumen $V_k = \frac{1}{6} \pi \left(\frac{2m}{\hbar^2} (W - W_0) \right)^{\frac{3}{2}}$ beträgt. Nach Gl. (2.26) sind innerhalb dieses Volumens nur diskrete Werte zulässig, die sich in k_x -, k_y -, und k_z -Richtung um $\frac{\pi}{L_x}$, $\frac{\pi}{L_y}$ und $\frac{\pi}{L_z}$ unterscheiden. Berücksichtigt man zusätzlich die Spinartung der Zustände, so ergibt sich die Zahl der für eine gegebene maximale Energie besetzbaren elektronischen Zustände gemäß Gl. 2.31. (b) Die $\rho(W)$ gibt die Anzahl der Zustände bezogen auf das Volumen V und das Energieintervall dW . Die Zustandsdichte nimmt mit der Wurzel der kinetischen Energie $W - W_0$ zu. (Bildquelle: [3])

Für die Zustandsdichte $\rho(W)$ des Halbleiters erhält man damit die Beziehung

$$\rho(W) = \frac{1}{V} \frac{dN}{dW} = 4\pi \frac{(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{W - W_0}. \quad (2.31)$$

Die Zustandsdichte nimmt also mit der Wurzel der kinetischen Energie $W - W_0$ zu, siehe Abb. 2.3 (b).

2.2.2 Elektronen im eindimensionalen periodischen Potential

Der im vorhergehenden Abschnitt betrachtete dreidimensionale Potentialkasten stellt ein sehr grobes Modell eines Halbleiters dar, bei dem insbesondere der Einfluss der periodisch angeordneten Gitteratome auf die Zustände der Elektronen vernachlässigt wurde. Dieses Modell soll nun verfeinert werden. Dazu untersuchen wir, wie sich die Dispersionsrelation der äußeren Elektronenwellen in einem Festkörper ändert, wenn Atome zu einem Kristall zusammengefügt werden. Aus der regelmäßigen periodischen Anordnung der Atome im Kristallgitter ergibt sich ein periodischer Verlauf der zugehörigen potentiellen Energie $W_{\text{pot}}(\mathbf{r})$,

$$W_{\text{pot}}(\mathbf{r}) = W_{\text{pot}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (2.32)$$

wobei es sich bei $\mathbf{R}$ um einen Gittervektor handelt, also um einen Translationsvektor, der das Gitter unverändert lässt. Die gesuchten Zustände der äußeren Elektronen im periodischen Potential $W_{\text{pot}}(\mathbf{r}) = W_{\text{pot}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ der Atomrümpfe ergeben sich aus der Lösung der zugehörigen stationären Schrödinger-Gleichung gemäß Gl.(2.7). In diesem Zusammenhang kommt das sog. Bloch-Theorem zur Anwendung, siehe [4].

Bloch-Theorem: Die Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung für ein periodisches Potential $W_{\text{pot}}(\mathbf{r}) = W_{\text{pot}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ sind das Produkt aus einer ebenen Welle $\exp(j\mathbf{k}\mathbf{r})$ und einer Funktion $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, die die gleiche Periodizität aufweist wie das Kristallgitter,

$$\psi(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{j\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (2.33)$$

wobei

$$u_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_k(\mathbf{r}). \quad (2.34)$$

Die Bedeutung des Bloch-Theorems soll anhand eines vereinfachten Beispiels im Eindimensionalen verdeutlicht werden. Bild 2.4 zeigt ein eindimensionales periodisches Potential $W_{\text{pot}}(x) = W_{\text{pot}}(x + a)$, welches durch die periodische Anordnung der Atomrümpfe mit Abstand a erzeugt wird. Das Bloch-Theorem besagt nun, dass sich die Lösungen $\psi_k(x)$ der stationären Schrödinger-Gleichung in diesem Potential schreiben lassen als Produkte einer periodischen Funktion $u_k(x)$ und einer Welle $\exp(jkx)$,

$$\psi_k(x) = u_k(x) e^{jkx}, \quad (2.35)$$

wobei

$$u_k(x + a) = u_k(x). \quad (2.36)$$

Die Funktion $u_k(x)$ lässt sich in eine Fourier-Reihe entwickeln,

$$u_k(x) = \sum_{\nu} c_{k,\nu} e^{j\nu Kx}, \quad (2.37)$$

wobei $K = \frac{2\pi}{a}$ die Wellenzahl des periodischen Gitters bezeichnet. Eingesetzt in Gl.(2.35) ergibt sich daraus die Beziehung

$$\begin{aligned} \psi_k(x) &= \sum_{\nu} c_{k,\nu} e^{j\nu Kx} e^{jkx} = \sum_{\nu} c_{k,\nu} e^{j(\nu-1)Kx} e^{j(k+K)x} = \psi_{k+K}(x) \\ &= \sum_{\nu} c_{k,\nu} e^{j(\nu-2)Kx} e^{j(k+2K)x} = \psi_{k+2K}(x) \\ &= \sum_{\nu} c_{k,\nu} e^{j(\nu-3)Kx} e^{j(k+3K)x} = \psi_{k+3K}(x) \\ &= \sum_{\nu} c_{k,\nu} e^{j(\nu-n)Kx} e^{j(k+nK)x} = \psi_{k+nK}(x). \end{aligned} \quad (2.38)$$

Die zur Wellenzahl k gehörende Lösung $\psi_k(x)$ lässt sich also aufgrund der Periodizität der Funktion $u_k(x)$ auch als eine zur Wellenzahl $k + nK$ gehörende Lösung $\psi_{k+nK}(x)$ interpretieren. Mit anderen Worten: Die Gesamtheit aller Lösungen, die sich zur Wellenzahl k finden lassen, ist dieselbe, die sich auch zu einer um ein ganzzahliges Vielfaches der Gitter-Wellenzahl K verschobenen Wellenzahl k ergeben. Zur Beschreibung der k -Abhängigkeit der Lösungen $\psi_k(x)$ und ihrer Eigenschaften genügt es also, sich auf das Intervall $[-K/2, K/2]$ zu beschränken. Dieser Bereich wird in der Festkörperphysik auch als die erste Brillouin-Zone bezeichnet - nach der ersten Brillouin-Zone wiederholt sich die gesamte Struktur periodisch.

Um zu verstehen, wie die Bloch-Bedingungen die Dispersionsrelationen verändern, betrachten wir nun das sehr einfache Beispiel eines Elektrons in einem periodischen Gitter mit Periode a . Nehmen wir zunächst ein verschwindendes Potential der Atomrümpfe an, $W_{\text{pot}}(x) = 0$. In diesem Fall liegt ein freies Elektron vor, das eine Wellenfunktion der Form $\psi(x) = ce^{jk'x}$ besitzt, und dessen Dispersionsrelation gegeben ist durch

$$W(k') = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}. \quad (2.39)$$

Natürlich erfüllt ein konstantes Potential auch die Periodizitätsbedingung $W_{\text{pot}}(x+a) = W_{\text{pot}}(x) = 0$, so dass das Bloch-Theorem im Prinzip auch auf den Fall des freien Elektrons angewendet werden kann. Dementsprechend muss es möglich sein, die Wellenfunktion des freien Elektrons als Produkt

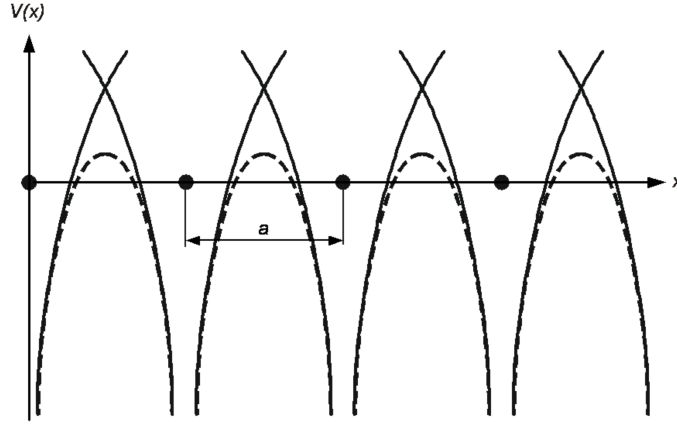


Abbildung 2.4: Periodisches Potential $W_{\text{pot}}(x) = W_{\text{pot}}(x + a)$, gestrichelt gezeichnet, erzeugt durch die periodische Anordnung von Atomrümpfen, deren jeweiliges Potential durchgezogen gezeichnet ist.

einer periodischen Funktion $u_k(x) = u_k(x + a)$ und einer ebenen Welle $\exp(jkx)$ mit Wellenzahl k zu schreiben,

$$\psi(x) = ce^{jk'x} = ce^{jnKx} e^{j(k' - nK)x} = u_k(x) e^{jkx} = \psi_k(x), \quad k = k' - nK, \quad u_k(x) = ce^{jnKx}, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (2.40)$$

Mit dieser Darstellung wird es also möglich, die Wellenzahl k' des freien Elektrons in eine Summe aus dem nächstliegenden ganzzahligen Vielfachen nK der Gitter-Wellenzahl K und der fehlenden Differenz $k = k' - nK$ zu zerlegen und damit die Analyse der Dispersionsrelation des freien Elektrons auf die erste Brillouin-Zone, $k \in [-K/2, K/2]$ zu reduzieren. Damit ergeben sich für eine Wellenzahl k der ersten Brillouin-Zone mehrere Energien $W_n(k)$, die den um nK verschobenen Wellenzahlen $k' = k + nK$ des freien Elektrons in der ursprünglichen Darstellung entsprechen,

$$W(k) = \frac{\hbar^2 (k + nK)^2}{2m}. \quad (2.41)$$

Dies ist beispielhaft in Abb. 2.5 (a) bis (c) illustriert. Zur Konstruktion der ersten Brillouin-Zone kann man sich vorstellen, dass die Dispersionsrelation $W(k')$ des freien Elektrons, dargestellt als Funktion der Wellenzahl von $-\infty < k' < \infty$, auf die erste Brillouin-Zone zurückgefaltet wird. Die Ausbreitungskonstante k' , welche zum mechanischen Impuls proportional ist, wird dann durch $k + nK$ ersetzt, wobei die neue Ausbreitungskonstante k nur noch innerhalb der ersten Brillouin-Zone betrachtet werden muss.

Was passiert, wenn wir jetzt das periodische Potential der Atomrümpfe einschalten? Die Wellenfunktionen der Elektronen werden am periodischen Potenzial der Atomrümpfe gestreut, was in Anlehnung an die Streuung von Röntgenphotonen stellenweise auch als “Bragg-Reflexion“ bezeichnet wird. Diese Streuung ist besonders effizient, wenn die halbe Gitterperiode $a/2$ eine ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge $2\pi/k'$ der Wahrscheinlichkeitsdichtewelle $\psi(x)$ beträgt. Dies ist gerade für $k' = nK/2$, $n \in \mathbb{Z}$, also in der Mitte und am Rand der Brillouin-Zone der Fall, da sich in diesem Fall die an benachbarten Gitteratomen reflektierten Teilwellen konstruktiv überlagern. Für diese Wellenzahlen k' bilden sich stehende Wellen mit gleicher Periodizität wie das Kristallgitter aus, siehe Abb. 2.6 (a), wobei für eine dieser stehenden Wellen die Wellenknoten mit den Gitteratomen zusammenfallen, während bei der anderen Welle die Wellenknoten gerade in der Mitte zwischen zwei benachbarten Gitteratomen liegen. Die Wellenknoten entsprechen einer verschwindenden Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons; bei der ersten stehenden Welle (1) hält sich das Elektron daher vornehmlich in der Nähe der Gitteratome, also im Bereich kleiner potentieller Energie $W_{\text{pot}}(x)$ auf; während bei der zweiten stehenden Welle (2) die Aufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen den Gitteratomen, also im Bereich hoher potentieller Energie am höchsten ist.

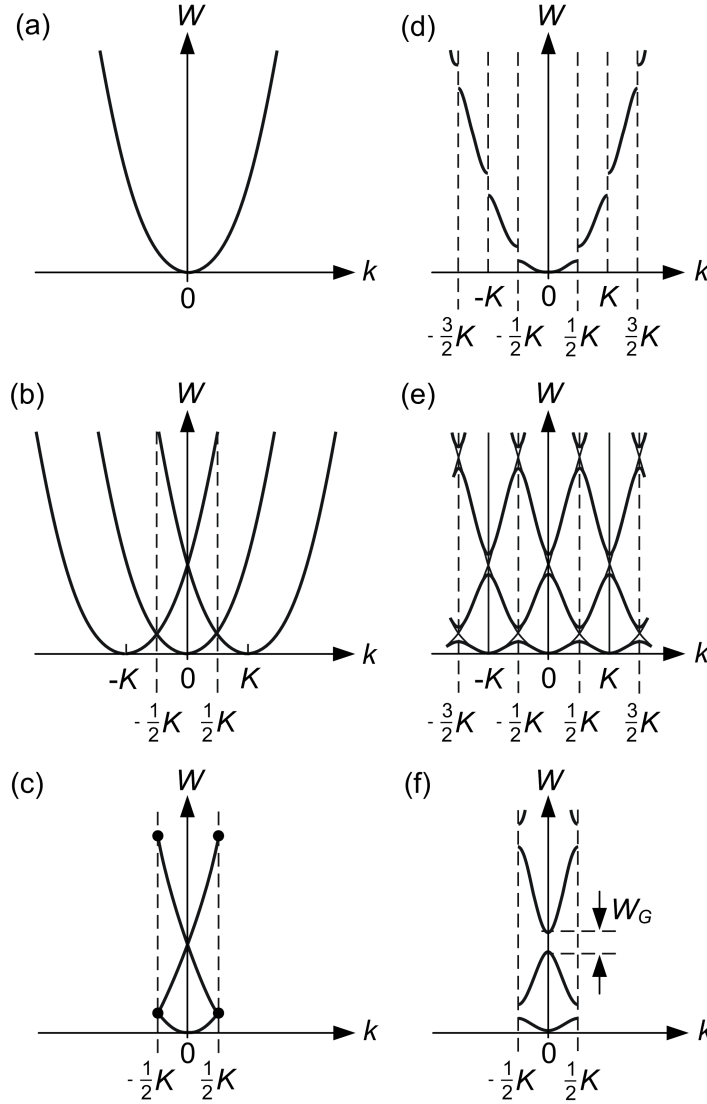


Abbildung 2.5: (a) Dispersionsrelation $W(k') = \hbar^2 k'^2 / (2m)$ des freien Elektrons. (b) Konstruktion der Dispersionsrelation des freien Elektrons unter dem Einfluss eines fiktiven periodischen Gitters mit Periode $a = 2\pi/K$ gemäß des Bloch-Theorems. Der durch die Wellenzahl k indizierte Zustand erfasst dabei alle Zustände des freien Elektrons mit Wellenzahlen $k' = k + nK$. Die Dispersionsrelation $W(k)$ ergibt sich durch Verschieben der Dispersionsrelation $W(k')$ des freien Elektrons um ganzzahlige Vielfache des Gitterwellenvektors K , $W(k) = \hbar^2 (k + nK)^2 / (2m)$. (c) Aufgrund der durch das Bloch-Theorem eingeführten Periodizität der Dispersionsrelation bzgl. K kann die Darstellung auf die erste Brillouin-Zone reduziert werden. Eine bestimmte Wellenzahl k indiziert dabei alle um ganzzahlige Vielfache der Gitterwellenzahl K verschobenen Zustände. (d) Aufspalten der ursprünglichen Dispersionsrelation unter dem Einfluss eines periodischen Gitters, siehe auch 2.6. (e) Darstellung im periodisch fortgesetzten Schema. (f) Reduzierte Darstellung in der ersten Brillouin-Zone. Die Aufspaltung der Energieniveaus führt zu einer Bandlücke W_G , innerhalb der es keine erlaubten Energiezustände für Elektronen gibt [11].

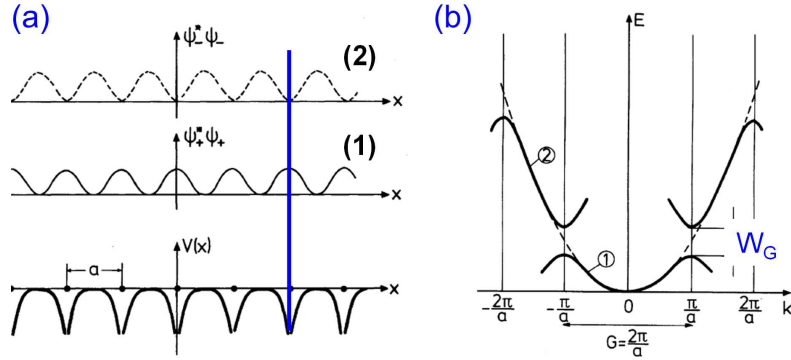


Abbildung 2.6: Die Streuung der Wellenfunktion $\psi(x)$ an den periodisch angeordneten Gitteratomen führt zu einer Deformation der Dispersionsrelation $W(k)$ am Rand der ersten Brillouin-Zone, zur Aufspaltung der Energiezustände und zur Bildung einer Bandlücke W_G . (a) Am Rand der Brillouin-Zone bilden sich stehende Wellen (1) und (2) mit gleicher Periodizität wie das Kristallgitter aus. Für Zustand (1) liegen die Wellenknoten gerade in der Mitte zwischen zwei benachbarten Gitteratomen, während bei Zustand (2) die Wellenknoten mit den Gitteratomen zusammen fallen. Die Wellenknoten entsprechen einer verschwindenden Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons; bei Zustand (1) hält sich das Elektron daher vornehmlich in der Nähe der Gitteratome, also im Bereich kleiner potentieller Energie $W_{\text{pot}}(x)$ auf; während bei Zustand (2) die Aufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen den Gitteratomen, also im Bereich hoher potentieller Energie am höchsten ist. (b) Die Ausbildung stehender Wellen führt zu einer Aufspaltung der Energieniveaus am Rand der Brillouin-Zone in einen hochenergetischen Zustand (2) und einen niederenergetischen Zustand (1). Durch Zurückfalten der entstehenden Dispersionsrelation auf die erste Brillouin-Zone ergibt sich die in Abb. 2.5 (f) gezeigte Dispersionsrelation. Diese weist eine aus der Aufspaltung der Energieniveaus herrührende Bandlücke W_G ($G = \text{gap}$) auf, innerhalb der es keine erlaubten Energiezustände für Elektronen gibt. (Bildquelle: [3])

Dies führt zu einer Aufspaltung der Energieniveaus im Rand der Brillouin-Zone in einen hochenergetischen Zustand (2) und einen niederenergetischen Zustand (1), siehe 2.5 (d) und (e). Durch Zurückfalten der entstehenden Dispersionsrelation auf die erste Brillouin-Zone ergibt sich die in (f) gezeigte Dispersionsrelation. Diese weist eine aus der Aufspaltung der Energieniveaus herrührende Bandlücke W_G ($G = \text{gap}$) auf, innerhalb der es keine erlaubten Energiezustände für Elektronen gibt.

