

Leibniz
Universität
Hannover

Bandstruktur von Halbleitern

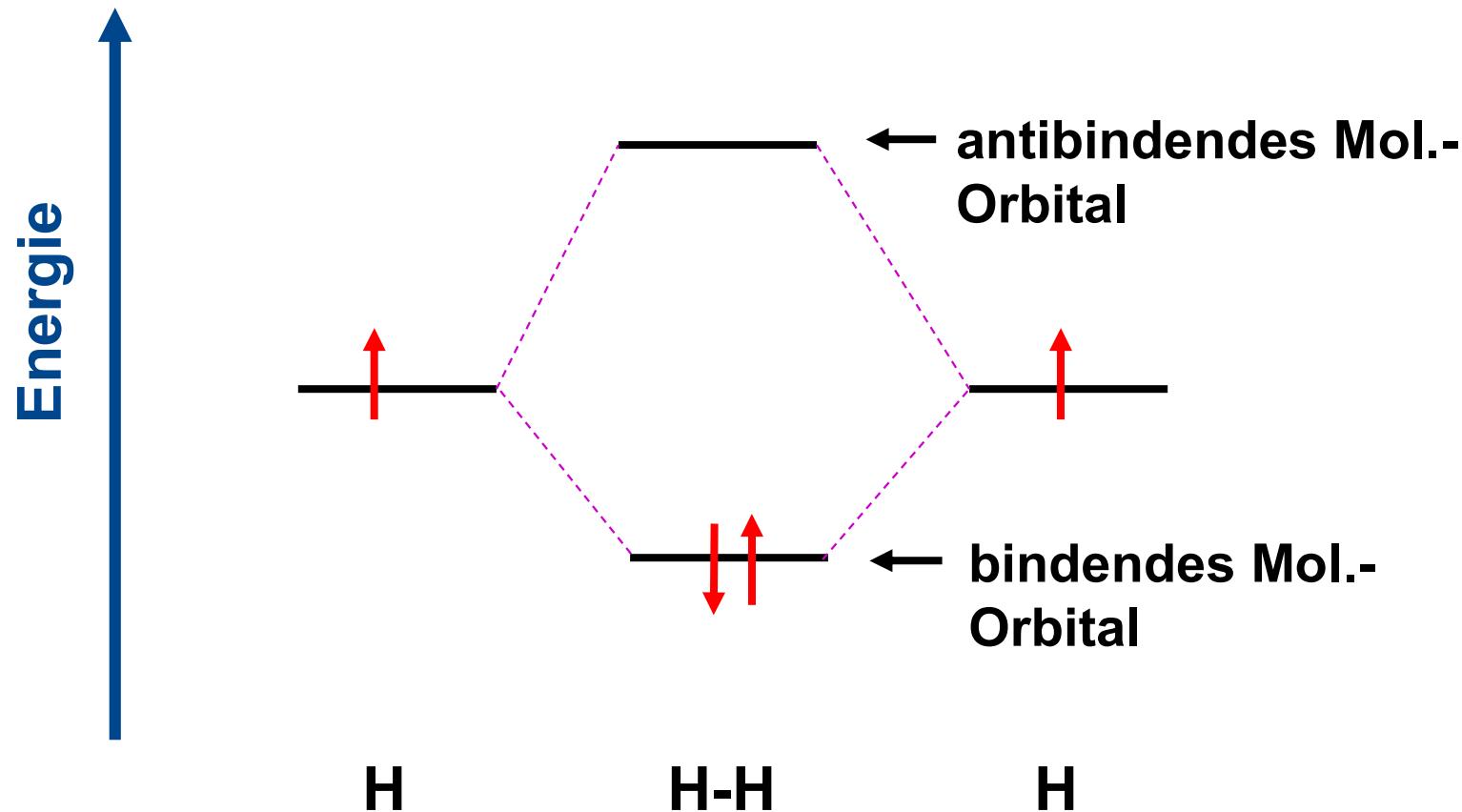
H. Jörg Osten

Institut für Materialien und Bauelemente
der Elektronik
- MBE -

Leibniz Universität Hannover
Schneiderberg 32, 30167 Hannover

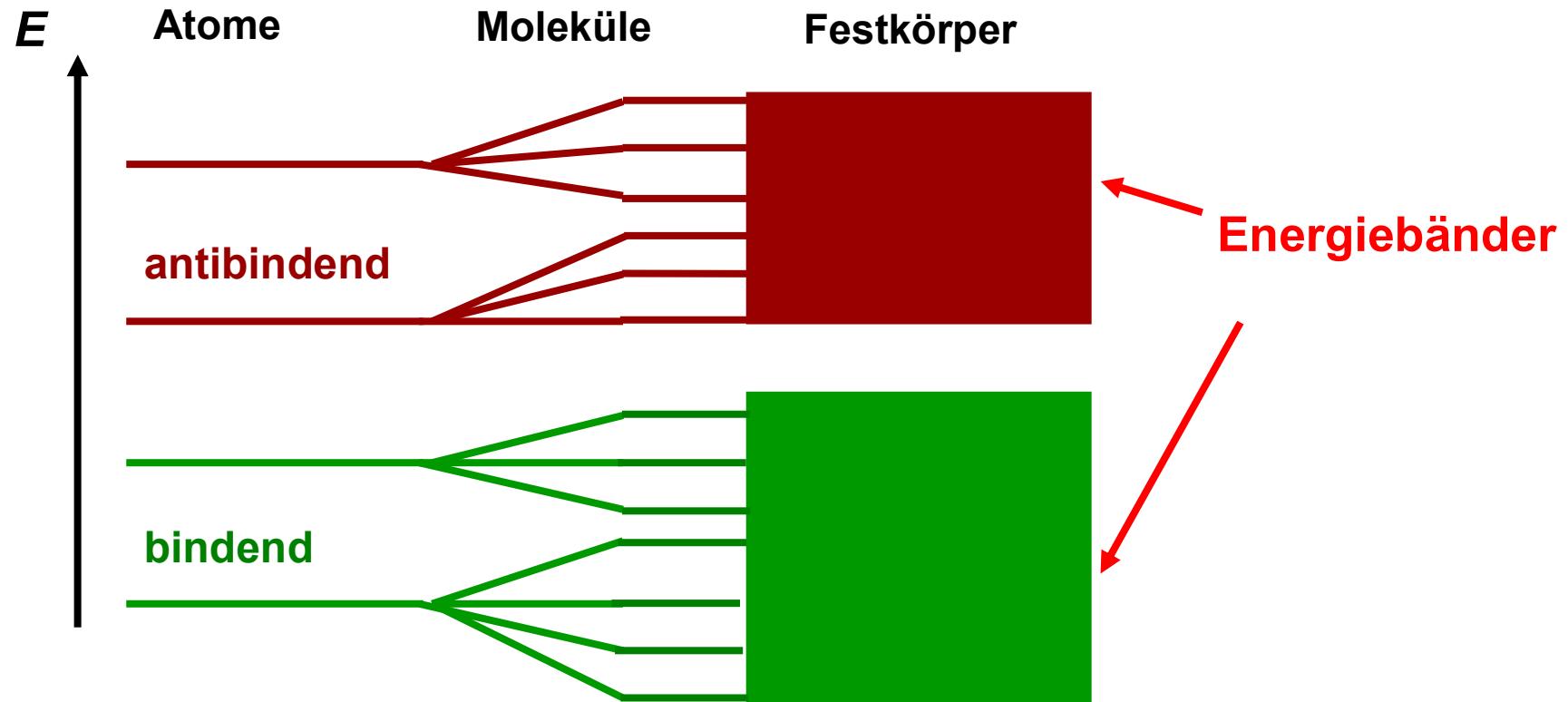
nur für den LUH-internen Gebrauch

Molekül-Orbital-Schema von H₂



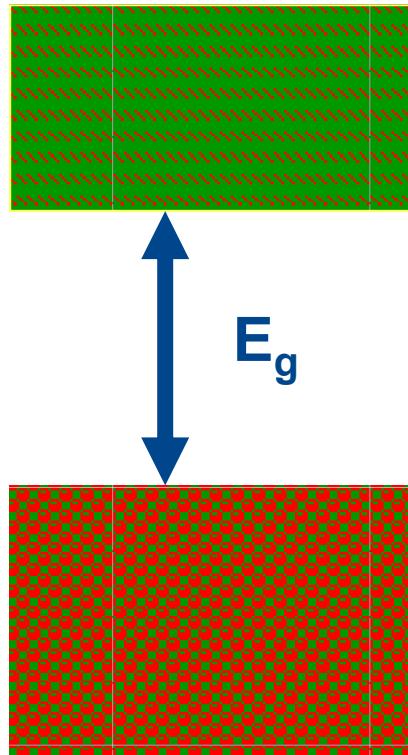
Das Bändermodell

Aufspaltung der Einzelatomorbitale in 10^{23} Orbitale im Festkörper



Jedes Orbital kann mit zwei Elektronen besetzt werden (Spin)

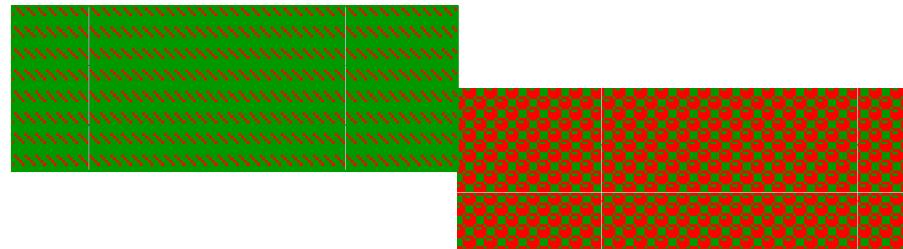
Das Bändermodell (allgemein)



