

# 7 Halbleiter

## 7.1 Phänomenologie

### 7.1.1 Einführung

Der Ausdruck "Halbleiter" deutet an, dass diese Materialien weniger gut leiten als Metalle, aber besser als Isolatoren. Man kann entsprechend auch Halbleiter als Materialien definieren, deren spezifischer Widerstand  $\rho$  bei Raumtemperatur im Bereich von  $10^{-4} - 10^7 \Omega\text{m}$  liegt. Ihre Leitfähigkeit ist damit deutlich schlechter als die von Metallen. Bezüglich ihrer elektronischen Struktur unterscheiden sie sich von Metallen dadurch, dass die Fermikante in einer Lücke zwischen zwei Bändern liegt, genau wie bei Isolatoren. Der Unterschied zwischen Halbleitern und Isolatoren liegt in der Breite dieser Bandlücke und ist damit nicht eindeutig. So ist Diamant bei Raumtemperatur ein ausgezeichneter Isolator, bei hohen Temperaturen kann er als Halbleiter genutzt werden. Bei typischen Halbleitern liegt die Bandlücke im Bereich von  $<2 \text{ eV}$ .

Halbleiter sind aber nicht wegen ihrer intrinsischen Leitfähigkeit besonders nützlich oder interessant, sondern weil es möglich ist, ihre Leitfähigkeit gezielt zu beeinflussen, sowohl über die Materialeigenschaften wie auch über äußere Felder. Dies ist ein Grund für ihr große technologische Bedeutung, z.B.

- in der Optik als: Halbleiterlaser, Photodioden, Solarzellen, CCD-Detektoren,
- bei der Einstellung oder Detektion von Temperaturen als: Dioden, Peltier-, NTC-Elemente,
- als elektronische Bauelemente wie Dioden und Transistoren.

Halbleiter haben deshalb heute eine enorme wirtschaftliche Bedeutung erhalten. Abb. 7.1 zeigt

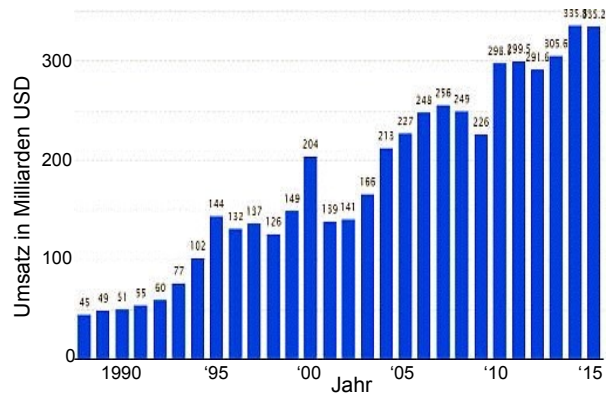


Abbildung 7.1: Zeitliche Entwicklung der Umsätze der Halbleiterindustrie.

die Entwicklung der Umsätze in der Halbleiterindustrie über die Zeit von 1988-2015.

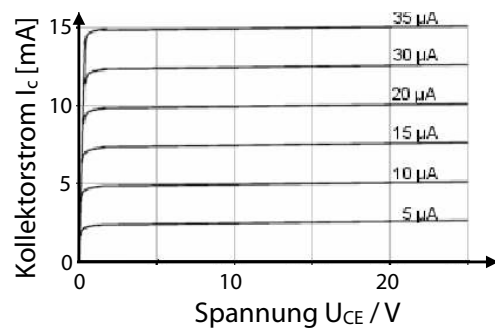


Abbildung 7.2: Typische Kennlinien eines Transistors.

Die wichtigsten Anwendungen liegen in der Elektronik, welche vor allem auf Silizium basiert. Abb. 7.2 zeigt als eine wichtige Voraussetzung die Steuerung des Strom-Spannung Kennlinie eines Transistors durch einen Strom an der Basis.

Darüber hinaus stellen Halbleiter eine wichtige Rolle in der Optik, wo z.B. Halbleiterlaser die effizientesten und am weitesten verbreiteten Lichtquellen darstellen. Heute bestehen auch die mei-

sten Lichtquellen im Haushalt aus Leuchtdioden (LEDs). Immer wichtiger wird auch die Möglichkeit, mit Hilfe von Halbleitern Licht in elektrischen Strom umzuwandeln, sowohl in Solarzellen wie auch in Detektoren wie z.B. Photodioden oder CCD Sensoren. Weitere Eigenschaften von Halbleitern sind auch die thermo-elektrischen Eigenschaften, welche u.a. die Möglichkeit bieten, mit Hilfe von Halbleitern zu kühlen oder zu heizen, oder Temperaturen zu messen. In der Teilchenphysik werden Halbleiter als Detektoren verwendet.

### 7.1.2 Klassifizierung

In Halbleitern ist bei 0 Kelvin die elektrische Leitfähigkeit gleich Null, da alle Zustände im Valenzband besetzt und alle Zustände im Leitungsband unbesetzt sind. Durch thermische Anregung kann die Energielücke  $\mathcal{E}_g$  aber (leicht) überwunden werden. Dies ergibt die intrinsische Leitfähigkeit von Halbleitern. Die Bandlücke kann am einfachsten mit optischer Absorption ausgemessen werden ( $\rightarrow$  Kap. 7.1.5).

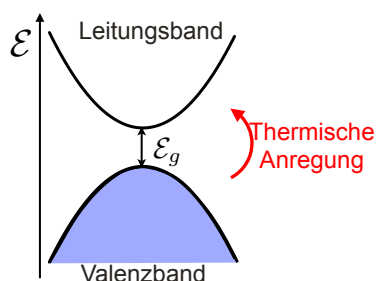


Abbildung 7.3: Thermische Anregung über die Bandlücke.

Halbleiter sind Kristalle mit einer Bandlücke, d.h. ein Band ist vollständig gefüllt und das nächsthöhere ist leer. Das untere Band wird als Valenzband bezeichnet, das obere als Leitungsband. Am absoluten Nullpunkt sind Halbleiter deshalb Isolatoren, d.h. sie leiten keinen Strom. Wir beschreiben die Halbleiter im Folgenden mit Hilfe des Modells quasi-freier Elektronen, also Einelektronenzuständen, welche in unterschiedliche Bänder aufgespalten sind. Diese sind durch

Bandlücken getrennt.

Wie im letzten Kapitel diskutiert, müssen Halbleiter (wie Isolatoren) immer eine gerade Anzahl Elektronen pro Elementarzelle besitzen. Diese Bedingung ist z.B. bei den Elementen der vierten Gruppe erfüllt, wie z.B. Si oder Ge. Diese sind typische Beispiele für elementare Halbleiter.

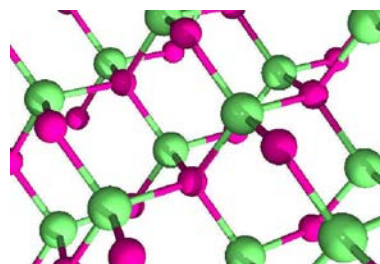


Abbildung 7.4: Struktur von GaAs.

Ebenso ist die Bedingung erfüllt für Verbindungen der Gruppen III und V des Periodensystems wie GaAs, AlAs, GaN, oder InP, Verbindungen der Gruppen II und VI wie ZnS, CdTe. Die Bindung in diesen Materialien hat einen stark kovalenten Charakter. Abb. 7.4 zeigt die Struktur von GaAs und vieler anderer Verbindungshalbleiter.

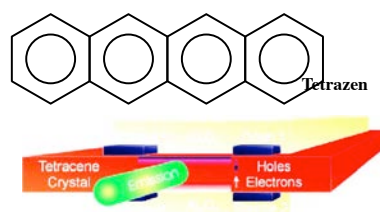


Abbildung 7.5: Tetracen als organischer Halbleiter.

Auch organische Materialien können Halbleitereigenschaften aufweisen. Abb. 7.5 zeigt als ein Beispiel Tetracen. Solche Materialien wurden erst vor wenigen Jahrzehnten entwickelt, haben aber schon eine erhebliche Bedeutung, z.B. in der Form von organischen Leuchtdioden (OLEDs), welche für Bildschirme oder Beleuchtungen verwendet werden. Gegenüber den klassischen Flüssigkristallbildschirmen bieten sie höheren Kontrast und geringeren Stromverbrauch. Organische Moleküle können in ihren Eigenschaften sehr weitgehend abgepasst werden.

### 7.1.3 Thermische Anregung

Halbleiter haben die gleiche Bandstruktur wie Isolatoren. Da die Bandlücke aber nur eine endliche Breite hat, können bei endlichen Temperaturen einzelne Elektronen aus dem Valenzband ins Leitungsband angeregt werden. Dabei entstehen bewegliche Ladungsträger, und zwar sowohl im Leitungsband, wo die Elektronen sich bewegen können, wie auch im Valenzband, wo Zustände frei werden, so dass benachbarte Elektronen unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes ihren Impuls ändern können.

Die Anzahl der Elektronen, welche durch thermische Anregung ins Leitungsband gelangen, ist gegeben durch die Zustandsdichte  $D(\mathcal{E})$  und die Besetzungswahrscheinlichkeit  $f(\mathcal{E})$ :

$$\begin{aligned} N_c &= \int_0^\infty d\mathcal{E} D(\mathcal{E}) f(\mathcal{E}) \\ &= \int_0^\infty d\mathcal{E} D(\mathcal{E}) \frac{1}{e^{(\mathcal{E}-\mu)/k_B T} + 1}. \end{aligned}$$

Ist die thermische Energie klein im Vergleich mit der Bandlücke,  $k_B T \ll \mathcal{E} - \mu$ , sind praktisch nur Zustände im Bereich des Leitungsbandminimums besetzt und die Gesamtzahl der Ladungsträger wird proportional zum Boltzmannfaktor  $e^{-\mathcal{E}_g/2k_B T}$ , wobei  $\mathcal{E}_g$  die Bandlücke darstellt und wir angenommen haben, dass das Fermi-niveau in der Mitte der Bandlücke liegt. Eine etwas genauere Rechnung (siehe Kap. 7.3.1) ergibt einen zusätzlichen Faktor  $T^{3/2}$ ,

$$N_c \propto T^{3/2} e^{-\mathcal{E}_g/2k_B T}.$$

Die Dichte der Ladungsträger nimmt deshalb mit zunehmender Temperatur exponentiell zu. Je kleiner die Bandlücke, desto rascher die Zunahme. Abb. 7.6 zeigt die Ladungsträgerkonzentration im Leitungsband für Germanium und Silizium als Funktion der Temperatur. Bei Germanium ist die Bandlücke mit 0.67 eV kleiner als bei Silizium (1.14 eV), deshalb ist die Zunahme rascher und die Leitfähigkeit bei Raumtemperatur um rund drei Größenordnungen höher

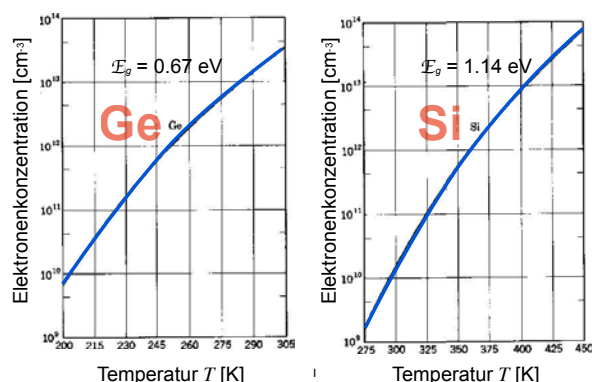


Abbildung 7.6: Temperaturabhängige Ladungsträgerdichte für Si und Ge.

als bei Silizium. Beträgt die Bandlücke z.B. 4 eV so ist die Anregungswahrscheinlichkeit  $10^{-35}$ , d.h. praktisch null. Für eine Bandlücke von 0.25 eV hingegen beträgt der Boltzmannfaktor bei Raumtemperatur rund 1%, so dass die Ladungsträgerdichte schon fast den Wert eines Metalls erreichen kann.

	$E_g(T=300\text{ K})$	$E_g(T=0\text{ K})$	Natur der Lücke
Diamant	5,47	5,48	indirekt
Si	1,12	1,17	indirekt
Ge	0,66	0,75	indirekt
GaP	2,26	2,32	indirekt
GaAs	1,43	1,52	direkt
InSb	0,18	0,24	direkt
InP	1,35	1,42	direkt
CdS	2,42	2,58	direkt

Tabelle 7.1: Bandlücken der wichtigsten Halbleitermaterialien.

Wie in Tabelle 7.1 gezeigt, liegen die Bandlücken der wichtigsten Halbleitermaterialien im Bereich von rund einem eV. Diamant hat eine wesentlich größere Lücke und man findet deshalb erst bei Temperaturen von mehreren hundert Grad eine wesentliche Eigenleitfähigkeit. Die Bandlücke hängt auch von der Temperatur ab, sie nimmt bei zunehmender Temperatur ab. Dies ist u.a. eine Folge der Ausdehnung des Kristalls und der dadurch abnehmenden Bindungsstärke zwischen den Atomen, wie auch der Kopplung der zunehmenden Phononenzahl.

### 7.1.4 Dotierung

Während bei Metallen die Leitfähigkeit abnimmt wenn das Material verunreinigt wird, ist bei Halbleitern das Gegenteil der Fall. Auch kleine Verunreinigungen können die Leitfähigkeit dramatisch verändern.

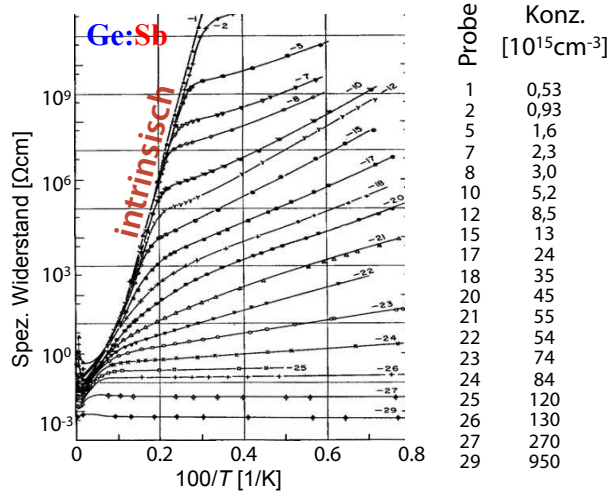


Abbildung 7.7: Einfluss von Dotierung und Temperatur auf den spezifischen Widerstand.

