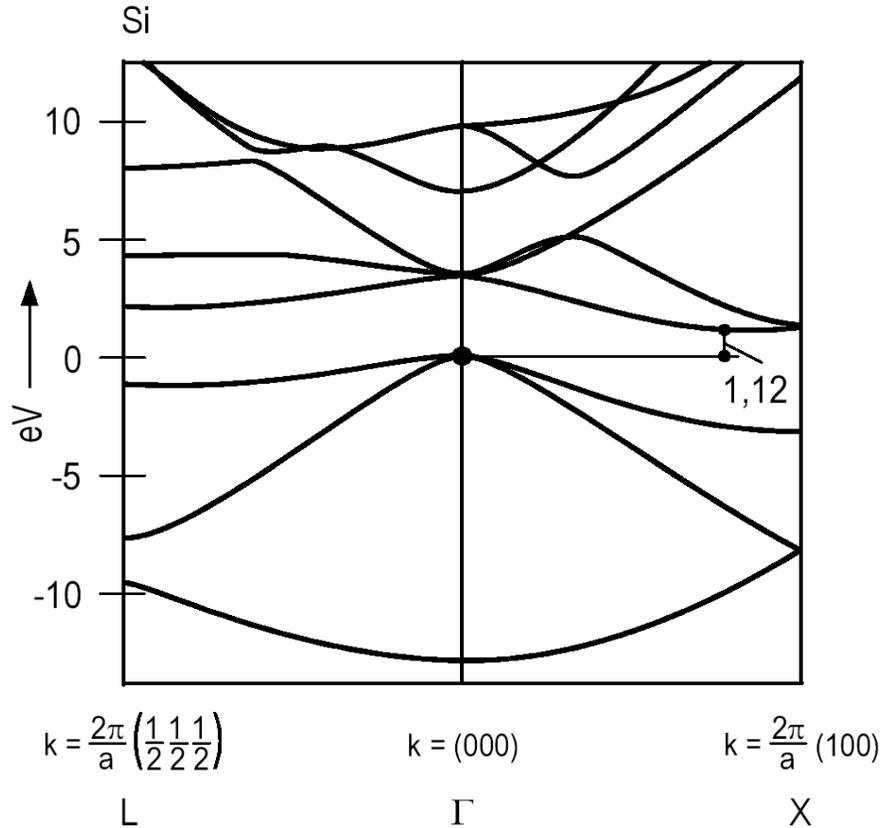
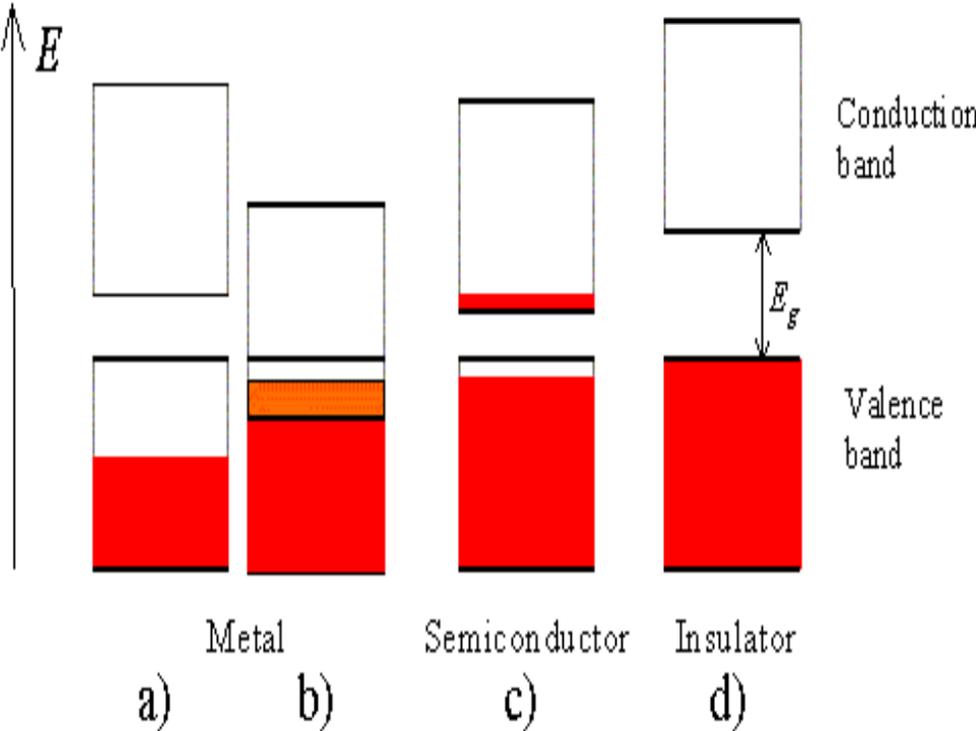


1. **Grundlagen der Quantenmechanik**
2. **Elektronische Zustände**
3. **Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente**
4. **Elektronen in Kristallen**
5. **Halbleiter**
6. **Quantenstatistik für Ladungsträger**
  - 6.1 Die Zustandsdichte
  - 6.2 Besetzungswahrscheinlichkeiten
  - 6.3 Ladungsträgerdichten
7. **Dotierte Halbleiter**
8. **Halbleiter im Nichtgleichgewicht**
9. **Der pn-Übergang**

Optik & Festkörperelektronik  
SS 2020  
9. Foliensatz  
04.06.2020

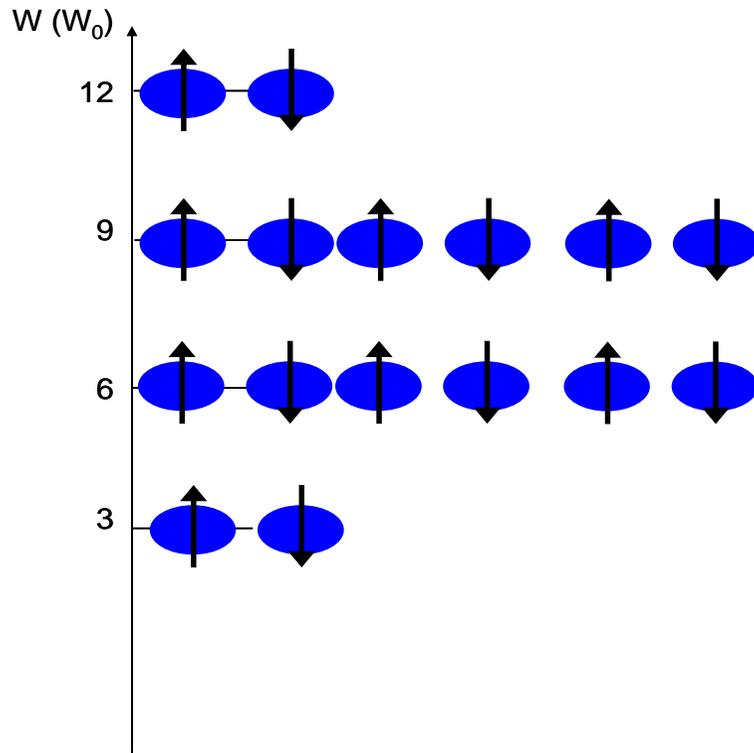
# Welche Zustände sind besetzt ?



# Welche Zustände sind eigentlich besetzt ?

---

OFE 9.3  
SS 2020



-im Prinzip sollte das Ganze  
ähnlich wie beim Atom erfolgen

- Besetzung von „unten nach oben“

-...wie viele Elektronen kann man in  
ein Band hineinsetzen ?