Leitungsband: Freie Elektronen
(nicht mehr an ein bestimmtes Atom
gebunden = Stromleitung möglich)

Verbotene Zone (Bandlücke):
Energiebereich, ohne erlaubte
Energieniveaus für Elektronen

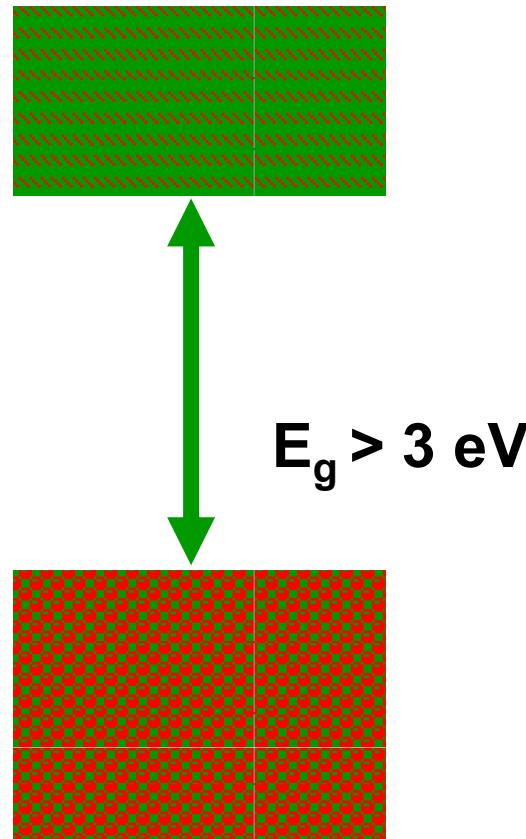
Valenzband: Energiebereich, in dem
sich die äußeren Bindungselektronen
des Atoms befinden
(nicht für Stromleitung verfügbar)



Metalle

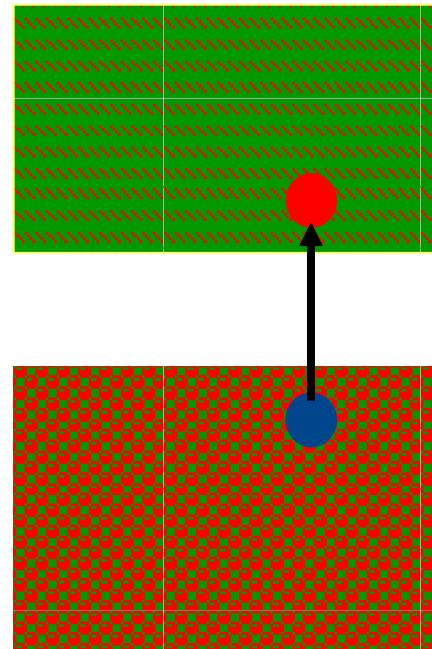
→ keine verbotene Zone (Bandlücke = 0)

Isolatoren



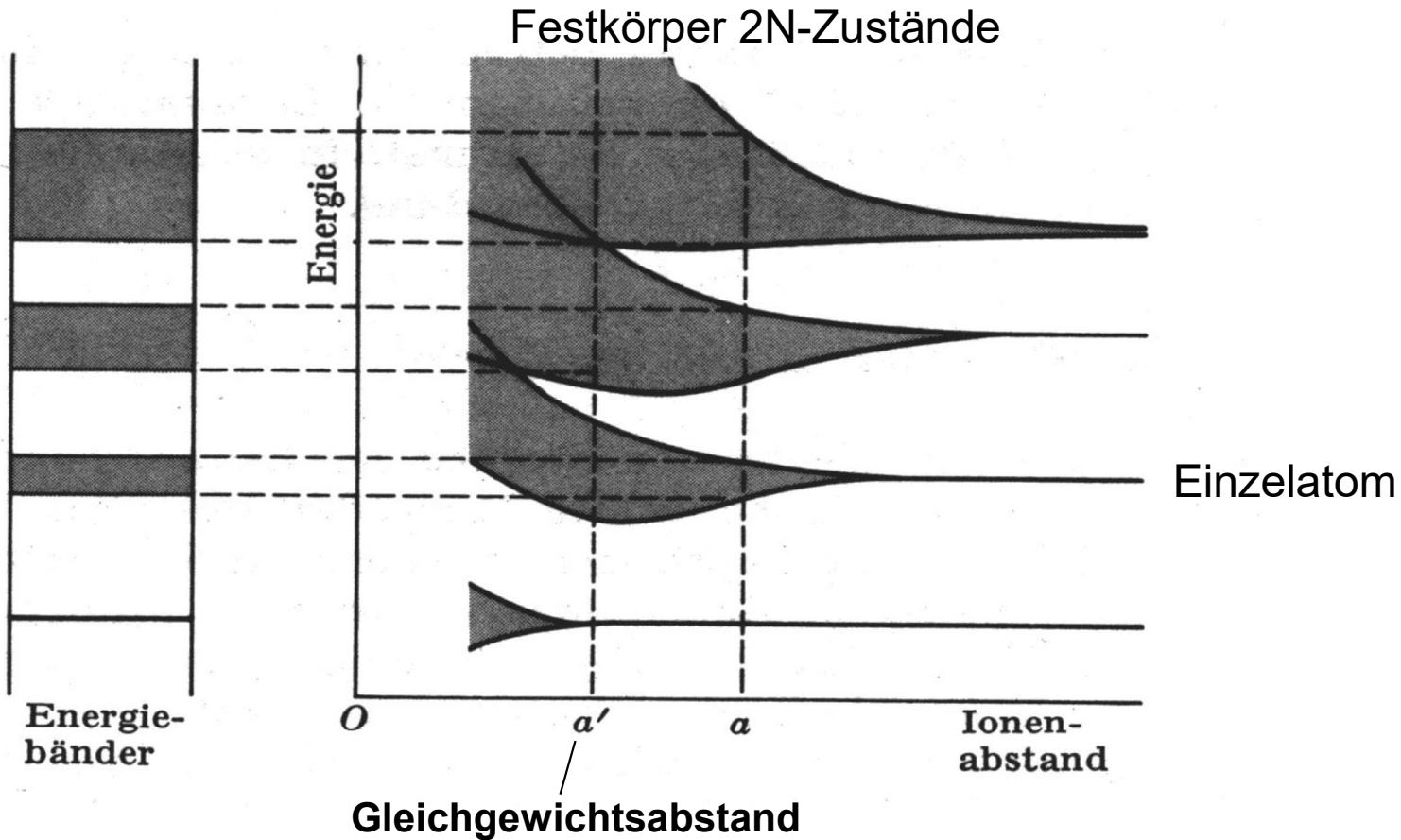
Halbleiter

$E_g < 3 \text{ eV}$



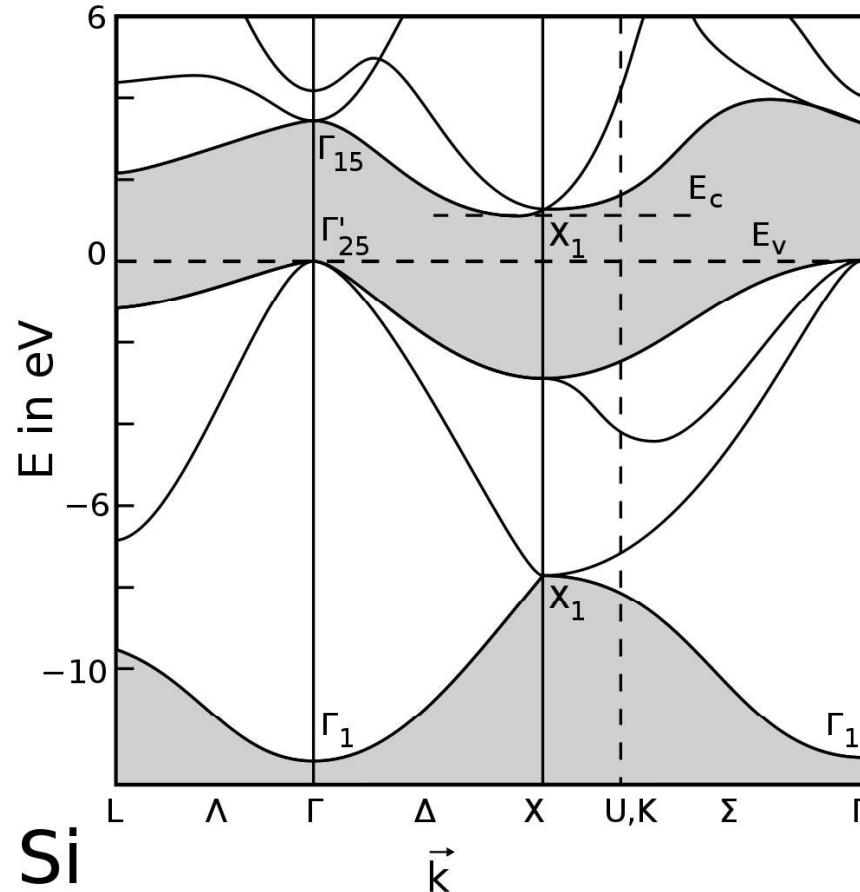
Freies Elektron

Loch
(Defektelektron)



→ Bildung von Energiebändern im Festkörper

Bandstruktur von Silizium



Üblich:
Darstellung im
Impulsraum $E(k)$

nicht besetzte Zustände sind grau eingefärbt

Der Impuls

- Die physikalische Größe, die im Deutschen traditionell mit Impuls bezeichnet wird (in anderen Sprachen *Momentum*), beschreibt die Bewegung der Masse, die ein Körper enthält

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$$

- So wie die Geschwindigkeit dieser Bewegung ist der Impuls eine Vektorgröße, hat also neben einem Betrag auch eine Richtung (die der Bewegung selbst).