Abb. 7.7 zeigt die Ladungsträgerdichte von Germanium, das mit Antimon dotiert wurde<sup>1</sup>. Je höher die Konzentration der Verunreinigungen, desto höher die Ladungsträgerdichte. Bei einer Variation der Dichte der Verunreinigungen um 3 Größenordnungen variiert der Widerstand um rund 15 Größenordnungen. Diese großen Unterschiede findet man allerdings nur bei niedrigen Temperaturen (rechts in Abb. 7.7). Für höhere Temperaturen steigt die Leitfähigkeit in allen Fällen auf den gleichen Grenzwert an - man nennt diesen den "intrinsischen" Wert, also die Leitfähigkeit, die das Material ohne Verunreinigungen aufweist.

Ein weiterer interessanter Aspekt von Halbleitern sind die gemessenen Werte für die Hallkonstante,

$$R_H = -\frac{1}{ne},$$

<sup>1</sup>H. Fritzsche, J. Phys. Chem. Solids, 6, 69 (1958).

welche indirekt proportional zur Ladungsträgerdichte sein sollte. Bei Halbleitern findet man nicht nur Werte, die sehr viel größer sind als bei Metallen (wie wir es auf Grund der geringeren Ladungsträgerdichte erwarten), sie können auch positiv sein, was darauf hindeutet, dass der Strom nicht durch Elektronen, sondern durch positiv geladene Teilchen geleitet wird.

### 7.1.5 Absorption von Licht

Ein weiterer interessanter Aspekt ist, dass die Leitfähigkeit durch einfallendes Licht wesentlich gesteigert werden kann. Diesen Effekt, den man als Photo-Leitfähigkeit bezeichnet, deutet darauf hin, dass Ladungsträger nicht nur thermisch erzeugt werden, sondern auch durch Energiezufuhr über die Absorption von Photonen. Diese müssen eine Energie aufweisen, die mindestens so groß ist wie die Bandlücke. Für die Bandlücken der Halbleiter benötigt man deshalb Photonen mit einer Wellenlänge im Sichtbaren oder nahen Infraroten, also ca. 500 nm bis 2 μm. Bei Silizium z.B. muss die Wellenlänge des Lichtes kleiner als 1.1 μm sein. Diese Eigenschaften, die Photovoltaik und die Photoleitfähigkeit, haben heute eine große technische Bedeutung, indem Halbleiter als Solarzellen und Detektoren für Licht zum Einsatz kommen, z.B. als Photodioden und CCD's in Kameras. Umgekehrt können Halbleiter auch Licht erzeugen; dies wird in LED's und Laserdioden benutzt.

Die Bandlücke kann am einfachsten mit optischer Absorption ausgemessen werden. Die optische Absorption setzt ein, wenn für die Energie der einfallenden Photonen gilt:

$$\mathcal{E}_g = \hbar\omega_g.$$

Bei der Anregung vom Valenzband ins Leitungsband muss der Impuls des Systems erhalten bleiben. Die Wellenlänge  $\lambda$  von optischem Licht ist sehr viel größer als eine typische Gitterkonstante:  $\lambda \gg a$ . Der Impuls  $p_\nu = \hbar k = h/\lambda$  eines optischen Photons ist deshalb klein im Vergleich zu einem typischen Impuls eines Elektrons

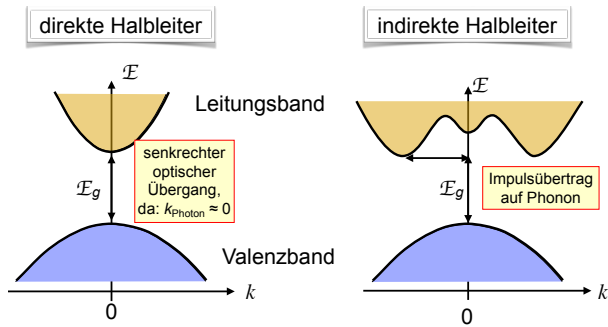


Abbildung 7.8: Lichtabsorption bei direkten und indirekten Halbleitern.

$p_e = h/a$ . Die Absorption eines Photons ändert deshalb den Impuls des Elektrons kaum, er bleibt praktisch konstant. Das Elektron wechselt deshalb bei der Absorption auf einen Zustand gleicher Wellenzahl; man nennt diesem einen vertikalen Übergang.

Bei Energien am Rande der Bandlücke ist dies aber nicht immer möglich. So ist es möglich, dass das Minimum des Leitungsbandes bei einem Wert  $k \neq 0$  auftritt, wie in Abb. 7.8 in der rechten Hälfte dargestellt. Photonen mit dieser Energie können somit nur dann absorbiert werden, wenn die Impulsänderung des Elektrons durch das System kompensiert werden kann. Dies geschieht normalerweise durch die Erzeugung eines Phonons mit dem richtigen Impuls, respektive durch die Vernichtung eines Phonons mit entgegengesetztem Impuls, falls diese Phononen genügend angeregt sind. Da die Energie der Phononen sehr viel kleiner ist als die Photonenenergie, brauchen wir diese bei der Energieerhaltung nicht zu berücksichtigen. Bei einem solchen Prozess werden Energie und Impuls wie folgt erhalten:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{Photon}} &= \hbar\omega = \mathcal{E}_g + \hbar\Omega \approx \mathcal{E}_g \\ \vec{k}_{\text{Photon}} &= \vec{k}_c + \vec{K} \approx 0. \end{aligned}$$

Hier stellen  $\Omega$  die Frequenz und  $\vec{K}$  den Wellenvektor des Phonons dar und  $\vec{k}_c$  den Wellenvektor des Elektrons im Leitungsband.

Absorptionsprozesse können nicht nur an der Bandkante stattfinden, sondern auch bei höhe-

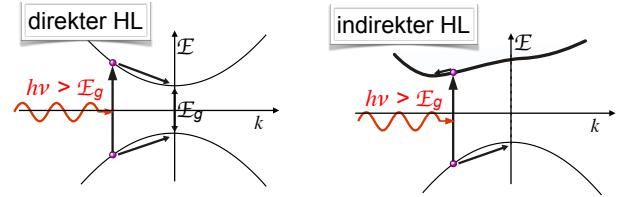


Abbildung 7.9: Lichtabsorption und Relaxation bei direkten und indirekten Halbleitern.

ren Photonen-Energien. Dabei wird ein Loch im Innern des Valenzbandes erzeugt, zusammen mit einem Elektron im Innern des Leitungsbandes. Die auf diese Weise erzeugten Ladungsträger streuen an Phononen und relaxieren auf diese Weise rasch zum Energieminimum ihrer Bänder (Abb. 7.9).

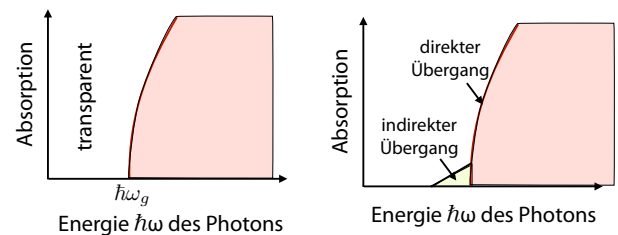


Abbildung 7.10: Absorptionswahrscheinlichkeit bei direkten und indirekten Halbleitern.

Aus der Wahrscheinlichkeit für solche Absorptionsprozesse erhält man ein Absorptionsspektrum. Wie in Abb. 7.10 gezeigt, ist die Absorptionskante bei einem direkten Halbleiter schärfer als bei einem indirekten.

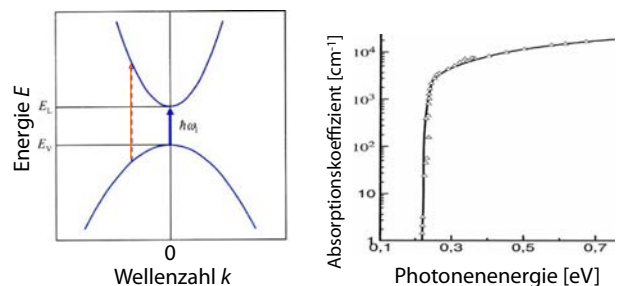


Abbildung 7.11: Bandstruktur (links) und Absorption (rechts) von InSb.

Abb. 7.11 zeigt als typisches Beispiel für einen direkten Halbleiter die Bandstruktur von InSb; hier liegen das Maximum des Valenzbandes und das Minimum des Leitungsbandes beide im Zentrum der Brillouin-Zone. Dementsprechend setzt die Absorption sehr scharf ein, wenn die Photonenenergie die Bandlücke übersteigt, wie in der rechten Hälfte gezeigt.

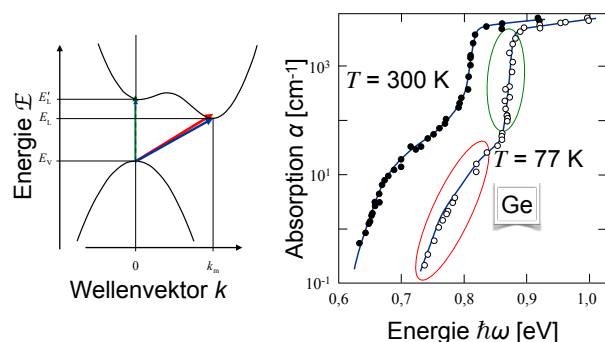


Abbildung 7.12: Bandstruktur (links) und Absorption (rechts) von Germanium.

Abb. 7.12 zeigt die entsprechenden Daten für Germanium, einen indirekten Halbleiter. Hier ist der Übergang vom transparenten zum absorbierenden Bereich stark verschmiert und besteht aus 2 Bereichen mit unterschiedlich starker Absorption: für die indirekten Prozesse ist die Absorptionswahrscheinlichkeit deutlich geringer.

### 7.1.6 Lichtemission

Der Umkehrprozess der Absorption ist die Emission von Licht. Dabei geht ein Elektron aus dem Leitungsband ins Valenzband über und strahlt die Energiedifferenz in der Form eines Photons ab. Auch hier muss die Erhaltung von Energie und Impuls gewährleistet sein. Bei einem Übergang von Bandkante zu Bandkante wird somit ein Photon mit Energie  $\hbar\omega = \mathcal{E}_g$  frei. Bei der Emission ist diese Bedingung jedoch schwieriger zu erfüllen als bei der Absorption: Ein Elektron aus dem Leitungsband muss mit einem Loch im Valenzband rekombinieren, welche jeweils den gleichen Impuls besitzen. Dies ist bei

direkten Halbleitern unproblematisch, bei indirekten Halbleitern jedoch nicht, da dort die freien Zustände (= besetzten Lochzustände) nicht bei der gleichen Wellenzahl auftreten. Der Unterschied zwischen direkten und indirekten Halbleitern spielt deshalb für die optischen Eigenschaften eine zentrale Rolle.

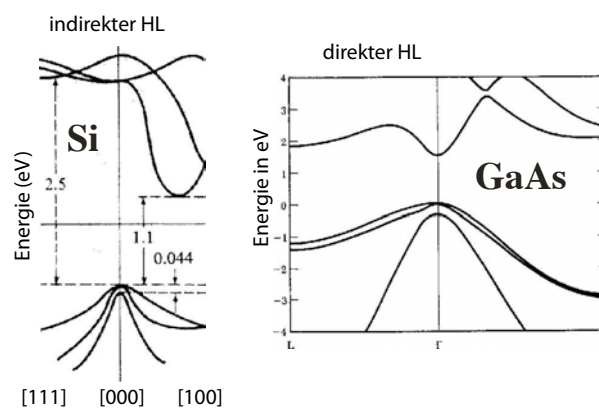


Abbildung 7.13: Bandstruktur von Si und GaAs.

Silizium, z.B. ist ein indirekter Halbleiter. Das entartete Valenzband hat sein Maximum im Zentrum der Brillouin-Zone, während das Leitungsband-Minimum relativ weit vom Zentrum entfernt ist, nämlich ca. 80 % der Brillouin-Zone in Richtung 100. Aus Symmetriegründen existieren 6 äquivalente Richtungen entlang der 6 Koordinatenachsen. Unter typischen Bedingungen ist die Dichte von Elektronen im Leitungsband in der Nähe des Leitungsbandminimums am größten. Bei einem senkrechten Übergang ins Valenzband würden diese Elektronen aber nur besetzte Zustände antreffen. Dadurch ist in Si die Emission von Licht stark erschwert. Si wird deshalb z.B. nicht für den Bau von Leuchtdioden oder Halbleiterlasern verwendet. Ein typischer direkter Halbleiter, welcher hauptsächlich für optoelektronische Komponenten wie z.B. Halbleiterlaser verwendet wird, ist GaAs.

Erst seit kurzem kann man auch eine Modifikation von Si herstellen, welche leuchtet. Während man sich über den Mechanismus noch nicht ganz einig ist, scheint es dafür nötig zu sein, dass das

Material auf so kleinen Skalen strukturiert ist, dass die übliche Beschreibung des Materials als unendlich ausgedehnter Kristall, die wir hier verwenden, nicht mehr gültig sind.

### 7.1.7 Bandlücken und Gitterkonstanten

Bei einigen Verbindungshalbleitern kann man die Größe der Bandlücke und ihren Charakter (direkt versus indirekt) durch die Herstellung anpassen - dies wird als "band-gap engineering" bezeichnet. Dadurch erreicht man eine große Flexibilität, z.B. um einen Laser mit einer gewünschten Wellenlänge herzustellen.

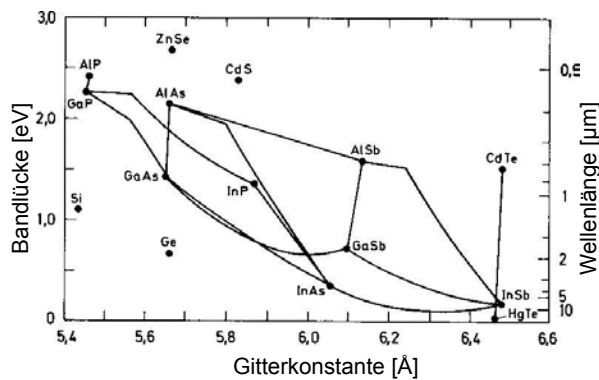


Abbildung 7.14: Bandlücken und Gitterkonstanten von Verbindungshalbleitern.