Wie wendet man das Pauli-Prinzip bei einer kontinuierlichen Verteilung von Zuständen an ?

1. **Grundlagen der Quantenmechanik**
2. **Elektronische Zustände**
3. **Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente**
4. **Elektronen in Kristallen**
5. **Halbleiter**
6. **Quantenstatistik für Ladungsträger**
  - 6.1 Die Zustandsdichte
  - 6.2 Besetzungswahrscheinlichkeiten
  - 6.3 Ladungsträgerdichten
7. **Dotierte Halbleiter**
8. **Halbleiter im Nichtgleichgewicht**
9. **Der pn-Übergang**

# Zustandsdichte : Badewannen-Analogie

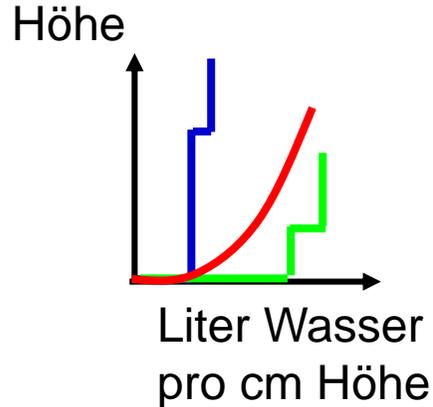
OFE 9.5  
SS 2020

Wie viel Wasser ist in einer Badewanne, die bis zur Höhe von 30 cm über dem Boden gefüllt ist?

Wie viele Liter passen in die nächsten 10 cm?

Die Antwort hängt von der Form der Badewanne ab!

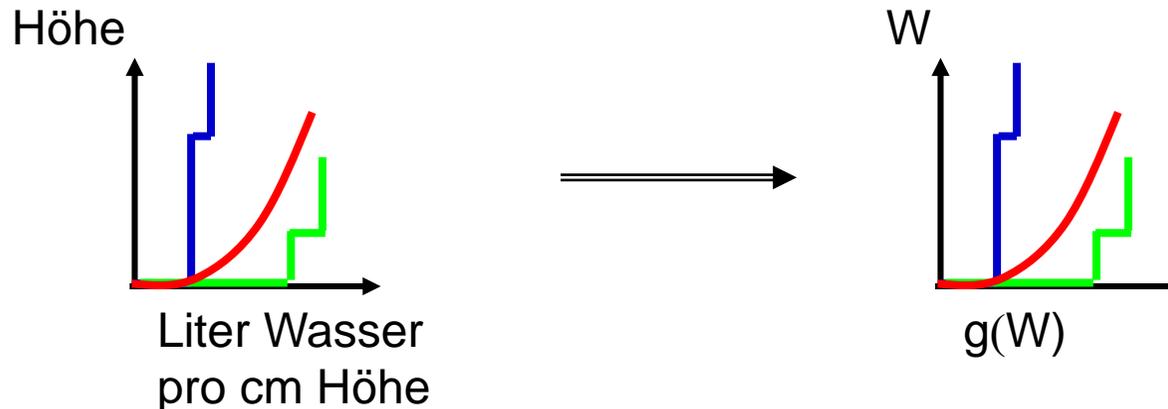
Integrieren ergibt Gesamtwassermenge.



Die Wassermenge in einer bis zu einer bestimmten Höhe gefüllten Badewanne hängt von der Form der Badewanne ab.

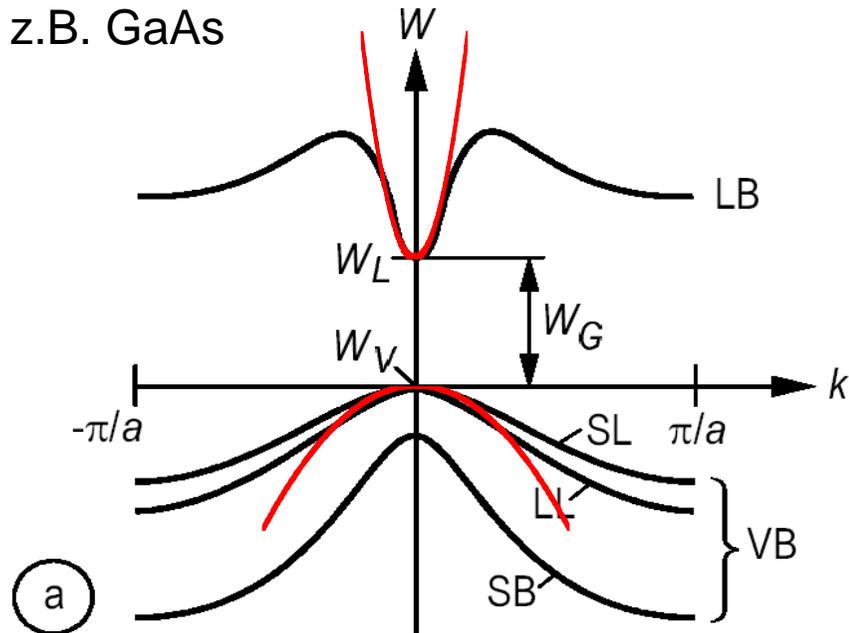
Genauso hängt die Anzahl der Ladungsträger in einem bis zu einer bestimmten Energie gefüllten Band von der Form der Bandstruktur ab.

Die Anzahl der erlaubten Zustände pro Volumeneinheit und pro Energieintervall ist durch die Zustandsdichte  $g(W)$  gegeben.



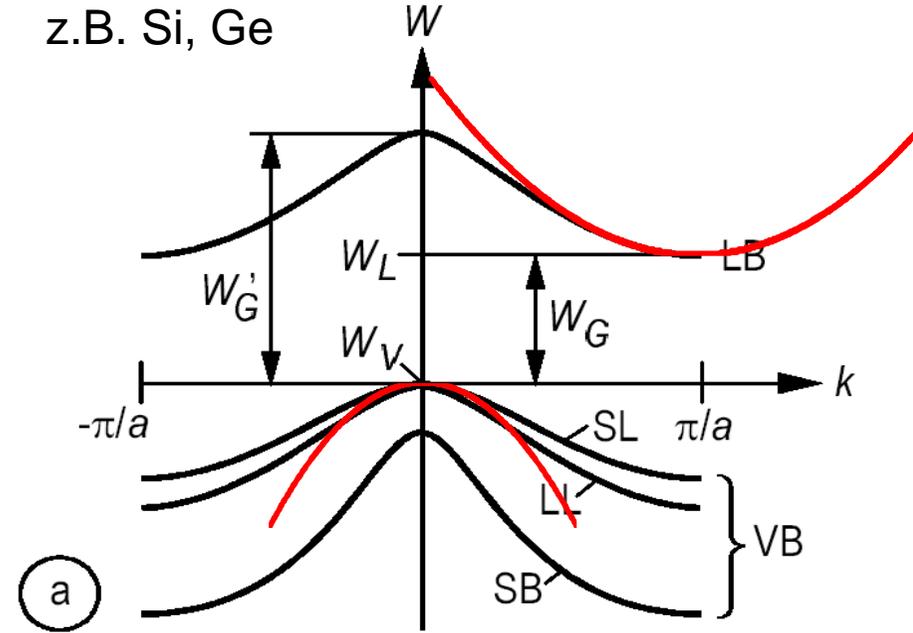
## Direkter Halbleiter

z.B. GaAs



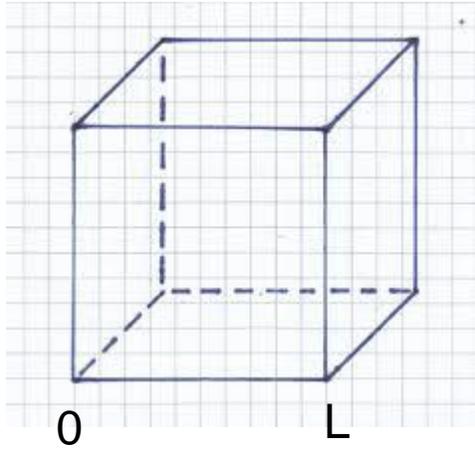
## Indirekter Halbleiter

z.B. Si, Ge



Wie sieht das dann konkret im Fall von **parabolischen** Bändern aus ?

