

Moderne Experimentalphysik III

Experimentelle Festkörperphysik

M-PHYS-106295, SoSe 2024





TTProf. Dr. Philip Willke, Physikalisches Institut

Wiederholung

Eigenschaften von Halbleitern



Leitungsband und Valenzband

$$E(\mathbf{k}) = E_{c} + \frac{\hbar^{2}}{2} \sum_{ij} k_{i} \left(\frac{1}{m^{*}}\right)_{ij} k_{j} \qquad \text{(Elektronen)}$$
$$E(\mathbf{k}) = E_{v} + \frac{\hbar^{2}}{2} \sum_{ij} k_{i} \left(\frac{1}{m^{*}}\right)_{ij} k_{j} \qquad \text{(Löcher)}.$$



Ladungsträgerdichte von intrinsischen Halbleitern

$$\mu = E_{\rm v} + \frac{1}{2}E_{\rm g} + \frac{3}{4}k_{\rm B}T\ln\frac{m_{\rm h,DOS}^*}{m_{\rm e,DOS}^*} \, . \qquad n_i = \sqrt{n_c \cdot p_v} = \sqrt{n_c^{\rm eff}p_v^{\rm eff}} \, \, {\rm e}^{-E_g/2k_{\rm B}T}$$

Bandstruktur von GaAs



As 🔵 Ga

Figure 3.1: 20x10 nm² constant current topography ($V_{blas} = +2$ V, $I_T = 100$ pA) of an *n*-type Fe/GaAs($\bar{1}10$) interface in cross-sectional geometry [47, 121]. Data was taken at room temperature. The interface is located at x = 0 indicated by the green solid line.





PhD Thesis, Tim Iffländer <u>https://journals.aps.org/prl/pdf/10</u> .1103/PhysRevLett.114.146804

Lernziele

Dotieratome

Dotierte Halbleiter



Dotierung

• intrinsische Ladungsträgerdichte ist für die meisten Anwendungen zu gering -> zu geringe Leitfähigkeit

Dotierung:

- Erzeugung von zusätzlichen Ladungsträgern durch Einbringen von Verunreinigungen
- gezielte Dotierung von HL ist Grundlage für HL-Technologie
- bei Metallen ist Dotierung nicht (kaum) möglich (intrinsisch hohe LT-Dichte), auch kein elektrischer Feldeffekt

• Verunreinigungen in Halbleitern:

- **Donatoren**: → haben im Vergleich zu HL-Atomen zu viele Elektronen
- → geben zusätzliche Ladungsträger an Gitter ab
- → Beispiele: P, As, Sb, Bi für Si und Ge
- *Akzeptoren*: → haben im Vergleich zu HL-Atomen zu wenige Elektronen
- → nehmen fehlende Elektronen von Gitter auf, es bleiben Löcher zurück
- → Beispiele: B, Al, Ga, In für Si und Ge



• Donator- und Akzeptor-Niveaus, wie groß ist die Bindungsenergie der überschüssigen/fehlenden Elektronen

Wasserstoffatom-Modell für Donatoren:

➔ zusätzliches Elektron ist an einfach geladenes Donatoratom gebunden

Energieniveaus von H-Atom:

$$E_n^H = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} \frac{1}{n^2}$$





• Donator- und Akzeptor-Niveaus, wie groß ist die Bindungsenergie der überschüssigen/fehlenden Elektronen

Wasserstoffatom-Modell für Donatoren:

➔ zusätzliches Elektron ist an einfach geladenes Donatoratom gebunden



Energieniveaus von H-Atom:

$$E_n^H = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} \frac{1}{n^2}, \qquad E_1^H = 13.6 \text{ eV}$$

Was ändert sich im Festkörper?