2.2.3 Semi-klassische Bewegungsgleichungen und effektive Masse

In Abschnitt 2.1.3 wurde die Gruppengeschwindigkeit $\mathbf{v}_g$ des Elektrons anhand seiner Dispersionsrelation $W(\mathbf{k})$ bestimmt. Auch wenn zur Veranschaulichung zunächst ein freies Elektron in einem konstanten Potential betrachtet wurde, war es in der Herleitung von Gl. (2.21) nicht notwendig, eine bestimmte Form der Dispersionsrelation anzunehmen. Gl. (2.21) bleibt also insbesondere auch dann gültig, wenn anstelle eines freien Elektrons mit $W(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ein im periodischen Potenzial eines Festkörpers propagierendes Elektron mit einer anderen Dispersionsrelation $W(k)$ betrachtet wird. Für die Gruppengeschwindigkeit des Elektrons gilt also nach wie vor Gl. (2.21),

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} W(\mathbf{k}), \quad (2.42)$$

wobei $\nabla_{\mathbf{k}} W(\mathbf{k})$ den Gradienten der Dispersionsrelation bzgl. $\mathbf{k}$ bezeichnet. Für die Propagation in einer Dimension ergibt sich daraus die einfachere Beziehung (2.20),

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial W}{\partial k}. \quad (2.43)$$

Die Gruppengeschwindigkeit ist also proportional zur Steigung der Dispersionsrelation. Am Rand der Brillouin-Zone nimmt die Dispersionsrelation einen Extremwert und eine Steigung von Null an, siehe Abb. 2.5 (f) – an diesen Stellen verschwindet also die Gruppengeschwindigkeit, was mit dem in Abschnitt 2.2.2 beschriebenen Bild einer stehenden Welle konsistent ist.

In Analogie dazu ist es wünschenswert, auch andere, aus der klassischen Mechanik bekannte Beziehungen so zu formulieren, dass sie auch für Elektronen mit komplizierteren Dispersionsrelationen $W(\mathbf{k})$ gültig bleiben. Eine wichtige Fragestellung in diesem Zusammenhang betrifft das Verhalten eines Elektrons unter dem Einfluss eines von außen angelegten elektrischen Feldes $\mathbf{E}$. Wir betrachten zunächst die Frage, nach welchem Gesetz sich der Impuls eines Elektrons ändert, das unter dem Einfluss einer Dispersionsrelation $W(k)$ in einem äußeren elektrischen Feld E propagiert. Bei einer eindimensionalen Bewegung des Elektrons entlang der x -Richtung mit einer Gruppengeschwindigkeit v_g ergibt sich die Energieaufnahme ΔW pro Zeiteinheit Δt aus dem Produkt des zurückgelegten Weges $v_g \Delta t$ und der auf das Elektron wirkenden Kraft $-eE$,

$$\Delta W = -eE v_g \Delta t.$$

Gleichzeitig lässt sich eine Beziehung zwischen der Energieaufnahme ΔW und der zugehörigen Änderung Δk der Wellenzahl über die Ableitung der Dispersionsrelation formulieren,

$$\Delta W = \frac{\partial W}{\partial k} \Delta k.$$

Gleichsetzen der beiden Ausdrücke führt zu einer Beziehung für die Zunahme der Wellenzahl k eines Elektrons unter dem Einfluss eines äußeren Feldes,

$$\frac{\partial(\hbar k)}{\partial t} = -eE. \quad (2.44)$$

Die Größe $\hbar k$ ändert sich also proportional zur von außen einwirkenden Kraft und kann daher als Impuls des Elektrons interpretiert werden. Dieser Impuls ist im Sinne einer quantenmechanischen Erhaltungsgröße bei der Bewegung eines Elektrons im periodischen Potenzial des Kristallgitters zu verstehen und wird daher auch als Kristallimpuls bezeichnet. Der Kristallimpuls ist insbesondere nicht mehr direkt mit der Geschwindigkeit v_g verknüpft – am Rand der Brillouin-Zone liegt eine Gruppengeschwindigkeit von Null vor, während der Kristallimpuls die Werte $\pm \hbar \pi / a$ annimmt. Gl. (2.44) lässt sich auch auf drei Dimensionen erweitern,

$$\frac{\partial(\hbar \mathbf{k})}{\partial t} = -e\mathbf{E}. \quad (2.45)$$

Neben der Impulszunahme ist auch die Zunahme der Gruppengeschwindigkeit v_g in einem äußeren elektrischen Feld von Bedeutung. Die zeitliche Änderung der Gruppengeschwindigkeit lässt sich schreiben als

$$\frac{\partial \mathbf{v}_g}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial W}{\partial k} \right) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W}{\partial k^2} \frac{\partial(\hbar k)}{\partial t} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W}{\partial k^2} (-eE).$$

Damit wurde eine Beziehung zwischen der Beschleunigung $\partial \mathbf{v}_g / \partial t$ und der auf das Elektron wirkenden Kraft $(-eE)$ formuliert. Ein Vergleich mit der klassischen Beziehung $m \frac{\partial \mathbf{v}_g}{\partial t} = -eE$ liefert einen Ausdruck für die sogenannte effektive Masse m^* des Elektrons im periodischen Potenzial des Kristallgitters,

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W}{\partial k^2}. \quad (2.46)$$

Die effektive Masse des Elektrons ist also invers proportional zur Krümmung der Dispersionsrelation des Elektrons. Auch diese Beziehung lässt sich auf drei Dimensionen erweitern – die effektive Masse wird dann durch eine 3x3-Matrix repräsentiert, die der Hesse-Matrix der Dispersionsrelation entspricht,

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{l,m} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W(k)}{\partial k_l \partial k_m} \quad (2.47)$$

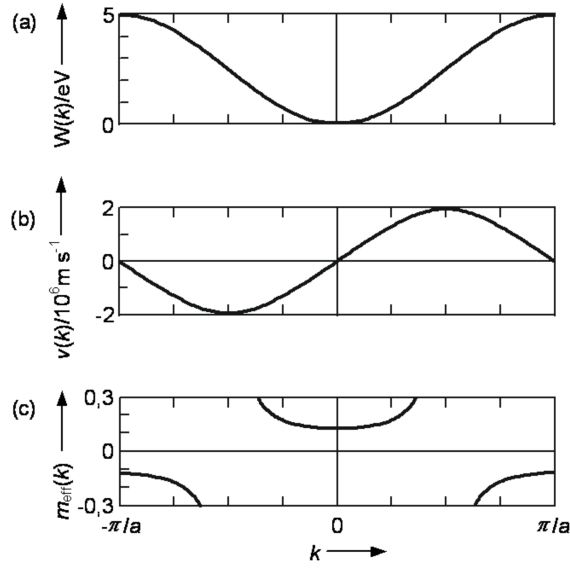


Abbildung 2.7: (a) Energie, (b) Gruppengeschwindigkeit und (c) effektive Masse als Funktion der Wellenzahl für einen kosinus-förmigen Bandverlauf mit der Breite $\Delta W = 5\text{eV}$, in einem Kristall mit Gitterkonstante $a = 0.5\text{nm}$.

2.2.4 Bloch-Oszillationen

Als Modellsystem für die Bewegung eines Elektrons im Leitungsband eines eindimensionalen Kristalls kann folgende kosinusförmige Abhängigkeit der Leitungsbandenergie als Funktion der Wellenzahl betrachtet werden:

$$W(k) = \frac{\Delta W}{2} (1 - \cos(ka)). \quad (2.48)$$

Mit den Formeln (2.43) und (2.46) erhalten wir für die Gruppengeschwindigkeit und effektive Masse der Elektronen als Funktion seiner Wellenzahl k die Beziehungen

$$\begin{aligned} v &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial W}{\partial k} = \frac{\Delta W a}{2\hbar} \sin(ka), \\ \frac{1}{m^*} &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W}{\partial k^2} = \frac{\Delta W a^2}{2\hbar^2} \cos(ka). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Diese sind in Abb.2.7 dargestellt.

An den Grenzen der Brillouinzone, $k = \pm\pi/a$, wird die Geschwindigkeit $v_g = \partial W/\partial k = 0$. Dort ist der Gitterabstand gerade halb so groß wie die Wellenlänge der Wellenfunktion der Elektronen, $k = \pi/a$, d. h. alle von Gitteratomen reflektierten Teilwellen interferieren konstruktiv (Bragg-Bedingung für Reflexionsgitter) und führen zu einer stehenden Welle. An der Oberkante ergibt sich für Elektronen aufgrund der negativen Krümmung des Bandes eine negative effektive Masse $m^* < 0$. Dies bedeutet, dass sie in die entgegengesetzte Richtung einer äußeren auf sie wirkenden Kraft beschleunigen.

Legen wir nun eine äußere Kraft an das Elektron an, so ändert sich dessen Impuls, Ist die Kraft $-eE$ konstant, so durchläuft das Elektron die erste Brillouinzone gemäß Gl (2.44),

$$\hbar k(t) = \hbar k(0) - eEt. \quad (2.50)$$

Für ein in negative x -Richtung gerichtetes elektrisches Feld E bewegt sich das Elektron im k -Raum nach rechts, „verschwindet“ am rechten Rand der Brillouin-Zone bei $k = \pi/a$, und taucht am linken Rand bei $k = -\pi/a$ wieder auf - die Werte $k = \pm\pi/a$ sind aufgrund der Periodizität der Dispersionsrelation äquivalent. Durch Einsetzen des Kristallimpulses in die Gleichung (2.49) findet

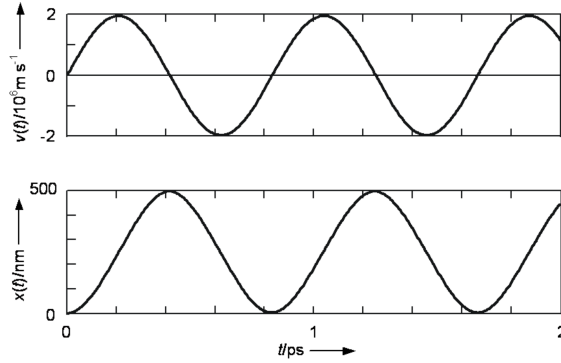


Abbildung 2.8: Bloch-Oszillation eines Elektrons als Funktion der Zeit infolge eines äußeren angelegten Feldes der Stärke $E = -100 \text{ kVcm}^{-1}$ in dem oben definierten kosinusförmigen Leitungsband.

man für die Gruppengeschwindigkeit und den Ort des Elektrons für ein konstantes elektrisches Feld, $E = -100 \text{ kVcm}^{-1}$, die in Fig. 2.8 gezeigten Oszillationen.

Während das Elektron die Brillouinzone durchläuft, ändert sich seine Teilchengeschwindigkeit ($\hbar v = \partial E / \partial k$) periodisch zwischen positiven und negativen Extremwerten, d.h. es führt eine Schwingung aus (sogenannte Bloch-Oszillation). Die Zeit zum Durchlaufen des Bereichs $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ unter dem Einfluss einer elektrischen Feldstärke ($T = \text{Periodendauer der Bloch-Oszillation}$) ist gerade:

$$T = \frac{h}{aeE}. \quad (2.51)$$

Für $a = 0.5 \text{ nm}$ (typische Gitterkonstante von Halbleitern) und $E = 100 \text{ kVcm}^{-1}$ erhält man $T = 0.8 \text{ ps}$. Die sich damit ergebende Schwingung in Geschwindigkeit und Ort ist in Bild 2.8 dargestellt.

Allerdings lassen sich Bloch-Oszillationen in natürlichen Festkörpern nur sehr schwer beobachten. Das liegt daran, dass die Wellenfunktion eines Elektrons nicht unbeeinflusst von Störungen wie z.B. der Wechselwirkung mit thermisch angeregten Phononen, Gitterversetzungen und Elektron-Elektron-Streuung bleibt. Diese Störungen führen dazu, dass das Elektron innerhalb von Bruchteilen einer Pikosekunde durch unelastische Stöße mit Gitterschwingungen in andere Zustände im gleichen Band transferiert, wobei sich Energie, Materiewellenlänge und Phase der Elektronenwelle diskontinuierlich ändern. Bloch-Oszillationen konnten bislang nur in künstlichen Kristallen beobachtet werden, in denen man basierend auf periodischen Folgen dünner Schichten (Übergitter [20, esaki70]) eine effektive Gitterkonstante a von der Größe der Periodenlänge des Übergitters erzeugen kann, die die Periodendauer entsprechend herabsetzt und damit eine Wechselwirkung mit dem Kristallgitter innerhalb einer Bloch-Periode unmöglich macht. Diese Bloch-Oszillationen wurden kürzlich nachgewiesen und entsprechende Bauelemente könnten in Zukunft eine effiziente Quelle für THz-Strahlung werden [21, leo91] [22, feldmann92].

2.2.5 Elektronen im idealen dreidimensionalen Kristall

Dieselben Überlegungen, die wir in Abschnitt 2.2.2 in einer Dimension aufgestellt haben, lassen sich natürlich auch auf reale dreidimensionale Kristalle erweitern. Dazu muss zunächst eine zur Wellenzahl $K = 2\pi/a$ des Kristallgitters analoge Darstellung in drei Dimensionen gefunden werden. Dies führt zum Konzept des sog. reziproken Gitters. Das dem Kristallgitter zugeordnete Bravais-Gitter lässt sich aus Gittervektoren $\mathbf{R}$ aufbauen, die sich durch eine Linearkombination von drei primitiven Basisvektoren $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, und $\mathbf{a}_3$ mit ganzzahligen Koeffizienten m_1 , m_2 und m_3 ergeben,

$$\mathbf{R} = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3. \quad (2.52)$$

Das reziproke Gitter entspricht ebenfalls einem Bravais-Gitter, das durch die zu den primitiven Basisvektoren $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, und $\mathbf{a}_3$ orthogonalen Translationsvektoren $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$, und $\mathbf{b}_3$ im dreidimensionalen $\mathbf{k}$ -Raum aufgespannt wird,

$$\mathbf{K} = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3. \quad (2.53)$$

Die Basisvektoren des reziproken Gitters lassen sich aus den Basisvektoren des Kristallgitters im Ortsraum berechnen,

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}. \quad (2.54)$$

Auf diese Weise ergibt sich beispielsweise aus einem kubisch-flächenzentrierten Kristallgitter im Ortsraum ein kubisch-raumzentriertes reziprokes Gitter im k -Raum, siehe Abb. 2.9 (a) und (b). Aus der Einheitszelle des reziproken Gitters im k -Raum lässt sich die erste Brillouin-Zone konstruieren, siehe Abb. 2.9 (c). Sie umfasst alle Punkte im k -Raum, die näher am Gitterpunkt $\Gamma = (0, 0, 0)$ liegen als an irgendeinem anderen Gitterpunkt und lässt sich im reziproken Raum mit Hilfe der Mittellot-Ebenen zwischen benachbarten Gitterpunkten konstruieren.

Banddiagramme in drei Dimensionen werden durch eine im k -Raum definierte Dispersionsrelation $W(\mathbf{k})$ beschrieben. Da eine Visualisierung und Interpretation in drei Dimensionen schwierig ist, beschränkt man sich auf eine eindimensionale Darstellung entlang ausgewählter Linien des reziproken Raumes. Dabei macht man sich die Tatsache zu nutze, dass Extremwerte der Dispersionsrelation entlang der Symmetrielinien des reziproken Gitters auftreten. Diese Symmetrielinien werden durch ihren Anfangs- und ihren Endpunkt beschrieben. Gängige Symmetriepunkt im reziproken Gitter sind in Abb. 2.9 (c) für ein kubisch-flächenzentriertes Gitter im Ortsraum eingezeichnet. Der sog. Γ -Punkt bezeichnet den Ursprung des reziproken Raumes, der Punkt $\mathbf{L} = \frac{K}{2}(1, 1, 1)$ liegt auf der Raumdiagonalen des reziproken Gitters, und $\mathbf{X} = K(1, 0, 0)$ bezeichnet einen Punkt in der Mitte der quadratischen Seitenfläche der ersten Brillouin-Zone.

Die Bandstruktur eines freien Elektrons in einem kubisch-flächenzentrierten (fcc = face centered cubic) Kristall mit Gitterabstand a ist in Bild 2.10 dargestellt. Abb. 2.10 zeigt die berechneten Bandstrukturen von Silizium (Si) und Gallium-Arsenid (GaAs). Die Diagramme in Abb. 2.10 (a) und (b) zeigen den Verlauf der Energieniveaus entlang ausgewählter Symmetrielinien eines kubisch flächenzentrierten Gitters innerhalb der ersten Brillouin-Zone. Die Symmetrielinien verbinden den Ursprung Γ des k -Raumes mit den Punkten $\mathbf{X}$ und $\mathbf{L}$, siehe Abb. 2.10 (c). Das energetisch am höchsten liegende besetzte Band wird als Valenzband (VB), das energetisch am tiefsten liegende unbesetzte Band wird als Leitungsband (LB) bezeichnet; die Energien an den zugehörigen Bandkanten mit W_C (nach dem englischen Begriff „conduction band“) bzw. W_V . Durch thermische Anregung können Elektronen die Bandlücke überwinden und vom Valenzband ins Leitungsband gelangen - sie hinterlassen im Valenzband unbesetzte Zustände, die als positiv geladene Partikel („Löcher“) beschrieben werden können. Die Bandstrukturen von Silizium und GaAs weisen einen wichtigen Unterschied auf: Bei GaAs liegen sowohl das Minimum des LB als auch das Maximum des VB bei $\mathbf{k} = 0$ (Γ); eine solche Konstellation wird auch als direkte Bandlücke bezeichnet. Im Gegensatz dazu treten die Extrempunkte von VB und LB bei Si an verschiedenen Punkten im k -Raum auf – dies wird als indirekte Bandlücke bezeichnet. Indirekte und direkte Bandlücken spielen eine große Rolle bei der Interaktion des Halbleiters mit Licht, insbesondere bei der Emission und Absorption von Licht durch elektronische Übergänge zwischen den Bändern.