Hier ist der Bezugspunkt für die Energie das Minimum des Leitungsbandes  $W_L$  bzw. das Maximum des Valenzbandes  $W_V$ .



Gedankenexperiment: Der Festkörper wird unterteilt in viele Würfel mit Kantenlänge  $L$  ( $L \gg$  Einheitszelle;  $L \ll$  Ausdehnung des Festkörpers). Dieser Würfel ist repräsentativ für das Gesamtvolumen.

„Periodische Fortsetzung/Randbedingungen“: Wellenfunktion muss phasenrichtig an der gegenüberliegenden Seite des Würfels wieder herauskommen.

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{+j\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\psi(r+L) = \psi(r) \longrightarrow$$

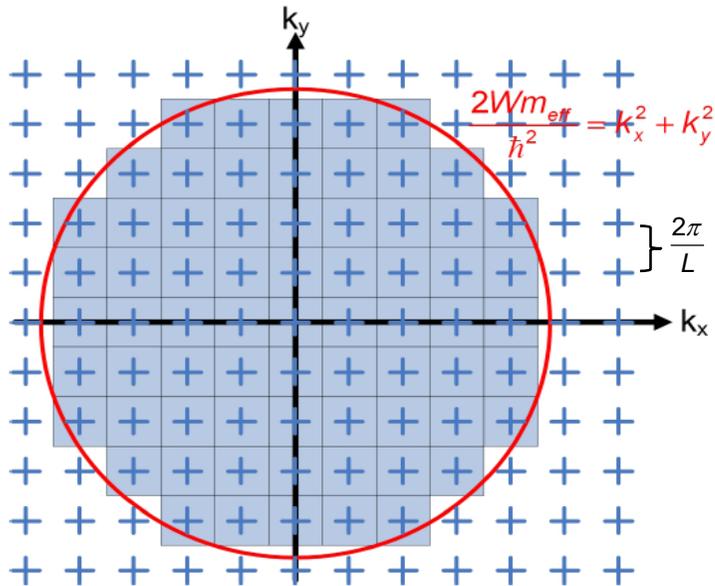
$$u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$$

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x$$

$$k_y = \frac{2\pi}{L} n_y$$

$$k_z = \frac{2\pi}{L} n_z$$

Nur diskrete Wellenvektoren sind erlaubt.



„Volumen“ eines  
Zustandes im k-Raum:

$$V_{\text{Zustand}} = \frac{8\pi^3}{L^3} :$$

Anzahl der Zustände mit Wellenvektorbetrag  $\leq k$  ist  
für „große“  $k$ :

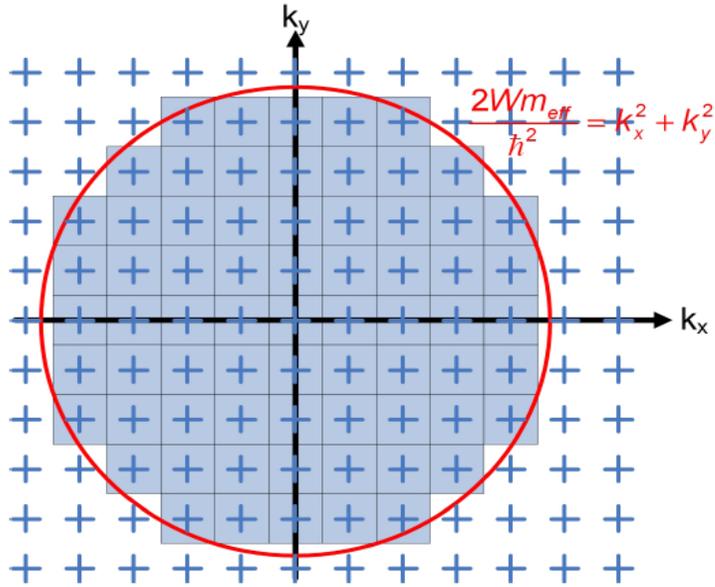
$$N(k) = \frac{4\pi k^3}{3} \cdot \frac{L^3}{8\pi^3}$$

K ist unhandlich  $\rightarrow$  Umschreiben auf W:

$$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mW}$$

$\rightarrow$  Anzahl der Zustände mit Energie  $\leq W$ :

$$N(W) = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{L^3}{8\pi^3} \left( \frac{1}{\hbar} \right)^3 (2mW)^{\frac{3}{2}} = \frac{L^3}{6\pi^2 \hbar^3} (2mW)^{\frac{3}{2}}$$



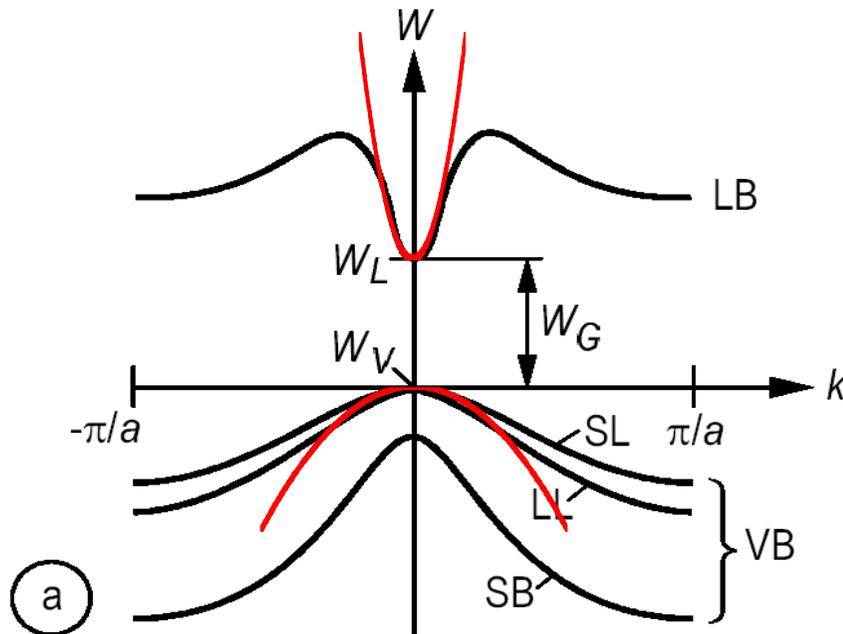
Dichte der Zustände in Kugelschale  $[W, W+dW]$ :

$$D(W) = \frac{dN(W)}{dW} = L^3 \frac{(2m_{eff})^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2 \hbar^3} W^{\frac{1}{2}}$$

Normierung auf das Volumen:  $*1/L^3$

Berücksichtigung Spin:  $*2$

→ **Zustandsdichte** eines parabolischen Halbleiters:  $g_e(W) = \frac{1}{V} \frac{dN(W)}{dW} = \frac{(2m_{eff})^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2 \hbar^3} W^{\frac{1}{2}}$