- Coulomb-Potenzial ist abgeschirmt
- \rightarrow Berücksichtigung mit Dielektrizitätskonstante

 $\epsilon_{\scriptscriptstyle Si}=~11.7$, $\epsilon_{\scriptscriptstyle Ge}=~15.8$

Bandelektronen statt freie Elektronen $\rightarrow m_e \rightarrow m_e^*$

Donatorniveaus

$$E_{n,d} = \frac{m_e^* e^4}{2(4\pi\epsilon\epsilon_0\hbar)^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

 $E_{1,D} \sim 10 - 100 \text{ meV}$ (für Si und Ge)

• Donator- und Akzeptor-Niveaus, wie groß ist die Bindungsenergie der überschüssigen/fehlenden Elektronen

Wasserstoffatom-Modell für Akzeptoren:

➔ fehlendes Elektron (positiv geladenes Loch) ist an einfach negativ geladenes Akzeptoratom gebunden



Akzeptorniveaus

$$E_{n,A} = \frac{m_h^{\star} e^4}{2(4\pi\epsilon\epsilon_0\hbar)^2} \frac{1}{n^2}$$

$$E_{1,A} \sim 10 - 100 \text{ meV}$$
 (für Si und Ge)

Bohrscher Radius für Akzeptoren und Donatoren

$$r_d = \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0\hbar^2}{m_e^*e^2}$$

 $r_{A,D} \sim 5 - 50$ Å (für Si und Ge) $\rightarrow r_{A,D} \gg$ Atomabstand

Bohrscher Radius für Akzeptoren und Donatoren

 $r_{A,D}$ ~ 5 – 50 Å





PhD Thesis, Karen Teichmann

Mn acceptors in GaAs



Nature Materials volume 10 Pages 91–100 (2011)

Figure 3.1: 20x10 nm² constant current topography ($V_{blas} = +2 \text{ V}$, $I_T = 100 \text{ pA}$) of an *n*-type Fe/GaAs($\overline{1}10$) interface in cross-sectional geometry [47, 121]. Data was taken at room temperature. The interface is located at x = 0 indicated by the green solid line.

Ionisierungsenergien

• Ionisierungsenergien einiger Donatoren und Akzeptoren in Si und Ge

Halbleiter	Donatoren					Akzeptoren			
	Р	As	Sb	Bi		В	Al	Ga	In
E_d	(meV)	(meV)	(meV)	(meV)	Ea	(meV)	(meV)	(meV)	(meV)
Si	45	54	43	69		45	72	74	157
Ge	13	14	9.6	13		11	11	11	12





Ionisierungsenergien

Si doped GaAs

- Donorzustände sind direkt sichtbar unterhalb der Leitungsbandkante
- Weitere Zustände aus für uns irrelevanten Gründen





es gilt:
$$n_c = n_c^{\text{eff}} e^{-(E_c - \mu)/k_B T}$$
 $p_v = p_v^{\text{eff}} e^{-(\mu - E_V)/k_B T} \Longrightarrow n_c \cdot p_v = n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}} e^{-E_g/k_B T}$

Dichte der Donatoren und Akzeptoren

$$n_A = n_A^0 + n_A^-$$

neutral geladen/ionisiert neutral geladen/ionisiert

Neue Neutralitätsbedingung:

$$n_c + n_A^- = p_v + n_D^+$$

Wie groß ist Anteil der neutralen und geladenen Donatoren/Akzeptoren?

es gilt:
$$n_c = n_c^{\text{eff}} e^{-(E_c - \mu)/k_B T}$$
 $p_v = p_v^{\text{eff}} e^{-(\mu - E_V)/k_B T} \Longrightarrow n_c \cdot p_v = n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}} e^{-E_g/k_B T}$

Dichte der Donatoren und Akzeptoren

$$n_A = n_A^0 + n_A^-$$

neutral geladen/ionisiert neutral geladen/ionisiert

Neue Neutralitätsbedingung:

$$n_c + n_A^- = p_v + n_D^+$$

Wie groß ist Anteil der neutralen und geladenen Donatoren/Akzeptoren?

$$\frac{n_D^0}{n_D} = 2 \frac{1}{e^{(E_D - \mu)/k_B T} + 1}$$
Spin-Entartung

$$\frac{n_A^0}{n_A} = 4 \frac{1}{e^{(\mu - E_A)/k_B T} + 1}$$

Spin-Entartung, Entartung von hh-, lh-Band

• Berechnung der Ladungsträgerdichte in n-Typ Halbleiter ($n_D \gg n_A$)

Annahmen:

- $n_A^0 \simeq 0$, $n_A^- \simeq n_A$, da für $n_D \gg n_A$ alle Akzeptoren ein Elektron einfangen können
- $n_D^+ \gg p_v$, gilt immer bei genügend tiefen $T \rightarrow$ Wahrscheinlichkeit für VB \rightarrow LB Anregung gering
- Wir vernachlässigen Entartungsfaktoren

Neutralitätsbedingung:

$$n_c = p_v + n_D^+ - n_A^- \simeq n_D^+ - n_A = n_D - n_D^0 - n_A \qquad \Rightarrow n_c = n_D - n_D^0 - n_A$$

(Boltzmann)

0



Figure I.2: The upper image sketches two donors in GaAs and the STM tip. The colored area indicates the space charge region. The lower image shows a constant current topography of two donors. The charge switching is visible by the disk-shape of enhanced topographic height.