2.2.6 Direkte und indirekte Halbleiter

Direkte und indirekte Halbleiter unterscheiden sich bzgl. der Lage der Extrempunkte des Leitungs- und Valenzbandes im Banddiagramm. Man spricht von einem direkten Halbleiter, wenn sowohl das Minimum der Leitungsbandkante als auch das Maximum der Valenzbandkante den gleichen Kristallimpuls $\hbar\mathbf{k}$ aufweisen. Beim indirekten Halbleiter weisen die beiden Punkte dementsprechend

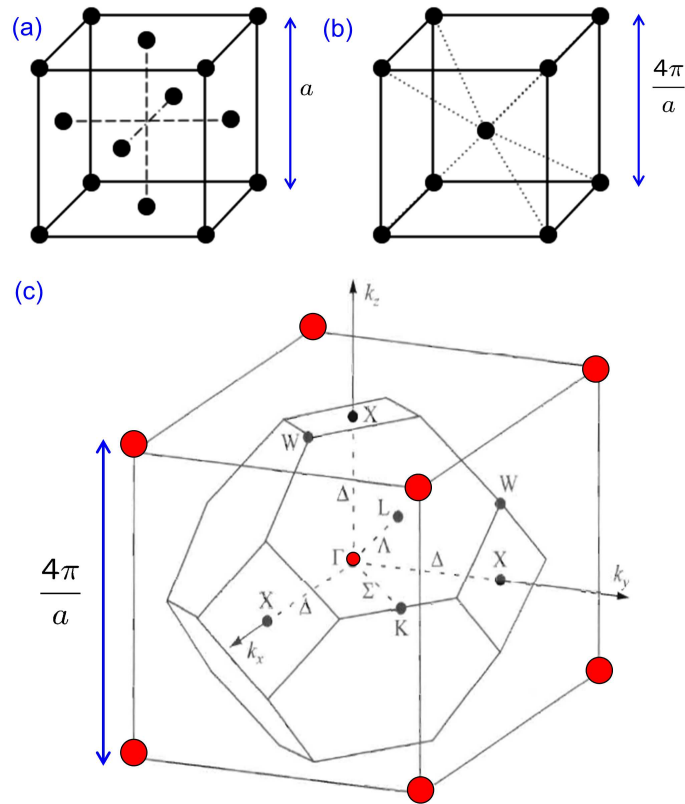


Abbildung 2.9: Kristallgitter im Ortsraum und im reziproken Raum. (a, b) Einem kubisch-flächenzentrierten Kristallgitter mit Gitterkonstante a im Ortsraum, (a), entspricht ein kubisch-raumzentriertes reziprokes Gitter mit Gitterskonstante $K = \frac{4\pi}{a}$ im k -Raum, (b). (c) Konstruktion der ersten Brillouin-Zone im reziproken Raum: Die erste Brillouin-Zone umfasst alle Punkte im k -Raum, die näher am Gitterpunkt $\Gamma = (0, 0, 0)$ liegen als an irgendeinem anderen Gitterpunkt. Sie lässt sich im reziproken Raum mit Hilfe der Mittellot-Ebenen zwischen benachbarten Gitterpunkten konstruieren. Zur Darstellung von Banddiagrammen werden durch ausgewählte Symmetriepunkte definierte Linien im reziproken Raum herangezogen. Der sog. Γ -Punkt bezeichnet dabei den Ursprung des reziproken Raumes, der Punkt $L = \frac{K}{2}(1, 1, 1)$ liegt auf der Raumdiagonalen des reziproken Gitters, und $X = K(1, 0, 0)$ bezeichnet einen Punkt in der Mitte der quadratischen Seitenfläche der ersten Brillouin-Zone.

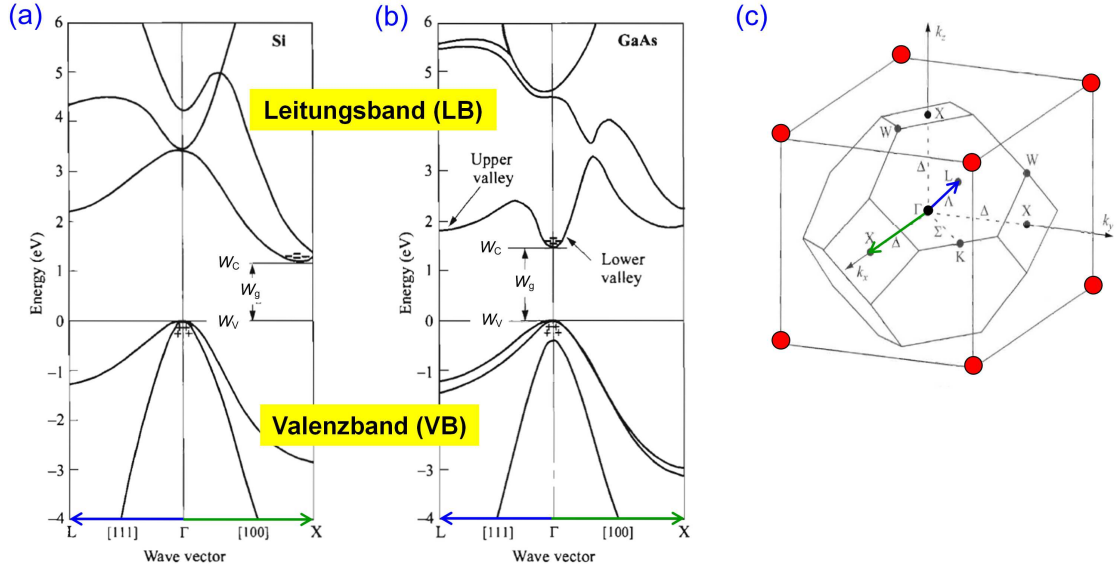


Abbildung 2.10: Bandstrukturen von (a) Silizium (Si) und (b) Gallium-Arsenid (GaAs). Die Diagramme zeigen den Verlauf der Energieniveaus sind entlang ausgewählter Symmetrielinien eines kubisch flächenzentrierten Gitters innerhalb der ersten Brillouin-Zone. Das energetisch am höchsten liegende besetzte Band wird als Valenzband (VB), das energetisch am tiefsten liegende unbesetzte Band wird als Leitungsband (LB) bezeichnet; die Energien an den zugehörigen Bandkanten mit W_C (nach dem englischen Begriff „conduction band“) bzw. W_V . Bei GaAs liegen sowohl das Minimum des LB als auch das Maximum des VB bei $\mathbf{k} = 0$ (Γ); eine solche Konstellation wird auch als direkte Bandlücke bezeichnet. Im Gegensatz dazu treten die Extrempunkte von VB und LB bei Si an verschiedenen Punkten im k -Raum, also bei verschiedenen Kristallimpulsen $\hbar\mathbf{k}$ auf – dies wird als indirekte Bandlücke bezeichnet. (c) Die zur Darstellung von (a) und (b) verwendeten Symmetrielinien verbinden den Ursprung Γ des k -Raumes mit den Punkten X (blau) und L (grün). (Bild nach [9]).

verschiedene Kristallimpulse auf. Direkte und indirekte Halbleiter verhalten sich unter Lichteinwirkung ganz unterschiedlich. Damit es nämlich zu einer optischen Anregung eines Elektrons durch ein Photon oder zur Emission eines Photons durch die Rekombination eines Elektron-Loch-Paares kommen kann, muss sowohl Energieerhaltung als auch Impulserhaltung erfüllt werden.

Energieerhaltung wird dadurch erreicht, dass das Photonenenergie mit dem energetischen Abstand des Elektron-Loch-Paares übereinstimmt und damit im wesentlichen der Bandlücke entspricht bzw. geringfügig größer ist als diese, da die vom Elektron und Loch eingenommenen Zustände nicht genau an der Bandkante liegen müssen. Die Photonenenergie ist gegeben durch $\hbar\omega_{\text{phot}}$, wobei $\omega_{\text{phot}} = 2\pi c/\lambda_{\text{phot}}$ die optische Kreisfrequenz und λ_{phot} die Vakuumwellenlänge des Photons bezeichnet,

$$W_{\text{phot}} = \hbar\omega_{\text{phot}} \gtrsim W_C - W_V \geq W_G. \quad (2.55)$$

Bei Halbleitern liegt die Bandlücke in der Größenordnung von 1 eV, was zu Wellenlängen im sichtbaren oder nahinfraroten Spektralbereich führt. Der zugehörige Impuls eines Photons mit Vakuumwellenlänge λ_L ist gegeben durch $p_{\text{phot}} = \hbar k_{\text{phot}}$, wobei $k_{\text{phot}} = 2\pi/\lambda_L$ die optische Wellenzahl des Photons beschreibt. Dieser Impuls ist sehr viel kleiner als typische in einem Kristallgitter auftretende Kristallimpulse der Größenordnung $p \approx \hbar\pi/a$,

$$p_{\text{phot}} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda_L} \ll \hbar \frac{\pi}{a}. \quad (2.56)$$

Dies wird unmittelbar klar, wenn man sich vergegenwärtigt, dass die Gitterkonstante a in typischen Halbleitern nur Angstrom (10^{-10} m) beträgt, während die optische Wellenlänge in der Größenordnung von $1 \mu\text{m}$ liegt. In diesem Sinne ändert sich der Impuls eines Elektrons bei Anregung durch ein Photon oder bei der Rekombination mit einem Loch unter Emission eines Photons

praktisch nicht. Dies ist in Abb. 2.11 (a) illustriert: Da das Maximum des VB und das Minimum des LB bei einem direkten HL beim gleichen Kristallimpuls liegen, können Elektronen unter Abgabe eines Photons der Energie $\hbar\omega_{\text{phot}} \approx W_G$ vom LB ins VB übergehen. Der Impulsumsatz bei diesem Vorgang ist vernachlässigbar; dementsprechend findet der Übergang im Bänderschema „vertikal“ statt, d.h., ohne dass sich der horizontal aufgetragene Kristallimpuls des Photons merklich ändert. Der vernachlässigbare Photonenimpuls wird etwa dadurch zur Verfügung gestellt, dass die Anfangs- und Endzustände des Elektrons bei leicht unterschiedlichen Kristallimpulsen liegen, die in der Darstellung von Abb. 2.11 (a) nicht zu sehen sind. Wegen der direkten Interaktion eines Elektrons mit einem Photon wird in direkten Halbleitern Licht stark absorbiert bzw. emittiert. Die zugehörigen Lebensdauern für strahlende Übergänge vom LB ins VB liegen im Bereich von Nanosekunden. Direkte Halbleiter wie z.B. GaAs oder InGaAsP werden zur Realisierung von Lichtquellen wie z.B. Leuchtdioden oder Laserdioden sowie von effizienten Photodetektoren verwendet, siehe Abschnitte 7.8 und 7.4.

Beim indirekten Halbleiter ist dies anders. Hier liegen das Maximum des VB und das Minimum des LB bei verschiedenen Kristallimpulsen, die sich typischerweise um einen Betrag in der Größenordnung von $\hbar\pi/a$ unterscheiden, siehe Abb. 2.11 (b). Dieser Impuls kann nach Gl. (2.56) nicht von einem am Übergang teilnehmenden Photon erbracht werden. Um sowohl Energie- als auch Impulserhaltung zu erreichen wird also ein drittes Teilchen benötigt, das den Impuls aufnimmt bzw. beisteuert und gleichzeitig einen möglichst kleinen Einfluss auf die Energiebilanz hat. Dies wird durch Gitterschwingungen, sogenannte Phononen möglich – ihre Energien liegen im Halbleiter bei wenigen meV, während sich der Impuls in der Größenordnung von π/a bewegt. Ein derartiger „Dreierstoß“, also eine Interaktion von einem Elektron, einem Photon und einem Phonon ist allerdings sehr unwahrscheinlich. Licht wird daher in einem indirekten Halbleiter nur schwach absorbiert und emittiert; dementsprechend ist auch die Lebensdauer für angeregtes Elektron im LB sehr viel größer als bei direkten Halbleitern. Übergänge in indirekten Halbleitern erfolgen vornehmlich nichtstrahlend, daher sind indirekte Halbleiter wie Ge oder Si als Lichtquellen ungeeignet. Dies gilt nicht für manche amorphe Halbleiter – dort ist keine Kristallstruktur vorhanden und die Prozesse, welche zur Absorption und Emission führen, gehorchen anderen Regeln als den hier diskutierten.

Bei hinreichend kurzwelligem Licht können auch in indirekten Halbleitern Elektronen ohne Impulsänderung vom VB ins LB befördert werden, siehe Abb. 2.11 (b). Die Photonenenergie muss dabei mindestens der direkten Bandlücke W'_G entsprechen. Der umgekehrte Prozess einer Rekombination eines Elektron-Loch-Paares über die direkte Bandlücke bei $k = 0$ ist allerdings sehr unwahrscheinlich, da sich die Elektronen im LB immer im Bandminimum bei $k = \pi/a$ ansammeln, während die Löcher im VB das Bandmaximum bei $k = 0$ besetzen.

Absorptionsspektren von indirekten und direkten Halbleitern sind am Beispiel von Silizium (Si) und Galliumarsenid (GaAs) in Abb. 2.12 skizziert. Silizium zeichnet sich als indirekter Halbleiter für Photonenenergien knapp oberhalb der direkten Bandlücke ($W_G \approx 1.12 \text{ eV}$ bei $T = 300 \text{ K}$) aufgrund des verhältnismäßig unwahrscheinlichen Dreierstoßes beim Übergang zwischen VB und LB durch einen kleinen Absorptionskoeffizienten aus. Dagegen weist bei GaAs als direkter Halbleiter bei Photonenenergien oberhalb der Bandlücke ($W_G \approx 1.42 \text{ eV}$ bei $T = 300 \text{ K}$) einen sehr steilen Anstieg des Absorptionskoeffizienten als Funktion der Photonenergie auf. Bei Photonenenergien von $\hbar\omega_{\text{phot}} = W'_G \approx 3.5 \text{ eV}$, siehe Abb. 2.10, werden in Si auch direkte Übergänge möglich, die zu einer starken Zunahme des Absorptionskoeffizienten führen. Neben den Absorptionskoeffizienten bei Raumtemperatur (300 K) sind auch die Kurven für eine Temperatur von $T = 77 \text{ K}$ eingezeichnet, die deutlich die in Abschnitt 1.3.2 beschriebene Abnahme der Bandlücke bei tiefen Temperaturen zeigen.

2.2.7 Parabolische Näherung der Bandstruktur

Die Bandstruktur ist im Zentrum und an den Grenzen der ersten Brillouinzone eine symmetrische Funktion von k . In der Nähe von $k = 0$ und $k = \pm\pi/a$ läßt sich die Energie im Valenz- und

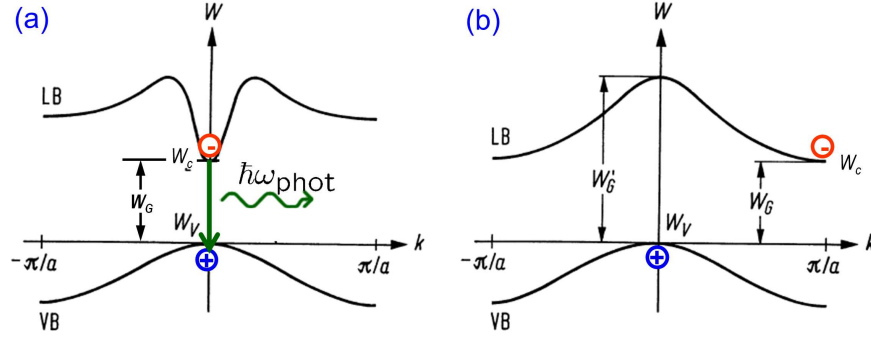


Abbildung 2.11: Schematische Bandstrukturen von direkten und indirekten Halbleitern. (a) Direkter Halbleiter: Das Maximum des VB und das Minimum des LB liegen beim gleichen Kristallimpuls. Als Folge davon können Elektronen unter Abgabe eines Photons der Energie $\hbar\omega_{\text{phot}} \approx W_G$ unter vernachlässigbarem Impulsumsatz $\hbar 2\pi/\lambda_L \ll \hbar\pi/a$, vom LB ins VB übergehen („vertikaler“ Übergang). Wegen der direkten Interaktion eines Elektrons mit einem Photon wird in direkten Halbleitern Licht stark absorbiert bzw. emittiert. Direkte Halbleiter wie z.B. GaAs oder InGaAsP werden daher zur Realisierung von Lichtquellen wie z.B. Leuchtdioden oder Laserdioden sowie von effizienten Photodetektoren verwendet. (b) Indirekter Halbleiter: Hier liegen das Maximum des VB und das Minimum des LB bei verschiedenen Kristallimpulsen, die sich um $\hbar\pi/a$ unterscheiden. Um bei einem Übergang eines Elektrons vom LB ins VB sowohl Energie- als auch Impulserhaltung zu erreichen wird also ein Phonon als zusätzlicher Stoßpartner benötigt, der den Impuls aufnimmt. Ein derartiger „Dreierstoß“ zwischen einem Elektron, einem Photon und einem Phonon ist allerdings sehr unwahrscheinlich. Licht wird daher in einem indirekten Halbleiter nur schwach absorbiert und emittiert.

Leitungsband daher durch eine Parabel approximieren, siehe Abb.(2.13). Die Krümmung der Parabel ergibt sich gemäß Gl. (2.46) aus der effektiven Masse der Elektronen bzw. Löcher an den Bandkanten,

$$W_L(k) = W_L + \frac{|k - k_0|^2}{2m_n}, \quad \frac{1}{m_n} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W_L(k)}{\partial k^2}, \quad (2.57)$$

$$W_V(k) = W_V - \frac{|k - k_0|^2}{2m_p}, \quad \frac{1}{m_p} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W_V(k)}{\partial k^2}. \quad (2.58)$$

Durch Vergleich mit der Dispersionsrelation vom freien Elektron sieht man, dass sich die Kristallelektronen in der Nähe dieser ausgezeichneten Stellen wie freie Elektronen bzw. Löcher verhalten, wenn man an die Stelle der Ruhemasse m die entsprechenden effektiven Massen einsetzt. Im Leitungsbandminimum ergibt sich eine effektive Massen für Elektronen $m_n > 0$. Die dortigen Elektronen verhalten sich also wie freie Elektronen mit einer modifizierten Masse und werden daher auch als quasifrei bezeichnet. Im Valenzbandmaximum ergibt sich dagegen eine negative effektive Masse für Elektronen. Es ist in diesem Zusammenhang zweckmäßig, das Konzept eines „Loches“ in einem fast zur Gänze mit Elektronen besetzten Band einzuführen, das eine positive Ladung und eine positive effektive Masse m_p besitzt.