In der Parabelnäherung verhalten sich Elektronen im LB also quasifrei mit der effektiven Masse  $m_n$ . Ihre Zustandsdichte ist gegeben durch:

$$g_L(W) = \frac{4\pi(2m_e)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{W - W_L}$$

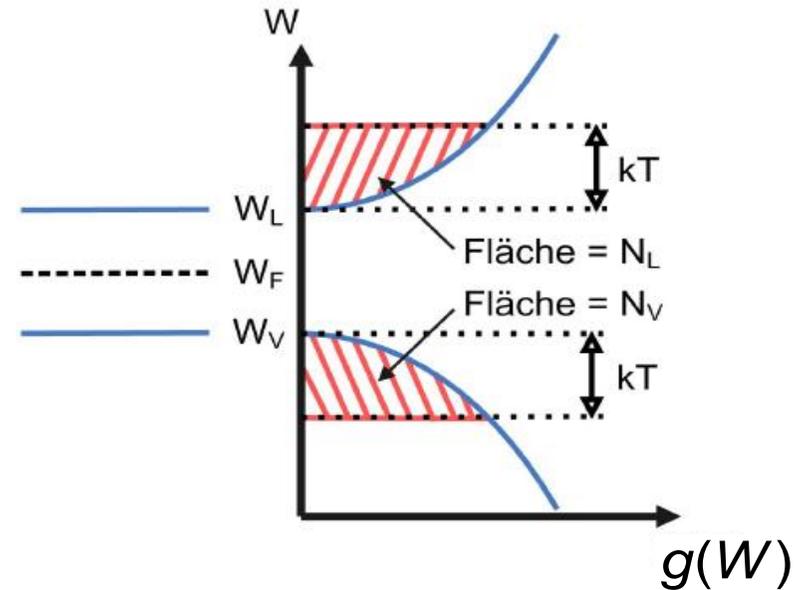
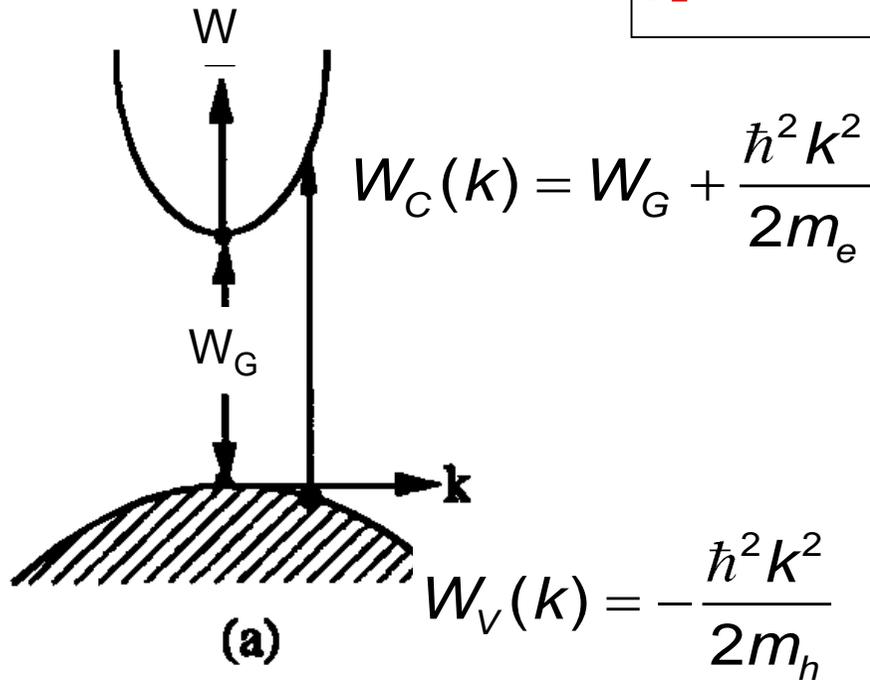
In der Parabelnäherung verhalten sich Löcher im VB quasifrei mit der effektiven Masse  $m_p$ . Ihre Zustandsdichte ist gegeben durch:

$$g_V(W) = \frac{4\pi(2m_h)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{W_V - W}$$

## Dispersionsrelation

## Zustandsdichte

$$g_L(W) = \frac{4\pi(2m_e)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{W - W_L}$$



$$g_V(W) = \frac{4\pi(2m_h)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{W_V - W}$$

1. **Grundlagen der Quantenmechanik**
2. **Elektronische Zustände**
3. **Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente**
4. **Elektronen im Kristall**
5. **Halbleiter**
6. **Quantenstatistik für Ladungsträger**
  - 6.1 Die Zustandsdichte
  - 6.2 Besetzungswahrscheinlichkeiten
  - 6.3 Ladungsträgerdichten
7. **Dotierte Halbleiter**
8. **Ladungsträgerdynamik im Halbleiter**
9. **Der pn-Übergang**

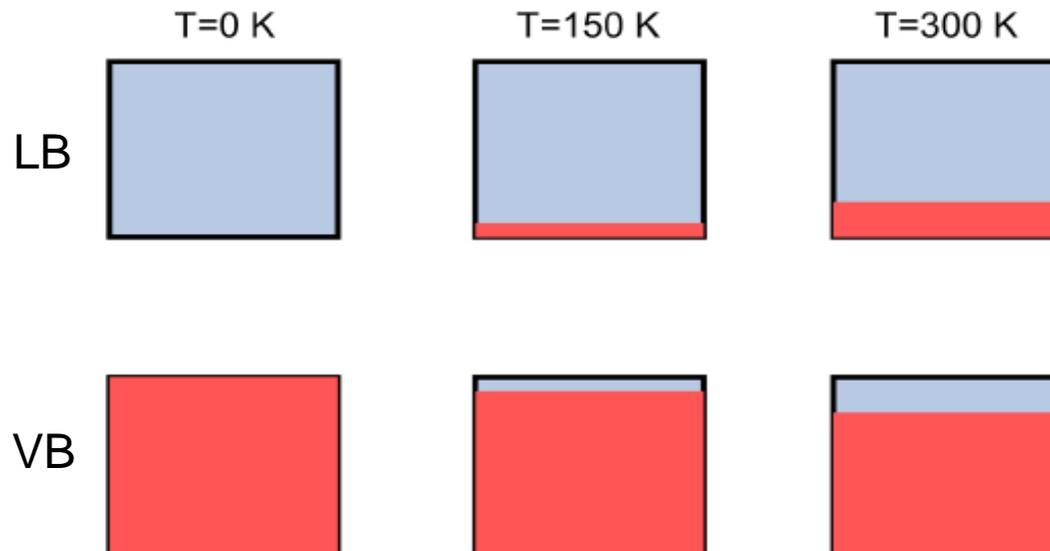
Bei  $T = 0 \text{ K}$  sind alle Zustände im Valenzband (VB) mit Elektronen besetzt und alle Zustände im Leitungsband (LB) sind unbesetzt.

⇒ Leitfähigkeit  $\sigma = 0$ , da es keine beweglichen Ladungsträger gibt.

Bei steigender Temperatur  $T$  beobachtet man, dass mehr und mehr Zustände im Leitungsband besetzt sind und mehr und mehr Zustände im Valenzband frei sind.

⇒ Da es mehr bewegliche Träger gibt, steigt die Leitfähigkeit zunächst mit der Temperatur.