Abb. 7.14 vergleicht die Bandlücken und Gitterkonstanten von unterschiedlichen binären Halbleitern. Die Linien deuten die Eigenschaften der quasi-binären Verbindungen an, bei denen die Zusammensetzung variiert wird. Besonders interessant ist z.B. das System GaAs-AlAs, denn hier ändert sich die Gitterkonstante als Funktion der Konzentration fast nicht. Dies minimiert unerwünschte Verzerrungen des Gitters, insbesondere bei epitaktisch gewachsenen (z.B. Hetero-) Strukturen. Es gibt jedoch auch Fälle, in denen man durch gezielte Fehlanpassung des Gitters die Eigenschaften variiert.

## 7.2 Ladungsträger

### 7.2.1 Elektronen und Löcher

Im Grundzustand ist ein Halbleiter ein Isolator: das Valenzband ist vollständig gefüllt, das Leitungsband leer. Somit existieren keine freien Ladungsträger. Der Impuls eines vollständig gefüllten Bandes ist null und da keine freien Zustände existieren, können die Elektronen nicht auf äußere Felder reagieren – das Material ist ein Isolator.

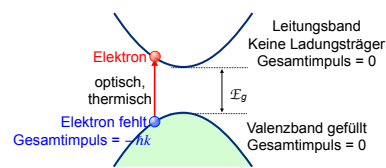


Abbildung 7.15: Bandlücke.

Durch die Absorption von Licht oder durch thermische Anregung können Elektronen vom Valenzband ins Leitungsband gebracht werden. Damit entstehen im Leitungsband frei bewegliche Ladungsträger, welche auf äußere Felder reagieren können. Ebenso werden im Valenzband leere Zustände verfügbar, welche durch andere Elektronen besetzt werden können, und so ebenfalls zur Leitfähigkeit beitragen.

Wir betrachten als Ausgangspunkt den Fall, dass genau ein Elektron aus dem Valenzband ins Leitungsband angeregt wurde. Der Beitrag des einzelnen Elektrons im Leitungsband zur elektrischen Leitfähigkeit kann relativ leicht mit Hilfe einer halbklassischen Bewegungsgleichung beschrieben werden, da es sich um ein einzelnes Elektron handelt. Um den Beitrag des Valenzbandes zur Bewegung der Ladungsträger zu berechnen, müsste aber eigentlich die Bewegung sämtlicher Elektronen berechnen. Auf Grund des Pauli Prinzips sind diese außerdem nicht unabhängig. Die gleichzeitige Lösung von  $10^{20}$  gekoppelten Bewegungsgleichungen stellt aber eine unlösbare Aufgabe dar.

Man kann jedoch den Impuls des gesamten Valenzbandes (mit einem leeren Zustand) relativ

leicht berechnen, wenn man vom Impuls des vollständig besetzten Bandes ausgeht ( $=0$ ) und davon den Impuls  $\hbar k$  des leeren Zustandes abzieht: offenbar beträgt der Impuls des beinahe gefüllten Bandes somit  $-\hbar k$ . Man kann allgemein den Beitrag des Valenzbandes berechnen, indem man den leeren Zustand verfolgt. Man bezeichnet ein solches fehlendes Elektron als Loch. In einem intrinsischen Halbleiter entstehen bei der Erzeugung von Ladungsträgern durch Licht oder Wärme immer eine identische Zahl von Elektronen und Löchern.

### 7.2.2 Eigenschaften der Löcher

Um das Konzept der Löcher als effektive Teilchen korrekt verwenden zu können, muss man einige Regeln beachten. Zunächst muss man sich entscheiden, ob man ein Band über Löcher oder Elektronen beschreiben will. Dies ist i. A. keine Schwierigkeit: Halbleiter zeichnen sich ja dadurch aus, dass alle Bänder entweder (fast) voll oder (fast) leer (von Elektronen) sind. Fast volle Bänder werden sinnvollerweise als fast leere Loch-Bänder beschrieben, fast leere Bänder als fast leere Elektronen-Bänder. Anders ausgedrückt: Zustände oberhalb der Fermienergie werden als Zustände von Elektronen beschrieben, unterhalb als Loch-Zustände.

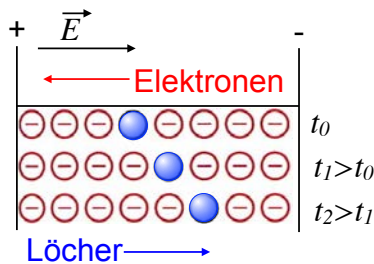


Abbildung 7.16: Bewegung von Elektronen und Löchern in einem elektrischen Feld.

Wenn sich die Elektronen in einem fast vollständig gefüllten Band unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes bewegen, verschiebt sich die Lücke in entgegengesetzter Richtung, wie in Abb. 7.16 gezeigt. Dies lässt sich qualitativ dadurch

erklären, dass man dem Loch eine positive Ladung zuschreibt.

$\vec{k}_h = -\vec{k}_e$  : Die Summe der Wellenvektoren eines vollständig besetzten Bandes verschwindet,  $\sum \vec{k} = 0$ . Fehlt ein Elektron mit Wellenvektor  $\vec{k}_e$ , so muss damit die Summe über alle besetzten Zustände gleich  $-\vec{k}_e$  sein. Da wir das ganze Band als leer, abgesehen von einem einzelnen Loch beschreiben möchten, muss dieses den Wellenvektor  $\vec{k}_h = -\vec{k}_e$  haben.

$\mathcal{E}_h = -\mathcal{E}_e$  : Wir setzen den Energienullpunkt an die Oberkante des Bandes. Um ein Elektron aus einem energetisch niedrigen Zustand zu entfernen, muss viel Energie aufgebracht werden; die daraus resultierende Energie des Systems ist also hoch. Beschreibt man das System mit Hilfe eines Lochs, ist somit die Energie des Lochs hoch,  $\mathcal{E}_h = -\mathcal{E}_e$ .

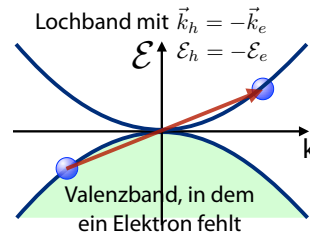


Abbildung 7.17: Symmetrie zwischen Elektron und Loch.

Dadurch ergibt sich, dass die Dynamik des Lochs am besten diskutiert werden kann, wenn wir das beinahe gefüllte Valenzband ersetzen durch ein beinahe leeres Lochband, welches am Scheitelpunkt des Valenzbandes gespiegelt ist, wie in Abb. 7.17 gezeigt.

$m_h = -m_e$  : Die Masse eines Ladungsträgers ist indirekt proportional zur Krümmung (zweite Ableitung) des Bandes, wie in Kapitel 6.4 diskutiert. Diese ist wegen  $\mathcal{E}_h = -\mathcal{E}_e$  für das Lochband gerade das Inverse der Krümmung des Valenzbandes. Die effektive Masse des Elektrons an der Oberkante des Bandes ist negativ, so dass die Masse  $m_h$  des Lochs positiv wird.

$v_h = v_e$  : Da sowohl Impuls wie Masse ihre Vorzeichen wechseln, ist die Geschwindigkeit des Lochs die gleiche wie die des Elektrons.



Mit diesen Regeln folgt, dass die Bewegungsgleichung für das Loch gerade derjenigen für ein positiv geladenes Teilchen entspricht.

Die Bewegungsgleichung für ein Loch lautet somit

$$\hbar \frac{d\vec{k}_h}{dt} = +e(\vec{E} + \vec{v}_h \times \vec{B}).$$

Für die Stromdichte gilt  $\vec{j} = nq\vec{v}$ , mit  $q$  der Ladung und  $\vec{v}$  der Geschwindigkeit der Ladungsträger. Für Elektronen im Leitungsband ergibt dies

$$\vec{j}_e = n_e(-e)\vec{v}_e = -n_e e \vec{v}_e$$

und für Löcher im Valenzband

$$\vec{j}_h = n_h(+e)\vec{v}_h = +n_h e \vec{v}_h.$$

Für Löcher ist damit die Stromdichte parallel zur Bewegungsrichtung, für Elektronen entgegengesetzt dazu.

### 7.2.3 Effektive Masse und Bandkrümmung

Die Energie von freien Elektron ist gegeben durch die kinetische Energie

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

d.h. die Energie ist eine quadratische Funktion des Wellenvektors, wobei der Proportionalitätsfaktor und damit die Krümmung der Kurve durch die Masse des Elektrons bestimmt wird.

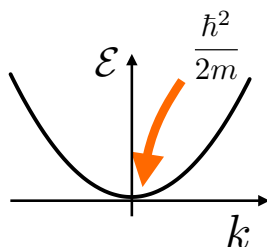


Abbildung 7.18: Bandkrümmung bei freien Elektronen.

Die (inverse) effektive Masse  $m^*$  eines Elektrons kann somit aus der Dispersionsrelation berechnet werden als

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \mathcal{E}}{dk^2}. \quad (7.1)$$

Aufgrund der Kopplung der Elektronen an das periodische Potenzial des Gitters ändert sich die Krümmung des Bandes, insbesondere in der Nähe der Zonengrenze. Dies bedeutet, dass obige Beziehung in dieser Form nicht allgemein gelten kann. Insbesondere am Rand der Brillouinzone, wo durch die Kopplung an das periodische Potenzial eine Bandlücke entsteht, ergeben sich Abweichungen. Man korrigiert dies häufig so, dass man die Beziehung (7.1) postuliert und die Masse als eine Variable betrachtet: Das Elektron, resp. Loch erhält eine effektive Masse. Die Änderung widerspiegelt den Einfluss des Gitters auf die Dynamik der Ladungsträger.

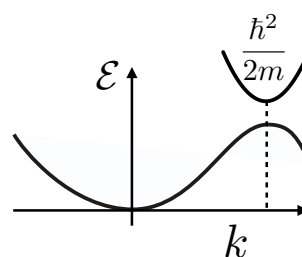


Abbildung 7.19: Bandkrümmung am Zonenrand.

Als Beispiel für die Änderung einer effektiven Masse betrachten wir die Krümmung an der Grenze der ersten Brillouinzone. Bei der Diskussion des periodischen Potenzials hatten wir gesehen, dass die Aufspaltung zwischen Valenz- und Leitungsband die Energie der Eielektronenzustände in der Nähe der Zonengrenze verändert und damit die Krümmung beeinflusst. Wir hatten gefunden, dass die Energie der Elektronen im Leitungsband in der Nähe der Zonengrenze

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 + \frac{\hbar^2 \delta k^2}{2m} \left( 1 + \frac{2\lambda}{U} \right)$$

beträgt.  $\delta k$  bezeichnet die Differenz der Wellenzahl zur Referenz an der Bandkante,  $\lambda$  die kinetische Energie der Elektronen an der Bandkante,

$U$  die Stärke der Kopplung mit dem periodischen Potenzial, und  $\mathcal{E}_1$  die Unterkante des Leitungsbandes. Diese Gleichung kann geschrieben werden als

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 + \frac{\hbar^2 \delta k^2}{2m_e}$$

mit

$$m_e = \frac{m}{1 + \frac{2\lambda}{U}}.$$

Üblicherweise gilt  $\lambda \gg U$ , so dass

$$m_e \approx m \frac{U}{2\lambda}.$$

Die Krümmung vergrößert sich dabei um einen Faktor  $\lambda/\mathcal{E}_g$ , wobei  $\lambda$  die Energie des freien Elektrons und  $\mathcal{E}_g$  die Aufspaltung, also die Bandlücke darstellt. Typische Werte für Halbleiter sind  $\lambda = 20\text{eV}$  und  $\mathcal{E}_g = 0.2 - 2\text{eV}$ . Damit vergrößert sich die Krümmung um einen Faktor 10 bis 100 und die effektive Masse wird um diesen Faktor kleiner als für ein freies Elektron.

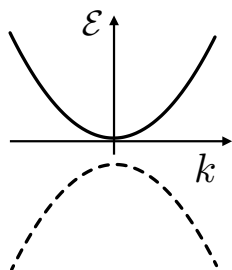


Abbildung 7.20: Bandkrümmung im Lochband.

Für die Zustände im Valenzband gilt

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 - \frac{\hbar^2 \delta k^2}{2m_h}$$

mit

$$m_h = \frac{m}{\frac{2\lambda}{U} - 1}.$$

Das Minuszeichen bei der Energie sorgt dafür, dass die Masse positiv wird, obwohl die Krümmung der Bandkante negativ ist.

### 7.2.4 3D: Halbklassische Bewegungsgleichung

Eine eigentliche Herleitung benutzt die Bewegungsgleichung für ein Elektron, resp. Loch. Wir betrachten deshalb ein Wellenpaket, dessen mittlerer Impuls  $\hbar k$  sein soll. Die Gruppengeschwindigkeit beträgt

$$v_G = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\mathcal{E}}{dk}$$

oder

$$\vec{v} = \vec{\nabla}_{\vec{k}} \mathcal{E}(\vec{k}).$$

Die Bewegung eines Elektrons wird sowohl durch äußere Felder wie auch durch den Kristall beeinflusst. Wir berechnen zunächst die Energieänderung bei der Bewegung in einem äußeren Feld  $\vec{E}$  für eine Zeit  $\delta t$ :

$$d\mathcal{E} = F dx = -eE dx = -eE v_G dt = F v_G dt,$$

wobei  $F$  die äußere Kraft darstellt, welche hier durch die Coulomb-Wechselwirkung zustande kommt. Gleichzeitig gilt

$$d\mathcal{E} = \frac{d\mathcal{E}}{dk} dk = \hbar v_G dk.$$

Damit erhalten wir eine Bewegungsgleichung für den Wellenvektor

$$dk = -\frac{eE}{\hbar} dt \rightarrow \hbar \frac{dk}{dt} = -eE = F.$$

Die äußere Kraft bewirkt also eine Änderung des Wellenvektors  $k$ : Ein Teilchen, auf das eine konstante Kraft wirkt, wird im  $k$ -Raum gleichförmig beschleunigt.