Mit den Näherungen der Dispersionsrelationen gemäß Gl. (2.57) und (2.58) kann die für freie Elektronen in Abschnitt 2.2.1 hergeleitete Beziehung (2.31) für die Zustandsdichte direkt auf Elektronen und Löcher im Halbleiter übertragen werden, indem einfach statt der Ruhemasse m des Elektrons die effektiven Massen m_n und m_p von Elektronen bzw. Löchern eingesetzt werden,

$$\rho_n(W) = 4\pi \frac{(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{W - W_L}, \quad (2.59)$$

$$\rho_p(W) = 4\pi \frac{(2m_p)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{W_V - W}. \quad (2.60)$$

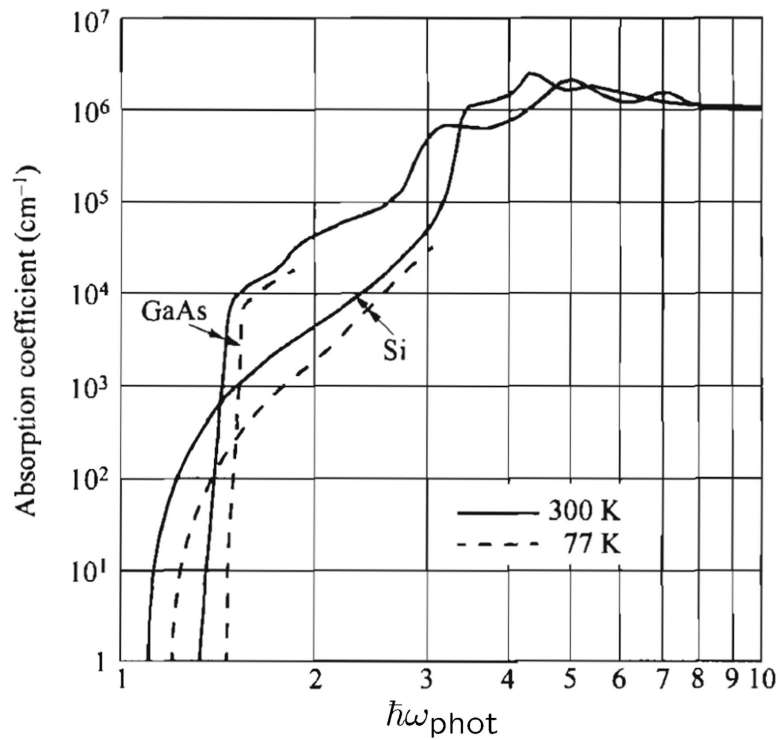


Abbildung 2.12: Absorptionsspektren von Si (indirekter Halbleiter) und GaAs (direkter Halbleiter). Silizium zeichnet sich in für Photonenenergien knapp oberhalb der direkten Bandlücke ($W_G \approx 1.12$ eV bei $T = 300$ K) aufgrund des verhältnismäßig unwahrscheinlichen Dreierstoßes beim Übergang zwischen VB und LB durch einen kleinen Absorptionskoeffizienten aus, während bei GaAs bei Photonenenergien oberhalb der Bandlücke ($W_G \approx 1.42$ eV bei $T = 300$ K) einen sehr steilen Anstieg des Absorptionskoeffizienten als Funktion der Photonenenergie aufweist. Bei Photonenenergien von $\hbar\omega_{\text{phot}} = W'_G \approx 3.5$ eV werden in Si auch direkte Übergänge möglich, die zu einer starken Zunahme des Absorptionskoeffizienten führen. Neben den Absorptionskoeffizienten bei Raumtemperatur (300 K) sind auch die Kurven für eine Temperatur von $T = 77$ K eingezeichnet, die deutlich die erwartete Abnahme der Bandlücke bei tiefen Temperaturen zeigen. (Bild nach [9])

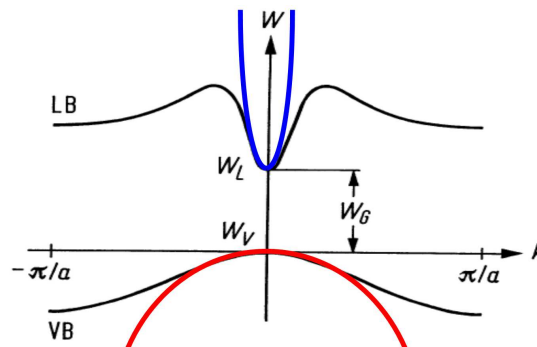


Abbildung 2.13: Parabolische Annäherung der Bandverläufe eines Halbleiters in der Nähe der Bandkanten. Die Krümmungen der Parabeln ergeben sich gemäß Gl. (2.46) aus den effektiven Masse der Elektronen bzw. Löcher. Aufbauend auf diesem Modell lassen sich Beziehungen für die Zustandsdichten für Elektronen im LB bzw. für Löcher im VB aufstellen.

Kapitel 3

Eigenhalbleiter und dotierte Halbleiter

Bei sehr tiefen Temperaturen ($T = 0\text{ K}$) sind in reinen Halbleitern alle Zustände im Valenzband (VB) besetzt und alle Zustände im Leitungsband (LB) unbesetzt. In diesem Fall kann kein Strom fließen, da im LB keine quasi-freien Elektronen vorhanden sind, und da die Elektronen im VB in Ermangelung freier Zustände keine kinetische Energie aufnehmen können. Was passiert bei höheren Temperaturen? Aufgrund der thermischen Energie kann es passieren, dass ein Elektron eine Bindung verlässt und vom Valenzband ins Leitungsband wechselt. Umgekehrt werden thermisch angeregte Elektronen mit den vorhandenen Löchern rekombinieren. Im thermischen Gleichgewicht werden pro Zeiteinheit genauso viele Bindungen durch thermische Aktivierung aufbrechen wie Rekombinationen zwischen Elektronen und Löcher aufgrund verschiedenster Prozesse stattfinden. Dies führt zu einer statistischen Besetzung der vorhandenen Elektronenzustände. Die dann nicht mehr voll besetzten Bänder erlauben bei angelegter Spannung einen Stromtransport. Damit wir zu quantitativen Aussagen kommen können, werden wir im Modell der parabolischen Bandstruktur die Anzahl der freien Ladungsträger bei gegebener Temperatur bestimmen. Wir werden dabei dotierte und undotierte Halbleiter diskutieren.

3.1 Eigenhalbleiter

Ein Eigenhalbleiter (intrinsic semiconductor) ist ein Halbleiter, der nur verschwindend kleine Spuren von Verunreinigungen enthält. Verschwindend heißt in diesem Zusammenhang etwa eine Verunreinigung auf 10^9 oder noch mehr Atome. Im Folgenden wollen wir berechnen, wieviele thermisch angeregte freie Elektronen n_{th} und Löcher p_{th} bei gegebener Temperatur in einem Band eines Eigenhalbleiters vorhanden sind. Die Verteilung der Elektronen über der Energie W ergibt sich aus der Zustandsdichte $\rho_n(W)$ für Elektronen im Leitungsband, Gl. (2.59), multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit $f(W)$, dass diese Zustände besetzt sind, und die Gesamtzahl der Elektronen erhält man durch Integration über alle Energien oberhalb der LB-Kante,

$$n_{\text{th}} = \int_{W_L}^{\infty} f(W) \rho_n(W) dW. \quad (3.1)$$

Analog dazu erhält man die Zahl der Löcher durch Integration des Produktes aus der Zustandsdichte $\rho_p(W)$ für Löcher im Valenzband, Gl. (2.60), und der Wahrscheinlichkeit $1 - f(W)$, dass diese Zustände nicht durch ein Elektron besetzt sind,

$$p_{\text{th}} = \int_{-\infty}^{W_V} (1 - f(W)) \rho_p(W) dW. \quad (3.2)$$

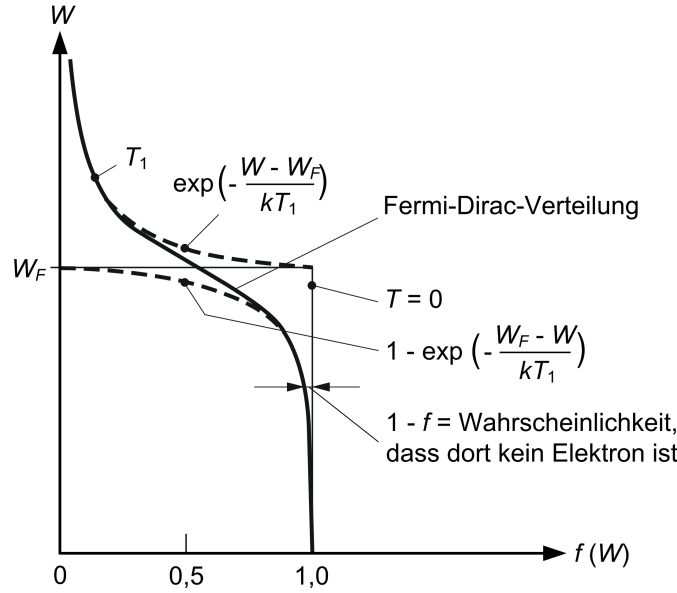


Abbildung 3.1: Fermi-Dirac-Verteilung: Die Fermi-Dirac-Verteilung $f(W)$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass ein bei W befindlicher Elektronenzustand besetzt ist; $1 - f(W)$ ist dementsprechende die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Zustand unbesetzt ist. Die Fermi-Energie W_F bezeichnet gerade die Energie, für die die Besetzungswahrscheinlichkeit $1/2$ beträgt. Für Energien weit entfernt von W_F ($|W - W_F| > 3kT$) lässt sich die Fermi-Verteilung $f(W)$ bzw. ihr Komplement $1 - f(W)$ durch die Boltzmann-Näherungen (gestrichelt) approximieren.

3.1.1 Die Fermi-Dirac-Verteilung

Die in Gl. (3.1) und (3.2) verwendete Wahrscheinlichkeit $f(W)$, dass ein bei Energie W befindlicher Energiezustand mit einem Elektron besetzt ist, ergibt sich aus der sog. Fermi-Dirac-Verteilung,

$$f(W) = \frac{1}{1 + e^{(W-W_F)/kT}}, \quad (3.3)$$

Die Fermi-Dirac-Verteilung gilt für ein Ensemble aus ununterschiedbaren Fermionen, d.h. Teilchen mit halbzahligem Spin, die dem Pauli-Verbot unterliegen, unter der Annahme, dass die Teilchen nicht miteinander wechselwirken („ideales Fermi-Gas“). Die Fermi-Verteilung nach Gl. (3.3) lässt sich aus der Bedingung herleiten, dass im thermischen Gleichgewicht die freie Energie eines Systems ein Minimum annimmt, siehe z.B. [3]. Die Konstante W_F wird als Fermi-Energie bezeichnet und entspricht der Energie eines Zustandes, dessen Besetzungswahrscheinlichkeit gerade $1/2$ beträgt, siehe Abb. 3.1.

Für $T \rightarrow 0$ strebt die Fermi-Verteilung gegen eine Sprungfunktion, bei der nur die Zustände unterhalb des Fermi-Niveaus besetzt sind. Weit weg von der Fermi-Energie kann die Fermi-Dirac-Verteilung durch eine Boltzmann-Verteilung angenähert werden,

$$\begin{aligned} W \gg W_F : \quad & f(W) \approx e^{-\frac{(W-W_F)}{kT}} \\ W \ll W_F : \quad & 1 - f(W) \approx e^{-\frac{(W_F-W)}{kT}} \end{aligned} \quad (3.4)$$

wobei $1 - f(E)$ die Wahrscheinlichkeit darstellt, dass ein Zustand mit einem Loch besetzt ist. Für $|(W - W_F)/kT| > 3$ sind die Boltzmann-Näherungen besser als 5%.

3.1.2 Ladungsträgerkonzentrationen und effektive Zustandsdichten

Zur Berechnung der Elektronen- und Löcherdichten im Halbleiter werden die Integrale nach Gl. (3.1) und (3.2) berechnet. Dabei wird angenommen, dass die Fermienergie einen energetischen

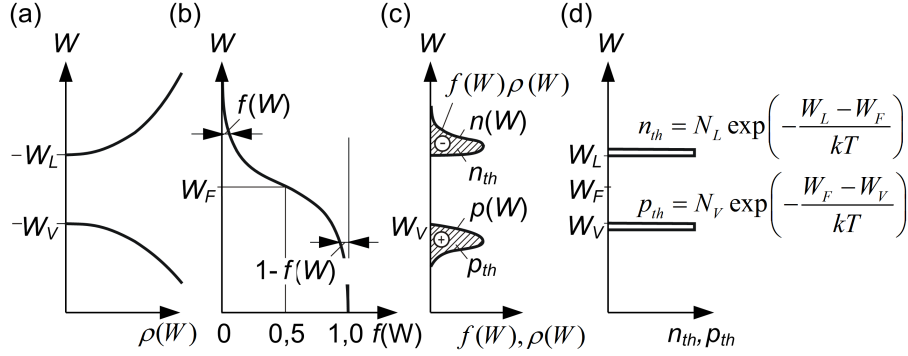


Abbildung 3.2: Bestimmung der Eigenleitungsträgerdichten aus den Zustandsdichten und der Fermi-Verteilung. (a) Zustandsdichten $\rho_n(W)$ für Elektronen im Leitungsband und $\rho_p(W)$ für Löcher im Valenzband. (b) Besetzungswahrscheinlichkeit $f(W)$ für Elektronenzustände bzw. das zugehörige Komplement $1 - f(W)$ gemäß der Fermi-Dirac Verteilung. (c) Produkt aus den Zustandsdichten $\rho_n(W)$ und $\rho_p(W)$ und den zugehörigen Besetzungswahrscheinlichkeiten gemäß der Fermi-Dirac-Verteilung. Der Großteil der besetzten Zustände liegt in der Nähe der Bandkante innerhalb eines Energieintervalls von kT . (d) In einer vereinfachten Darstellung lassen sich die Ladungsträgerdichten durch effektive Zustandsdichten N_L und N_V beschreiben, deren Besetzungswahrscheinlichkeit durch eine Boltzmann-Verteilung angenähert werden kann.

Abstand von mehr als $3kT$ zur Bandkante hin aufweist, so dass die Fermi-Verteilung $f(W)$ bzw. ihr Komplemente $1 - f(W)$ durch die entsprechenden Boltzmann-Verteilungen angenähert werden können. Für die Elektronen- und Löcherdichten ergeben sich daraus die Beziehungen

$$n_{th} = \int_{W_L}^{\infty} f(W) \rho_n(W) dW \approx N_L e^{-\frac{W_L - W_F}{kT}}, \quad (3.5)$$

$$p_{th} = \int_{-\infty}^{W_V} (1 - f(W)) \rho_p(W) dW \approx N_V e^{-\frac{W_F - W_V}{kT}}, \quad (3.6)$$

wobei die sogenannten äquivalenten Zustandsdichten N_L und N_V für das Leitungs- bzw. Valenzband gegeben sind durch

$$N_L = 2 \left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{3/2}, \quad (3.7)$$

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_p kT}{h^2} \right)^{3/2}. \quad (3.8)$$

Bei der Berechnungen der Trägerdichten gemäß Gl. (3.5) und (3.6) wurde das Integral $\int_0^{\infty} \sqrt{x} \exp(-x) dx = \sqrt{\pi}/2$ verwendet.

Die Berechnung der Eigenleitungsträgerdichten aus den Zustandsdichten und der Fermi-Verteilung ist in Abb.(3.2) skizziert. Die bei Eigenleitung resultierenden Verteilungen von Elektronen und Löchern sind aufgrund der Fermi-Verteilung an den Bandkanten lokalisiert und nur innerhalb eines Energieintervalls, welches der thermischen Energie kT entspricht, von Null verschieden. Die äquivalenten Zustandsdichten N_L und N_V für das Leitungs- bzw. Valenzband können als Zustandsdichten interpretiert werden, die unmittelbar an den Bandkanten lokalisiert sind und deren Besetzungswahrscheinlichkeit durch eine Boltzmann-Verteilung angenähert werden kann, siehe Abb.3.2(d). Die „thermische Energie“ kT bestimmt offensichtlich, wieviele bewegliche Ladungsträger beim eigenleitenden Material vorhanden sind. Bei Raumtemperatur $T = 293K$ beträgt $kT = 25meV$ und ist bei den nützlichen Halbleitern klein gegen die Bandlücke $W_G \approx 1eV = 40kT$.

3.1.3 Massenwirkungsgesetz

Im Halbleiter herrscht ein dynamisches Gleichgewicht zwischen der temperaturabhängigen Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren durch „Aufreißen“ von kovalenten Bindungen und der Rekombination. Im thermischen Gleichgewicht muss die Generationsrate für Elektron-Loch-Paare gleich der Rekombinationsrate sein. Die Rekombinationsrate steigt mit der Wahrscheinlichkeit, dass Elektronen und Löcher in Wechselwirkung treten und ist damit proportional zum Produkt $n_{\text{th}}p_{\text{th}}$ aus Elektronendichte n_{th} und Löcherdichte p_{th} . Für eine konstante thermische Generationsrate stellt sich also ein festes Produkt $n_{\text{th}}p_{\text{th}}$ ein,

$$n_{\text{th}}p_{\text{th}} = n_i^2(T), \quad (3.9)$$

wobei $n_i(T)$ eine durch das Material gegebene Konstante ist, die als intrinsische Ladungsträgerdichte bzw. Eigenleitungsträgerdichte bezeichnet wird. Die Beziehung (3.9) heißt Massenwirkungsgesetz und kann wie folgt interpretiert werden: $n_{\text{th}}p_{\text{th}}$ ist proportional zur Rekombinationsrate von Elektronen im LB mit Löchern im VB, n_i^2 ist proportional zur Generationsrate von Trägerpaaren zufolge des Aufreißens von Valenzbindungen. Gleichgewicht herrscht dann, wenn Rekombinationsrate und Generationsrate gleich groß sind. Einsetzen von Gl. (3.5) und (3.6) liefert die Temperaturabhängigkeit von $n_i(T)$,

$$n_i^2(T) = N_L N_V e^{-\frac{W_G}{kT}}. \quad (3.10)$$

Für undotierte Halbleiter gilt ferner, dass Elektronen im LB und Löcher im VB immer paarweise entstehen, also $n_{\text{th}} = p_{\text{th}} = n_i(T)$. Die Eigenleitungsträgerdichte $n_i(T)$ bezeichnet also gerade diejenige Dichte, die sich in einem undotierten Halbleiter im thermischen Gleichgewicht einstellt. Sie hängt nach Gl. (3.10) gemäß einem Arrheniusgesetz von der Bandlückenenergie ab. Bei Raumtemperatur ($T = 293 \text{ K}$) ergeben sich die folgenden Eigenleitungsträgerdichten:

Ge	$n_i = 2,4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$
Si	$n_i = 1,5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$
InP	$n_i = 1,2 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-3}$
GaAs	$n_i = 1,8 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-3}$

Die Eigenleitungsträgerdichte für die drei wichtigsten Halbleiter sind in Bild 3.3 als Funktion der Temperatur dargestellt. Wie nachfolgend gezeigt wird, ist in Halbleitern mit hohem Bandabstand der Fall der Eigenleitung nicht erreichbar, da die Anzahl der Ladungsträger liefernden Störstellen auch bei höchster Reinheit groß gegen n_i ist.