$$\vec{p} = m \cdot \vec{V}$$

Teilchen:

$$E_{kin} = \frac{m}{2} V^2 \quad p = mV$$

↓

$$\Rightarrow E_{kin} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{2mE_{kin}}$$

De Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}}$$

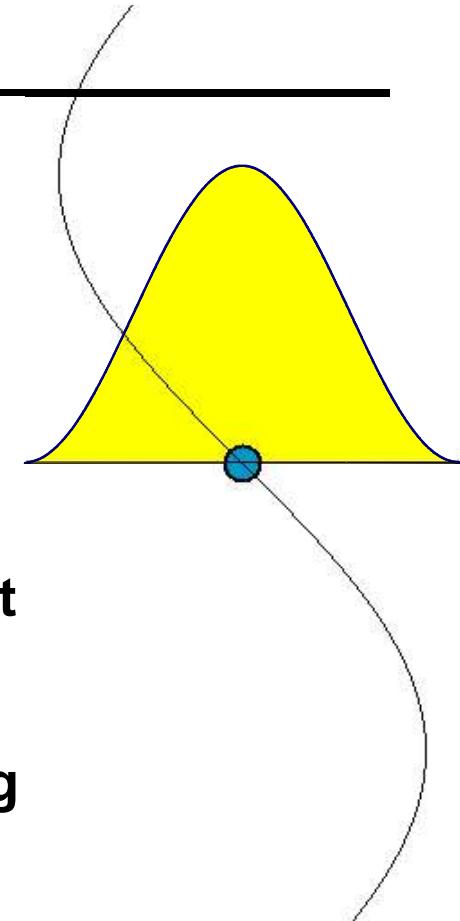
Die Wellenlänge λ von Materiewellen freier Teilchen ist durch den Impuls bestimmt.

Eine Welle

Beschrieben durch:

$$\Psi(x, t)$$

→ Wellenfunktion



$$|\Psi(x, t)|^2 \text{ Aufenthaltswahrscheinlichkeit}$$

Einfachste 1-dimensionale Beschreibung

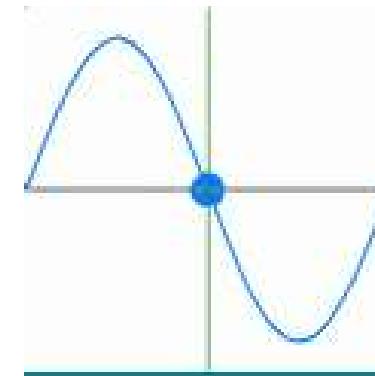
$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = 0$$

→ Wellengleichung

- Eine Welle ist eine räumliche und zeitliche Zustandsänderung physikalischer Größen, die nach bestimmten periodischen Gesetzmäßigkeiten erfolgt
Erfolgt die periodische Änderung der physikalischen Größe harmonisch, so spricht man von harmonischen Wellen

- Beschreibung einer Harmonischen Welle:

$$\Psi(x, t) = A \sin(kx - \omega t)$$



A - Amplitude

k - Wellenzahl (beschreibt die Ausbreitungsrichtung)

ω - Frequenz

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = 0$$

Lösung mit den Anfangsbedingungen:

$$\Psi(x, t) = 0 \text{ für } x = 0 \text{ und } t = 0$$

$$\boxed{\Psi(x, t) = A \sin(kx - \omega t)}$$

A - Amplitude

k - Wellenzahl (beschreibt die Ausbreitungsrichtung)

ω - Frequenz

Mehrere Wellen

- Einfachste Beschreibung einer Welle

$$\Psi(x, t) = A \sin(kx - \omega t)$$

- Wellen mit gleicher Wellenlänge aber mit einem Wegunterschied x:

→ der Wegunterschied führt zu einer Phasenverschiebung $\Delta\Phi$

$$\Psi(x, t) = A \sin(kx - \omega t + \Delta\Phi)$$

Achtung

- Für eine vollständige quantenmechanische Beschreibung (insbesondere für die Interpretation der Aufenthaltswrscheinlichkeit als Betrags-Quadrat der Wellen-Amplitude $|\Psi|^2$) muss berücksichtigt werden, dass die quantenmechanische Wellenfunktion Ψ eine komplexe Funktion ist:

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= A (\sin[kx - \omega t + \Phi] + i \cos[kx - \omega t + \Phi]) \\ &= A e^{i(kx - \omega t + \Phi)}\end{aligned}$$

- Die folgende qualitative Beschreibung von Elektronen im Festkörper dient nur dazu, einen rein anschaulichen Zugang zu den Ergebnissen der quantenmechanischen Behandlung zu schaffen.

- **Die Amplitude**

ist die maximale mögliche Auslenkung der Welle

Sie ist bei Wellen – im Gegensatz zu Schwingungen – eine vektorielle Größe, da neben der Stärke der Auslenkung auch deren Richtung entscheidend ist.

Ist die Ausbreitungsrichtung parallel zur Amplitude, handelt es sich um eine Longitudinalwelle, ist sie senkrecht, um eine Transversalwelle.

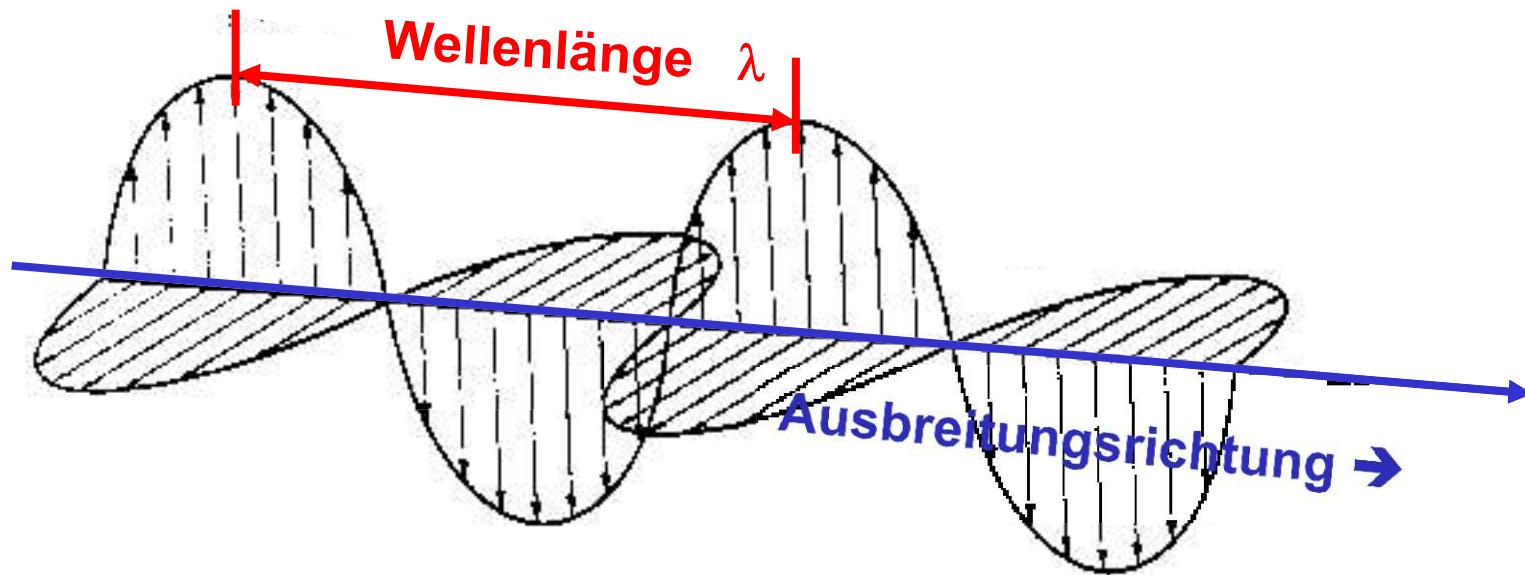
- **Phase**

Die Phase einer Welle gibt an, in welchem Abschnitt innerhalb einer Periode sich die Welle zu einem Referenzzeitpunkt und -ort befindet.

Im Beispiel einer ebenen Welle ist die Phase zum Zeitpunkt t am Ort x :

$$\Phi = kx - \omega t$$

→ Die Phase hängt damit von den zwei Parametern Wellenvektor k und Kreisfrequenz ω ab.



Wellenzahl und Wellenvektor

- Der Wellenvektor gibt die Ausbreitungsrichtung einer Welle an.

Häufige Bezeichnung \vec{k}

- Der Betrag des Wellenvektors ist die Wellenzahl k

$$|\vec{k}| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

wobei λ die Wellenlänge ist.