Wir interessieren uns aber primär für die Geschwindigkeit im direkten Raum, d.h. für die Änderung der Gruppengeschwindigkeit des Teilchens. Diese ändert sich wie folgt:

$$\hbar \frac{d}{dt} v_G = \frac{d}{dt} \frac{d\mathcal{E}}{dk} = \frac{d}{dk} \frac{d\mathcal{E}}{dk} \frac{dk}{dt} = \frac{d^2 \mathcal{E}}{dk^2} \frac{F}{\hbar}.$$

Wir vergleichen dies mit dem Newton'schen Gesetz

$$\frac{dv_G}{dt} = \frac{F}{m}.$$

Wenn dieses gültig bleiben soll, müssen wir eine effektive Masse  $m^*$  definieren als

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\mathcal{E}}{dk^2}.$$

Für ein anisotropes System wird die Bewegungsgleichung zu

$$\frac{dv_\mu}{dt} = \sum_\nu \left( \frac{1}{m^*} \right)_{\mu\nu} F_\nu.$$

Die effektive Masse ist hier ein Tensor

$$\left( \frac{1}{m^*} \right)_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\mathcal{E}}{dk_\mu dk_\nu} \quad \text{mit } \mu, \nu = x, y, z.$$

Dieser Tensor der reziproken effektiven Masse ist in erster Linie ein Maß für die Krümmung der Fermi-Oberfläche an der Bandkante. Diese kann lokal immer durch ein Ellipsoid angenähert werden, genau wie in einer Dimension durch eine Parabel.

### 7.2.5 Effektive Massen in Halbleitern

Man kann den Massentensor auch benutzen, um die Dispersionsrelation in drei Dimensionen darzustellen:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\mu\nu} \delta k_\mu \delta k_\nu \left( \frac{1}{m} \right)_{\mu\nu}.$$

Diese Gleichung definiert ein Ellipsoid.

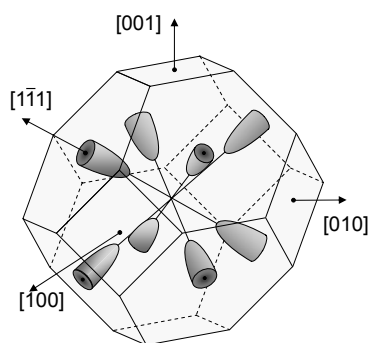


Abbildung 7.21: Ellipsoide konstanter Energie für Germanium am L-Punkt, d.h. in [111]-Richtung.

In Abb. 7.21 sind Ellipsoide konstanter Energie für die Elektronen in Germanium dargestellt. Der Massentensor ist durch die zweiten Ableitungen der Energie nach dem Wellenvektor gegeben. Hier sind die Massentensoren am Minimum des Leitungsbandes (beim L-Punkt) dargestellt.

Aufgrund der Spin-Bahn Wechselwirkung können Bänder in Subbänder mit unterschiedlicher effektiver Masse aufgespalten werden. Abb. 7.22 zeigt eine Bandstruktur, wie sie für viele Halbleiter mit direkter Bandlücke, wie z.B. GaAs typisch ist.

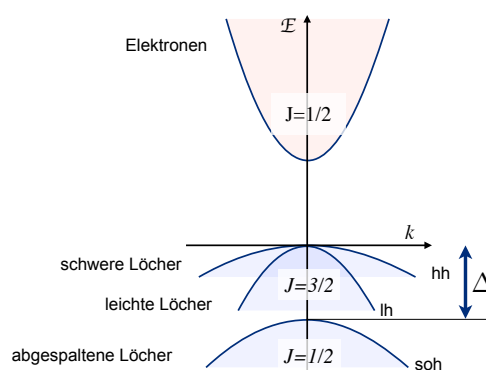


Abbildung 7.22: Effektive Massen für Bänder in Halbleitern mit direkter Bandlücke.

Das Valenzband besteht aus  $p$ -Orbitalen, deren Bahndrehimpuls beträgt  $L = 1$ . Durch die Spin-Bahn Kopplung spaltet das Band auf in zwei Subbänder mit  $J = 3/2$  und  $J = 1/2$ , deren Energie sich um die Spin-Bahn Kopplung  $\Delta$  unterscheidet. Nimmt man für den Energienullpunkt die Obergrenze des gesamten Bandes, so werden die Energien

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(hh) &= -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}} \\ \mathcal{E}(lh) &= -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}} \\ \mathcal{E}(soh) &= -\Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{soh}} \end{aligned}$$

Das energetisch tiefer liegende Band mit  $J = 1/2$  wird als abgespaltenes Band (englisch 'split-off

band') bezeichnet. Im energetisch höher liegenden Band mit  $J = 3/2$  sind die Zustände im Zentrum der Brillouin-Zone entartet, aber die Dispersion der Zustände mit  $m_J = \pm 3/2$  ist schwächer als die der Zustände mit  $m_J = \pm 1/2$ . Sie werden deshalb als schwere Löcher bezeichnet, diejenigen mit  $m_J = \pm 1/2$  als leichte Löcher. Allerdings sind beide deutlich 'leichter' als isolierte Elektronen, wie in Tabelle 7.2 gezeigt.

Material	$\frac{m_e}{m}$	$\frac{m_{hh}}{m}$	$\frac{m_{lh}}{m}$	$\frac{m_{soh}}{m}$	$\Delta/\text{eV}$
InSb	0,015	0,39	0,021	0,11	0,82
InAs	0,026	0,41	0,025	0,08	0,43
InP	0,073	0,4	0,078	0,15	0,11
GaSb	0,047	0,3	0,06	0,14	0,80
GaAs	0,066	0,5	0,082	0,17	0,34
Cu <sub>2</sub> O	0,99		0,58	0,69	0,13

Tabelle 7.2: Effektive Massen für verschiedene Halbleiter.

### 7.2.6 Dynamik am Zonenrand

Die Änderung der effektiven Masse des Elektrons hängt eng zusammen mit der Bragg-Reflexion an einem periodischen Gitter: In der Nähe der Oberkante des Bandes bestehen die Zustände nicht nur aus ebenen Wellen, sondern zu jedem Zustand mit Wellenvektor  $k$  ist auch ein Komponente mit  $k - G$  beigemischt, welche durch Reflexion am Gitter zustande kommt:

$$\Psi(x) = C_k e^{ikx} + C_{k-G} e^{i(k-G)x}.$$

Diese Zumischung einer gegenläufigen Komponente nimmt in der Nähe der Zonengrenze rasch zu. Der Erwartungswert des Impulses ist gegeben durch die gewichtete Mittelung über die beiden Komponenten

$$\langle p \rangle = \hbar [C_k^2 k + C_{k-G}^2 (k - G)]$$

und verschwindet am Zonenrand, d.h. bei  $k = G/2$ :

$$\langle p \rangle = \hbar C_k^2 \left[ \frac{G}{2} - \frac{G}{2} \right] = 0.$$

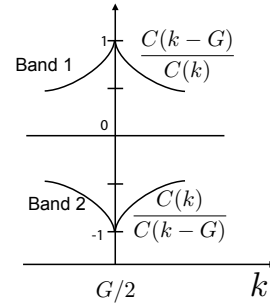


Abbildung 7.23: Koeffizienten der Zustände am Zonenrand.

Das gleiche gilt für die Gruppengeschwindigkeit. Wirkt auf ein Elektron in der Nähe der Bandkante eine äußere Kraft, welche den Wellenvektor vergrößert, so muss für die Änderung des Erwartungswertes auch die Abhängigkeit der Koeffizienten vom nominellen Wellenvektor berücksichtigt werden:

$$\frac{d}{dk} \langle p \rangle = \hbar (C_k^2 + k \frac{d}{dk} C_k^2 + C_{k-G}^2 + (k-G) \frac{d}{dk} C_{k-G}^2).$$

Berücksichtigt man die Normierung

$$C_k^2 + C_{k-G}^2 = 1,$$

vereinfacht sich dieser Ausdruck zu

$$\begin{aligned} \frac{d}{dk} \langle p \rangle &= \hbar (1 + k \frac{d}{dk} C_k^2 + (k-G) \frac{d}{dk} C_{k-G}^2) \\ &= \hbar (1 - G \frac{d}{dk} C_{k-G}^2). \end{aligned}$$

Der zweite Term kann größer als 1, die rechte Seite damit negativ werden. Dies bedeutet, dass die resultierende Bewegungsänderung im Mittel der Kraft entgegenwirkt, d.h. die effektive Masse ist negativ. Der erste Term entspricht dabei der Impulsänderung eines freien Elektrons, während der zweite Term den Einfluss des Gitters reflektiert. Dieser Teil der Impulsänderung wird deshalb durch eine inverse Impulsänderung der Atomrümpfe kompensiert.

Oberhalb der Bandlücke hingegen nimmt die Amplitude der gegenläufigen Komponente mit zunehmendem Impuls rasch ab. Dies bedeutet, dass die Geschwindigkeitsänderung größer ist als bei einem freien Elektron, resp. die effektive Masse positiv und klein.

### 7.2.7 Leichte und schwere Elektronen

Da die inverse Masse proportional zur Krümmung des Bandes ist, wird die Masse klein, wenn die Krümmung groß ist und umgekehrt. Sie ist demnach am kleinsten wenn die Kopplung ans periodische Gitter klein ist.

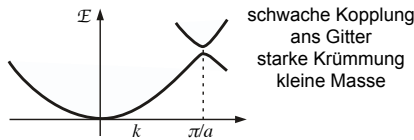


Abbildung 7.24: Geringe Bandlücke, geringe Masse.

Abb. 7.24 zeigt einen Fall, bei dem die Bandlücke sehr klein ist. Damit weichen die gekoppelten Zustände erst in der Nähe der Zonengrenze wesentlich von den Zuständen der freien Elektronen ab. Die Krümmung wird deshalb hier groß und die Masse klein.

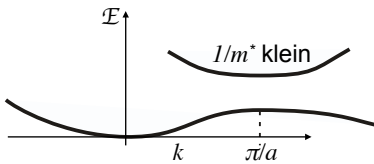


Abbildung 7.25: Geringe Krümmung, große Masse.

Es gibt aber auch Materialien in denen die Energie nur schwach von  $k$  abhängt. In Abb. 7.25 wird die Krümmung klein und die effektive Masse sehr groß.

Dies entspricht einem starken Potenzial: Die Elektronen sind dann beinahe vollständig bei den einzelnen Atomen lokalisiert und die Breite des Bandes ist klein. Es ist dann schwierig, das Elektron in Bewegung zu bringen und die effektive Masse ist groß.

Solche Systeme erhält man vor allem, wenn die Valenzelektronen  $f$ -Elektronen von seltenen Erden oder Actiniden sind. Diese Orbitale sind relativ tief im Atomrumpf versteckt und überlappen deshalb nur schwach. Die effektive Masse kann

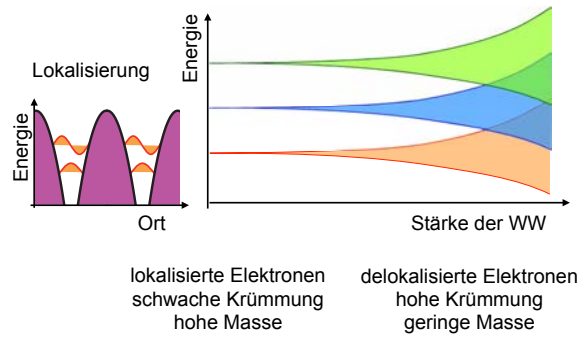


Abbildung 7.26: Variation von Energie, Breite der Bänder und effektiven Massen mit der Kopplungsstärke.

in solchen Systemen sehr groß werden. Sie sind als Schwere-Fermionen Systeme bekannt.

### 7.2.8 Form der Fermi-Oberfläche / Zyklotronresonanz

Das elektrische Verhalten der Halbleiter wird bestimmt durch die Dynamik der Ladungsträger, welche sich in der Nähe des oberen, resp. unteren Endes des Valenz-, resp. Leitungsbandes befinden. Man kann deshalb Materialien besser charakterisieren wenn man ihre Fermi-Oberfläche kennt. Eine wichtige Methode dafür ist die Zyklotronresonanz.

Dazu müssen wir in der Bewegungsgleichung (5.15) die Lorentzkraft berücksichtigen. Der zusätzliche Term ist

$$\hbar \frac{dk}{dt} = F = -e\vec{v} \times \vec{B}.$$

Mit der Beziehung für die Gruppengeschwindigkeit

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} \mathcal{E}(\vec{k})$$

wird daraus

$$\frac{dk}{dt} = -\frac{e}{\hbar^2} \left( \vec{\nabla}_{\vec{k}} \mathcal{E}(\vec{k}) \right) \times \vec{B}. \quad (7.2)$$

Hier tritt als einzige Koordinate der Wellenvektor auf, d.h. die Bewegungsgleichung bezieht

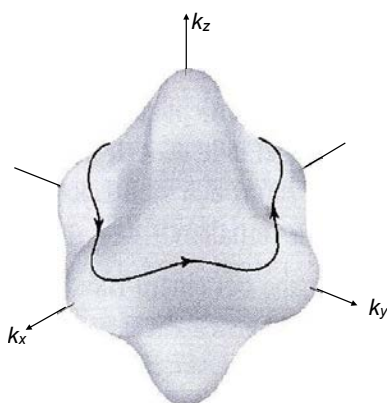


Abbildung 7.27: Bahn eines Elektrons im  $k$ -Raum.

sich auf den reziproken Raum; ihre Lösung wird durch eine Kurve im  $k$ -Raum beschrieben.

Gleichung (7.2) zeigt, dass sich das Elektron im Magnetfeld senkrecht zum Gradienten der Energie bewegt, und damit auf einer Fläche konstanter Energie, wie in Abb. 7.27 gezeigt. Dies folgt auch aus der Energieerhaltung, da ein konstantes Magnetfeld keine Energieänderung des abgelenkten Teilchens bewirkt. Gleichzeitig bewegt es sich senkrecht zum äußeren Magnetfeld. Aus diesen rein geometrischen Überlegungen folgt somit, dass sich das Elektron auf einer Kurve bewegt, welche durch die Schnittkurve der Iso-Energie Fläche mit einer Ebene senkrecht zum Magnetfeld gegeben ist - beide Flächen sind im  $k$ -Raum definiert.