Wie können wir die Besetzung der Zustände berechnen ???

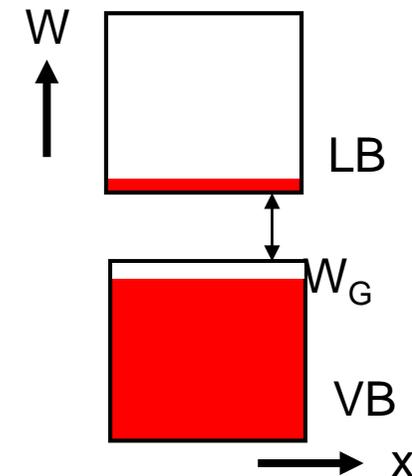


Elektronen können vom Valenzband (VB) ins Leitungsband (LB) übergehen, wenn ihnen mindestens die Energie  $W_G$  zugeführt wird.

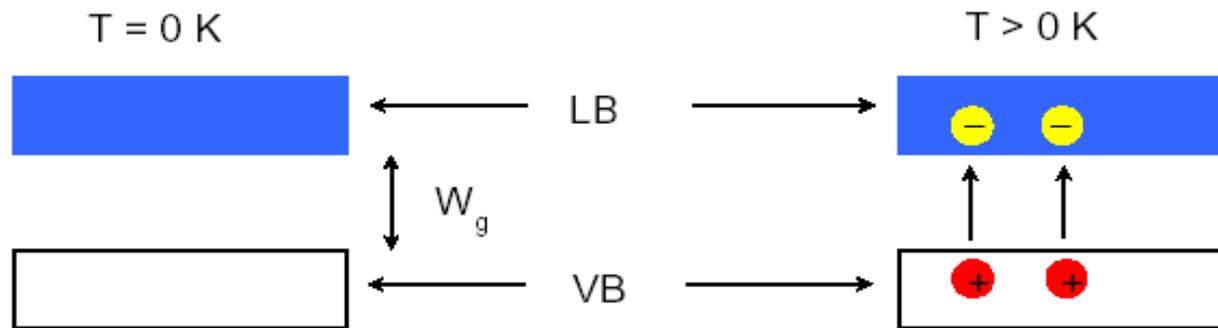
⇒ Quantenmechanisch gesehen geht das Elektron durch Energiezufuhr von einem Zustand im Valenzband in einen Zustand im Leitungsband über.

Die Energie kann auf verschiedene Arten zugeführt werden:

- ⇒ Thermische Energie (Stoß mit dem „wackelnden“ Atomgitter)
- ⇒ Elektromagnetische Strahlung
- ⇒ Elektrische Felder
- ⇒ ...



Warum befinden sich bei höheren Temperaturen eigentlich Elektronen in höheren Niveaus ?



Aus der Thermodynamik:

Die Besetzung der Zustände erfolgt so, dass die freie Energie minimiert wird:

$$F=U-TS=\text{Min!}$$

Die innere Energie ergibt als Summe der Energie der einzelnen Elektronen:

$$U = \sum_i n_i W_i$$

$F=U-TS=\text{Min!}$

Für die Entropie gilt:

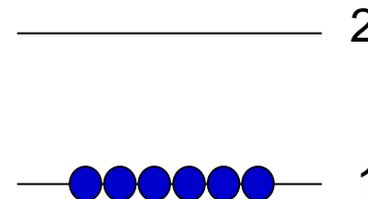
$$S = k \ln P$$

$k=1,3805 \cdot 10^{-23} \text{JK}^{-1} = 8,61 \text{eV} \cdot \text{K}^{-1}$  ist die Boltzmannkonstante

Hierbei ist  $P$  die Anzahl der Realisierungsmöglichkeiten.

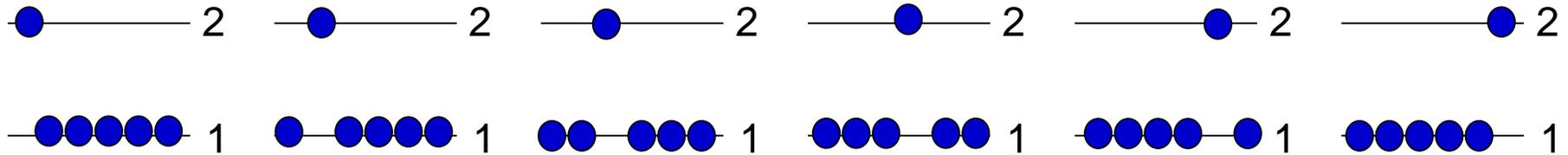
Nehmen wir an, wir hätten 6 Elektronen auf zwei Energieniveaus 1 und 2 zu verteilen:

Wenn alle Elektronen im Zustand 1 sind, gibt es nur eine einzige Realisierungsmöglichkeit.



$$S=0$$

Das ist der Zustand für  $T=0$ .



Der Zustand (5 e's in 1, und 1 e in 2) lässt sich mehrfach realisieren.

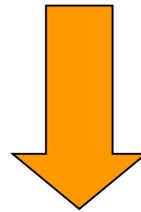
D.h. seine Entropie  $S=k \ln(6)$  ist endlich.

$$F=U-TS=\text{Min!}$$

Je höher die Temperatur ist, desto stärker sorgt die damit verbundene Entropieerhöhung für eine Besetzung der höheren Zustände.

Obwohl die innere Energie größer wird, wird u. U. die freie Energie kleiner !

Aus einer konsequenten thermodynamischen Betrachtung dieser Situation lässt sich die Wahrscheinlichkeit ableiten, dass ein Zustand bei einer Energie  $W$  mit einem Elektron besetzt ist.



Die Wahrscheinlichkeit, dass ein quantenmechanischer Zustand der Energie  $W$  bei gegebener Temperatur  $T$  besetzt ist, ist

$W_F$  wird als Fermi-Energie bezeichnet.