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Definition: $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

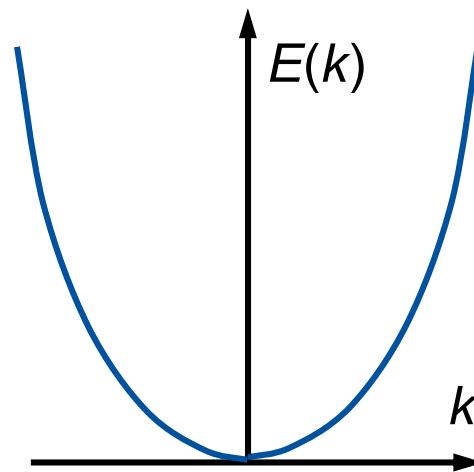
$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

- **Klassisches Freies Teilchen:** $E_{kin} = \frac{m}{2}V^2$ $p = mV$
- **Energie/Impuls-Beziehung:** $E_{kin} = \frac{p^2}{2m}$
- **Berücksichtigen wir noch die Quantenmechanik**

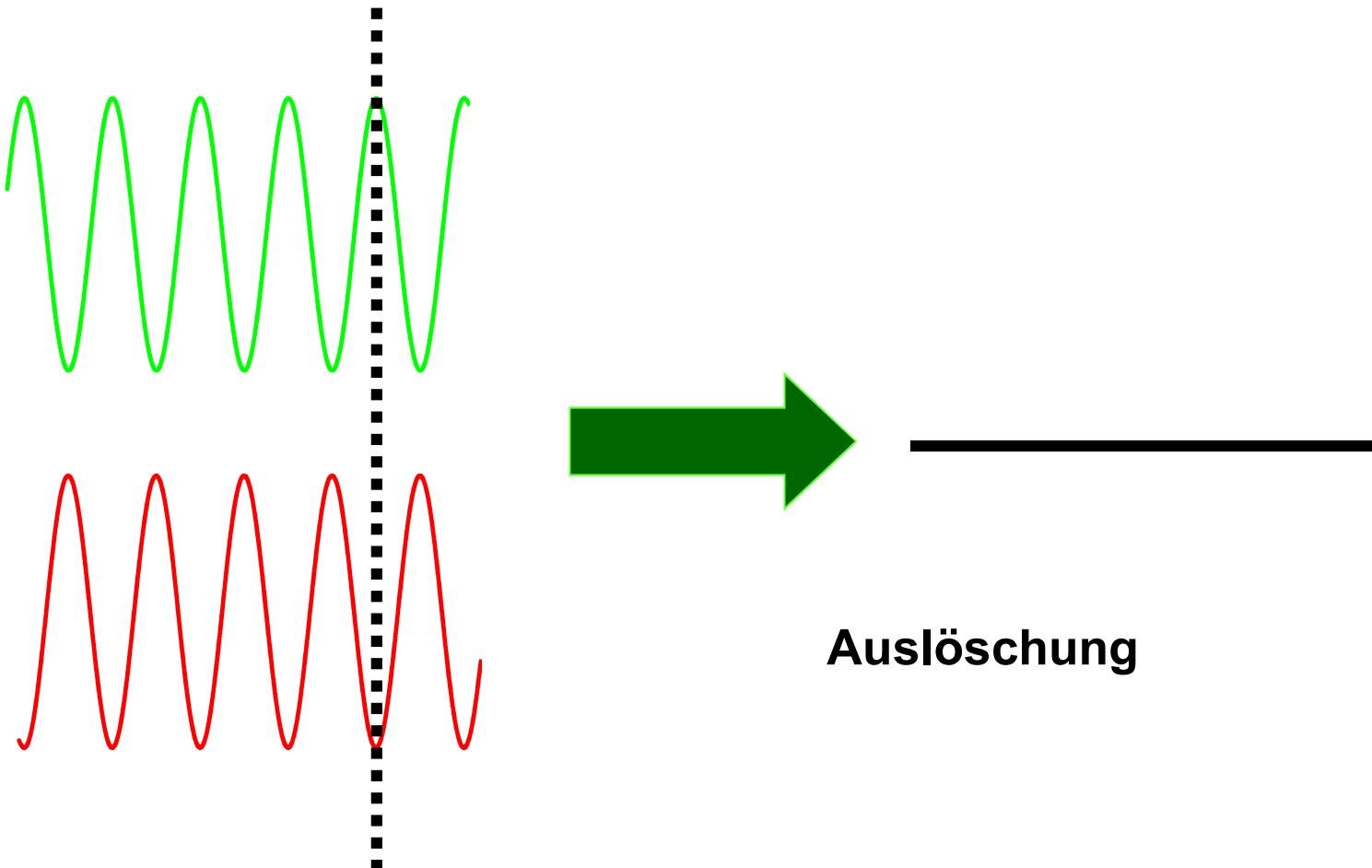
$$p = \hbar k$$

→ **Dispersionsrelation $E(k)$:**

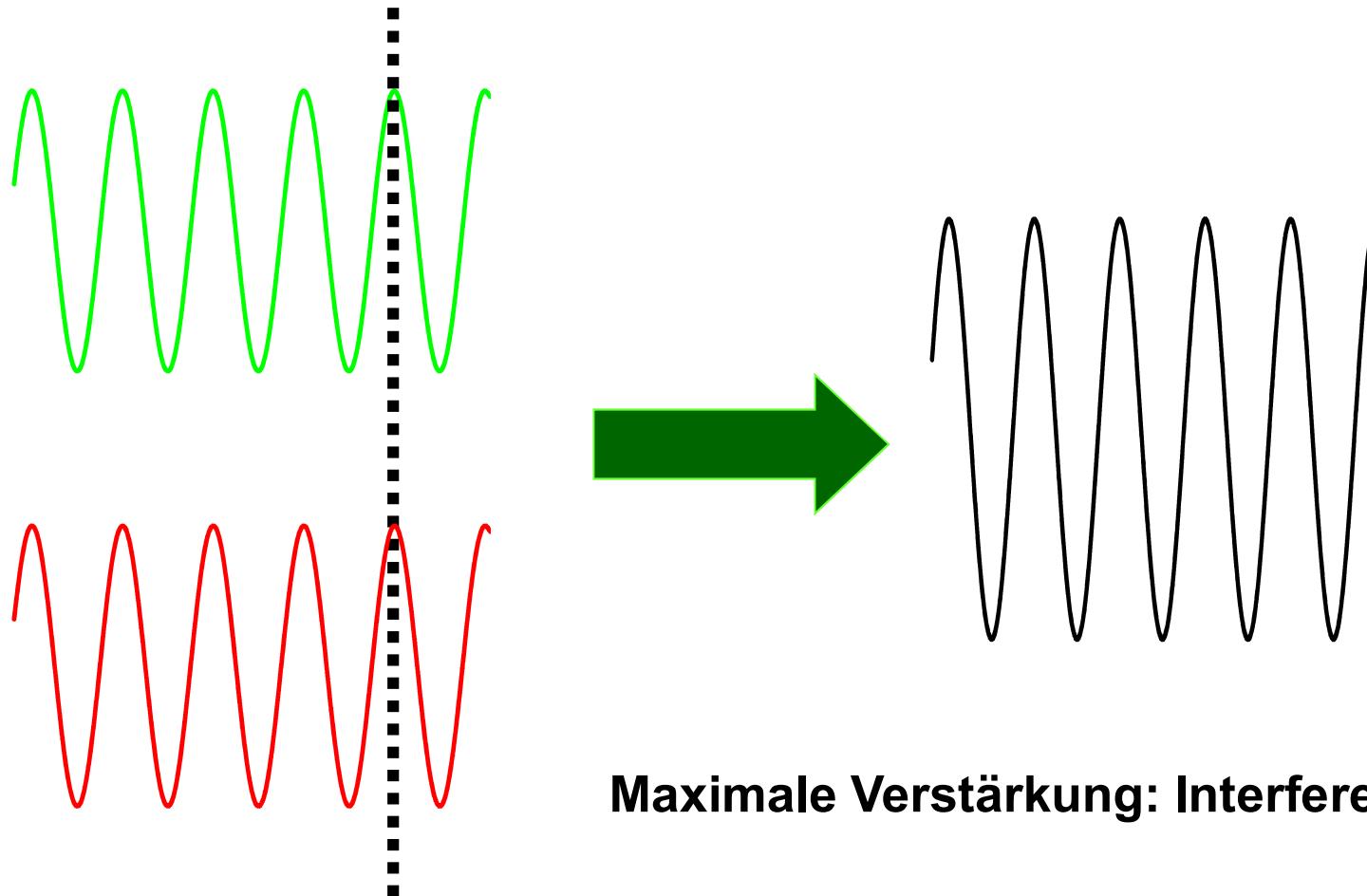
$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