Da sich bewegliche Ladungsträger notwendigerweise an der Fermi-Oberfläche befinden, kann eine Messung dieser Bewegung Informationen über die Struktur der Fermi-Oberfläche liefern. Bei freien Elektronen ist die Zyklotronfrequenz  $\omega_c = eB/m$ . Für die Verallgemeinerung auf Kristallelektronen ersetzt man die Masse durch eine effektive Masse  $m^*$ , welche die drei Hauptwerte enthält:

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}.$$

Weil die effektive Masse gerade die Krümmung des Bandes darstellt, kann über ihre Messung die

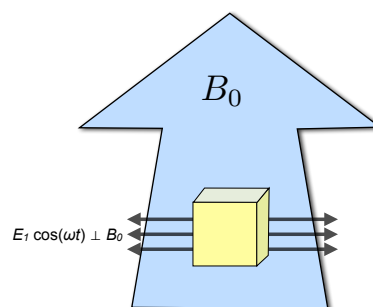


Abbildung 7.28: Prinzip der Zyklotronresonanz.

Form des Bandes bestimmt werden. Diese Zyklotronfrequenz kann gemessen werden, indem senkrecht zum statischen Magnetfeld ein elektrisches Wechselfeld der Frequenz  $\omega_c$  angelegt wird ( $\rightarrow$  Abb. 7.28). Man findet resonante Absorption der Mikrowellenstrahlung. Die Elektronen im Festkörper bewegen sich auf (im einfachsten Fall: Kreis-) Bahnen senkrecht zum Magnetfeld. Absorption des elektromagnetischen Wechselfeldes tritt immer dann auf, wenn die Bahnen geschlossen sind und die Frequenz des Wechselfeldes gleich (einem Vielfachen) der Umlauffrequenz  $\omega_c$  ist.

Experimentell ist die Breite der gemessenen Absorptionslinien von der Relaxationszeit  $\tau$  für Stöße abhängig. Damit eine Zyklotronresonanz in den Spektren sichtbar wird, muss  $\omega_c \tau \geq 1$  gelten. Die mittlere freie Weglänge zwischen zwei Stößen muss so groß sein, dass das Elektron dazwischen mindestens etwa eine volle Kreisbahn durchlaufen hat. Folgende Bedingungen müssen für die Beobachtung der Zyklotronresonanz erfüllt sein:

- hochreine Kristalle
- tiefe Temperaturen (flüssiges He)
- hohe  $B$ -Felder und HF-Strahlung

Bei einer Temperatur von 4 K ist die Eindringtiefe in Kupfer etwa 10 nm. Bei Halbleitern muss je nach Material und Messbedingung die Probe mit Licht bestrahlt werden, um Elektronen ins Leitungsband anzuregen.

### 7.2.9 Beispiele

Für freie Elektronen beträgt die Zyklotronfrequenz bei 1 T

$$\omega_c = \frac{eB}{m} = \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C N}}{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg A m}} \approx 176 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$$

oder

$$\nu_c = \frac{\omega_c}{2\pi} \approx 28 \text{ GHz.}$$

Typische Werte sind  $m^*/m = 0.1$ ,  $\nu_c = 24 \text{ GHz}$  und  $B = 86 \text{ mT}$ . Die Temperaturen müssen niedrig sein, damit die Stoßzeiten lang und die Auflösung hoch sind.

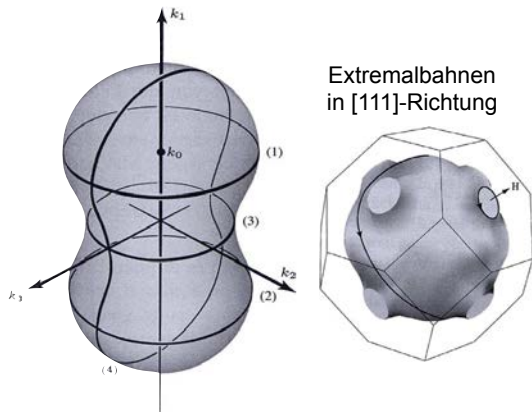


Abbildung 7.29: Extremalbahnen für unterschiedliche Magnetfeldrichtungen.

Damit kann man für die entsprechende Magnetfeldorientierung die Krümmung der Fermioberfläche bestimmen. Die stärkste Absorption ergeben sogenannte Extremalbahnen, also Bahnen bei denen die Krümmung und damit die effektive Masse näherungsweise konstant sind. Abb. 7.29 zeigt einige Beispiele von Extremalbahnen; links für die Magnetfeldrichtung entlang  $\vec{k}_1$  mit drei Extremalbahnen und  $\vec{k}_2$  mit einer Extremalbahn und rechts in [111]-Richtung, mit zwei unterschiedlichen Bahnen.

Abb. 7.30 zeigt als Beispiel die Resonanzen von Silizium und Germanium. Je nachdem, ob die besetzten Zustände innerhalb oder außerhalb der

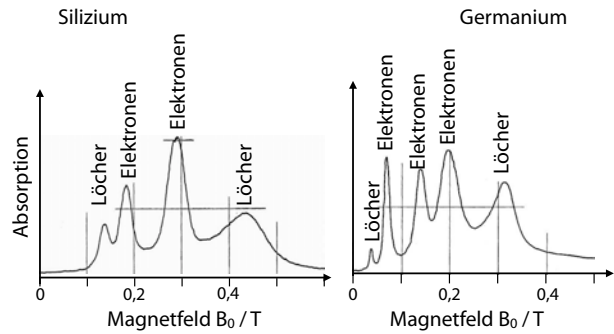


Abbildung 7.30: Zyklotronresonanz-Spektren von Silizium und Germanium.

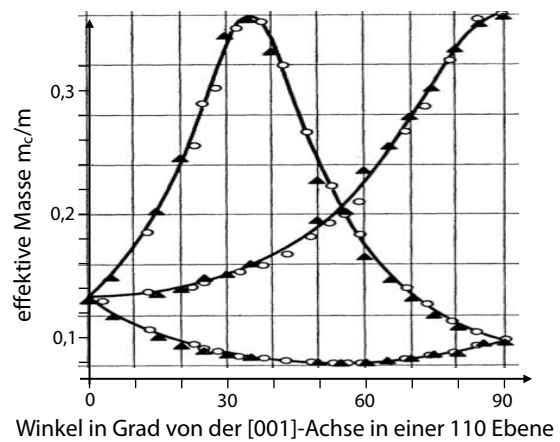


Abbildung 7.31: Anisotrope effektive Masse von Germanium.

Bahn liegen, werden sie als Elektron- oder Lochbahn bezeichnet.

Die gesamte Fermioberfläche kann durch Drehung des Magnetfeldes oder der Probe gemessen werden. Abb. 7.31 stellt die effektiven Massen von Germanium als Funktion der Richtung im  $k$ -Raum dar.

Bei der Diskussion der Bandstrukturen spielen einige Punkte der Brillouin-Zone eine besondere Rolle. Für diese hat sich eine eigene Nomenklatur eingebürgert. Das Zentrum der Brillouin-Zone wird immer als  $\Gamma$ -Punkt bezeichnet. Weitere Punkte sind für das fcc- und bcc Gitter:

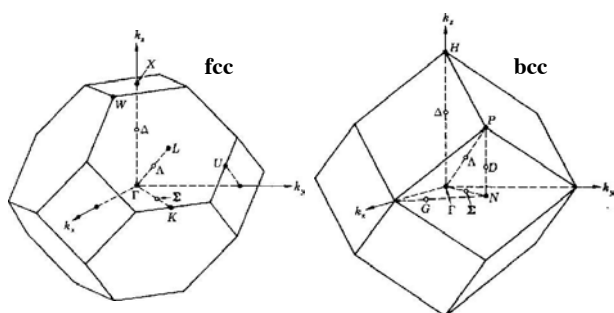


Abbildung 7.32: Bezeichnung der wichtigsten Punkte im  $k$ -Raum.

$\vec{k} = \frac{2\pi}{a}$	fcc	bcc
(000)	$\Gamma$	$\Gamma$
$(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	L	P
$(\frac{1}{2} 00)$	$\Delta$	$\Delta$

K, resp. N bezeichnen die Zonengrenze in Richtung (110) und L, resp. P in Richtung (111).

### 7.2.10 Zustandsdichte im Magnetfeld

In dünnen Halbleiterfilmen (Dicke  $\approx 10$  nm) bewegen sich die Elektronen (und Löcher) quasi-zweidimensional. In einem Magnetfeld senkrecht zu diesem Film sind die kreisförmigen Landau-Bahnen die relevanten Eigenzustände (Details  $\rightarrow$  Kap. 8.3). Im  $k$ -Raum beträgt der Radius der Bahnen

$$k_\ell = \sqrt{\left(\ell + \frac{1}{2}\right) \frac{2m^*\omega_c}{\hbar}},$$

mit der Zyklotronfrequenz

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}$$

und der Quantenzahl  $\ell = 0, 1, \dots$ . Die Fläche innerhalb dieser Bahnen beträgt

$$S_\ell = \pi k_\ell^2 = \left(\ell + \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi eB}{\hbar}$$

und ist damit proportional zur Stärke des Magnetfeldes. Die Energie eines Teilchens auf der

Bahn mit Index  $\ell$  beträgt

$$\mathcal{E}_\ell = \left(\ell + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c,$$

entsprechen einem harmonischen Oszillator.

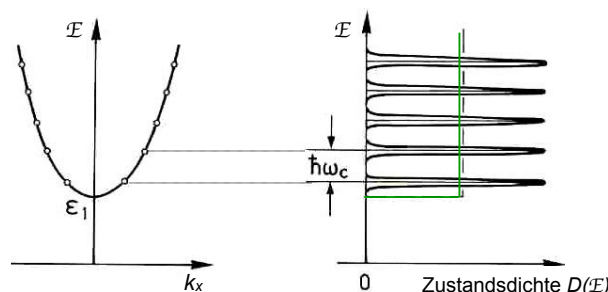


Abbildung 7.33: Zustände im  $k$ -Raum ohne Magnetfeld (links) und Zustandsdichte in Gegenwart eines Magnetfeldes (rechts).

Beim Einschalten des Magnetfeldes “kondensieren” alle Zustände, die sich in einem Energieintervall  $\hbar\omega_c \propto B$  befinden, auf das entsprechende Landau-Niveau (Abb. 7.33 rechts). Davon gibt es für zunehmende Magnetfeldstärke (und damit  $\omega_c$ ) immer weniger, so dass die Besetzung pro Niveau  $N_{La}$  steigen muss, denn die Gesamtzahl der Zustände ist konstant. Der Entartungsgrad ist deshalb proportional zur Stärke des Magnetfeldes:

$$N_{La} = \rho_{2D} \Delta S = \frac{L^2}{4\pi^2} \frac{2\pi e}{\hbar} B = \frac{e}{h} L^2 B.$$

Hier stellt  $\Delta S$  den Unterschied in der Fläche von zwei aufeinander folgenden Bahnen dar und  $L$  die Kantenlänge der quadratischen Probe.

Die Gesamtzahl der Zustände ohne Feld (Fläche unter der roten Linie in Abb. 7.34) und mit  $B$ -Feld sind gleich. In drei Dimensionen kann sich das Elektron außerdem parallel zum Magnetfeld bewegen. In dieser Richtung spielt das Magnetfeld keine Rolle und die Energie ist deshalb nicht quantisiert. Wegen der quasi-kontinuierlichen Variation von  $k_z$  kann in 3D die Energie jeden Wert bis zur Fermi-Kante annehmen. Bei den Energien, die zu den Landau-Niveaus korrespondieren, tritt wegen deren hoher Entartung jeweils eine van Hove-Singularität



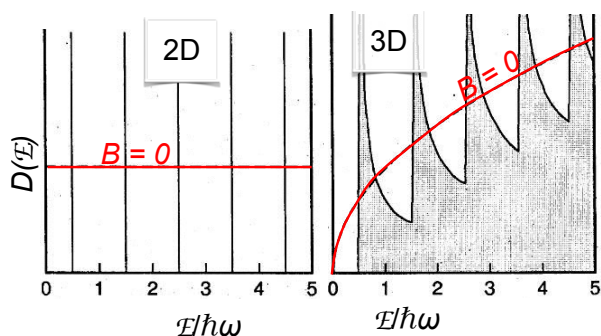


Abbildung 7.34: Zustandsdichte in 2D und 3D, jeweils ohne Magnetfeld (rote Kurven) und mit Magnetfeld (schwarze Kurven).

auf. Diese Singularitäten wiederholen sich jedes Mal, wenn ein weiteres Sub-Band eine waagerechte Tangente aufweist.

## 7.3 Leitfähigkeit

Die elektrische Leitfähigkeit von Halbleitern wird vor allem durch die Temperatur und die Dotierung mit Fremdatomen beeinflusst. Wir betrachten zunächst reine Halbleiter.

### 7.3.1 Zustandsdichte

Bei den Metallen konnte die Leitfähigkeit über den Ausdruck (5.16) berechnet werden:

$$\sigma = ne^2 \frac{\tau}{m}.$$

Als Funktion der Temperatur variierte vor allem die Stoßzeit  $\tau$ , was zu einer Abnahme der Leitfähigkeit mit zunehmender Temperatur führte.

Bei den Halbleitern ist nicht nur die Stoßzeit, sondern zusätzlich auch die Ladungsträgerdichte  $n$  stark von der Temperatur abhängig. Dies führt dazu, dass in diesem Fall die Leitfähigkeit mit der Temperatur zunimmt.