Figure 3.4: Schematic representation of the ionization mechanism: When the tip laterally far away from the donor (a), the bands on top of the donors are flat (b) ar the donor will be neutral. As the tip approaches laterally the donor with a positive sample bias (c), the bands are lifted due to the TIBB (d). At a certain voltage the don level aligns with the conduction band in the bulk and the electron can escape.

https://journals.aps.org/prl/abstract/ 10.1103/PhysRevLett.96.066403

PhD Thesis, Karen Teichmann



• Näherungen des Ausdrucks für die LT-Dichte

$$\frac{n_c(n_c + n_A)}{n_D - n_A - n_c} = n_c^{\text{eff}} e^{-E_d/k_BT}$$

i. Kompensationsbereich: $k_BT \ll E_d \Rightarrow n_c \ll n_A \ll n_D$

 für sehr tiefe *T* werden die sehr wenigen von Donatoren freigesetzten Elektronen alle von den Akzeptoren eingefangen → "Kompensation"

$$\frac{n_c(\mathbf{k} + n_A)}{n_D - \mathbf{k} - \mathbf{k}} = n_c^{\text{eff}} e^{-E_d/k_BT}$$

$$\mathbf{n}_c \simeq \frac{n_D n_c^{\text{eff}}}{n_A} e^{-E_d/k_BT}$$

• Näherungen des Ausdrucks für die LT-Dichte

$$\frac{n_c (n_c + n_A)}{n_D - n_A - n_c} = n_c^{\text{eff}} e^{-E_d/k_B T}$$

ii. Störstellenreserve: $k_BT \ll E_d \Rightarrow n_c \gg n_A$, $n_c \ll n_D$

durch thermische Aktivierung werden mit steigendem $k_B T$ jetzt immer mehr Elektronen von Donatoren freigesetzt, so dass $n_c \gg n_A$ $k_B T$ ist aber immer noch niedrig genug, dass $n_c \ll n_D \rightarrow$ "Störstellenreserve"



Vergleich zum intrinsischen Halbleiter:

$$n_i = \sqrt{n_c \cdot p_v} = \sqrt{n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}}} \ \mathrm{e}^{-E_g/2k_{\mathrm{B}}T}$$

• Näherungen des Ausdrucks für die LT-Dichte

$$\frac{n_c(n_c + n_A)}{n_{\rm D} - n_{\rm A} - n_c} = n_c^{\rm eff} \ {\rm e}^{-E_d/k_{\rm B}T}$$

iii. Störstellenerschöpfung: $k_BT \gtrsim E_d \Rightarrow n_c \gg n_A$, $\exp(-E_d/k_BT) \simeq 1 \Rightarrow n_c^2/n_c^{eff} \simeq (n_D - n_c) \simeq 0$, da $n_c \ll n_c^{eff}$

 k_BT ist so groß, dass alle Elektronen von Donatoren frei gesetzt sind \rightarrow "Störstellenerschöpfung

• Näherungen des Ausdrucks für die LT-Dichte

$$\frac{n_c(n_c + n_A)}{n_D - n_A - n_c} = n_c^{\text{eff}} e^{-E_d/k_BT}$$

iv. Eigenleitung: $k_B T \gg E_d$, obiger Ausdruck für n_c gilt nicht mehr, da er unter Annahme $n_D^+ \gg p_v$ abgeleitet wurde

$$\frac{n_c(n_c + n_c)}{n_D - n_A - n_c} n_c^{\text{eff}} e^{-E_d/k_B T}$$

$$n_c \simeq n_c^{\rm eff} \, {\rm e}^{-E_g/2k_{\rm B}T}$$

 k_BT ist jetzt so groß, dass n_c durch die thermische Anregung aus dem VB dominiert wird, es gilt dann Ausdruck für intrinsischen HL \rightarrow "Eigenleitung"



pn-Übergang im thermischen Gleichgewicht

• Was passiert an Kontakt von *n*-Typ und *p*-Typ Halbleiter (z.B. *n*-Typ und *p*-Typ Silizium)