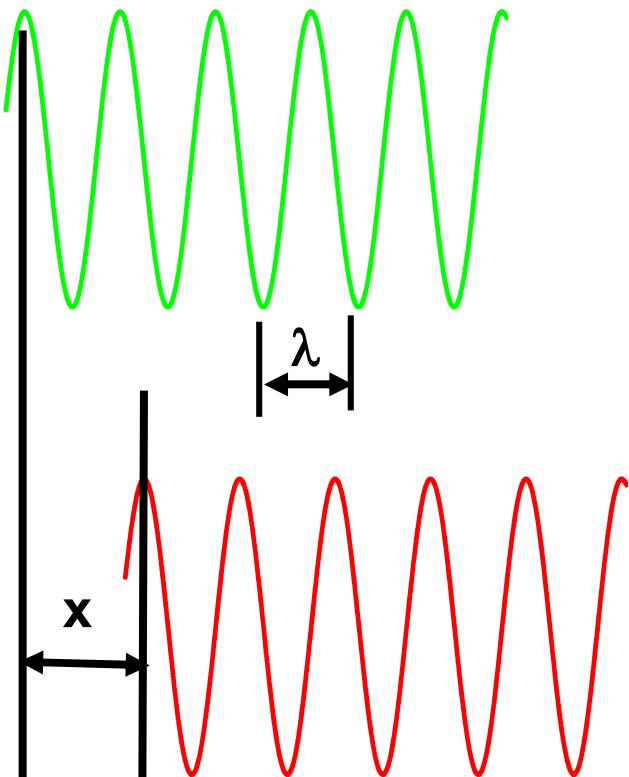
Überlagerung zweier Wellen



Überlagerung zweier Wellen



Maximale Verstärkung: Interferenz



Interferenz: $x = 0, \lambda, 2\lambda, 3\lambda\dots$

$$\rightarrow X = n \lambda$$

Auslöschung: $x = \lambda/2, 3\lambda/2, 5\lambda/2\dots$

$$\rightarrow X = (2n + 1)/2 \lambda$$

Annahme: gleiche Wellenlängen

Überlagerung von zwei Wellen

Interferenz: $x = 0, \lambda, 2\lambda, 3\lambda\dots$

$$\rightarrow X = n \lambda$$

Auslöschung: $x = \lambda/2, 3\lambda/2, 5\lambda/2\dots$

$$\rightarrow X = (2n + 1)/2 \lambda$$

$$\Psi(x, t) = A \sin(kx - \omega t + \Delta\Phi)$$

Interferenz: $\Delta\Phi = 0, 2\pi, 4\pi, 6\pi\dots$

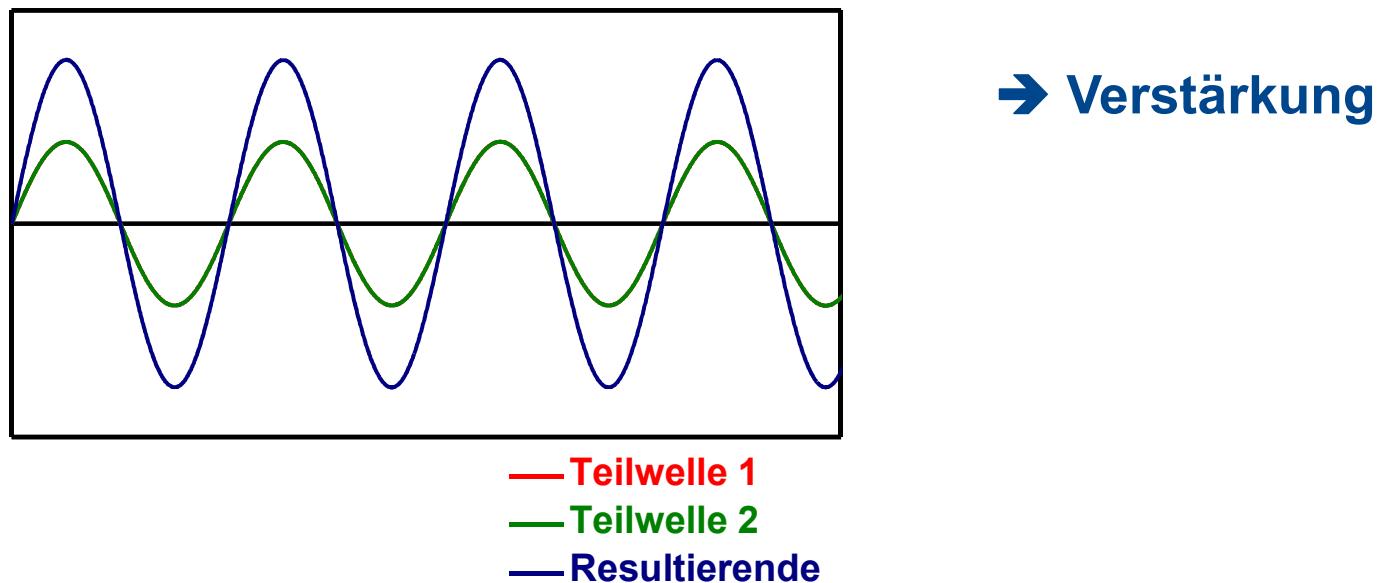
Auslöschung: $\Delta\Phi = \pi, 3\pi, 5\pi\dots$

Beispiele

Wellenfunktion Ψ mit Wellenlänge λ als Überlagerung aus zwei Teil-Wellen an festem Zeitpunkt $t = 0$:

$$\Psi(x,t) = \sin(2\pi x / \lambda - \omega t) + \sin(2\pi x / \lambda - \omega t + \Delta\Phi)$$

Phasenunterschied der Teil-Wellen: $\Delta\Phi = 0$

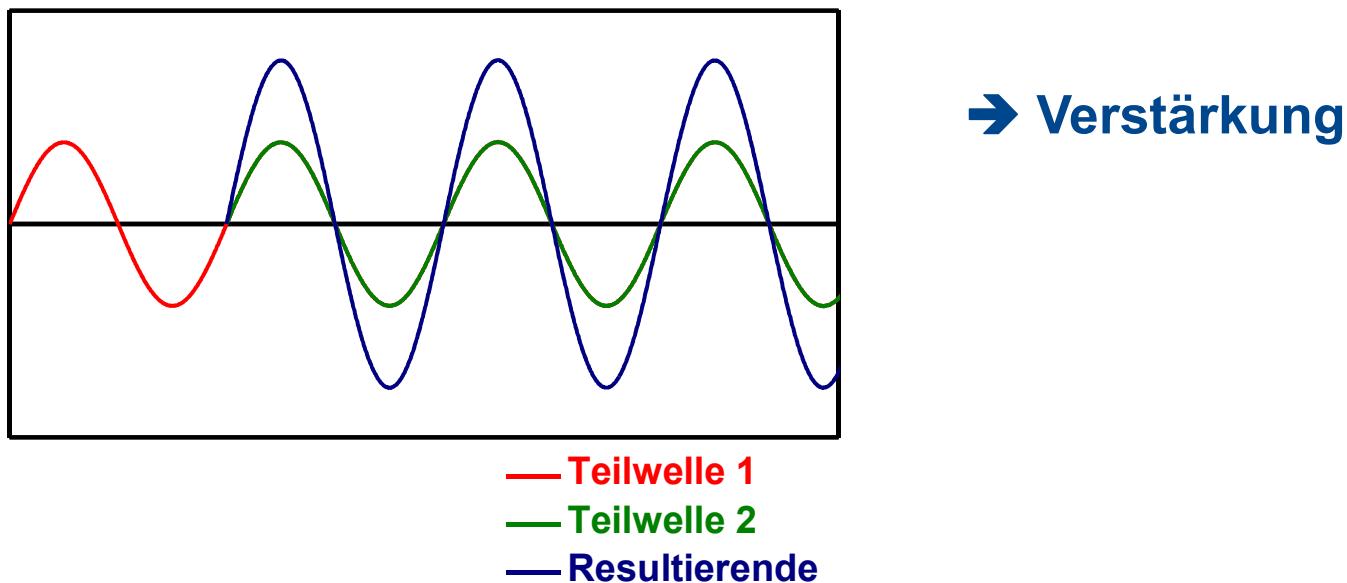


Beispiele

Wellenfunktion Ψ mit Wellenlänge λ als Überlagerung aus zwei Teil-Wellen an festem Zeitpunkt $t = 0$:

$$\Psi(x,t) = \sin(2\pi x / \lambda - \omega t) + \sin(2\pi x / \lambda - \omega t + \Delta\Phi)$$

Phasenunterschied der Teil-Wellen $\Delta\Phi = 2\pi$ ($\simeq \lambda$)

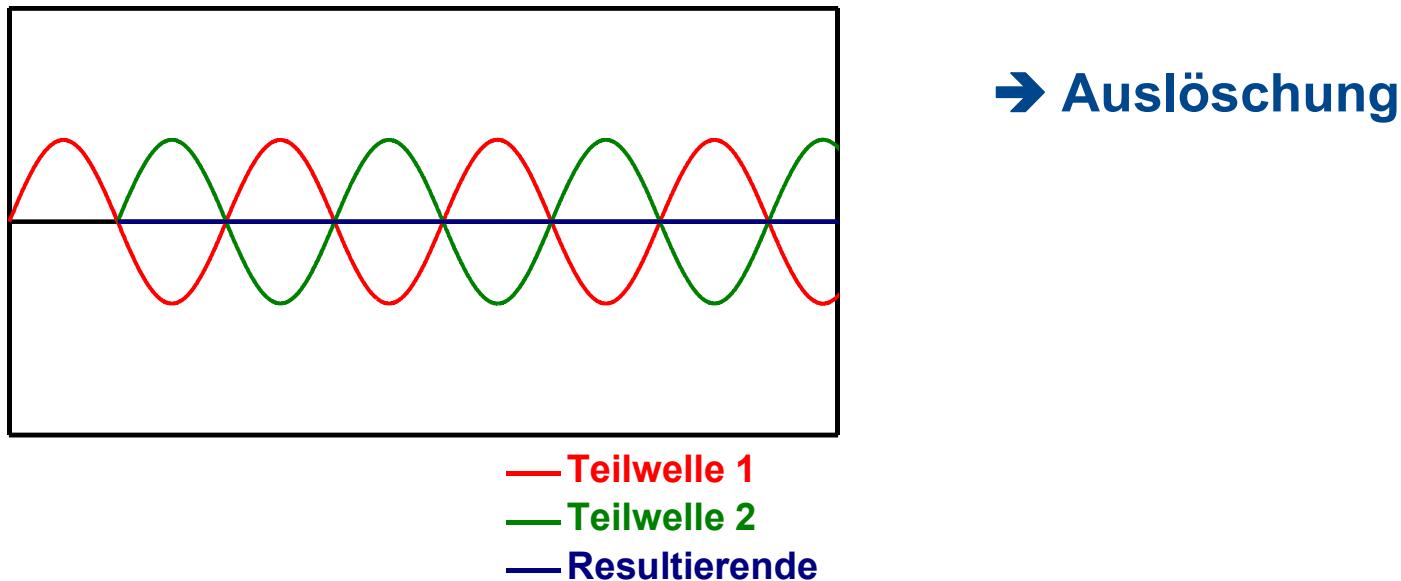


Beispiele

Wellenfunktion Ψ mit Wellenlänge λ als Überlagerung aus zwei Teil-Wellen an festem Zeitpunkt $t = 0$:

$$\Psi(x,t) = \sin(2\pi x / \lambda - \omega t) + \sin(2\pi x / \lambda - \omega t + \Delta\Phi)$$

Phasenunterschied der Teil-Wellen $\Delta\Phi = \pi$ ($\simeq \lambda / 2$)