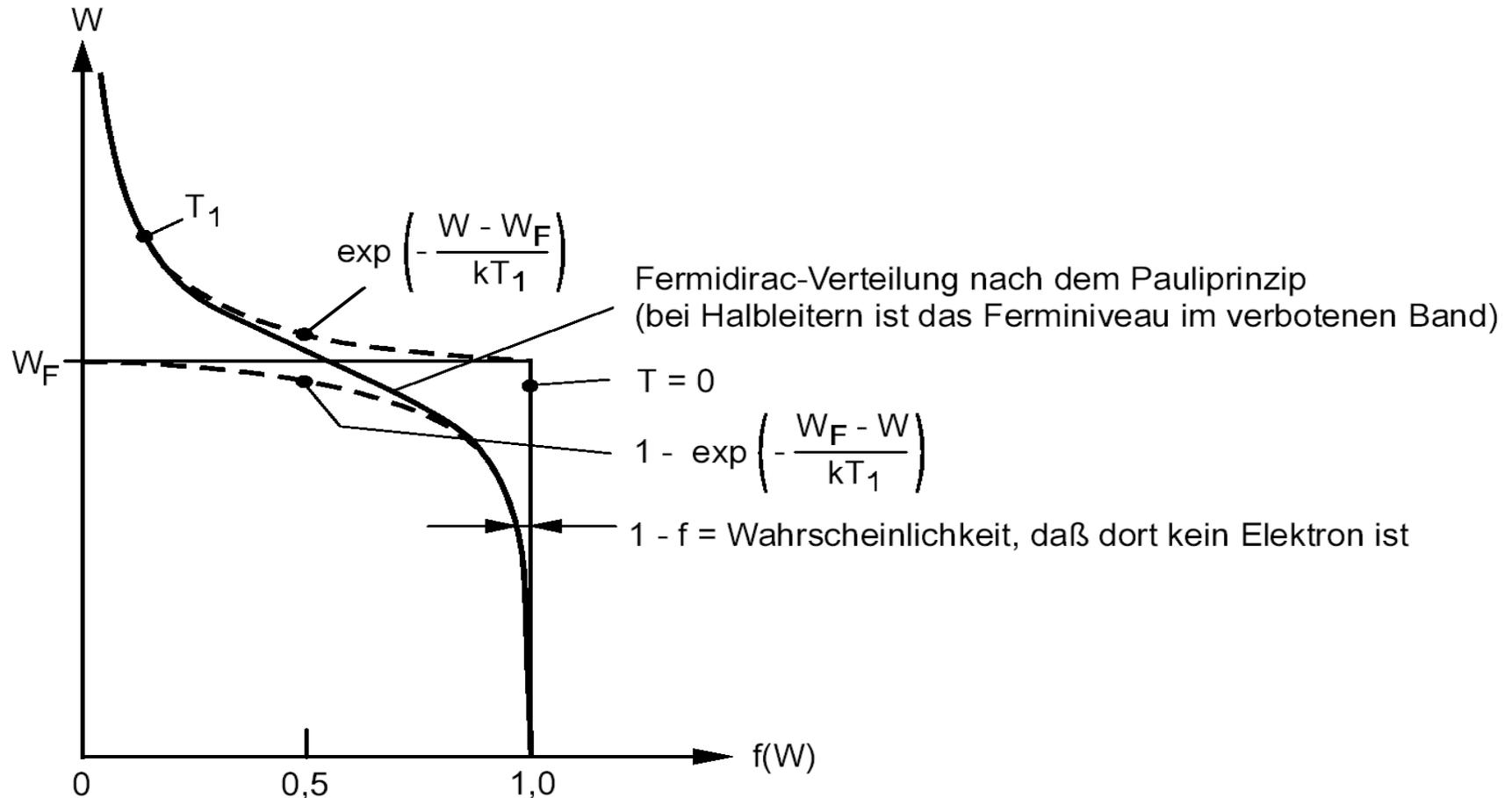
$$f(W, T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{W - W_F}{kT}\right)}$$

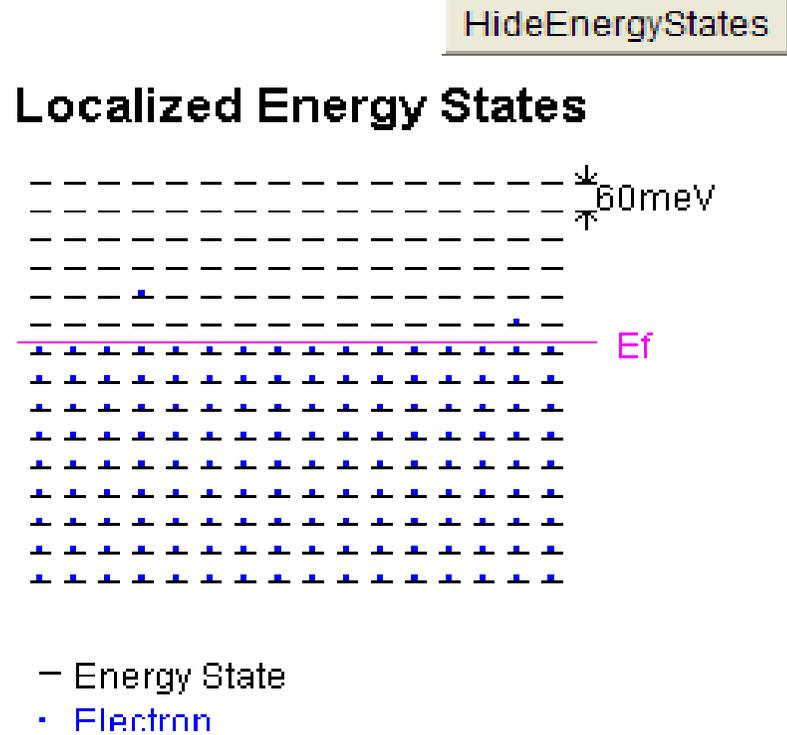
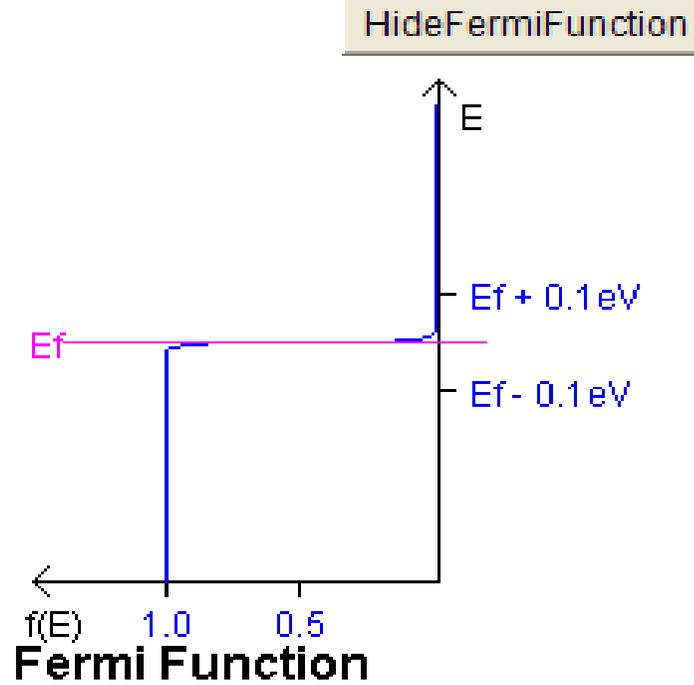
Fermi-Dirac-Verteilung

# Fermi-Dirac-Verteilung

$$f(W, T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{W - W_F}{kT}\right)}$$

Bei der  $T=0$  K ergibt sich eine Stufenfunktion.





Temperature = 48.8K

1. **Grundlagen der Quantenmechanik**
2. **Elektronische Zustände**
3. **Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente**
4. **Elektronen in Kristallen**
5. **Halbleiter**
6. **Quantenstatistik für Ladungsträger**
  - 6.1 Die Zustandsdichte
  - 6.2 Besetzungswahrscheinlichkeiten
  - 6.3 Ladungsträgerdichten
7. **Dotierte Halbleiter**
8. **Halbleiter im Nichtgleichgewicht**
9. **Der pn-Übergang**

Jetzt wissen wir, mit welcher Wahrscheinlichkeit  $f(W)$  ein Zustand im thermischen Gleichgewicht mit einem Elektron besetzt ist.

Um die Anzahl der Ladungsträger zu berechnen müssen wir nur noch wissen, wie viele Zustände es insgesamt gibt.

Die Anzahl der erlaubten Zustände pro Volumeneinheit und pro Energieintervall nennt man die Zustandsdichte  $g(W)$ .