Am absoluten Nullpunkt sind Halbleiter Isolatoren, aber bei endlicher Temperatur werden Elektronen aus dem Valenzband ins Leitungsband

angeregt. Die Anzahl der Elektronen im Leitungsband ist bestimmt durch die Fermi-Dirac Verteilung. Die Besetzungswahrscheinlichkeit für einen Einelektronenzustand mit Energie  $\mathcal{E}$  ist allgemein

$$f_e = \frac{1}{e^{\frac{\mathcal{E}-\mu}{k_B T}} + 1},$$

wobei  $\mu$  das chemische Potenzial darstellt. Für einen reinen Halbleiter bei niedriger Temperatur liegt dieses in der Mitte zwischen Valenzband und Leitungsband. Bei nicht allzu hohen Temperaturen ist  $\mathcal{E} - \mu \gg k_B T$  für Elektronen im Leitungsband. Damit wird die Exponentialfunktion im Nenner groß gegen 1 und der Ausdruck kann vereinfacht werden zur Boltzmann-Statistik

$$f_e = e^{\frac{\mu-\mathcal{E}}{k_B T}}.$$

Innerhalb des Leitungsbandes wächst die Energie des Elektrons quadratisch mit dem Impuls

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}. \quad (7.3)$$

Die Anzahl Zustände mit Wellenvektor  $< k$  ist nach Gl. (5.3)

$$n(k) = V \frac{k^3}{3\pi^2}. \quad (7.4)$$

Wir lösen die Dispersionsrelation (7.3) auf nach der Wellenzahl

$$k = \frac{\sqrt{2m_e}}{\hbar} \sqrt{\mathcal{E} - \mathcal{E}_c}$$

und setzen dies ein in (7.4):

$$n(\mathcal{E}) = \frac{V}{3\pi^2} \frac{(2m_e)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} (\mathcal{E} - \mathcal{E}_c)^{\frac{3}{2}}.$$

Die Zustandsdichte  $D_e(\mathcal{E})$  als Funktion der Energie ist deshalb

$$D_e(\mathcal{E}) = \frac{dn(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} = \frac{V}{2\pi^2} \frac{(2m_e)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \sqrt{\mathcal{E} - \mathcal{E}_c},$$

für  $\mathcal{E} > \mathcal{E}_c$ .

### 7.3.2 Ladungsträgerdichte

Damit ergibt sich die Dichte  $n$  der Elektronen im Leitungsband als

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{V} \int_{\mathcal{E}_c}^{\infty} D_e(\mathcal{E}) f_e(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \frac{(2m_e)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} e^{\frac{\mu}{k_B T}} \int_{\mathcal{E}_c}^{\infty} \sqrt{\mathcal{E} - \mathcal{E}_c} e^{\frac{-\mathcal{E}}{k_B T}} d\mathcal{E}. \end{aligned}$$

Für die Berechnung des Integrals kann der Ausdruck

$$\int_0^{\infty} \sqrt{u} e^{-u} du = 2 \int_0^{\infty} v^2 e^{-v^2} dv = 2 \frac{\sqrt{\pi}}{4} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

verwendet werden. Damit erhält man

$$n = 2 \left( \frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu - \mathcal{E}_c}{k_B T}}.$$

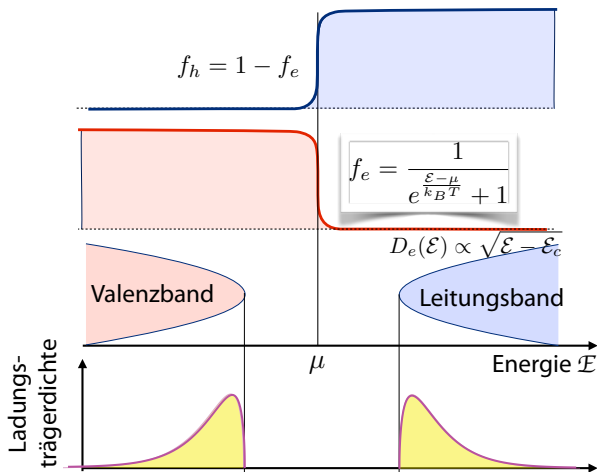


Abbildung 7.35: Besetzungswahrscheinlichkeit für Elektronen und Löcher in einem reinen Halbleiter.

Die Löcherkonzentration  $f_h$  erhält man, indem man berücksichtigt, dass ein Orbital entweder voll oder leer ist, d.h.

$$\begin{aligned} f_h &= 1 - f_e = 1 - \frac{1}{e^{\frac{\mathcal{E} - \mu}{k_B T}} + 1} \\ &= \frac{e^{\frac{\mathcal{E} - \mu}{k_B T}}}{e^{\frac{\mathcal{E} - \mu}{k_B T}} + 1} = \frac{1}{1 + e^{\frac{\mu - \mathcal{E}}{k_B T}}} \approx e^{\frac{\mathcal{E} - \mu}{k_B T}}. \end{aligned}$$

Die Zustandsdichte der Löcher ist

$$D_h(\mathcal{E}) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{(2m_h)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \sqrt{\mathcal{E} - \mathcal{E}_v}.$$

Damit wird die Dichte der Löcher bei der Temperatur  $T$

$$p = 2 \left( \frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mathcal{E}_v - \mu}{k_B T}}.$$

### 7.3.3 Temperaturabhängigkeit

Das Produkt der Ladungsträgerdichten

$$n \cdot p = 4 \left( \frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{\frac{3}{2}} e^{-\mathcal{E}_g / k_B T}$$

hängt damit nur von der Bandlücke  $\mathcal{E}_g = \mathcal{E}_c - \mathcal{E}_v$  und der Temperatur ab. Dies bedeutet, dass eine Erhöhung der Anzahl Elektronen im Leitungsband durch Dotierung zu einer Verringerung der Anzahl Löcher im Valenzband führt und umgekehrt. Die Werte für die wichtigsten Halbleiter sind bei Raumtemperatur

	Si	Ge	GaAs
$n \cdot p$ [cm <sup>-6</sup> ] bei 300 K	$2 \cdot 10^{19}$	$3 \cdot 10^{26}$	$7 \cdot 10^{12}$
$\mathcal{E}_g$ [eV]	1,12	0,66	1,43

Für einen reinen Halbleiter gilt  $n = p$  und damit

$$\begin{aligned} n &= p = \sqrt{n p} \\ &= 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_e m_h)^{\frac{3}{4}} e^{-\mathcal{E}_g / 2k_B T} \quad (7.5) \end{aligned}$$

Das chemische Potenzial  $\mu$  eines reinen Halbleiters kann bestimmt werden, indem man die Ausdrücke für die Anzahl Elektronen und Löcher gleichsetzt. Daraus erhält man

$$m_e^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{\frac{-\mathcal{E}_c}{k_B T}} = m_h^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mathcal{E}_v}{k_B T}} e^{\frac{-\mu}{k_B T}}$$

und damit

$$e^{\frac{2\mu}{k_B T}} = \left( \frac{m_h}{m_e} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mathcal{E}_v + \mathcal{E}_c}{k_B T}}.$$

Logarithmieren gibt

$$\frac{2\mu}{k_B T} = \frac{3}{2} \ln \left( \frac{m_h}{m_e} \right) + \frac{\mathcal{E}_v + \mathcal{E}_c}{k_B T}.$$

Damit wird das Potenzial

$$\mu = \frac{\mathcal{E}_v + \mathcal{E}_c}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \left( \frac{m_h}{m_e} \right).$$

Für identische Massen oder am absoluten Nullpunkt liegt das chemische Potenzial somit in der Mitte zwischen Valenzband und Leitungsband.

Mit Hilfe des Ausdrucks (7.5) kann man auch die Ladungsträgerdichte von zwei unterschiedlichen Materialien vergleichen:

$$\frac{n_{Ge}}{n_{Si}} = \frac{e^{-\mathcal{E}_{g,Ge}/2k_B T}}{e^{-\mathcal{E}_{g,Si}/2k_B T}} = e^{(\mathcal{E}_{g,Si} - \mathcal{E}_{g,Ge})/2k_B T}.$$

Hier wurden die Unterschiede in den Massen vernachlässigt. Die Bandlücken  $\mathcal{E}_{g,Si}$  und  $\mathcal{E}_{g,Ge}$  unterscheiden sich um etwa 0,45 eV. Bei Raumtemperatur ( $T = 300$  K) ist  $k_B T = 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300$  J =  $4,14 \cdot 10^{-21}$  J. Mit  $1$  eV =  $1,6 \cdot 10^{-19}$  J entspricht dies 26 meV und

$$\frac{n_{Ge}}{n_{Si}} = e^{\frac{0,45}{0,026}} \approx 5000.$$

### 7.3.4 Beweglichkeit

Der Strom in Halbleitern wird durch Elektronen wie auch Löcher geleitet.

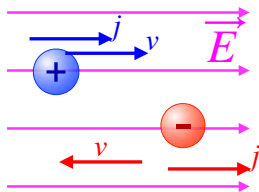


Abbildung 7.36: Bewegung von Elektronen und Löchern in einem E-Feld.

Dabei bewegen sich die Löcher in Richtung des Feldes, die Elektronen entgegengesetzt. Die Richtung des Stromes ist in beiden Fällen parallel zum Feld.

Wenn wir uns für die Leitfähigkeit interessieren, benötigen wir nicht nur die Ladungsträgerdichte, sondern auch die Geschwindigkeit  $v$  der Ladungsträger für ein gegebenes Feld. Dies wird üblicherweise durch die Beweglichkeit

$$\mu = \frac{|v|}{|E|} \quad [\mu] = \frac{\text{m}^2}{\text{Vs}}$$

quantifiziert. Damit wird die gesamte Leitfähigkeit eines Materials

$$\sigma = n e \mu_e + p e \mu_h,$$

mit den Ladungsträgerdichten  $n$  und  $p$  für Elektronen und Löcher.

Wie in Metallen ist die Driftgeschwindigkeit der Ladungsträger proportional zur Stoßzeit  $\tau$ :

$$v = \frac{q\tau E}{m}.$$

Somit ist auch die Beweglichkeit proportional zu  $\tau$ :

$$\mu_e = e \frac{\tau_e}{m_e} \quad \text{und} \quad \mu_h = e \frac{\tau_h}{m_h}.$$

Kristall	Elektronen	Löcher	Kristall	Elektronen	Löcher
Diamant	1800	1200	GaAs	8000	300
Si	1350	480	GaSb	5000	1000
Ge	3600	1800	PbS	550	600
InSb	800	450	PbSe	1020	930
InAs	30000	450	PbTe	2500	1000
InP	4500	100	AgCl	50	-
AlAs	280	-	KBr (100 K)	100	-
AlSb	900	400	SiC	100	10-20

Tabelle 7.3: Beweglichkeit von Elektronen und Löchern bei Raumtemperatur in  $\text{cm}^2/\text{Vs}$ .

Tabelle 7.3 enthält die Beweglichkeiten unterschiedlicher Ladungsträger in den wichtigsten Halbleitermaterialien. Normalerweise ist die Beweglichkeit der Elektronen höher als die der Löcher,  $\mu_e > \mu_h$ . Grund dafür sind einerseits die kleinere effektive Masse der Elektronen,  $m_e < m_h$ , sowie Entartungen an der Valenzbandkante, welche zu Streuung zwischen den Lochbändern führen. Die experimentell gefundenen Beweglichkeiten hängen einerseits von der Temperatur, andererseits von der Art und Qualität der Kristalle

ab. Die Beweglichkeit der Elektronen ist größer als die der Löcher, so dass die elektrische Leitfähigkeit in nicht dotierten Halbleitern durch die Elektronen dominiert wird.

### 7.3.5 Dotierung

Der Grund, dass Halbleiter in der Industrie so nützlich geworden sind, liegt nicht an ihrer intrinsischen Leitfähigkeit, sondern an der Möglichkeit, die Leitfähigkeit durch die Zugabe von Fremdatomen gezielt zu verändern.

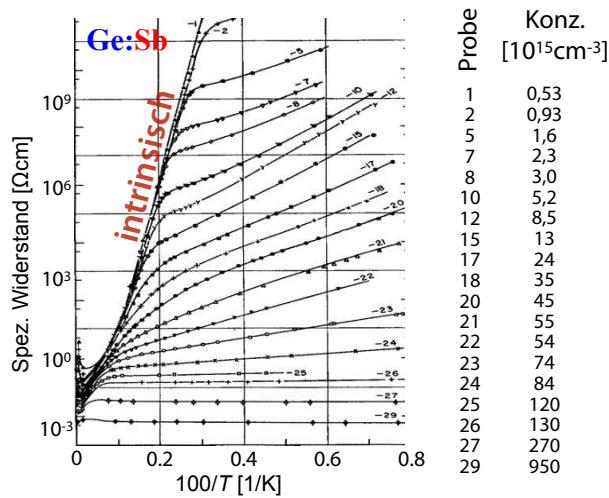


Abbildung 7.37: Einfluss von Dotierung und Temperatur auf den spezifischen Widerstand. [7]

Man hat zwei Arten von Variationsmöglichkeiten: In binären Verbindungen wie GaAs erzeugt eine Abweichung von der exakten Stöchiometrie Mangelhalbleiter; die häufigere Methode ist Dotieren, also der Einbau von Fremdatomen. Wie Abb. 7.37 zeigt, kann eine Zugabe von kleinsten Mengen von Antimon zu Germanium die elektrische Leitfähigkeit um mehr als 10 Größenordnungen verändern.

Am einfachsten lässt sich der Effekt bei den diamantartigen Halbleitern wie Silizium diskutieren. Wird ein fünfwertiges Atom wie N, P oder As in Silizium eingebaut, so nimmt es einen Gitterplatz von Si ein. Das Gitter bleibt damit weitgehend unverändert, aber die Rumpfladung des



Abbildung 7.38: N-Dotierung.

eingebauten Atoms ist um eins höher als die der übrigen Gitteratome; außerdem ist die Anzahl der Elektronen um eines höher als bei einem reinen Halbleiter. Solche Atome werden deshalb als Donatoren bezeichnet.

### 7.3.6 Donatorzustände

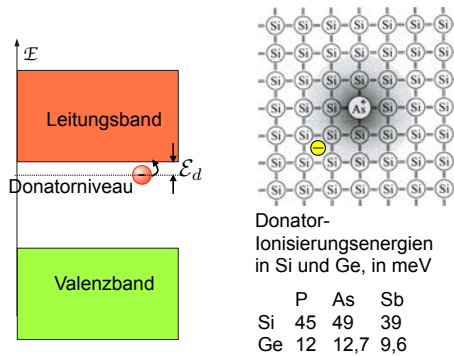


Abbildung 7.39: Energie und Struktur eines Donator-Zentrums.