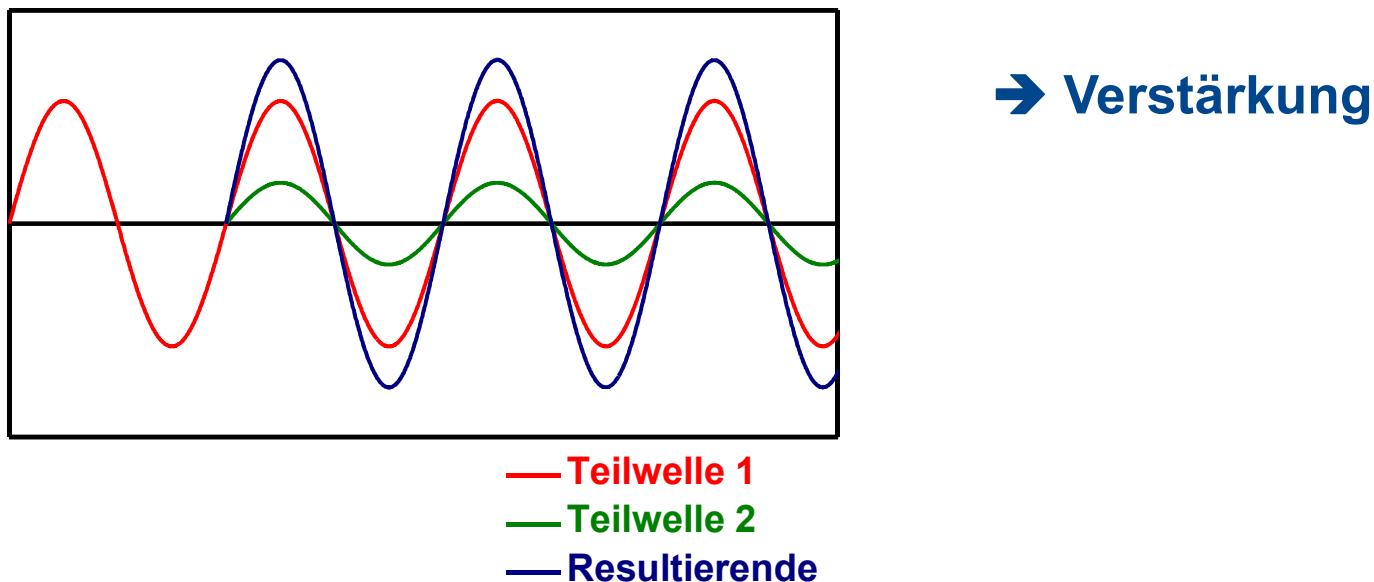


Beispiele

Wellenfunktion Ψ mit Wellenlänge λ als Überlagerung aus zwei Teil-Wellen an festem Zeitpunkt $t = 0$ mit unterschiedlicher Amplituden (z.B.: $A_1 = 3 A_2$):

$$\Psi(x,t) = A_1 \sin(2\pi x / \lambda - \omega t) + A_2 \sin(2\pi x / \lambda - \omega t + \Delta\Phi)$$

Phasenunterschied der Teil-Wellen $\Delta\Phi = 2\pi$ ($\cong \lambda$)

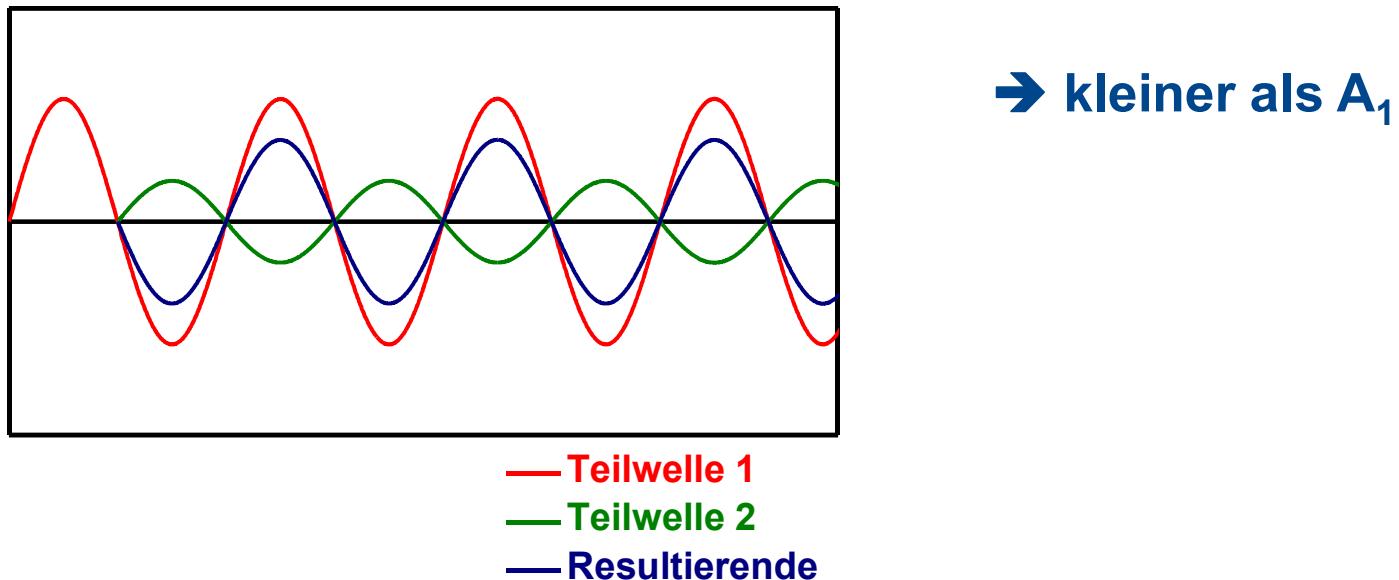


Beispiele

Wellenfunktion Ψ mit Wellenlänge λ als Überlagerung aus zwei Teil-Wellen an festem Zeitpunkt $t = 0$ mit unterschiedlicher Amplituden (z.B.: $A_1 = 3 A_2$):

$$\Psi(x, t) = A_1 \sin(2\pi x / \lambda - \omega t) + A_2 \sin(2\pi x / \lambda - \omega t + \Delta\Phi)$$

Phasenunterschied der Teil-Wellen $\Delta\Phi = \pi$ ($\cong \lambda / 2$)



Beispiele

Wellenfunktion Ψ mit Wellenlänge λ als Überlagerung aus zwei Teil-Wellen an festem Zeitpunkt $t = 0$ mit unterschiedlicher Amplituden (z.B.: $A_1 = 3 A_2$):

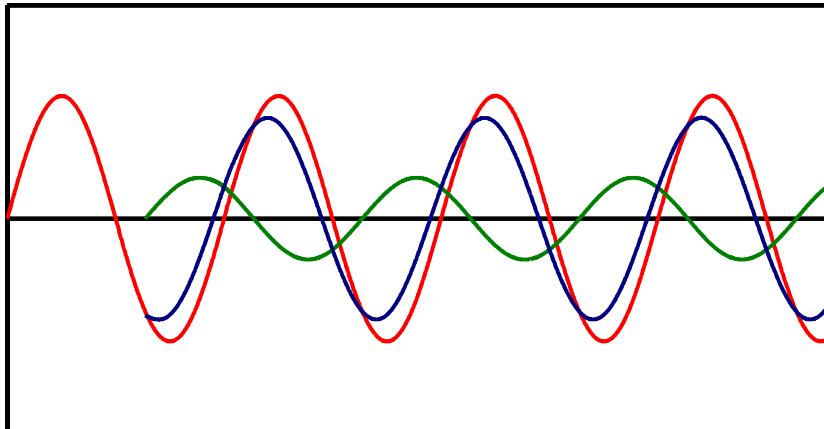
$$\Psi(x, t) = A_1 \sin(2\pi x / \lambda - \omega t) + A_2 \sin(2\pi x / \lambda - \omega t + \Delta\Phi)$$

Beliebiger Phasenunterschied, z.B.

$$\Delta\Phi = \frac{2}{3} \lambda$$

→ $A_R \leq A_1 + A_2$

→ Sinusfunktion



- Teilwelle 1
- Teilwelle 2
- Resultierende

Beispiele

Wellenfunktion Ψ eines Elektrons mit Wellenlänge λ als Überlagerung aus zwei Teil-Wellen an festem Zeitpunkt $t = 0$ mit unterschiedlicher Amplituden:

$$\Psi(x, t) = A_1 \sin(2\pi x / \lambda - \omega t) + A_2 \sin(2\pi x / \lambda - \omega t + \Delta\Phi)$$

→ Jede Wellenüberlagerung aus Wellen gleicher Wellenlänge ergibt wieder eine Wellenform mit derselben Wellenlänge

Stehende Welle

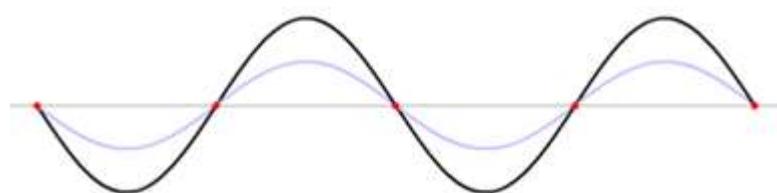
- Wellenfunktion Ψ eines Elektrons als Überlagerung aus zwei entgegengesetzt laufenden Teil-Wellen gleicher Amplitude und gleicher Wellenlänge:

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= A \sin(2\pi x / \lambda - \omega t) + A \sin(-2\pi x / \lambda - \omega t + \Delta\Phi) \\ &= 2 A \cos(-2\pi x / \lambda + \Delta\Phi/2) \sin(-\omega t + \Delta\Phi/2)\end{aligned}$$

→ stehende Welle!