- Die Anzahl der Elektronen im Leitungsband (bzw. die Anzahl der Löcher im Valenzband) mit einer Energie  $W$  ist im thermischen Gleichgewicht gegeben durch:

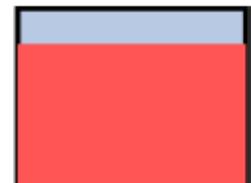
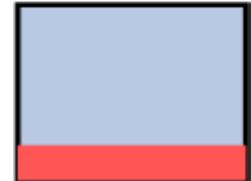
$$\frac{\partial n}{\partial W} = g_L(W)f(W)$$

bzw.

$$\frac{\partial p}{\partial W} = g_V(W)(1 - f(W))$$

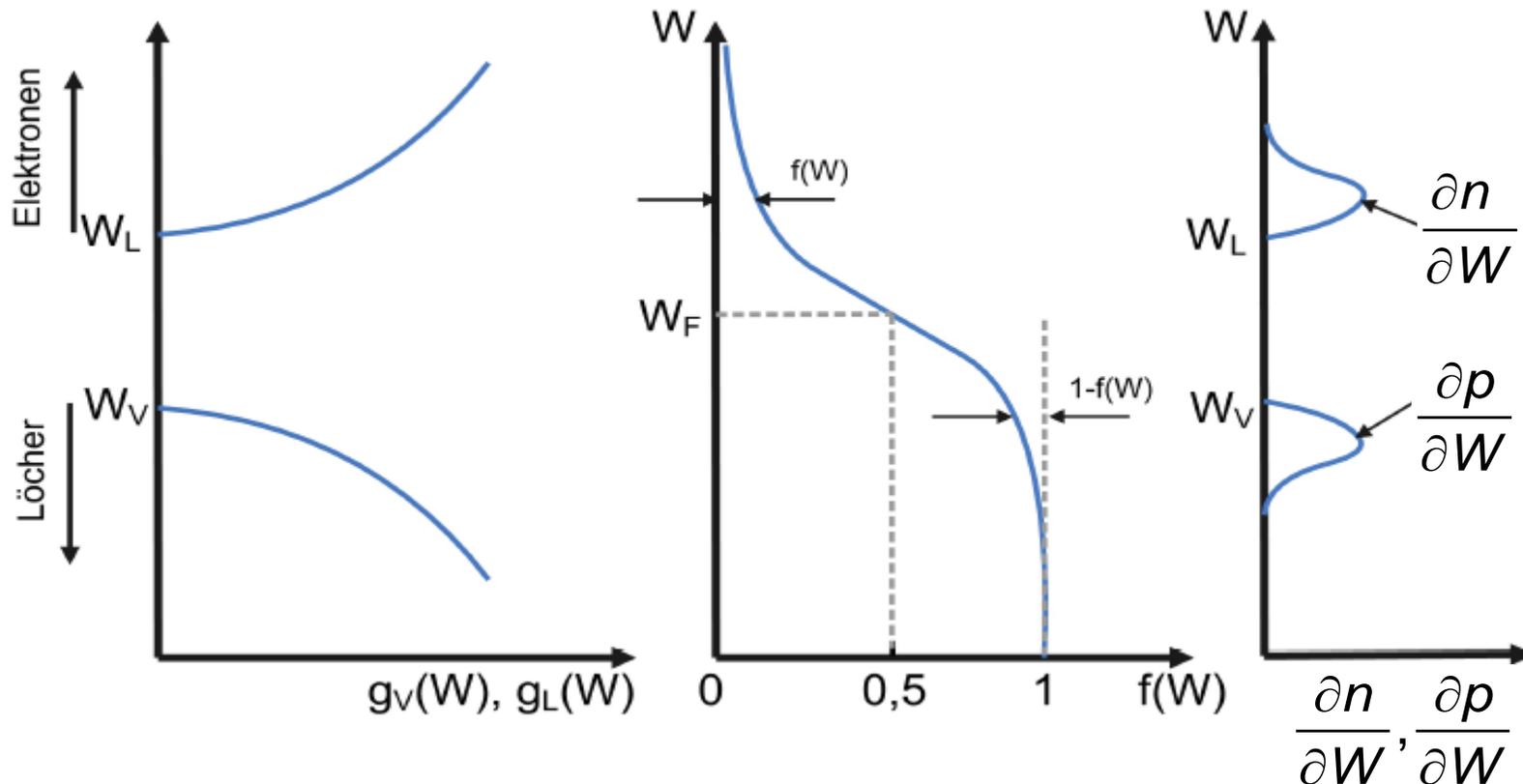
- Durch Integrieren über alle Energien  $W$  erhält man die Gesamtzahl der Ladungsträger  $n$  bzw.  $p$ .

T=300 K



Für die Anzahl der Ladungsträger gilt damit:

$$n = \int_{W_L}^{\infty} \frac{\partial n}{\partial W} dW = \int_{W_L}^{\infty} g_L(W) f(W) dW \quad \text{bzw.} \quad p = \int_{-\infty}^{W_V} \frac{\partial p}{\partial W} (W) dW = \int_{-\infty}^{W_V} g_V(W) (1 - f(W)) dW$$



# Dichte der Ladungsträger

OFE 9.25  
SS 2020

(jetzt mit E statt W)

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)}$$

Zahlenwerte:  
300 K:  $k_B \cdot T = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \cdot 300 \text{ K}$

$$= \frac{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 7 \text{ eV K}^{-1} \cdot 300 \text{ K}}{1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}}$$
$$= 0,0258 \text{ eV} \approx 25 \text{ meV}$$

Typisches  $E - E_F : 0,5 \text{ eV} \Rightarrow \frac{E - E_F}{k_B \cdot T} \approx 20$

$$\exp(20) = 0,485 \cdot 10^9 \gg 1$$

# Dichte der Ladungsträger

OFE 9.26  
SS 2020

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \approx f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} = \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_B T}\right)$$

Zahlenwerte:  
300 K:  $k_B \cdot T = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \cdot 300 \text{ K}$   
 $= \frac{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 7 \text{ eV K}^{-1} \cdot 300 \text{ K}}{1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}}$   
 $= 0,0258 \text{ eV} \approx 25 \text{ meV}$

Typisches  $E - E_F : 0,5 \text{ eV} \Rightarrow \frac{E - E_F}{k_B \cdot T} \approx 20$

$\exp(20) = 0,485 \cdot 10^9 \gg 1$

„Boltzmann'scher Grenzfall“

# Dichte der Ladungsträger

OFE 9.27  
SS 2020

Für die Elektronendichte gilt also näherungsweise:

$$n = \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot \cancel{\exp} \int_{E_C}^{\infty} \sqrt{E-E_C} \exp\left(-\frac{E-E_F}{kT}\right) dE$$

$$= \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \exp\left(\frac{E_F}{kT}\right) \exp\left(\frac{-E_C}{kT}\right) \int_{E_C}^{\infty} \sqrt{E-E_C} \exp\left(-\frac{E-E_C}{kT}\right) dE$$

# Dichte der Ladungsträger

OFE 9.28  
SS 2020

Substitution:  $x = \frac{E - E_c}{k_B \cdot T}$

Integrationsgrenzen:

$$E_c \rightarrow 0$$

$$\infty \rightarrow \infty$$

$$dE = k_B \cdot T \cdot dx ; \quad \sqrt{E - E_c} = \sqrt{k_B \cdot T} \cdot \sqrt{x}$$

# Dichte der Ladungsträger

OFE 9.29  
SS 2020

$$n = \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2 \cdot \hbar^3} \cdot (\hbar \cdot T)^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{E_L - E_F}{\hbar \cdot T}\right) \int_0^{\infty} \sqrt{x} \cdot \exp(-x) dx$$

Definiere:  $N_L^{\text{eff}} = 2 \cdot \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{\hbar^2}\right)^{3/2}$

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Insgesamt ergibt sich:

$$n = N_L^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{E_L - E_F}{kT}\right)$$

Genauso kann für die Besetzung des Valenzbandes mit Löchern abgeleitet werden:

$$p = N_V \exp\left(-\frac{W_F - W_V}{kT}\right)$$

$$\text{mit } N_V = 2\left(\frac{2\pi m_h kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$N_V$  ist die effektive  
Zustandsdichte des Valenzbandes

-Beschreibung des Halbleiters durch zwei effektive Niveaus mit  
entsprechend großer Zustandsdichte

-Besetzung erfolgt mit einem Boltzmann-Faktor.