3.1.4 Lage des Fermi-Niveaus beim intrinsischen Halbleiter

Aus $n_{\text{th}} = p_{\text{th}} = n_i(T)$ erhält man durch Einsetzen von n_{th} und p_{th} aus (3.5) unter Beachtung der Beziehung (3.6) für die Bandgewichte eine Beziehung für die Lage des Fermi-Niveaus in einem eigenleitenden Halbleiter,

$$W_F = \frac{1}{2}(W_V + W_L) + kT \ln \sqrt{\frac{N_V}{N_L}} = \frac{1}{2}(W_V + W_L) + \frac{3}{4}kT \ln \left(\frac{m_p}{m_n} \right) = W_i. \quad (3.11)$$

Für $T \rightarrow 0$ liegt das Fermi-Niveau im Eigenhalbleiter in der Mitte des verbotenen Bandes. Für hohe Temperaturen nähert sich das Fermi-Niveau dem Band mit der kleineren äquivalenten Zustandsdichte (dem Band der kleineren effektiven Masse), weil bei $n_{\text{th}} = p_{\text{th}}$ das Band mit der kleineren Zustandsdichte schneller gefüllt wird und sich dadurch die Lage des Zustands, der mit der Wahrscheinlichkeit 1/2 mit einem Träger besetzt ist, näher an dieses Band rückt. Die Energie W_i bezeichnet die Lage des Fermi-Niveaus bei einem Eigenhalbleiter („i“ für intrinsisch). 3.1.4

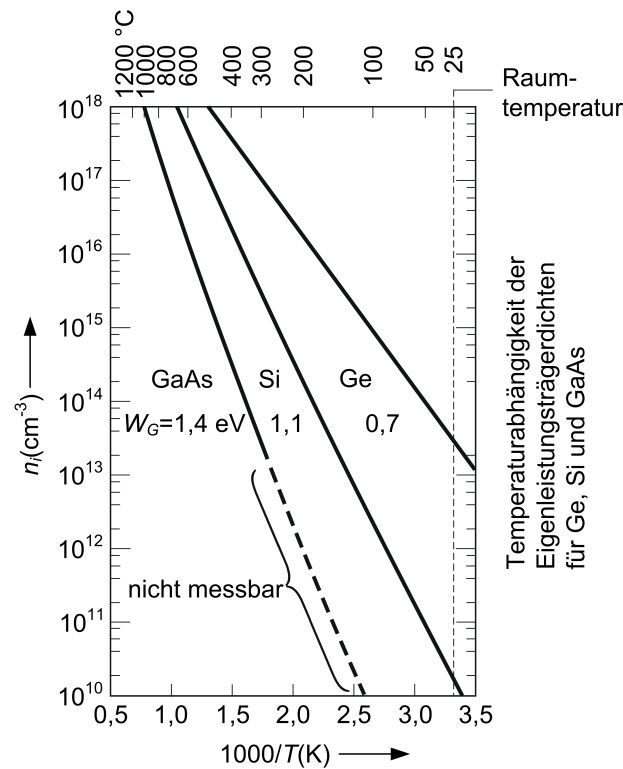


Abbildung 3.3: Temperaturabhängigkeit der Eigenleitungsträgerdichten für Ge, Si und GaAs. In Halbleitern mit hohem Bandabstand wie z.B. GaAs ist der Fall der Eigenleitung in der Praxis oft nicht erreichbar, da die Anzahl der Störstellen auch bei höchster Reinheit noch größer als n_i ist. [5].

3.2 Dotierte Halbleiter

Die Leitfähigkeiten von Halbleitern lassen sich durch Dotieren, also durch die Zugabe von Fremdatomen, gezielt einstellen; der Eigenhalbleiter geht dann in einen sog. Fremdhalbleiter („extrinsischer“ Halbleiter) über. Dabei ist es sehr wichtig, die Konzentration der Fremdatome sehr genau zu kontrollieren. Die moderne Halbleitertechnologie wurde insbesondere durch Prozesse zur Herstellung reiner Halbleitermaterialien ermöglicht. Dies ist von größter Wichtigkeit, da die Kontamination mit unerwünschten Fremdatomen zusätzlich bewegliche Ladungsträger freisetzen kann, die die Eigenschaften des Halbleiters unkontrollierbar machen. Um z. B. in Silizium bei Raumtemperatur Eigenleitung zu erreichen, muss die Eigenleitungsträgerdichte $n_i = 1.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ größer sein als die Dichte der Fremdatome unter der Voraussetzung, dass jedes Fremdatom nur ein Elektron beiträgt. Für Silizium mit einer Gitterkonstanten von $a \approx 0.357 \text{ nm}$ und einer Einheitszelle aus 8 Atomen folgt damit, dass auf $\left(8 / (0.357 \cdot 10^{-9})^3\right) / (1.5 \cdot 10^{10}) = 4 \cdot 10^{14}$ Si-Atome nur ein Fremdatom kommen darf. Es werden heute Reinheitsgrade von $10^{10} - 10^{12}$ Fremdatomen pro cm^3 erreicht.

3.2.1 Donatoren und Akzeptoren

Bei Halbleitern werden die Valenzbindungen zu den nächsten vier Nachbaratomen im Mittel durch vier Elektronen pro Atom in den äußersten Schalen gebildet. Dem entsprechen in den äußersten Schalen folgende Elektronenkonfigurationen, siehe Bilden 1.4 und 1.5.

Elementhalbleiter	Ge, Si (s^2p^2)
III-V-Halbleiter	Ga (s^2p^1), As (s^2p^3)
II-VI-Halbleiter	Zn (s^2), Se (s^2p^4)

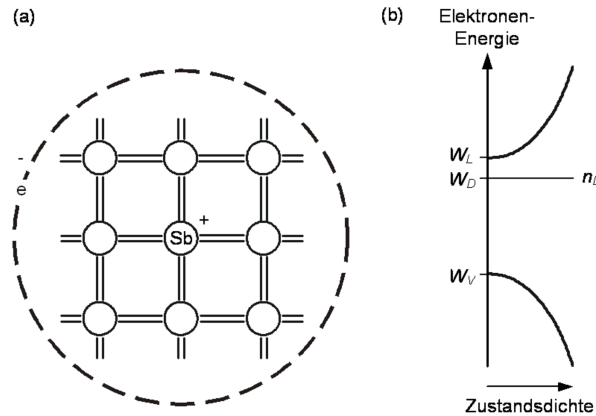


Abbildung 3.4: (a) Antimon (Sb, V. Hauptgruppe) substituiert als Donator ein Silizium-Atom im Kristallgitter. Da Antimon über ein zusätzliches Außenelektron verfügt, entsteht daraus ein freies Elektron, das mit einer verhältnismäßig geringen Energiezufuhr ins Leitungsband abgegeben werden kann. (b) Lage des Donatorniveaus in der Bandlücke [10] .

Donator-Dotierungen

Bei Donatoren wird ein Kristall-Atom durch ein anderes substituiert, welches ein zusätzliches Elektron in der äußersten Schale enthält (Substitutionsstörstelle). Dieses Elektron kann dann mit geringer Energiezufuhr (je nach Atom im Bereich von $0,2 kT_0$ bis $2 kT_0$, $kT_0 = 25 \text{ meV}$) an das LB abgegeben werden. Damit wird $n > p$ und man erhält einen n-Halbleiter (Überschusshalbleiter), siehe Abb. 3.4.

Akzeptor-Dotierungen

Wird dagegen ein Atom durch ein anderes substituiert, welches ein Elektron weniger in der äußersten Schale enthält, so nimmt dieses mit geringer Energiezufuhr ein Elektron aus einer Valenzbindung auf, wodurch ein Loch im VB entsteht. Damit wird $p > n$ und man erhält einen p-Halbleiter (Defekthalbleiter). Diese Störstelle heißt Akzeptor, siehe Abb. 3.5.

Amphotere Dotierungen

In einem III-V-Halbleiter kann ein Element der IV-ten Gruppe (z. B. Si) sowohl als Donator (auf einem Ga-Platz), als auch als Akzeptor (auf einem As-Platz) eingebaut werden. Man bezeichnet solche Störstellen als amphotere (altgriech. “zwitterhaft”).

3.2.2 Lage der Energieniveaus bei verschiedenen Dotanden

Abb. 3.6 zeigt die Lage von wichtigen Donator- und Akzeptorniveaus in den drei wichtigsten Halbleitern Ge, Si und GaAs. Abhängig von der Lage der Energieniveaus ergeben sich unterschiedliche Funktionen der Dotierung, die nachstehend kurz erläutert werden.

Leitfähigkeitsdotierung

Dotanden, deren Abstand von von der Bandkante in der Größenordnung von $W_L - W_D \approx kT$, $W_A - W_V \approx kT$ liegt, nehmen Elektronen auf dem VB auf bzw. geben Elektronen an das LB ab. Dies führt zu einer Änderung der Leitfähigkeit (Leitfähigkeitsdotierung).

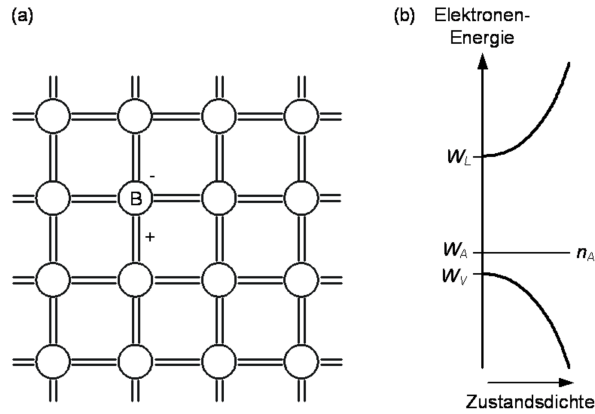


Abbildung 3.5: (a) Bor (III. Hauptgruppe) substituiert als Akzeptor ein Silizium-Atom im Kristallgitter. Da Bor über ein Außenelektron weniger verfügt als Silizium, entsteht daraus ein Loch im VB, indem mit verhältnismäßig geringer Energiezufuhr eine Elektron aus dem VB aufgenommen wird. (b) Lage des Akzeptorniveaus in der Bandlücke [10]

Semi-isolierende Dotierung, Lebensdauerdotierung

Ist das Donator- bzw. Akzeptor-Niveau mehr in der Bandmitte und damit viele kT_0 von den Bandkanten entfernt, so werden diese in der Regel nicht durch thermische Anregung ionisiert. Sie stellen aber gleichwohl eine Störung im Kristallgitter dar, die zu erhöhten Rekombinationsraten und damit zu einer Verringerung der intrinsischen Trägerlebensdauer und damit der Leitfähigkeit führt, siehe auch Abschnitt 4.4.3. Auf diese Weise kann z.B. durch Dotierung von n-halbleitendem GaAs mit Cr semiisolierendes GaAs hergestellt werden, siehe Bild 3.6. Bei einer gezielten Dotierung mit solchen Materialien spricht man von Lebensdauerdotierung. Ein weiteres Beispiel einer Lebensdauerdotierung ist der unbeabsichtigte Eintrag von Gold (Au) in Silizium, das dort sehr effektiv als Rekombinationszentrum fungiert und zusätzliche Dotierungen wirkungslos macht. Geld-Verunreinigungen in Silizium-Fertigungslinien können sich daher sehr schädlich auswirken.

Entartete Halbleiter

Bei hohen Dotierungen entsteht durch die Wechselwirkung zwischen Dotierungsatomen eine Aufspaltung der Donator- bzw. Akzeptortermine, wie in Bild 3.7 dargestellt. Das Fermi-Niveau verschiebt sich dann in das Leitungsband (n-Dotierung) bzw. in das Valenzband (p-Dotierung) und der Halbleiter zeigt metallähnliches Verhalten. Man spricht von einem entarteten Halbleiter. Die Leitfähigkeit bleibt auch bei tiefen Temperaturen erhalten. Entartete Halbleiter finden Anwendung in der Tunnel diode und als Kontaktzonen zwischen Metall- und Halbleiterschichten.

3.2.3 Besetzungswahrscheinlichkeiten von Störstellen

Zur Berechnung der in das System zusätzlich eingebrachten freien Ladungsträger infolge der Dotierung wird neben den Anzahldichten der Donatoren oder Akzeptoren auch noch die Wahrscheinlichkeiten für deren Aktivierung benötigt, also die Wahrscheinlichkeiten dafür, dass Donatoren ein Elektron ins Leitungsband abgegeben bzw. Akzeptoren ein Elektron aus dem Valenzband aufgenommen haben. Diese ergeben sich aus der Fermi-Dirac-Verteilung, Gl. (3.3), wobei noch verschiedene Entartungsfaktoren für den elektronenreicheren bzw. elektronenärmeren Zustand in Betracht gezogen werden müssen. Diese Entartungsfaktoren hängen davon ab, ob es sich um

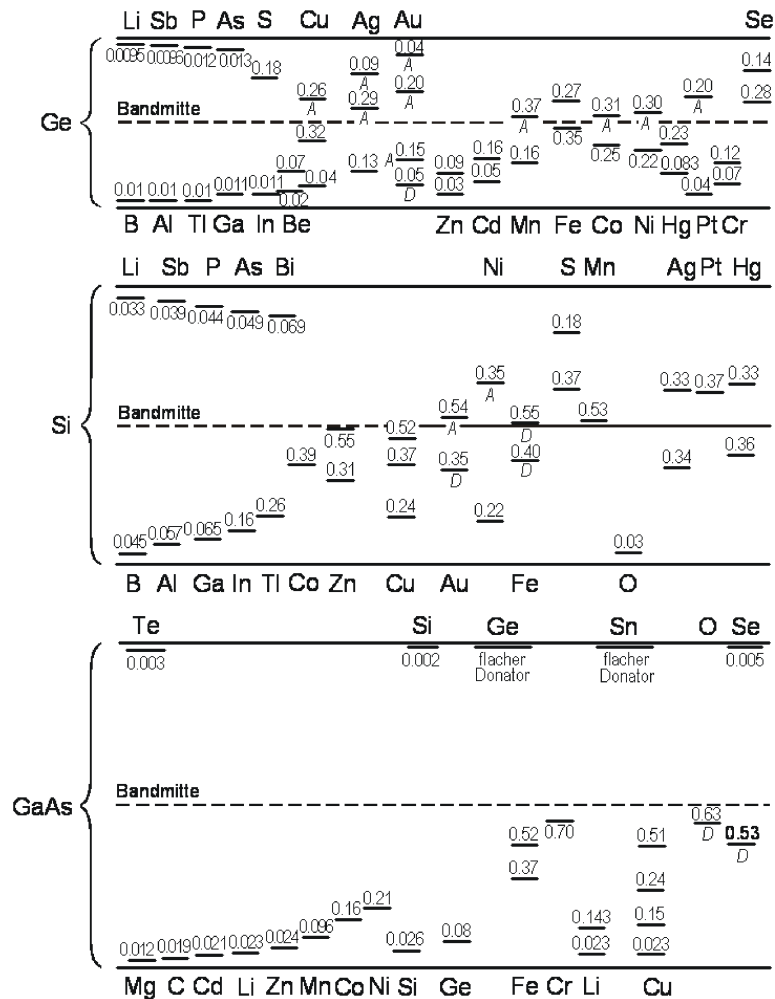


Abbildung 3.6: Lage der Energieniveaus verschiedener Dotanden in Ge, Si und GaAs. Die Zahlen geben gemessene Ionisierungsenergien in eV an. Die Niveaus unter der Bandmitte sind von der oberen Bandkante des Valenzbandes gemessen und stellen Akzeptorniveaus dar, wenn nicht durch D (Donator) gekennzeichnet; die Niveaus über der Bandmitte sind von der unteren Bandkante des Leitungsbandes gemessen und stellen Donatorniveaus dar, wenn nicht durch A (Akzeptor) gekennzeichnet [5].

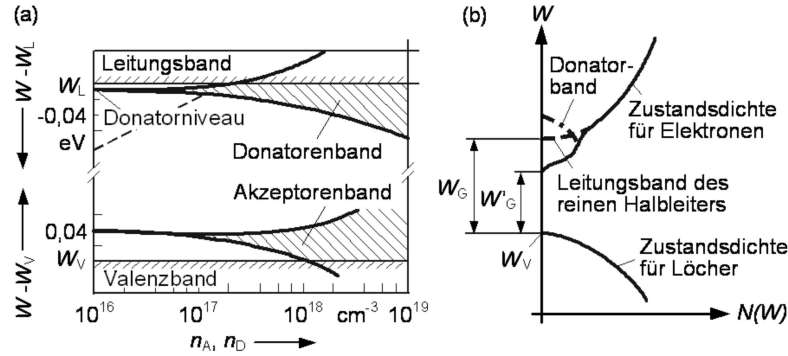


Abbildung 3.7: (a) Aufspaltung von Störstellenniveaus zu Störbändern und Überlappung mit dem Valenz- und Leitungsband in GaAs. (b) Zustandsdichten für einen entartetet n-Halbleiter [5].

einen Akzeptor oder Donator handelt. Im Falle des unbesetzten Donators D sind alle Elektronen in vollständig besetzte Orbitale eingebunden und deren Spin nicht frei wählbar. Daher gibt es nur einen möglichen Zustand. Im Gegensatz dazu liegt beim besetzten Donator ein ungepaartes Elektron in einem einfach besetzten Orbital vor, dessen Spin frei wählbar ist. Deshalb gibt es 2 Möglichkeiten, diesen Zustand zu realisieren. Im Falle des Akzeptors gilt gerade das Umgekehrte: In einem mit einem Elektron besetzten Akzeptor sind alle Elektronen in zweifach besetzte Orbitale eingebunden – dieser Zustand lässt sich auf genau eine Möglichkeit realisieren. Ist der Akzeptor nicht mit einem Elektron besetzt, so kann das ungepaarte Elektron zwei Spinzustände annehmen. Bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeiten, dass ein Donator bzw. ein Akzeptor mit einem Elektron besetzt ist, muss die zweifache Spin-Entartung des besetzten Donator- bzw. des unbesetzten Akzeptorzustandes berücksichtigt werden,

$$f_D(W_D) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{W_D - W_F}{kT}}} \quad (3.12)$$

$$f_A(W_A) = \frac{1}{1 + 2e^{\frac{W_A - W_F}{kT}}} \quad (3.13)$$

Die unterschiedlichen Besetzungswahrscheinlichkeiten für Bandzustände, Elektronen und Löcher lassen sich durch einen zusätzlichen Spin-Entartungsfaktor g in der folgenden Beziehung zusammenfassen,

$$f_{B,D,A}(W) = \frac{1}{1 + \frac{1}{g} e^{\frac{W - W_F}{kT}}} \quad (3.14)$$

$$\text{wobei } g = \begin{cases} 1 & \text{Bandzustände (B)} \\ 2 & \text{Donatoren (D)} \\ \frac{1}{2} & \text{Akzeptoren (A)} \end{cases} \quad (3.15)$$

Eine detailliertere Diskussion der Verteilungsfunktionen für Akzeptor und Donator ist beispielsweise in [14] gegeben.

3.2.4 Konzentration der Ladungsträger bei dotierten Halbleitern

Die Anzahl der aktivierten Donatoren bzw. Akzeptoren ergibt sich aus der Multiplikation der Dotierungskonzentration mit der zugehörigen Wahrscheinlichkeit dafür, dass das entsprechende Dotierungsatom ionisiert ist. Für Donatoren ist die Ionisierungswahrscheinlichkeit die Wahrscheinlichkeit $1 - f_D(W_D)$ dafür, dass der zugehörige Zustand unbesetzt ist, da das Elektron vom Donator an das Leitungsband abgegeben wurde. Für Akzeptoren ist die Ionisierungswahrscheinlichkeit gerade durch die Wahrscheinlichkeit $f_A(W_A)$ dafür gegeben, dass der zugehörige Zustand mit einem

Elektron besetzt ist. Die Dichten n_D^+ bzw. n_A^- der ionisierten Donator- bzw. Akzeptor-Störstellen ergibt sich also gerade zu

$$\begin{aligned} n_D^+ &= n_D[1 - f_D(W_D)] = \frac{n_D}{1 + 2 \exp\left(\frac{W_F - W_D}{kT}\right)}, \\ n_A^- &= n_A f_A(W_A) = \frac{n_A}{1 + 2 \exp\left(\frac{W_A - W_F}{kT}\right)}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Diese Gleichungen zeigen, dass die Störstellen aktiv bleiben, solange das Fermi-Niveau vom entsprechenden Störstellen-Niveau mehrere kT entfernt liegt.