Das Überschusselektron bewegt sich im Coulomb-Potenzial

$$U_{don} = \frac{e}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r},$$

des positiv geladenen Atomrumpfes mit  $\epsilon$  als Dielektrizitätskonstante. Die elektronische Zustände entsprechen deshalb den Zuständen des Wasserstoffatoms und sind in der Nähe des Zentrums lokalisiert, wie in Abb. 7.39 rechts gezeigt. Beim Wasserstoffatom ist die Energie des Grundzustands

$$\mathcal{E}_1 = -\frac{e^4 m}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \approx -13,6 \text{ eV.} \quad (7.6)$$

Im Falle eines Dotierungsatoms gibt es zwei Unterschiede: zum einen wird die positive Ladung

des Atomrumpfes durch die übrigen Elektronen abgeschirmt. Man nähert diesen Abschirmeffekt üblicherweise durch die statische Dielektrizitätskonstante des Materials.

Kristall	$\epsilon$	Kristall	$\epsilon$
Diamant	5,5	GaSb	15,69
Si	11,7	GaAs	13,13
Ge	15,8	AlAs	10,1
InSb	17,88	AlSb	10,3
InAs	14,55	SiC	10,2
InP	12,37	Cu <sub>2</sub> O	7,1

Abbildung 7.40: Statische Dielektrizitätskonstante von Halbleitern.

Außerdem wird in der Energie (7.6) die Elektronenmasse  $m$  durch die effektive Masse  $m_e$  ersetzt. Die veränderte Bindungsenergie wird damit zu

$$\mathcal{E}_d = \frac{e^4 m_e}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} \approx \frac{13,6 m_e}{\epsilon^2} \frac{m_e}{m} \text{ eV}.$$

Sie hängt somit quadratisch von der Dielektrizitätskonstante und linear von der effektiven Masse ab. Die Dielektrizitätskonstante  $\epsilon$  eines Halbleiters ist in der Größenordnung von 10 (siehe Abb. 7.40), die effektive Masse bei etwa 0.1  $m$ . Somit erwarten wir eine Reduktion der Bindungsenergie um etwa einen Faktor 1000. Experimentell beobachtete Energien sind auch tatsächlich etwa 10 meV für Ge und 40-50 meV für Si.

Durch die Abschirmung und die kleinere effektive Masse wird nicht nur die Bindungsenergie reduziert, gleichzeitig wird auch das Orbital größer. Im Wasserstoffatom ist die Größe des Orbitals durch den Bohr'schen Radius

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0,53 \text{ \AA}$$

gegeben. Im Halbleiter wird dieser zu

$$a_0^* = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = a_0 \epsilon \frac{m}{m_e} \approx 100 a_0 \approx 50 \text{ \AA}.$$

Für eine genauere Betrachtung müsste man auch berücksichtigen, dass die effektiven Massen anisotrop sind. Die Größenordnung der Werte ist

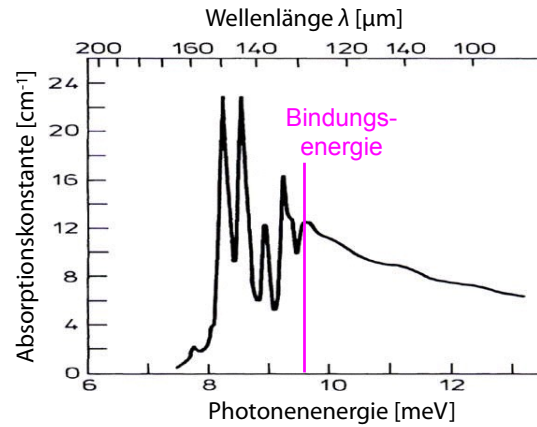


Abbildung 7.41: Messung der Bindungsenergie des Sb-Donators in Ge bei  $T=9$  K mit Infrarot-Spektroskopie.

jedoch korrekt. Sie zeigt z.B., dass innerhalb der Elektronenbahn rund 1000 Si-Atome liegen.

Die Bindungsenergie kann z.B. mit Infrarot-Spektroskopie gemessen werden, wie in Abb. 7.41 für Antimon in Germanium gezeigt. Die Banden für  $\mathcal{E} < 9.6$  meV entsprechen angeregten Zuständen des Donators. Die Aufhebung der Entartung durch das Kristallfeld liefert hier ein Mehrlinienspektrum das komplexer ist, als das von atomarem Wasserstoff.

### 7.3.7 P-Dotierung



Abbildung 7.42: P-Dotierung.

Anstelle von fünfwertigen Atomen können auch dreiwertige eingebaut werden, wie z.B. B, Al, In. In diesem Fall ist die Rumpfladung geringer. Das fehlende Elektron kann aus dem Valenzband kommen; dort wird dadurch ein Loch erzeugt. Diese Art von Zentren wird deshalb als Akzeptor-Zentren bezeichnet.

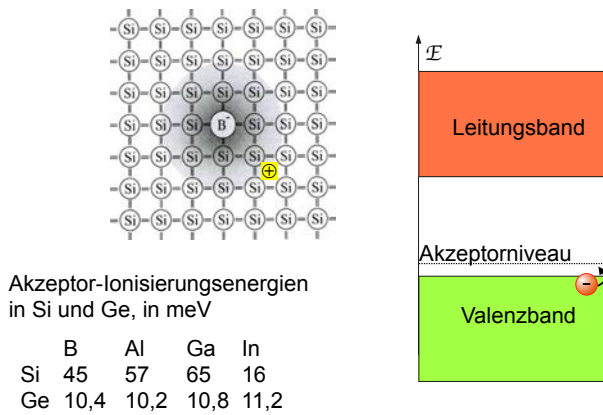


Abbildung 7.43: Energie der Akzeptorzustände.

Wiederum sorgt die veränderte Ladung für lokalisierte Zustände, welche ebenfalls mit dem modifizierten Bohr'schen Modell behandelt werden, wobei die Vorzeichen der Ladungen invertiert sind. Die Ionisationsenergien sind ähnlich wie bei den Donatorzuständen. Abb. 7.43 zeigt schematisch die Struktur eines solchen Zentrums und die Energien der relevanten Zustände.

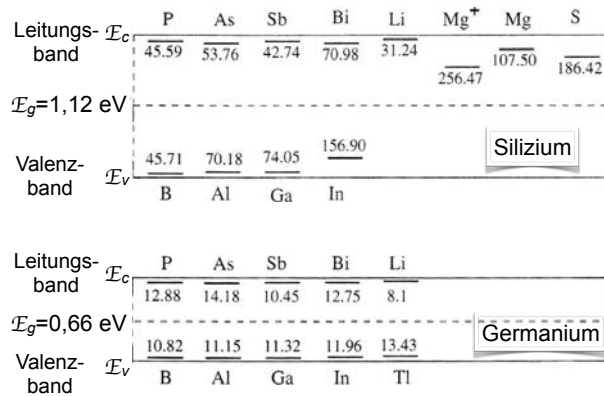


Abbildung 7.44: Energien von unterschiedlichen Dotier-Atomen in Si und Ge.

Abb. 7.44 zeigt die Energien der wichtigsten Donatoren und Akzeptoren in Silizium und Germanium. Die Bindungsenergien der Donatorzustände beziehen sich auf den Abstand von der Leitungsbandkante, diejenigen der Akzeptorzustände auf die Valenzbandkante. Die Werte liegen teilweise unterhalb, teilweise oberhalb der thermischen Energie bei Raumtemperatur.

### 7.3.8 Exzitonen

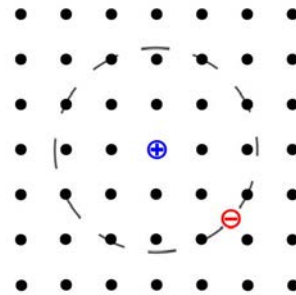


Abbildung 7.45: Exziton als gebundener Zustand von Elektron und Loch.

Sind in einem Halbleiter sowohl Elektronen wie auch Löcher vorhanden (z.B. bei optischer Anregung), so gehen diese auf Grund der Coulomb-Wechselwirkung häufig eine Bindung ein, wie in Abb. 7.45 gezeigt. Das System aus einem positiven und einem negativen Ladungsträger entspricht formal einem Wasserstoffatom (genauer: Positronium). Entsprechend sind die gebundenen Zustände die gleichen wie beim Wasserstoff - allerdings mit anderen Energien.

Si	14,7	BaO	56	RbCl	440
Ge	4,15	InP	4,0	LiF	(1000)
GaAs	4,2	InSb	(0,4)	AgBr	20
GaP	3,5	KI	480	AgCl	30
CdS	29	KCl	400	TlCl	11
CdSe	15	KBr	400	TlBr	6

Tabelle 7.4: Bindungsenergie von Exziton in unterschiedlichen Materialien in meV.

Tabelle 7.4 zeigt die Bindungsenergie von Exziton in unterschiedlichen Materialien. Ist die Bindungsenergie gering, von der Größenordnung 10 meV, spricht man von Mott-Wannier-Exziton. Ist sie in der Größenordnung von 1eV spricht man von stark gebundenen oder Frenkel-Exziton.

Abbildung 7.46 zeigt die Energieniveaus eines Exzitons innerhalb der Bandlücke. Optische Übergänge, die von der Oberkante des Valenzbandes ausgehen und Exzitonen erzeugen, sind durch Pfeile dargestellt. Der längste Pfeil entspricht der Energielücke. Die Bindungsenergie

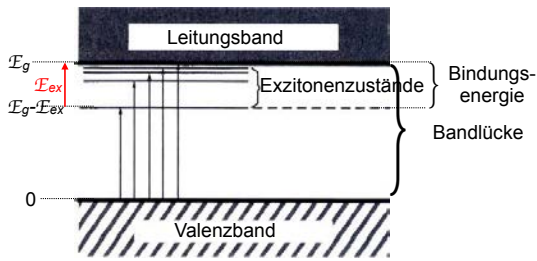


Abbildung 7.46: Energieniveaus von Exzitonen. Die vertikalen Pfeile entsprechen absorbierten Photonen.

des Exzitons ist  $\mathcal{E}_{ex}$  und bezieht sich auf ein freies Elektron und ein freies Loch. Die Absorptionslinie mit der niedrigsten Energie ist deshalb  $\mathcal{E}_g - \mathcal{E}_{ex}$ .

### 7.3.9 Thermische Anregung

Im Grundzustand, d.h. bei  $T = 0$ , sind die Elektronen der Dotierungsatome lokalisiert, das Material bleibt ein Isolator. Da ihre Energien jedoch nahe bei den Bandkanten liegen, können sie durch thermische Anregung leicht ionisiert werden. Aufgrund der relativ niedrigen Ionisierungsenergie ist diese, je nach Art des Zentrums, schon unterhalb der Raumtemperatur praktisch vollständig. Sind nur Donatoren vorhanden und ist die Temperatur sehr klein,  $k_B T \ll \mathcal{E}_d$ , so wird die Konzentration der Elektronen

$$n = \sqrt{n_0 N_d} e^{-\frac{\mathcal{E}_d}{2k_B T}}$$

mit

$$n_0 = 2 \left( \frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

und  $N_d$  die Konzentration der Donatoren. In Abb. 7.47 sind die Donatoren bei etwa 90 K vollständig ionisiert.

Ein analoges Resultat gilt für Akzeptoren. Bei Raumtemperatur ( $k_B T_R = 26 \text{ meV}$ ) sind beide ionisiert und die Ladungsträgerkonzentration wird zu  $n = N_d - N_a$  falls das Material n-dotiert ist ( $N_d > N_a$ ), oder  $p = N_a - N_d$  im umgekehrten Fall.

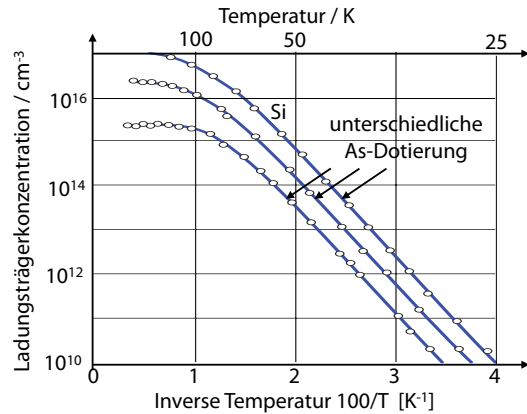


Abbildung 7.47: Ladungsträgerkonzentration als Funktion der Temperatur.

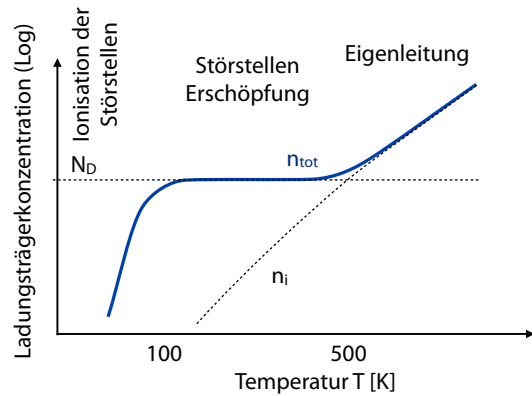


Abbildung 7.48: Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerkonzentration.

Abb. 7.48 fasst die Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerkonzentration zusammen. Bei niedrigen Temperaturen tragen nur die Dotieratome zur Leitfähigkeit bei und die Ladungsträgerkonzentration steigt rasch, bis zu etwa 100 K, wo alle Zentren ionisiert sind. Danach ändert sich die Leitfähigkeit nicht mehr stark mit der Temperatur, bis die Temperatur hoch genug wird, dass Elektronen aus dem Valenzband ins Leitungsband angeregt werden können. Erhöht man die Temperatur auf mehrere 100 K (je nach Dotierung), wird die Eigenleitung dominant, da die Zahl der intrinsischen Elektronen sehr viel größer ist, als die der Dotieratome (siehe Abb. 7.37).