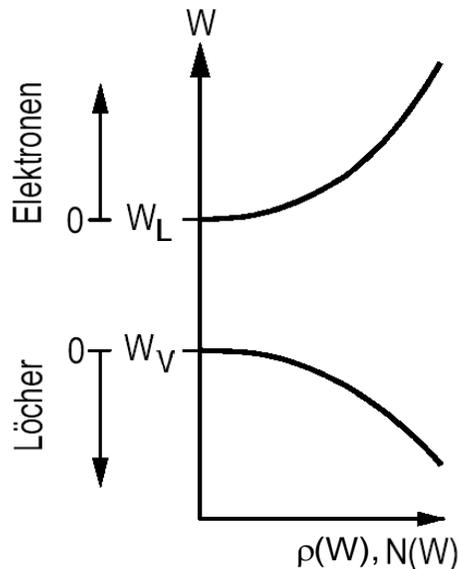
- ...allerdings ist  $N_{L,V}$  kein echter Materialparameter, da T-abhängig

Multiplikation  
ergibt:

$$np = N_L \exp\left(-\frac{W_L - W_F}{k_B T}\right) N_V \exp\left(\frac{W_V - W_F}{k_B T}\right) =$$

$$= N_L N_V \exp\left(-\frac{W_L - W_V - W_F + W_F}{k_B T}\right) = N_L N_V \exp\left(-\frac{W_G}{k_B T}\right)$$

$$\text{mit } W_G = W_L - W_V$$



D.h. Elektronen- und Lochkonzentration stellen sich ein nach einer Art „Massenwirkungsgesetz“ !

Für den intrinsischen Halbleiter gilt:

$$n_i = p_i = \sqrt{N_L N_V} \exp\left(-\frac{W_G}{2k_B T}\right)$$

- Da im Halbleiter Elektronen im LB und Löcher im VB paarweise entstehen gilt:

$$n_{th} = p_{th} = n_i$$

$n_i$  nennt man die Eigenleitungsträgerdichte.

- Berechnung des Produktes ergibt:

$$n_{th} p_{th} = n_i^2(T) = N_L N_V \exp\left(-\frac{W_G}{kT}\right)$$

Die Ladungsträgeranzahl  $n_i$  im thermischen Gleichgewicht hängt vom Bandabstand  $W_G$ , den effektiven Massen der Bänder und der Temperatur ab.

Beispiele für Eigenleitungsträgerdichten bei Zimmertemperatur ( $T=293$  (300) K):

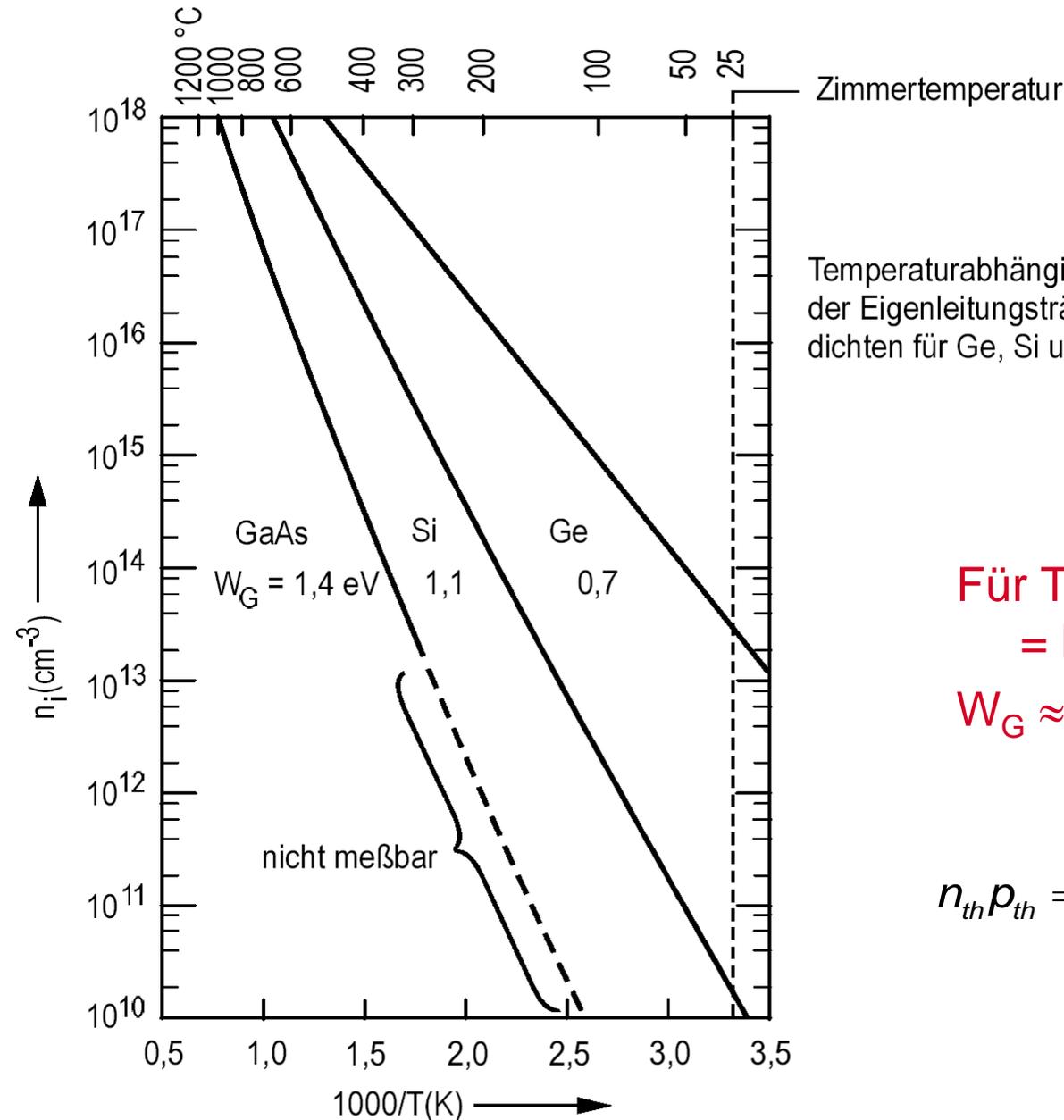
$$\text{Ge: } n_i = 2.4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$$

$$\text{Si: } n_i = 1.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$$

$$\text{InP: } n_i = 1.2 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-3}$$

$$\text{GaAs: } n_i = 1.2 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-3}$$

# Temperaturabhängigkeit von $n_i$



Für  $T = 293$  K (Raumtemperatur) ist  $W_{th} = kT = 25$  meV.

$W_G \approx 1$  eV =  $40 W_{th}$ .

$$n_{th} p_{th} = n_i^2(T) = N_L N_V \exp\left(-\frac{W_G}{kT}\right)$$