Für die Zahl der Ladungsträger im Leitungs- und Valenzband gelten auch im dotierten Halbleiter die Beziehungen (3.5) und (3.6) unter der Voraussetzung, dass die Boltzmann-Näherung angewandt werden kann,

$$n = N_L \exp\left[-\frac{W_L - W_F}{kT}\right], \quad p = N_V \exp\left[-\frac{W_F - W_V}{kT}\right]. \quad (3.17)$$

Eine Multiplikation der beiden Ausdrücke ergibt das Massenwirkungsgesetz, das auch im dotierten Halbleiter gültig bleibt,

$$np = n_i^2(T) = N_L N_V \exp\left(-\frac{W_G}{kT}\right). \quad (3.18)$$

Lage des Fermi-Niveaus im dotierten Halbleiter

Man könnte jetzt denken, dass sich z.B. in einem n-Halbleiter die Zahl der Ladungsträger im Leitungsband aus der Summe der im undotierten Halbleiter vorhandenen intrinsischen Elektrodichten n_{th} und der Dichte der ionisierten Donatoren berechnen lässt, $n = n_{th} + n_D^+$. n_{th} könnte man dann z.B. aus Gl. (3.5) berechnen, wobei für das Fermi-Niveau mit W_F der Wert des undotierten Halbleiters angenommen wird. Das ist leider nicht so – vielmehr ändert sich die Lage des Fermi-Niveaus mit der Dotierung, da z.B. in einem n-Halbleiter zusätzliche schwach gebundene Elektronen eingebracht werden, die niederenergetische Zustände auffüllen und damit das Fermi-Niveau erhöhen. Damit kennt man aber auch die Zahl der aktiven Dotanden n_D^+ nicht mehr. Es wird also eine Bestimmungsgleichung für das Fermi-Niveau benötigt, um damit die Konzentration der Ladungsträger im dotierten Halbleiter berechnen zu können. Diese Gleichung ist die Ladungsneutralitätsgleichung. Im homogenen Halbleiter gilt Ladungsneutralität an jeder Stelle, d.h. die Dichte $p + n_D^+$ der positiv geladenen Teilchen (Löcher und ionisierte Donator-Atome) muss gleich der Dichte $n + n_A^-$ der negativ geladenen Teilchen (Elektronen und ionisierte Akzeptor-Atome) sein,

$$n + n_A^- = p + n_D^+. \quad (3.19)$$

Aus dieser Beziehung lässt sich eine implizite Bestimmungsgleichung für das Fermi-Niveau W_F gewinnen: Setzt man n , p aus (3.17) und n_D^+ , n_A^- aus (3.16) in die Neutralitätsbedingung (3.19) ein, so erhält man die Beziehung

$$N_L \exp\left(-\frac{W_L - W_F}{kT}\right) + \frac{n_A}{1 + 2 \exp\left(\frac{W_A - W_F}{kT}\right)} = N_V \exp\left(-\frac{W_F - W_V}{kT}\right) + \frac{n_D}{1 + 2 \exp\left(\frac{W_F - W_D}{kT}\right)} \quad (3.20)$$

Aus dieser Beziehung lässt sich mit numerischen Verfahren bei gegebenen Dotierungsdichten und bei gegebene Energieniveaus der Bandkanten und Dotierungsatome das Fermi-Niveau berechnen.

Um ein besseres Verständnis für die physikalischen Zusammenhänge hinter Gl. (3.20) zu entwickeln, wollen wir die Beziehung graphisch lösen, indem die rechte und die linke Seite als Funktion der Fermi-Energie auftragen und den Schnittpunkt der beiden Schaubilder bestimmen. Dazu

nehmen wir zur Vereinfachung zunächst einen n-Halbleiter ($n_A = 0$) an, so dass sich Gl. (3.20) vereinfachen lässt zu

$$N_L \exp\left(-\frac{W_L - W_F}{kT}\right) = N_V \exp\left(-\frac{W_F - W_V}{kT}\right) + n_D \frac{1}{1 + 2 \exp\left(\frac{W_F - W_D}{kT}\right)}. \quad (3.21)$$

Die zugehörige graphische Lösung ist in Abb. 3.8 (a) skizziert. Dort sind zunächst die Elektronen- und Löcherdichten n (blau) bzw. p (rot gestrichelt) im logarithmischen Maßstab eingetragen. Das führt zu Geraden, deren Steigung invers proportional zur Temperatur ist. Ist $n_D = 0$, so ergibt der Schnittpunkt dieser Geraden gerade das Fermi-Niveau W_{Fi} im undotierten Zustand gemäß Gl. (3.11); die zugehörige Trägerdichte ist gleich der Eigenleitungsdichte n_i . Bei vorhandener n-Dotierung $n_D \neq 0$ muss noch die Dichte n_D^+ der ionisierten Donatoren als Funktion der Fermi-Energie aufgetragen werden. Durch Addition erhält man die Kurve $p + n_D^+$ (rot durchgezogen). Der Schnittpunkt zwischen n und $n_D^+ + p$ ergibt dann das gesuchte Fermi-Niveau W_f (grün). Die Fermi-Energie im n-Halbleiter ist stark in Richtung der Leitungsbandkante verschoben. Da zur Berechnung der Trägerdichten n und p in Gl. (3.20) und (3.21) die Boltzmann-Näherung verwendet wurde, spiegeln die Schaubilder natürlich nur in einem hinreichend großen Abstand von mehr als $3kT$ von den Bandkanten die korrekten Trägerdichten wider – daher sind die an den Bandkanten liegenden Abschnitte der Schaubilder nur gestrichelt dargestellt. Während Abb. 3.8 (a) die Situation bei Raumtemperatur ($T = 300$ K) beschreibt, spiegelt Abb. 3.8 (b) die Ladungsdichten bei sehr geringen Temperaturen wider. Dies führt dazu, dass die Steigungen der Geraden für die Elektronen- und Löcherdichten stark zunehmen und sich dementsprechend der Schnittpunkt der Schaubilder für $T \rightarrow 0$ K in Richtung des Leitungsbandes verschiebt. Für steigende Temperaturen verschiebt sich das Fermi-Niveau zunächst in Richtung der Bandmitte – Abb. 3.9 zeigt die Abhängigkeit des Fermi-Niveaus als Funktion der Temperatur mit der Dotierung als Parameter. Für sehr hohe Temperaturen liegt der Schnittpunkt der Schaubilder schließlich weit oberhalb der Dotierungsdichte n_D . In diesem Fall übertreffen die thermisch generierten Elektronen und Löcher die durch Dotierung eingebrachten Ladungsträger, der Halbleiter verhält sich wie ein intrinsischer Halbleiter, und das Fermi-Niveau nähert sich mit weiter steigender Temperatur dem Band mit der kleineren äquivalenten Zustandsdichte, siehe auch Abschnitt 3.1.4.

Wenn wir die Elektronendichte im soeben diskutierten n-dotierten Halbleiter als Funktion der Temperatur auftragen, gelangen wir zum prinzipiellen Verlauf der Elektronendichte nach Abb. 3.10. Bei niedrigen Temperaturen werden mit zunehmender Temperatur sukzessive Elektronen aus den Störstellen ionisiert, und n steigt stark mit der Temperatur an. Dies entspricht dem in Abb. 3.8 (b) skizzierten Fall. Die Elektronendichte liegt dabei unterhalb der Donatordichte; die Störstellen sind also nicht oder allenfalls unvollständig ionisiert, und die durch Aufbrechen von Valenzbindungen erzeugten Trägerpaare sind noch vernachlässigbar. Dieser Bereich wird als Störstellenreserve bezeichnet. Für noch tiefere Temperaturen nimmt der Anteil der ionisierten Störstellen immer weiter ab – dies wird auch als „Ausfrieren“ der Störstellen bezeichnet. Für höhere Temperaturen wird ein Bereich erreicht, bei dem alle Donatoren ionisiert sind, $n_D^+ = n_D$, aber die Zahl der thermisch generierten Trägerpaare noch vernachlässigbar klein ist. Dieser Bereich wird als Störstellenerschöpfung bezeichnet; er entspricht dem in Abb. (3.8) (a) skizzierten Fall, bei dem der Schnittpunkt zwischen n und $n_D^+ + p$ auf dem durch n_D definierten Plateau liegt und die Elektronendichte $n \approx n_D$ praktisch nicht von der Temperatur abhängt. Im Bereich der Störstellenschöpfung liegt das Fermi-Niveau hinreichend weit unterhalb des Donatorniveaus, $W_D - W_F \gg kT$; gleichzeitig ist aber die thermische Energie der Ladungsträger klein im Vergleich zur Bandlücke $kT \ll W_g$. In diesem Bereich verhält sich der Halbleiter extrinsisch¹. Es sei angemerkt, dass im Bereich der Störstellenerschöpfung die Minoritätsträgerdichte wegen $np = n_i^2$ weiter stark temperaturabhängig ist. Bei sehr hohen Temperaturen ($T \rightarrow \infty$) überwiegt schließlich die Zahl der thermisch generierten Trägerpaare die Zahl der von Störstellen herrührenden Träger, $n \gg n_D$,

¹Der Begriff „intrinsisch“ („von Innen kommend“) beschreibt eine Eigenschaft, welche zum Gegenstand selbst gehört. „Extrinsisch“ („von außen kommend“) beschreibt Eigenschaften, welche von äußeren Einflüssen (z.B. Dotierungen) herrühren.

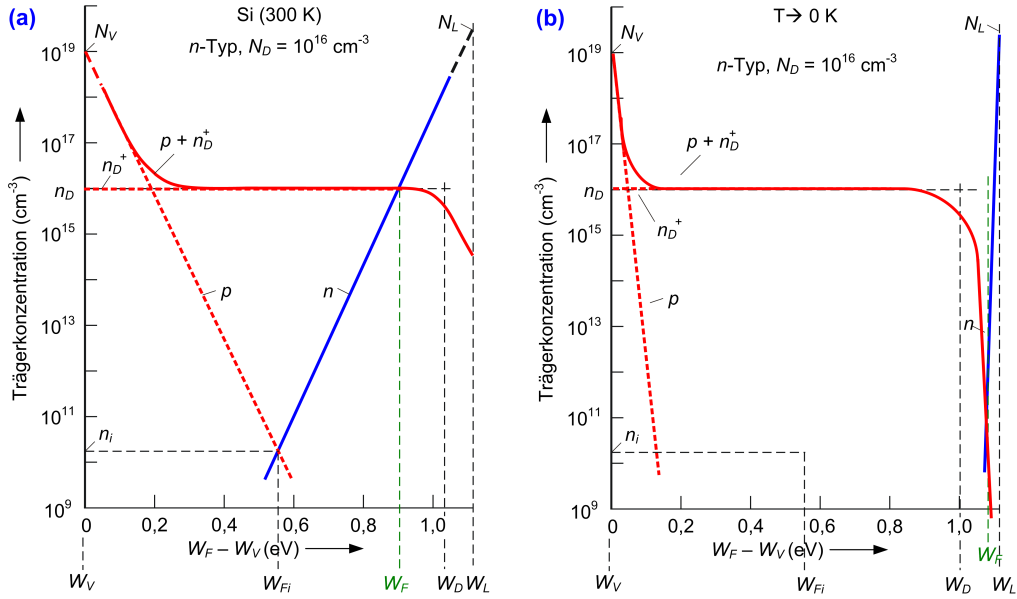


Abbildung 3.8: Ermittlung der Lage des Fermi-Niveaus eines n-Halbleiters durch graphische Lösung von Gl. (3.21). Die Elektronen- und Löcherdichten n (blau) bzw. p (rot gestrichelt) ergeben im logarithmischen Maßstab Geraden, deren Steigung invers proportional zur Temperatur ist. Im undotierten Halbleiter ($n_D = n_A = 0$) so ergibt der Schnittpunkt dieser Geraden gerade das Fermi-Niveau W_{Fi} ; die zugehörige Trägerdichte ist gleich der Eigenleitungsdichte n_i . Im n-dotierten Halbleiter ($n_D \neq 0$, $n_A = 0$) muss noch die Dichte n_D^+ der ionisierten Donatoren als Funktion der Fermi-Energie aufgetragen werden. Durch Addition kann man die Kurve $p + n_D^+$ (rot durchgezogen) erhalten. Der Schnittpunkt zwischen n und $n_D^+ + p$ ergibt dann das gesuchte Fermi-Niveau W_f (grün) im n-Halbleiter. Die Fermienergie ist stark in Richtung der Leitungsbandkante verschoben. Zur Berechnung der Trägerdichten n und p in Gl. (3.20) und (3.21) wurde die Boltzmann-Näherung verwendet; die Schaubilder spiegeln daher natürlich nur in einem hinreichend großen Abstand von mehr als $3kT$ von den Bandkanten die korrekte Trägerdichten wider. (a) Situation bei Raumtemperatur ($T = 300\text{ K}$): Der Schnittpunkt zwischen n und $n_D^+ + p$ liegt auf dem durch n_D definierten Plateau, und die Elektronendichte $n \approx n_D$ hängt praktisch nicht von der Temperatur ab. In diesem Fall liegt Störstellenschöpfung vor, d.h. alle Donatoren sind ionisiert und das Fermi-Niveau liegt einige kT unterhalb des Donatorkonzentrations. Gleichzeitig ist die thermische Energie der Ladungsträger klein im Vergleich zur Bandlücke $kT \ll W_g$. (b) Ladungsdichten bei sehr geringen Temperaturen: Die Steigungen der Geraden für die Elektronen- und Löcherdichten nehmen stark zu, und der Schnittpunkt der Schaubilder bzw. die Fermi-Energie verschieben sich für $T \rightarrow 0\text{ K}$ in Richtung des Leitungsbandes. In diesem Fall ist wegen $W_F > W_D$ nur ein sehr kleiner Anteil der Donatoren ionisiert; es liegt Störstellenreserve vor. Die Abhängigkeit der Fermi-Energie von der Temperatur ist in Abb. (3.9) skizziert. [5]

und es gilt näherungsweise $n = p = n_i$. In diesem Bereich verhält sich der Halbleiter wieder wie ein intrinsischer Halbleiter ohne Dotierung.

Die vorstehenden Ausführungen zum n-Halbleiter lassen sich sinngemäß auf p-Halbleiter übertragen. Solange die Energieniveaus hinreichend nahe an den Bandkanten liegen und die Dotierungsdichten klein im Vergleich zu den äquivalente Zustandsdichten sind, liegt das Fermi-Niveau innerhalb der Bandlücke und alle Donatoren sind ionisiert. Sind sowohl Akzeptoren als auch Donatoren vorhanden, so ist die Differenz $n_D - n_A$ dafür verantwortlich, ob der Halbleiter im Fall der Störstellenerschöpfung p - oder n -leitend ist. In diesem Fall gibt nicht jeder Donator ein Elektron im Leitungsband und jeder Akzeptor ein Loch im Valenzband ab, sondern es tritt der Fall auf, dass Donatoren ihr Elektron direkt Akzeptoren abgeben. Im Falle einer überwiegenden n-Dotierung ($n_D > n_A$) stehen also nur noch $n_D - n_A$ Donatoren zur Verfügung, die ihr Elektron ans Leitungsband abgeben können. Trotzdem ist bei Halbleitern, die sowohl n - als auch p -dotiert sind, der gesamte Einbau von Dotierstoffen $n_D + n_A$ verantwortlich für die Reduktion der Beweglichkeit, da alle Störstellen unabhängig von der Art der Dotierung Streuzentren für die Ladungsträger bilden und damit zur Impulsrelaxation beitragen, siehe auch Abschnitt (4.1.1).

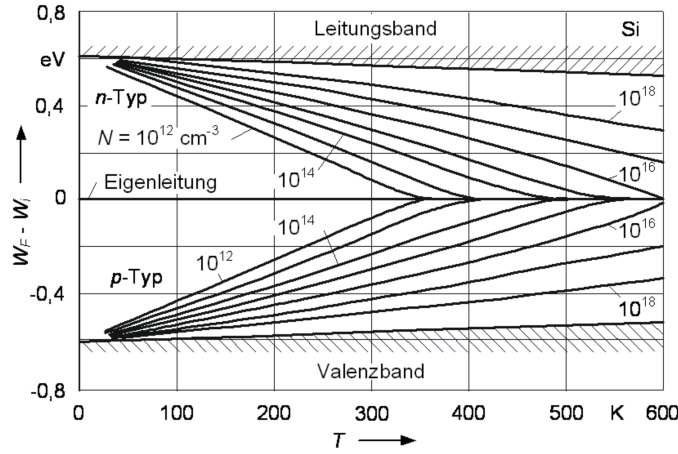


Abbildung 3.9: Fermi-Niveau in Si als Funktion der Temperatur mit der Dotierungskonzentration als Parameter. Für steigende Temperaturen bewegt sich das Fermi-Niveau zunächst von den Bandkanten in Richtung der Bandmitte, siehe auch Abb. (3.8). Die Bandlücke nimmt mit steigenden Temperatur ab, siehe auch Abschnitt 1.3.1. Für $T \rightarrow \infty$ wird sich das Fermi-Niveau, wie im undotierten (intrinsischen) Halbleiter dem Band mit der kleineren äquivalenten Zustandsdichte annähern, siehe auch Abschnitt 3.1.4. [5]

Berechnung der Trägerdichten für den Fall der Störstellenerschöpfung

Halbleiterbauelemente werden in der Praxis fast immer im Bereich der Störstellenerschöpfung ($n_D^+ = n_D$, $n_A^- = n_A$) betrieben, da dort die Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerdichten am geringsten ist, siehe Abb. 3.10. In diesem Fall können aus dem der Neutralitätsbedingung, Gl. (3.19), und dem Massenwirkungsgesetz, Gl. (3.9), die Konzentrationen n und p der Elektronen und Löcher im thermischen Gleichgewicht berechnet werden,

$$\begin{aligned} n &= \sqrt{\left(\frac{n_D - n_A}{2}\right)^2 + n_i^2} + \frac{n_D - n_A}{2}, \\ p &= \sqrt{\left(\frac{n_D - n_A}{2}\right)^2 + n_i^2} - \frac{n_D - n_A}{2} \end{aligned} \quad (3.22)$$

In technisch relevanten Fällen ist der extrinsische Halbleiter oft sehr stark dotiert, $|n_D - n_A| \gg n_i$, so dass Gl. (3.22) vereinfacht werden kann. Für einen n-Halbleiter ergibt sich daraus eine vereinfachte Beziehung,

$$\begin{aligned} n_n &= n_D - n_A, \\ p_n &= \frac{n_i^2}{n_D - n_A}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Der Index „n“ bei den Trägerdichten deutet dabei an, dass es sich um einen n-dotierten Halbleiter handelt. Analog dazu lassen sich auch Näherungsformeln für einen hinreichend stark dotierten p-Halbleiter angeben,

$$\begin{aligned} p_p &= n_A - n_D, \\ n_p &= \frac{n_i^2}{n_A - n_D} \end{aligned} \quad (3.24)$$