Nomenklatur:

- Majoritätsladungsträger:
- Elektronen im n-Typ und Löcher im p-Typ HL
- Minoritätsladungsträger:

Löcher im n-Typ und Elektronen im p-Typ HL

- im getrennten Fall sind Bandkanten der beiden Halbleiter auf gleichem Niveau
- im p-Typ HL liegt chemisches Potenzial μ nahe an VB-Kante, im p-Typ HL nahe an LB-Kante, da Besetzungswahrscheinlichkeit der Loch- bzw. Elektronzustände groß sein muss
- was passiert bei Kontakt?
 - > aufgrund des **Konzentrationsgradienten** diffundieren Elektronen vom n- in den p-Typ HL und Löcher vom p- in den n-Typ HL \rightarrow **Diffusionsströme**
 - > die zurückbleibenden positiv (negativ) geladenen Donatoren (Akzeptoren) bilden **Raumladungszone**
 - Driftströme durch den damit verbundenen elektrischen Potenzialgradienten
 - \succ nachdem thermisches Gleichgewicht erreicht ist, muss das chemisches Potenzial μ horizontal verlaufen
 - → wie sieht dann der Verlauf der Bandkanten aus ?

pn-Übergang im thermischen Gleichgewicht

• Welche LT-Bewegungen finden an *pn*-Kontakt statt?



• Majoritätsladungsträger:

diffundieren in den jeweils anderen HL-Typ und rekombinieren dort

Diffusion- oder Rekombinationsstrom

> zurückbleibende geladene Störstellen bilden Raumladungszone $\rho(x)$

$\succ \rho(x)$ ist mit Makropotenzial $\phi(x)$ verbunden:

$$-\nabla^2 \phi = -\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} = \frac{\rho(x)}{\epsilon \epsilon_0}$$

> potentielle Energie der Elektronen/Löcher: $\mp e\phi(x)$

> Diffusionsspannung: $V_D = \phi(\infty) - \phi(-\infty)$

• Minoritätsladungsträger:

- driften in Potentialgradient (E-Feld) in Raumladungszone
- ➔ Drift- oder Generationsstrom

• thermisches Gleichgewicht: Diffusionsstrom = Driftstrom

pn-Übergang im thermischen Gleichgewicht

• Räumlicher Verlauf der Ladungsträgerkonzentration und des Makropotenzials $oldsymbol{\phi}(x)$

$$n_n(\infty) = n_c^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{\boldsymbol{E}_c^n(\infty) - \boldsymbol{\mu}}{k_{\text{B}}T}\right) = n_c^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{\boldsymbol{e}\boldsymbol{V}_n}{k_{\text{B}}T}\right)$$
$$p_p(-\infty) = p_v^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{E}_v^p(-\infty)}{k_{\text{B}}T}\right) = p_v^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{\boldsymbol{e}\boldsymbol{V}_p}{k_{\text{B}}T}\right)$$



• Diffusionsspannung VD

- es gilt:
$$E_g = eV_D + eV_n + eV_p$$
 $eV_n = -k_BT \ln\left(\frac{n_n}{n_c^{\text{eff}}}\right)$

- Einsetzen und auflösen nach
$$V_D$$
: $eV_D = E_g + k_B T \ln \left(\frac{-k_B}{r_B}\right)$

$$V_n = -k_{\rm B}T \ln\left(\frac{n_n}{n_c^{\rm eff}}\right) \qquad eV_p = -k_{\rm B}T \ln\left(\frac{p_p}{p_v^{\rm eff}}\right)$$
$$V_D = E_g + k_{\rm B}T \ln\left(\frac{n_n p_p}{n_c^{\rm eff} p_v^{\rm eff}}\right)$$

$$- \text{ mit } n_i^2 = n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \text{ ergibt sich } Diffusionsspannung: eV_D = E_g + k_B T \ln\left(\frac{n_i^2}{n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}}}\right) = E_g + k_B T \ln\left(\frac{n_n p_p}{n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}}}\right)$$

Ladungsträgerkonzentrationen