### 7.3.10 Ladungsträger-Gleichgewicht

Da die Leitfähigkeit durch die Summe der Löcher und Elektronen gegeben ist, erhält man sowohl für hohe Donatoren-Konzentrationen wie auch für hohe Konzentrationen von Akzeptoren eine hohe Leitfähigkeit. Je nachdem, welcher Beitrag dominiert spricht man von p-Leitung (Lochleitung), resp. n-Leitung (Elektronenleitung).

Intrinsisches Material enthält Ladungsträger auf Grund der thermisch angeregten Übergänge zwischen Valenz- und Leitungsband. Die Zahl der positiven und negativen (beweglichen) Ladungsträger ist gleich:

$$n = p = n_i.$$

Wird das Material negativ dotiert, so steigt die Anzahl der freien Elektronen, diejenige der Löcher sinkt. Das Produkt der beiden bleibt konstant,

$$n \cdot p = n_i^2.$$

Da das Material insgesamt neutral sein muss, ist die Summe der positiven Ladungsträger gleich der Summe der negativen Ladungsträger. Für vollständig ionisierte Zentren lautet die Bilanzgleichung

$$N_d + p = N_a + n.$$

Hier stellt  $N_d$  die Dichte der positiv geladenen Donatorenrümpfe,  $N_a$  die Dichte der negativ geladenen Akzeptoren dar. In einem n-dotierten Material ist  $N_d \approx n \gg p$ . Zusammen mit dem Massenwirkungsgesetz folgt daraus

$$p \approx \frac{n_i^2}{N_d}.$$

Typische Zahlenwerte für n-Si sind  $n_i \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ,  $N_d \approx 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  und damit  $p \approx 10^5 \text{ cm}^{-3}$ .

## 7.4 Halbleiter-Bauelemente

Die Halbleiterelektronik benutzt gezielt die Effekte, die beim Übergang zwischen Gebieten

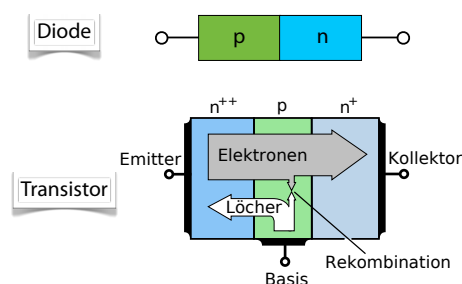


Abbildung 7.49: Aufbau einer Diode und eines Transistors.

unterschiedlicher Dotierungen auftreten. Eine Diode (Abb. 7.49 oben) besteht aus einem p/n Übergang, ein Transistor (Abb. 7.49 unten) aus einer Abfolge von p/n/p oder n/p/n-dotierten Bereichen. Als Halbleitermaterial verwendet man meist Silizium. Alternativen sind Germanium oder binäre Halbleiter aus Elementen der dritten und fünften Gruppe (III/V) Halbleiter, wie z.B. GaAs. Im Rahmen dieser Vorlesung beschränken wir uns auf Silizium, mit Hinweisen auf Germanium und GaAs. Die wichtigsten Parameter dieser Materialien sind in Tabelle 7.5 zusammengestellt.

### 7.4.1 n-p Übergang

Die wichtigsten Halbleiter-Bauelemente sind Dioden und Transistoren. Diese, wie auch praktisch alle anderen enthalten Grenzschichten zwischen einem n-(negativ) dotierten Teil und einem p-(positiv) dotierten Teil.

Abb. 7.50 zeigt eine solche Grenzschicht. In der linken Hälfte ist das Material n-dotiert, die Fermienergie liegt deshalb in der Nähe der Unterkante des Leitungsbandes. In der rechten Hälfte ist das Material p-dotiert und die Fermienergie liegt nahe an der Oberkante des Valenzbandes.

Bringt man die beiden Materialien in Kontakt, so gleichen sich die Fermienergien an. Im Bereich des Kontaktes verbiegen sich deshalb die Bänder. Diese Bandverbiegung kommt durch Diffusion der Ladungsträger zustande. Dadurch treffen Elektronen und Löcher aufeinander und rekombinieren. In der Nähe der Grenzschicht wird



	Ge	Si	GaAs	
Bandlücke	0,66	1,12	1,4	eV
Eigenleitungsichte $n_i$	$2,5 \cdot 10^{13}$	$1,5 \cdot 10^{10}$	$9,2 \cdot 10^6$	$\text{cm}^{-3}$
Elektronenbeweglichkeit $\mu_n$	3900	1350	8800	$\text{cm}^2/\text{Vs}$
Löcherbeweglichkeit $\mu_p$	1900	480	450	$\text{cm}^2/\text{Vs}$

Tabelle 7.5: Parameter für die wichtigsten Halbleitermaterialien

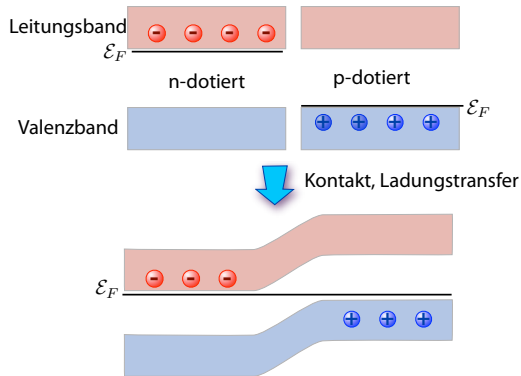


Abbildung 7.50: Übergang zwischen n-dotiertem und p-dotiertem Halbleiter ohne und mit elektrischem Kontakt.

deshalb die Dichte der Ladungsträger reduziert. Man bezeichnet diesen Bereich als Verarmungszone.

Da die ionisierten Atomrümpfe in der Verarmungszone zurückbleiben, entsteht im n-dotierten Bereich eine Zone positiver Raumladungen, auf der p-dotierten Seite ein Bereich negativer Raumladungen. Dies erzeugt ein elektrisches Feld in der Richtung vom n- zum p-dotierten Bereich. Die Stärke des Feldes ist bestimmt durch die Dichte der Raumladung,

$$\text{div} \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon}$$

oder, in einer Dimension,

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} = \frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon}$$

Die zugehörige Potenzialdifferenz entspricht dem Integral

$$\Phi(x) = - \int E_x(x) dx.$$

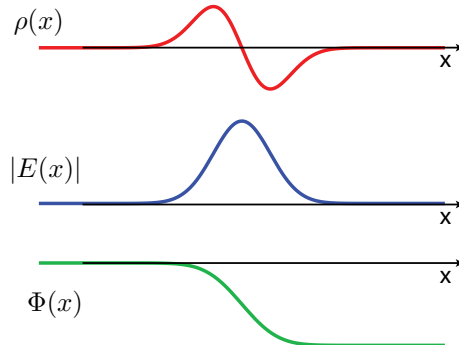


Abbildung 7.51: Ladungsdichte, elektrisches Feld und Potenzial im Bereich des Übergangs.

Dieses elektrische Feld, resp. das Potenzial, wirkt der Diffusion entgegen, so dass sich ein Gleichgewicht bildet. Die Breite der Verarmungszone liegt im Bereich von  $\mu\text{m}$  und ist abhängig vom Dotierungsprofil.

### 7.4.2 Diode

Ein Übergang zwischen zwei entgegengesetzt dotierten Bereichen bildet eine Halbleiterdiode. Wird an einen solchen Übergang eine Spannung angelegt, so hängt der Strom stark von der Richtung und der Stärke der Spannung ab. Wir betrachten zunächst den Fall, dass am p-Leiter eine negative Spannung angelegt wird und am n-Leiter eine positive. Dadurch werden die Ladungsträger im Halbleiter in Richtung auf die Elektroden verschoben. Die Sperrschicht wird dadurch breiter, die Raumladungszone wird größer und damit der Abstand zwischen den Energien der Bänder auf beiden Seiten.

Da sich in der Sperrschicht keine Ladungsträger befinden, fließt praktisch kein Strom durch die

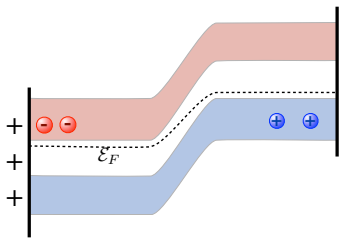


Abbildung 7.52: Sperrschicht bei Anlegen einer Spannung in Rückwärtsrichtung.

Sperrschicht. Da die Leitfähigkeit im Bereich der Sperrschicht weitaus niedriger ist, fällt hier der größte Teil der Spannung ab. Der Unterschied im Fermi-niveau zwischen den beiden Bereichen entspricht praktisch der angelegten Spannung.

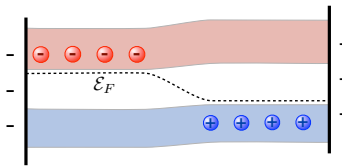


Abbildung 7.53: Sperrschicht bei Anlegen einer Spannung in Vorwärtsrichtung.

Wechselt man das Vorzeichen der Spannung, so werden auf der p-dotierten Seite zusätzliche Löcher, auf der n-dotierten Seite zusätzliche Elektronen eingebracht. Diese wandern in Richtung Sperrschicht, diese wird schmaler, die Raumladungszone wird reduziert und die Diffusionsspannung weitgehend kompensiert. Die Ladungsträger können die Sperrschicht durchqueren und rekombinieren, so dass hier ein Strom fließt. Man spricht deshalb vom "Durchlassbereich".

### 7.4.3 Diodenkennlinie

Die Beziehung zwischen Strom und Spannung einer Diode ist stark asymmetrisch. Im Sperrbereich fließt nur ein geringer Strom, der Sperrstrom  $I_S$ , der von den Minoritätsladungsträgern gebildet wird, d.h. den Elektronen im p-Bereich und den Löchern im p-dotierten Bereich. Für Ge-Dioden ist er in der Größenordnung von  $\mu\text{A}$ , für

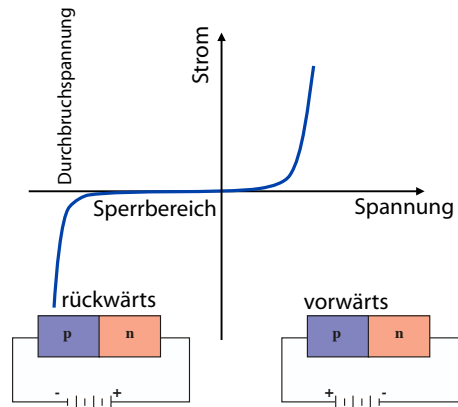


Abbildung 7.54: Strom-Spannungskennlinie einer typischen Diode.

Si-Dioden in der Größenordnung von  $\text{nA}$ . Da mit zunehmender Temperatur die Zahl der Minoritätsladungsträger zunimmt, steigt die Leitfähigkeit mit der Temperatur. Eine Temperaturerhöhung um  $10^\circ\text{C}$  verdoppelt etwa den Sperrstrom  $I_S$ .

Wenn die Spannung (in Sperrrichtung) die Durchbruchspannung  $U_{Br}$  übersteigt, so steigt der Strom sehr schnell an. In diesem Bereich reicht die kinetische Energie der Ladungsträger, um über Stoßionisation weitere Ladungsträger zu erzeugen. Wird der Strom in diesem Bereich nicht beschränkt, kann dies zur Zerstörung der Diode führen.

Im Durchlassbereich, d.h. in Vorwärtsrichtung, werden Ladungsträger in die Verarmungszone eingebracht, diese wird dünner. In diesem Bereich kann der Strom beschrieben werden durch die Funktion

$$I = I_s(e^{U/U_T} - 1),$$

wobei  $U_T$  die Temperaturspannung  $k_B T/e \approx 26\text{ mV}$  darstellt. Bei großen Spannungen,  $U \gg U_T$  weicht die Kennlinie von der Exponentialfunktion ab und nähert sich einer Geraden, da hier der endliche Bahnwiderstand der Diode wichtig wird.

#### 7.4.4 Thermoelektrische Effekte

Elektronen und Löcher, die in Halbleitern Ladung transportieren, besitzen eine Energie, die wesentlich über der Fermienergie liegt. Sie transportieren deshalb immer auch thermische Energie, wie bereits in Kap. 5.5.4 diskutiert. Der Energiefluss beträgt für Elektronen in einem elektrischen Feld  $E$

$$j_U = n(\mathcal{E}_c - \mu + \frac{3}{2}k_B T)(-\mu_e)E,$$

wobei  $\mu_e$  die Beweglichkeit der Elektronen darstellt. Der Energietransport ist verbunden mit dem Ladungstransport über den Peltier-Koeffizienten

$$\Pi_e = -\frac{\mathcal{E}_c - \mu + \frac{3}{2}k_B T}{e}.$$

Dieser ist für Elektronen negativ, da die thermische Energie in die umgekehrte Richtung transportiert wird wie die elektrische Ladung. Für Löcher gilt eine analoge Beziehung, doch ist dort der Koeffizient positiv.

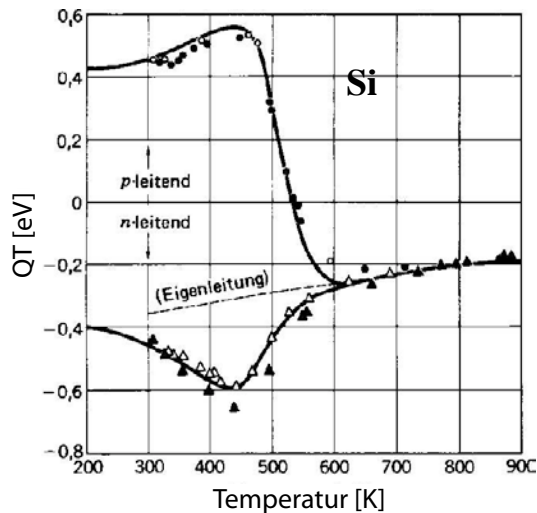


Abbildung 7.55: Peltier-Koeffizient von Si als Funktion der Temperatur.

Der Transport von thermischer Energie in einem elektrischen Feld führt zum Aufbau einer Temperaturdifferenz, weshalb Peltier-Elemente zum

Heizen oder Kühlen verwendet werden. Umgekehrt erzeugt ein Temperaturgradient  $\nabla T$  eine Spannung  $E = Q\nabla T$ , wobei die thermoelektrische Kraft  $Q$  direkt mit dem Peltier-Koeffizienten gekoppelt ist:  $\Pi = QT$ .