Die Fermi-Niveaus für den n- und p-Halbleiter lassen sich durch Auflösen von Gl. (3.5) bzw. (3.6) bestimmen unter Ausnutzung der Tatsache, dass die Majoritätsträgerdichten im Fall der Störstellenerschöpfung durch die jeweiligen Dotierungsdichten gegeben sind. Für eine hinreichend stark dotierten n-Halbleiter mit $n_D - n_A \gg n_i$ erhält man

$$W_F = W_L - kT \ln \left(\frac{N_L}{n_D - n_A} \right), \quad (3.25)$$

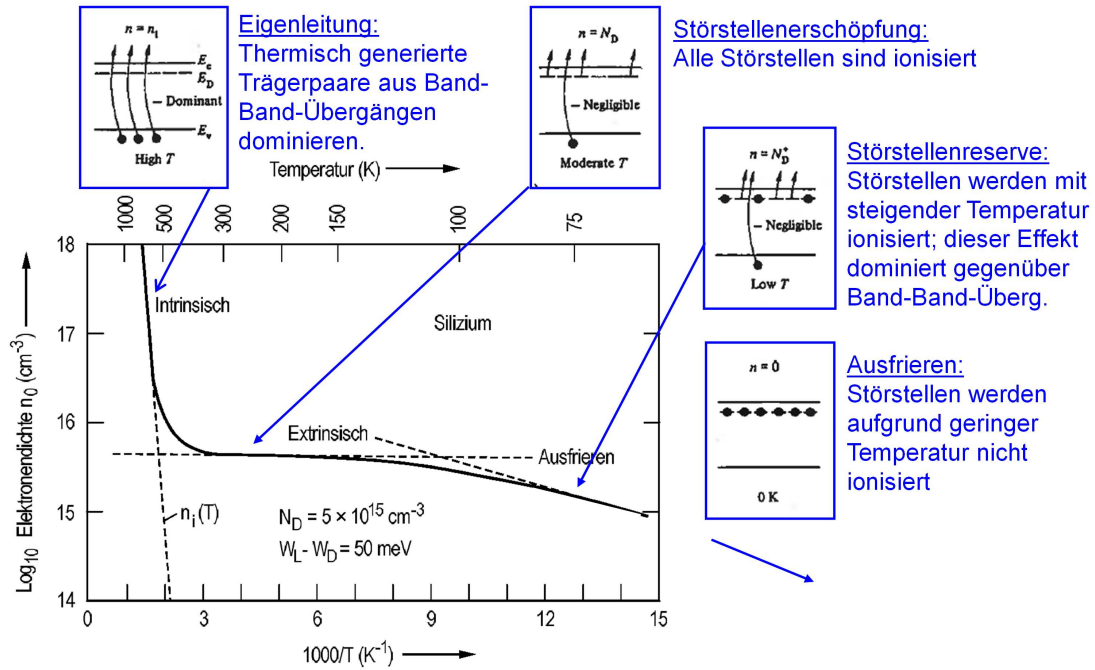


Abbildung 3.10: Prinzipieller Verlauf der Majoritätsträgerdichte als Funktion der Temperatur in einem n-Halbleiter. Die vertikale Achse ist logarithmisch und die horizontale invers zur Temperatur, so dass die asymptotischen Bereiche, Eigenleitung (intrinsisch), Fremdleitung (extrinsisch) und Störstellenreserve (Ausfrieren der Ladungsträger) als Geraden sichtbar werden. Bei niedrigen Temperaturen liegt Störstellenreserve vor – die Störstellen sind nicht oder allenfalls unvollständig ionisiert, und die durch Aufbrechen von Valenzbindungen erzeugten Trägerpaare sind noch vernachlässigbar. Dies entspricht dem in Abb. (3.8) (b) skizzierten Fall. Für noch tiefere Temperaturen nimmt der Anteil der ionisierten Störstellen immer weiter ab – dies wird auch als „Ausfrieren“ der Störstellen bezeichnet. Für höhere Temperaturen wird ein Bereich erreicht, bei dem alle Donatoren ionisiert sind, $n_D^+ = n_D$, aber die Zahl der thermisch generierten Trägerpaare noch vernachlässigbar klein ist. Dieser Bereich wird als Störstellenerschöpfung bezeichnet; er entspricht dem in Abb. (3.8) (a) skizzierten Fall. Im Bereich der Störstellenschöpfung liegt das Fermi-Niveau hinreichend weit unterhalb des Donatorniveaus, $W_D - W_F \gg kT$; gleichzeitig ist aber die thermische Energie der Ladungsträger klein im Vergleich zur Bandlücke $kT \ll W_g$. In diesem Bereich verhält sich der Halbleiter extrinsisch. Bei sehr hohen Temperaturen ($T \rightarrow \infty$) überwiegt schließlich die Zahl der thermisch generierten Trägerpaare die Zahl der von Störstellen herrührenden Träger, $n \gg n_D$, und es gilt näherungsweise $n = p = n_i$. In diesem Bereich verhält sich der Halbleiter wieder wie ein intrinsischer Halbleiter ohne Dotierung. [10]

und für einen hinreichend stark dotierten n-Halbleiter mit $n_A - n_D \gg n_i$ ergibt sich analog dazu

$$W_F = W_V + kT \ln \left(\frac{N_V}{n_A - n_D} \right). \quad (3.26)$$

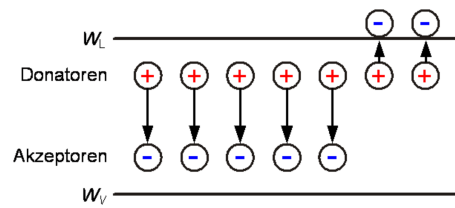


Abbildung 3.11: Elektronentransfer von Donatoren zu Akzeptoren und von Donatoren ins Leitungsband: Sind in einem Halbleiter sowohl Akzeptoren als auch Donatoren vorhanden, so ist die Differenz $n_D - n_A$ dafür verantwortlich, ob der Halbleiter im Fall der Störstellenerschöpfung p - oder, wie im vorliegenden Fall ($n_D > n_A$) n -leitend ist. In diesem Fall erzeugt nicht jeder Donator ein Elektron im Leitungsband, sondern ein Teil der Donatoren gibt Elektronen direkt an Akzeptoren ab. Im Falle einer überwiegenden n -Dotierung ($n_D > n_A$) nur daher nur noch $n_D - n_A$ Donatoren zur Verfügung, die ihr Elektron an das Leitungsband abgeben können.

Kapitel 4

Ladungsträgertransport im Halbleiter

In diesem Kapitel werden wir die verschiedenen Effekte betrachten, die zum Ladungsträgertransport im Halbleiter beitragen. Die Summe aller Effekte wird uns letztlich zu den Kontinuitätsgleichungen für Elektronen- und Löcherströme führen, die eine wichtige Grundlage für viele Halbleiterbauelemente darstellen.

4.1 Driftstrom

Unter dem Drift- oder Konvektionsstrom (engl. “drift current”) versteht man den Stromfluss aufgrund der elektrischen Leitfähigkeit des Materials bzw. der im Material vorhandenen freien Ladungsträger, welche unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes $\mathbf{E}$ eine Driftbewegung durchführen. Sowohl Elektronen als auch Löcher tragen zum Driftstrom bei. Die Größe der beiden Anteile hängt im Wesentlichen von der Ladungsträgerkonzentration und den mittleren Driftgeschwindigkeiten $\mathbf{v}_n, \mathbf{v}_p$ ab. Konkret kann man schreiben:

$$\mathbf{J}_F = \mathbf{J}_{n,F} + \mathbf{J}_{p,F} \quad (4.1)$$

$$= -en\mathbf{v}_n + ep\mathbf{v}_p \quad (4.2)$$

$$= [en\mu_n + ep\mu_p] \mathbf{E} \quad (4.3)$$

$$= \sigma \mathbf{E} , \quad (4.4)$$

wobei σ die Leitfähigkeit des Materials bezeichnet, und wobei es sich bei den Größen μ_n und μ_p um die sogenannten Beweglichkeiten (engl. “mobilities”) für Elektronen und Löcher handelt, die die Driftgeschwindigkeit und das elektrische Feld zueinander in Beziehung setzen,

$$\mathbf{v}_n = -\mu_n \mathbf{E}, \quad (4.5)$$

$$\mathbf{v}_p = \mu_p \mathbf{E}. \quad (4.6)$$

Die negative Ladung des Elektrons führt dazu, dass die Driftgeschwindigkeit $\mathbf{v}_n$ dem angelegten Feld $\mathbf{E}$ entgegengerichtet ist, was durch ein negatives Vorzeichen in Gl. (4.5) berücksichtigt wird. Damit ergibt sich für die Leitfähigkeit aufgrund der freien Ladungsträger der Ausdruck

$$\sigma = en\mu_n + ep\mu_p . \quad (4.7)$$

Die Leitfähigkeit hängt also sowohl von den Konzentrationen der Ladungsträger als auch von materialabhängigen Beweglichkeiten μ_n und μ_p ab. Abb. 4.1 zeigt die Leitfähigkeit von mit Arsen dotiertem Silizium bei verschiedenen Dotierungsdichten als Funktion der Temperatur. Da bei hohen Dotierungen und/oder hohen Temperaturen viele Ladungsträger zum Stromtransport beitragen,

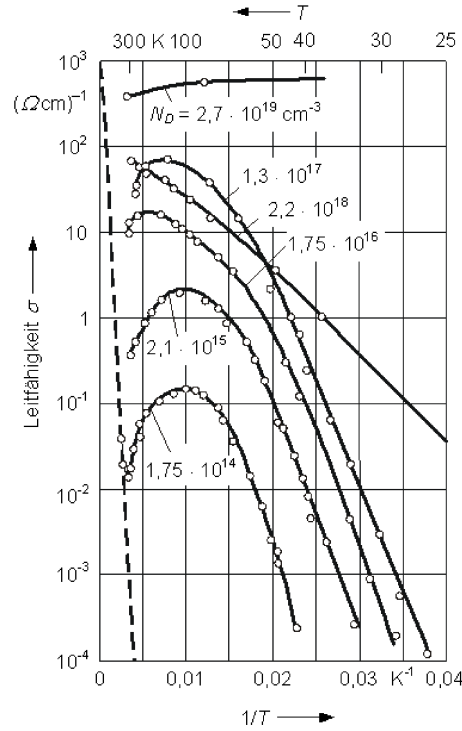


Abbildung 4.1: Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit für verschieden starke As Dotierungen von Si [5].

erwarten wir, dass die Leitfähigkeit mit der Dotierung und Temperatur ansteigt. Das ist in einem gewissen Bereich auch der Fall. Bei hohen Temperaturen verringert allerdings die Streuung der Ladungsträger an thermisch angeregten Phononen die Beweglichkeit und damit die Leitfähigkeit. Die Leitfähigkeit eines Halbleiters ist auch nicht streng proportional zur Dotierungsstärke, da die Störstellen nicht nur freie Ladungsträger erzeugen, sondern auch als Streuzentren für die Ladungsträger wirken und damit die Beweglichkeit herabsetzen. Offensichtlich hängt die Beweglichkeit der Ladungsträger in komplexer Weise von der Temperatur und der Konzentration der Ladungsträger ab. Wir wollen diese im nächsten Abschnitt gesondert betrachten.

4.1.1 Beweglichkeit der Ladungsträger

Die Bewegung eines Elektrons unter einem extern angelegten elektrischen Feld wird durch Gl. (2.45) in Verbindung mit Gl. (2.43) beschrieben. Gl. (2.45) geht allerdings von der Annahme aus, dass das Elektron immer mehr Kristallimpuls aufnimmt, ohne durch Wechselwirkung mit dem Kristallgitter Impuls zu verlieren, was zu einer unendlichen Impulszunahme eines Elektrons im Kristallgitter und damit zu sog. Bloch-Oszillationen führen würde, siehe Abschnitt 2.2.4. Dies ist allenfalls in einem idealen Kristall ohne Fehlstellen oder Gitterschwingungen möglich, der durch ein perfekt periodisches Potential beschrieben werden kann. Ein in einem realen Kristallen bei endlicher Temperatur $T > 0$ propagierendes Elektron tritt dagegen in Wechselwirkung mit Phononen (Gitterschwingungen) und mit durch Dotierungen eingebrachte Unregelmäßigkeiten im Kristallgitter. Dabei wird Impuls an das Kristallgitter abgegeben. Dies lässt sich durch einen zusätzlichen Term $-\hbar\mathbf{k}/\tau$ auf der rechten Seite von Gl. (2.45) berücksichtigen,

$$\frac{\partial(\hbar\mathbf{k})}{\partial t} = -e\mathbf{E} - \frac{\hbar\mathbf{k}}{\tau_{LB}}. \quad (4.8)$$

Die Variable τ_{LB} bezeichnet dabei die sog. Intraband-Impulsrelaxationszeit für Elektronen im Leitungsband und entspricht diejenigen Zeitkonstanten, mit der ein beschleunigtes Leitungsband-

Elektron seinen Impuls nach Abschalten des äußeren Feldes $\mathbf{E}$ wieder an das Kristallgitter abgibt. Unter Einfluss eines zeitlich konstanten elektrischen Feldes ergibt sich aus Gl. (4.8) im stationären Zustand ein konstanter Kristallimpuls $\hbar\mathbf{k} = -e\tau_{\text{LB}}\mathbf{E}$. Dieser lässt sich unter Annahme einer parabolischen Annäherung der Dispersionsrelation eines Elektrons im Leitungsband, Gl. (4.8), in eine Gruppengeschwindigkeit $\mathbf{v}_n$ des Elektrons umrechnen,

$$\mathbf{v}_n = -\frac{e\tau_{\text{LB}}}{m_n}\mathbf{E}, \quad (4.9)$$

wobei m_n die effektive Masse des Elektrons nach Gl. (2.57) bezeichnet. Durch Vergleich mit Gl. (4.5) erhält man einen Ausdruck für die Beweglichkeit μ_n des Elektrons,

$$\mu_n = \frac{e\tau_{\text{LB}}}{m_n}. \quad (4.10)$$

In ähnlicher Weise lässt sich die dazu analoge Beziehung für die Löcherbeweglichkeit herleiten,

$$\mu_p = \frac{e\tau_{\text{VB}}}{m_p}, \quad (4.11)$$

wobei τ_{VB} die Impulsrelaxationszeit für ein Loch im Valenzband und m_p die effektive Masse des Loches bezeichnet.

4.1.2 Einfluss von Dotierungen und Temperatur auf die Beweglichkeit

Sowohl die Dotierstoffkonzentration als auch die Temperatur beeinflussen die Beweglichkeiten für Elektronen und Löcher, siehe Abb. 4.2. Hohe Dotierungen reduzieren die Beweglichkeit wegen einer größeren Kollisionswahrscheinlichkeit mit einem Dotanden. Dies wird als “Impurity Scattering” bezeichnet. Die Wechselwirkung mit Störstellen im Gitter ist umso stärker, je langsamer sich die Elektronen im Gitter bewegen, d.h. der Wechselwirkungsquerschnitt des “Impurity Scattering” nimmt mit der steigenden Bewegungsgeschwindigkeit der Elektronen und damit mit steigender Temperatur ab. Eine genauere Analyse zeigt, dass dies zu einer Zunahme der Beweglichkeit proportional zu $T^{3/2}$ bei tiefen Temperaturen führt. Bei sehr hohen Temperaturen wird die Beweglichkeit der Ladungsträger durch Wechselwirkung mit Gitterschwingungen eingeschränkt, was als “Phonon Scattering” oder “Lattice Scattering” bezeichnet wird. Dieser Effekt nimmt mit der Temperatur zu und führt zu einem Abfall der Beweglichkeit proportional zu $T^{-3/2}$ bei hohen Temperaturen.

4.1.3 Einfluss von hohen Feldern auf die Beweglichkeit

Für hohe Feldstärken sind Gl. (4.5) und Gl. (4.6) ungültig. Grund dafür ist, dass Elektronen bei steigender Feldstärke zunehmend sog. longitudinal-optische (LO) Phononen anregen. Bei diesen schwingen benachbarte Atome longitudinal in Gegenphase mit einer Frequenz um 10^{13} Hz, was einer Phononenenergie von ca. 40 meV entspricht. Die führt dazu, dass sich die Driftgeschwindigkeit der freien Ladungsträger für steigende elektrische Felder einem Sättigungswert nähert. Je nach Material und Trägersorte liegen die Sättigungsgeschwindigkeiten (engl. “Saturation Velocity”) im Bereich von $10 \dots 100 \text{ nm/ps} = 10^6 \dots 10^7 \text{ cm/s}$.

Abb. 4.3 (a) zeigt die Driftgeschwindigkeit als Funktion der angelegten Feldstärke für die drei wichtigsten Halbleiter Si, Ge, und GaAs. Im Falle von GaAs ergibt sich in einem bestimmten Bereich sogar eine negative differentielle Beweglichkeit, d.h. die Driftgeschwindigkeit der Elektronen nimmt mit wachsender Feldstärke ab. Der Grund dafür ist in Abb. 4.3 (b) illustriert: Elektronen im Leitungsbandminimum von GaAs besitzen aufgrund der kleinen effektiven Masse (große Krümmung) eine sehr hohe Beweglichkeit. Bei großen Feldstärken nehmen die Elektronen innerhalb ihrer freien Weglänge so viel Energie auf, dass sie bei einer Kollision mit einem Dotieratom

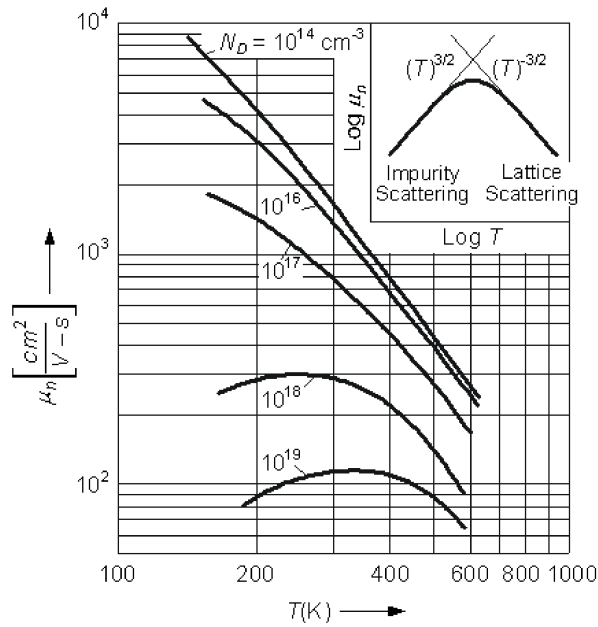


Abbildung 4.2: Die Beweglichkeit hängt stark von der Kollisionswahrscheinlichkeit ab. Hohe Dotierungen reduzieren die Beweglichkeit wegen einer größeren Kollisionswahrscheinlichkeit mit einem Dotanden (“Impurity Scattering”). Die Wechselwirkung mit Störstellen im Gitter ist bei tieferen Temperaturen stärker als bei hohen Temperaturen, was zu einer Zunahme der Beweglichkeit proportional zu $T^{3/2}$ bei tiefen Temperaturen führt. Bei sehr hohen Temperaturen wird die Beweglichkeit der Ladungsträger durch Wechselwirkung mit Gitterschwingungen eingeschränkt (“Phonon Scattering” bzw. “Lattice Scattering”). Dieser Effekt nimmt mit der Temperatur zu und führt zu einem Abfall der Beweglichkeit proportional zu $T^{-3/2}$ bei hohen Temperaturen.

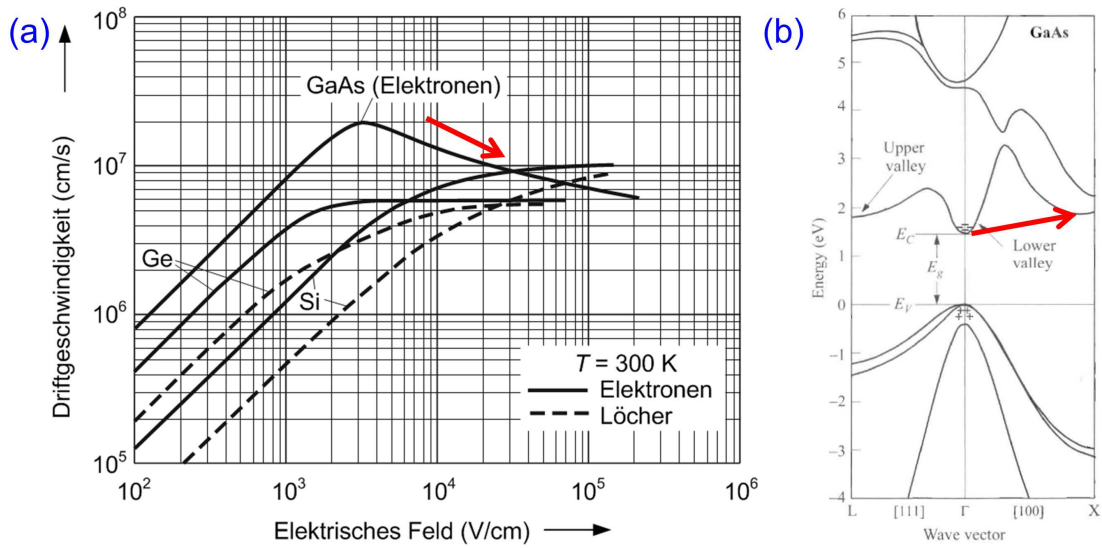


Abbildung 4.3: (a) Driftgeschwindigkeit von Elektronen als Funktion des angelegten elektrischen Feldes für Ge, Si und GaAs. Für stark dotiertes Material ist die Anfangssteigung der Kurven kleiner. Die Sättigungsdriftgeschwindigkeiten sind aber unabhängig von der Dotierung. Im Falle von GaAs nimmt in einem bestimmten Bereich die Driftgeschwindigkeit der Elektronen mit wachsender Feldstärke ab. (b) Die Abnahme der Driftgeschwindigkeit mit der elektrischen Feldstärke liegt daran, dass Elektronen im Leitungsbandminimum von GaAs aufgrund der kleinen effektiven Masse (große Krümmung) eine sehr hohe Beweglichkeit besitzen und bei großen Feldstärken in das um etwa 0.3 eV höher gelegene Nebenminimum des Valenzbandes streuen können (roter Pfeil). Die effektive Masse im Nebenminimum ist aber um etwa einen Faktor 20 höher und die Beweglichkeit entsprechend geringer als im Hauptminimum des Leitungsbandes, was bei gegebenem Kristallimpuls oder bei gegebener kinetischer Energie zu einem Absinken der Driftgeschwindigkeit führt. [6].

oder mit einem Phonon in das um etwa 0.3 eV höher gelegene Nebenminimum des Valenzbandes streuen können, siehe roter Pfeil in Abb. 4.3 (b). Die effektive Masse dort ist aber um etwa einen Faktor 20 höher und die Beweglichkeit entsprechend geringer als im Hauptminimum des Leitungsbandes, was bei gegebenem Kristallimpuls oder bei gegebener kinetischer Energie zu einem Absinken der Driftgeschwindigkeit führt. Daher nimmt die mittlere Driftgeschwindigkeit des Elektronenensembles in GaAs bei höherer Feldstärke ab. Wie sich später zeigen wird, beruhen auf diesem Effekt wichtige Bauelemente zur Mikrowellenerzeugung. Dazu zählt z.B. das sog. Gunn-Element, siehe Abschnitt 7.9.3.

Für Si und Ge können die experimentell gefundenen Abhängigkeiten der Driftgeschwindigkeiten vom elektrischen Feld durch einen empirischen Ausdruck angenähert werden,

$$v_{n,p} = \frac{v_s}{[1 + (E_0/E)^\gamma]^{1/\gamma}}, \quad (4.12)$$

wobei v_s die sog. Sättigungsdriftgeschwindigkeit ist und E_0 ein konstantes Feld darstellt. Für hochreines Silizium gelten folgende Werte: $v_s = 1 \cdot 10^7$ cm/s, $E_0 = 7 \cdot 10^3$ V/cm für Elektronen bzw. $E_0 = 2 \cdot 10^4$ V/cm für Löcher, und $\gamma = 2$ für Elektronen bzw. $\gamma = 1$ für Löcher.

4.1.4 Messung der Beweglichkeiten und Ladungsträgerkonzentrationen: Hall-Effekt

Die bisherigen Überlegungen haben nur ein äußeres elektrisches Feld mitberücksichtigt. Was passiert aber bei einem konstanten äußeren Magnetfeld (siehe Bild 4.4)? Wie hängen die Spannungen V , welche man in der x- und z-Richtung messen kann vom angelegten Strom ab? Wir wollen die Antwort systematisch erarbeiten.

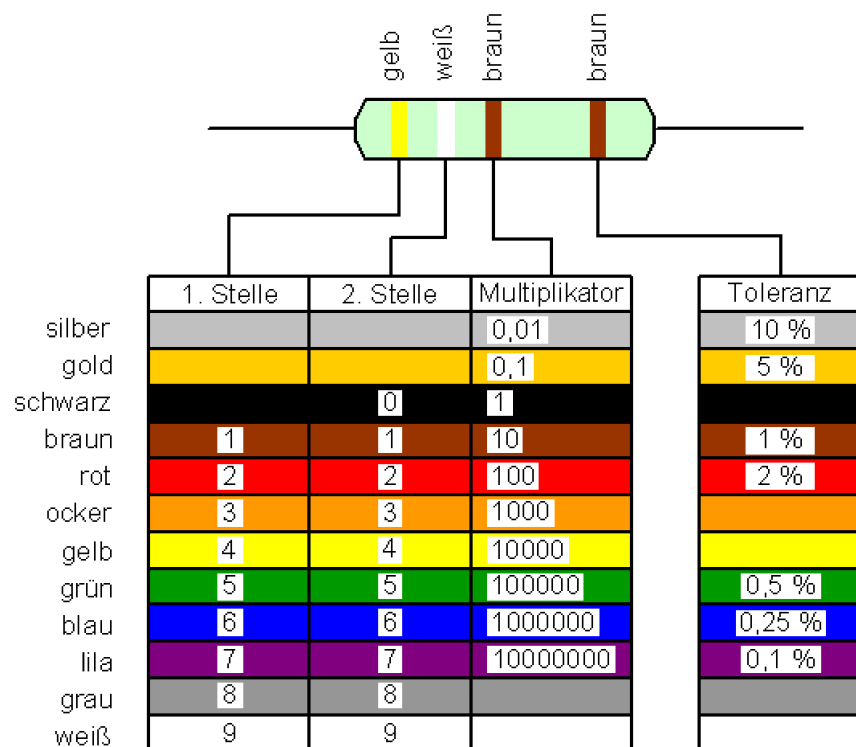
Ges: Der Zusammenhang zwischen $\vec{J}_p$ oder $\vec{J}_n$ mit den messbaren Spannungen V_z und V_x .

Lsg:

Anhang A

Symbole, Materialparameter und Naturkonstanten

A.1 Farbcodierung von Widerständen



A.2 Materialparameter

A.3 Naturkonstanten

Konstanten:

Elementarladung	$e = 1.602\,176\,487(40) \times 10^{-19} \text{ C}$
Boltzmann-Konstante	$k = 1.380\,650\,4(24) \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} = 8.617\,343(15) \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$
Lichtgeschwindigkeit	$c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$
Plancksche Konstante	$h = 6.626\,069\,57(29) \times 10^{-34} \text{ Js}$
Reduzierte Plancksche Konst.	$\hbar = h/(2\pi) = 1.054\,571\,726(47) \times 10^{-34} \text{ Js}$
Masse des freien Elektrons	$m_0 = 9.109\,382\,15(45) \times 10^{-31} \text{ kg}$
Permeabilitätskonstante	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ A s / (V m)} = 1.256\,637\,061... \times 10^{-6} \text{ A s / (V m)}$
Dielektrizitätskonstante	$\varepsilon_0 = 8.854\,187\,817... \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
Avogadro-Konstante	$N_A = L = 6.022\,141\,5(10) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Elektronvolt $1 \text{ eV} = 1.602\,176\,53(14) \times 10^{-19} \text{ J}$

(= kinetische Energie eines Elektrons, wenn dieses über einer Potentialdifferenz von 1 V beschleunigt wurde)

A.4 Verschiedenes

- Definition von Potentialdifferenzen $U_{AB} = \varphi_A - \varphi_B$
(D.h. mit dieser Notation geben wir die Spannung an, welche am Punkt A gegenüber dem Potential bei B anliegt. Herrscht beispielsweise bei A ein Potential von 10 V, und B ist geerdet, dann ist $U_{AB} = 10 \text{ V}$.)
- **Achtung**, diese Notation darf nicht mit der Vektornotation aus der Physik verwechselt werden:
Definition von Vektoren $\vec{r}_{12} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$
(Damit ist dann der Vektor $\vec{r}_{12}$ gemeint, der von Punkt 1 nach Punkt 2 zeigt.)

Properties of Ge, Si, and GaAs at 300 K			
Properties	Ge	Si	GaAs
Atoms/cm ³	4.42×10^{22}	5.0×10^{22}	4.42×10^{22}
Atomic weight	72.60	28.09	144.63
Breakdown field (V/cm)	$\sim 10^5$	$\sim 3 \times 10^5$	$\sim 4 \times 10^5$
Crystal structure	Diamond	Diamond	Zincblende
Density (g/cm ³)	5.3267	2.328	5.32
Dielectric constant	$\epsilon_{\text{stat}} = \epsilon_{\text{opt}} = 16.0$	$\epsilon_{\text{stat}} = \epsilon_{\text{opt}} = 11.9$	$\epsilon_{\text{stat}} = 13.1$ $\epsilon_{\text{opt}} = 11.1$
Effective density of states in conduction band, N_C (cm ⁻³)	1.04×10^{19}	2.8×10^{19}	4.7×10^{17}
Effective density of states in valence band, N_V (cm ⁻³)	6.0×10^{18}	1.04×10^{19}	7.0×10^{18}
Effective Mass, m^*/m_0			
Electrons	$m_l^* = 1.64$ $m_t^* = 0.082$	$m_l^* = 0.98$ $m_t^* = 0.19$	0.067
Holes	$m_{lh}^* = 0.044$ $m_{hh}^* = 0.28$	$m_{lh}^* = 0.16$ $m_{hh}^* = 0.49$	$m_{lh}^* = 0.082$ $m_{hh}^* = 0.45$
Electron affinity, χ (V)	4.0	4.05	4.07
Energy gap (eV) at 300 K	0.66	1.12	1.424
Intrinsic carrier concentration (cm ⁻³)	2.4×10^{13}	1.45×10^{10}	1.79×10^6
Intrinsic Debye length (μm)	0.68	24	2250
Intrinsic resistivity ($\Omega\text{-cm}$)	47	2.3×10^5	10^8
Lattice constant ($\text{\AA}$)	5.64613	5.43095	5.6533
Linear coefficient of thermal expansion, $\Delta L/L \Delta T$ ($^\circ\text{C}^{-1}$)	5.8×10^{-6}	2.6×10^{-6}	6.86×10^{-6}
Melting point ($^\circ\text{C}$)	937	1415	1238
Minority carrier lifetime (s)	10^{-3}	2.5×10^{-3}	$\sim 10^{-8}$
Mobility (drift) (cm ² /V-s)	3900 1900	1500 450	8500 400
Optical-phonon energy (eV)	0.037	0.063	0.035
Phonon mean free path λ_0 ($\text{\AA}$)	105	76 (electron) 55 (hole)	58
Specific heat (J/g- $^\circ\text{C}$)	0.31	0.7	0.35
Thermal conductivity at 300 K (W/cm- $^\circ\text{C}$)	0.6	1.5	0.46
Thermal diffusivity (cm ² /s)	0.36	0.9	0.24
Vapor pressure (Pa)	1 at 1330 $^\circ\text{C}$ 10^{-6} at 760 $^\circ\text{C}$	1 at 1650 $^\circ\text{C}$ 10^{-6} at 900 $^\circ\text{C}$	100 at 1050 $^\circ\text{C}$ 1 at 900 $^\circ\text{C}$
Quelle: S.M.Sze, "Physics of Semiconductor Devices", 2nd Ed., Wiley 1981			

Literaturverzeichnis

- [1] Neundorff, D.; Pfendtner, R.; Popp, H. P.: Elektrophysik, Springer Verlag, Berlin, 1996.
- [2] Jutzi, W.: Digitalschaltungen. Eine Einführung. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag 1995.
- [3] Ibach, H.; Lüth, H.: Festkörperphysik. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag 2009.
- [4] Kittel, C.; Fong, C. Y.; Tiegler, E.: Quantentheorie der Festkörper, Oldenbourg Wissenschaftsverlag 1988.
- [5] Müller, R.: Grundlagen der Halbleiter-Elektronik, Bd. 1 u. 2, Springer Verlag, Berlin, 1984.
- [6] Sze, S. M.: Semiconductor Devices, Physics and Technology. New York, John Wiley 1985.
- [7] Sze, S. M.: Physics of Semiconductor Devices. New York: John Wiley 1981.
- [8] Sze, S. M. und Ng, Kwok K., „Physics of Semiconductor Devices“, Third Edition, John Wiley, 2006.
- [9] Sze, S. M. und Lee, M. K.: „Semiconductor Devices, Physics and Technology“, Third Edition, John Wiley, 2012.
- [10] Fonstad, C. G.: Microelectronic Devices and Circuits, McGraw-Hill, Inc. (1994).
- [11] Ashcroft, N. W.; Mermin, N. D.: Solid State Physics, Saunders College (1976).
- [12] Ashcroft, N. W.; Mermin, N. D.: Solid State Physics, CBS Publishing ASIA LTD (1988).
- [13] Pierret, R. F.: Semiconductor Device Fundamentals, Addison-Wesley, Reading MA (1996).
- [14] Spenke, E.: Elektronische Halbleiter, Springer Verlag, Berlin, 1965. (Kapitel VIII).
- [15] Seeger, K.: Semiconductor physics. Wien, New York: Springer 1973
- [16] Paul, R.: Halbleiterphysik. Heidelberg: Dr. Alfred Hüthig 1975
- [17] Paul, R.: Halbleiterdioden. Grundlagen und Anwendung. Heidelberg: Dr. Alfred Hüthig 1976
- [18] Paul, R.: Transistoren und Thyristoren. Grundlagen und Anwendung. Heidelberg, Basel: Dr. Alfred Hüthig 1977
- [19] Paul, R.: Elektronische Halbleiterbauelemente, 3. Aufl. Stuttgart: B. G. Teubner 1992
- [20] Esaki, L; und Tsu, S.: IBM J. Res. Dev. 14, 61 (1970).
- [21] Leo, K.; Göbel, E. O.; Damen, T. C.; Shah, J.; Schmitt-Rink, S.; Schäfer, W.; Müller, J. F.; Köhler, K. und Ganser, P.: Phys. Rev. Lett. 66, 201 (1991).
- [22] Feldmann, J.; Leo, K.; Shah, J.; Miller, D. A. B.; Cunningham, J. E.; Schmitt-Rink, S.; Meier, T.; von Plessen, G.; Schulze, A. and Thomas, P.: Phys. Rev. B 46, 7252 (1992).

- [23] Queisser, H.: Kristallene Krisen, Piper, München, Zürich 1987.
- [24] Reisch, M.: Elektronische Bauelemente, Springer Verlag 1998.
- [25] Lilienfeld, I. E.: Method and apparatus for controlling electric currents. Application for U.S. Patent 1 745 175.
- [26] Heil, O.: Improvements in or relating to electrical amplifiers and other control arrangements and devices. British Patent 439 457, Sept. 1939.
- [27] G. Grau, W. Freude; "Optische Nachrichtentechnik: eine Einführung". 3te Auflage, Springer-Verlag, Berlin 1991
- [28] B.E.A: Saleh and M.C. Teich; "Fundamentals of Photonics"; Wiley Internationals, 1991
- [29] K. J. Ebeling; "Integrierte Optoelektronik", Zweite Auflage, Springer-Verlag 1992
- [30] G. P. Agrawal; "Fiber Optic Communication Systems, 2nd Ed."; John Wiley & Sons, Inc.
- [31] M. Bitter; "InP/GaAs pin-Photodiode Arrays for Parallel Optical Interconnects and Monolithic InP/InGaAs pin/HBT Optical Receivers for 10 Gb/s and 40 Gb/s"; Series in Microelectronics, Vol 13, Hartung-Gorre Verlag, Konstanz, 2001
- [32] G. S. Kinsey, J. C. Campbell, and A. G. Dentai; „Waveguide Avalanche Photodiode Operating at 1.55 m with a Gain-Bandwidth Product of 320 GHz“; PTL, vol. 13, no. 8, pp. 842 ff., Aug. 2001
- [33] Riatsch, Diss ETH No. 14130, 2001
- [34] G.D. Wilk; „High-k gate dielectrics: Current status and materials properties considrations“; J. Appl. Phys., Vol. 89, No. 10; pp. 5243, May 2001
- [35] “A 30 Year Retrospective on Dennard’s MOSFET Scaling Paper” by Mark Bohr, IEEE Solid State Circuits, Jan. 2007
- [36] Ref.: R. Dennard, et al., “Design of ion-implanted MOSFETs with very small physical dimensions,” IEEE Journal of Solid State Circuits, vol. SC-9, no. 5, pp. 256-268, Oct. 1974.
- [37] T. Nagatsuma et al.; Laser & Photon. Rev.3, No.1–2, 123–137 (2009)