- Entgegengesetzt laufende Wellen gleicher Wellenlänge und gleicher Amplitude erzeugen bei Überlagerung eine „stehende Welle“:

→ Feste Positionen



für „Maximal-Ausschläge“ und
für „Null-Stellen“

Stehende Welle

- Wellenfunktion Ψ eines Elektrons als Überlagerung aus zwei entgegengesetzt laufenden Teil-Wellen gleicher Amplitude und gleicher Wellenlänge:

$$\Psi(x,t) = A \sin(2\pi x / \lambda - \omega t) + A \sin(-2\pi x / \lambda - \omega t + \Delta\Phi)$$

$$\Psi(x,t) = 2A \cos(-2\pi x / \lambda + \Delta\Phi / 2) \sin(-\omega t + \Delta\Phi / 2)$$

→ stehende Welle!

- Entgegengesetzt laufende Wellen gleicher Wellenlänge und gleicher Amplitude erzeugen bei Überlagerung eine „stehende Welle“:

→ Feste Positionen für „Maximal-Ausschläge“ und für „Null-Stellen“

Eine stehende Welle (im engeren Sinne) entsteht aus der Überlagerung zweier gegenläufiger fortschreitender Wellen gleicher Frequenz und gleicher Amplitude.

Stehende Wellen in einer Box

- Bei jeder Reflexion an einer Wand findet ein Phasensprung um $\pi/2$ statt
- Existieren zwei Wände, so müssen exakt eine ganze Anzahl von Halbwellen in die Box passen
- Es sei L die Länge der BOX, dann gilt:

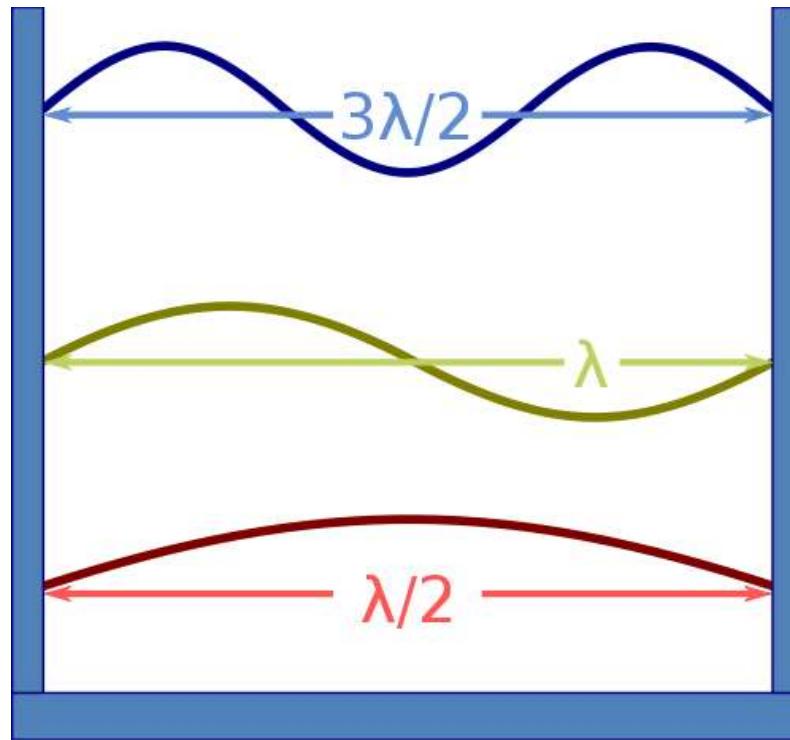
$$L = n \frac{\lambda}{2}$$

- Es ergeben sich erlaubte „Eigenschwindungen“:

$$\lambda_n = \frac{2 \cdot L}{n} \quad \text{mit } n = 1, 2, 3, \dots$$

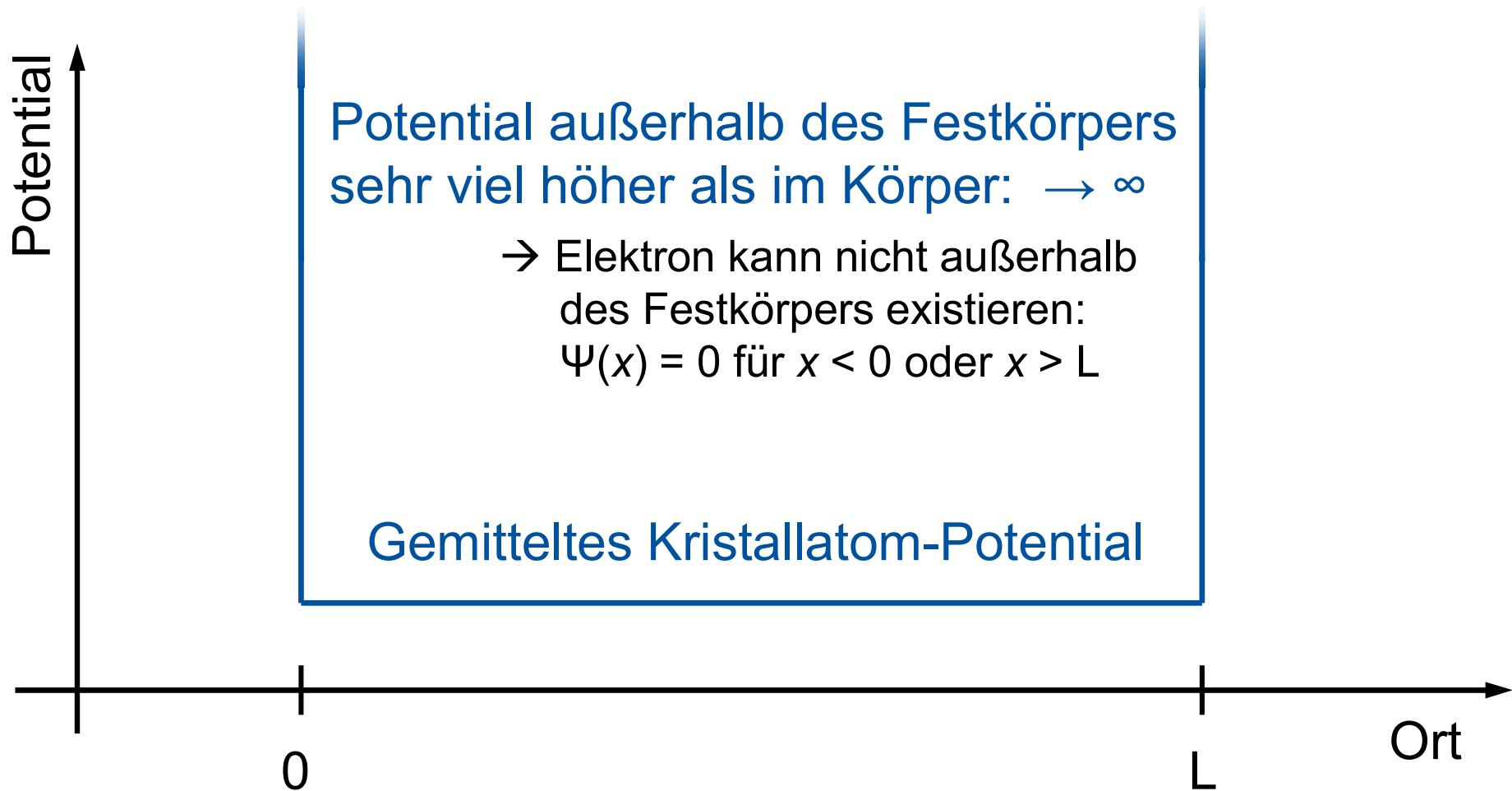
$$k_n = n \frac{\pi}{L}$$

Beispiel für stehende Wellen in einer Box: Saite

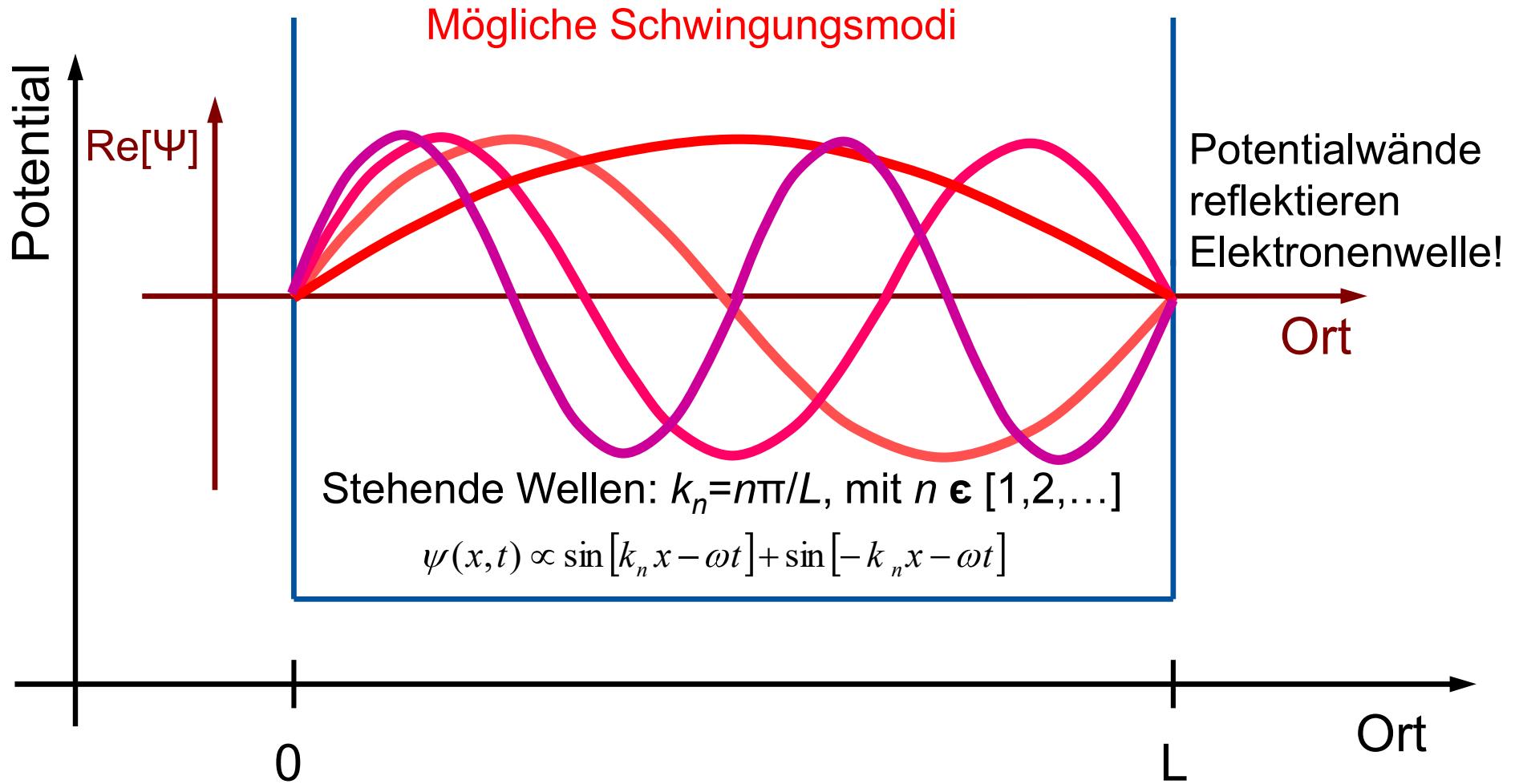


Die drei größten Wellenlängen, die bei einer fest eingespannten Saite entstehen

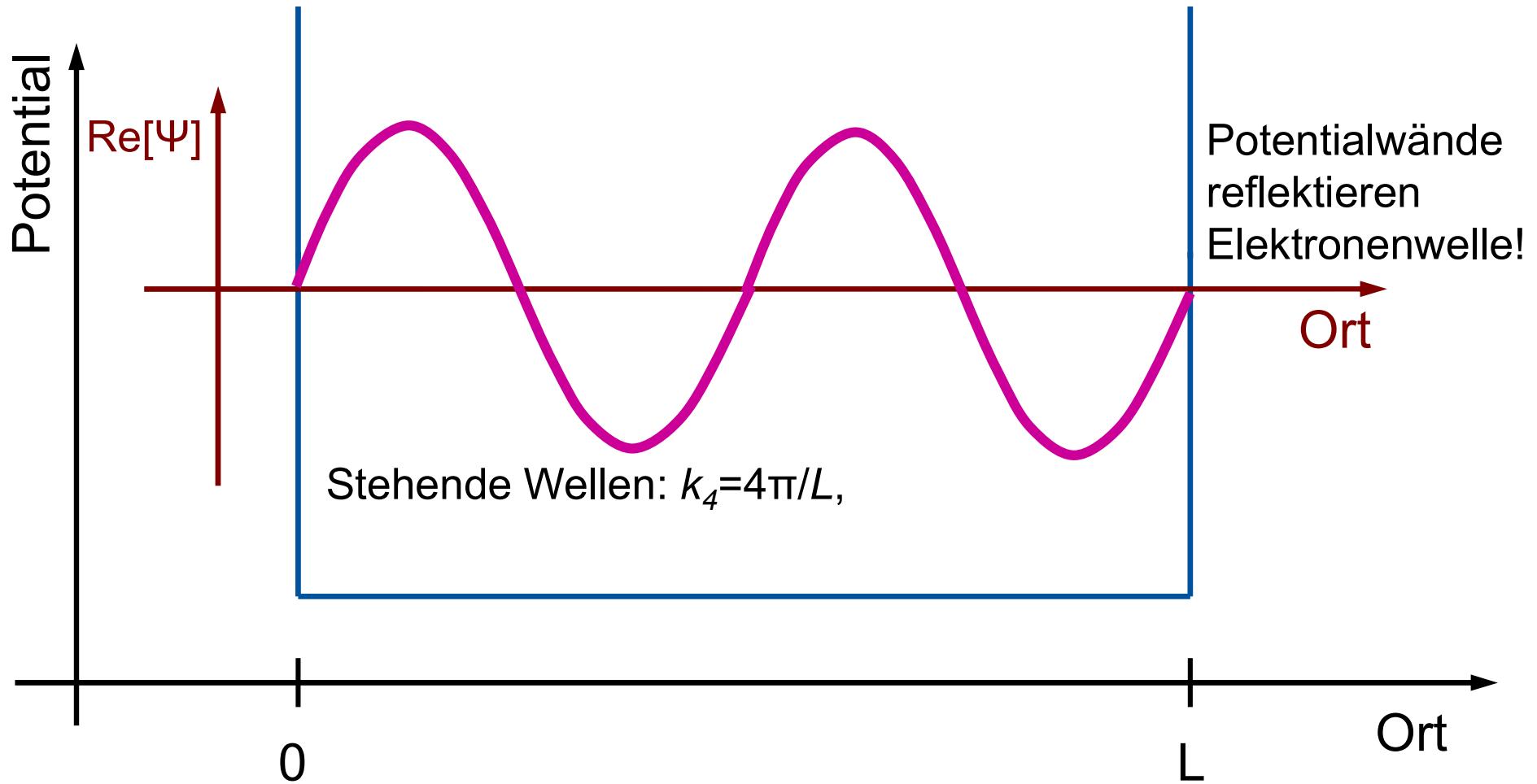
Einfachste Modell eines Festkörpers in 1D



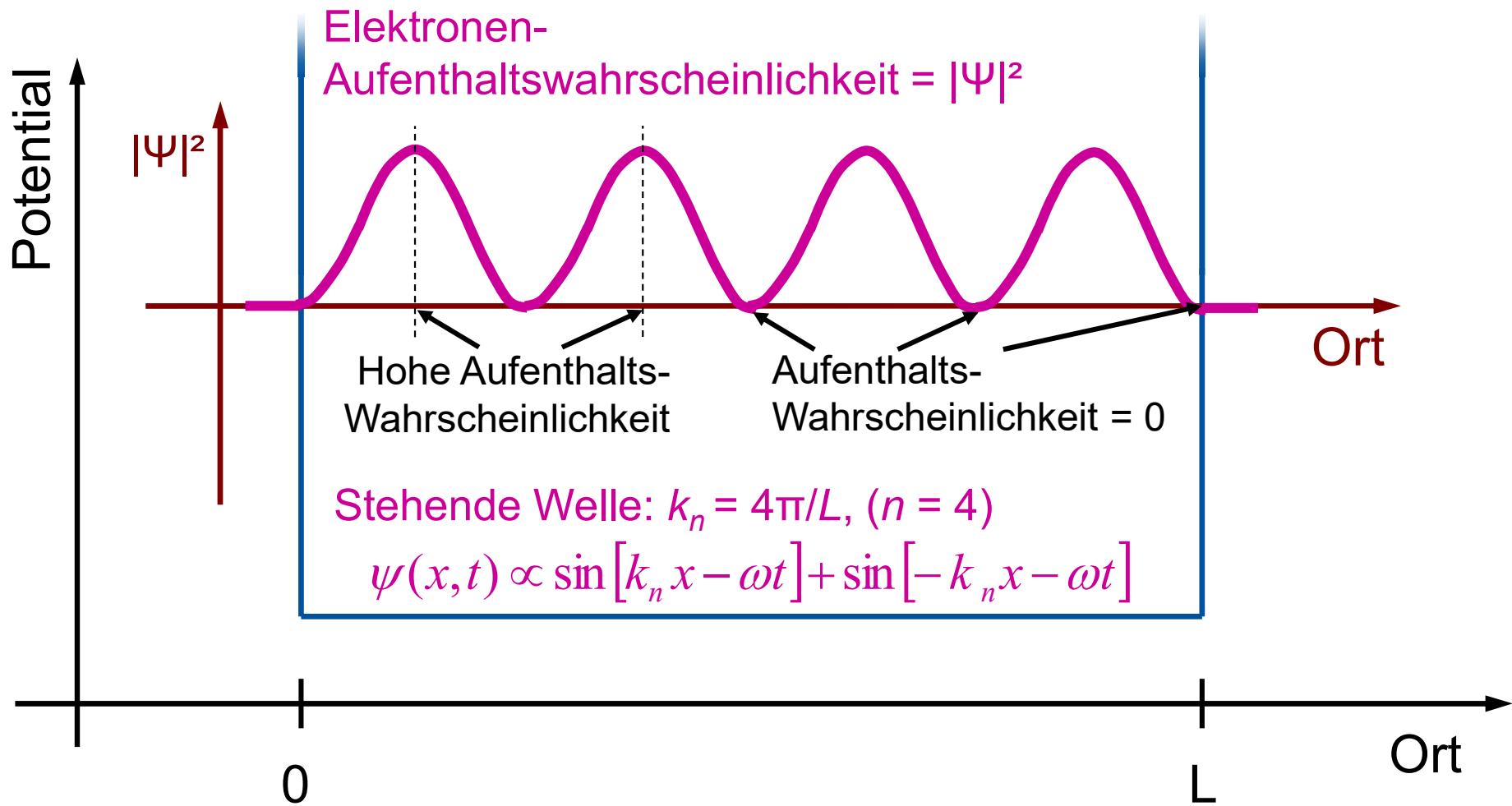
Einfachste Modell eines Festkörpers in 1D



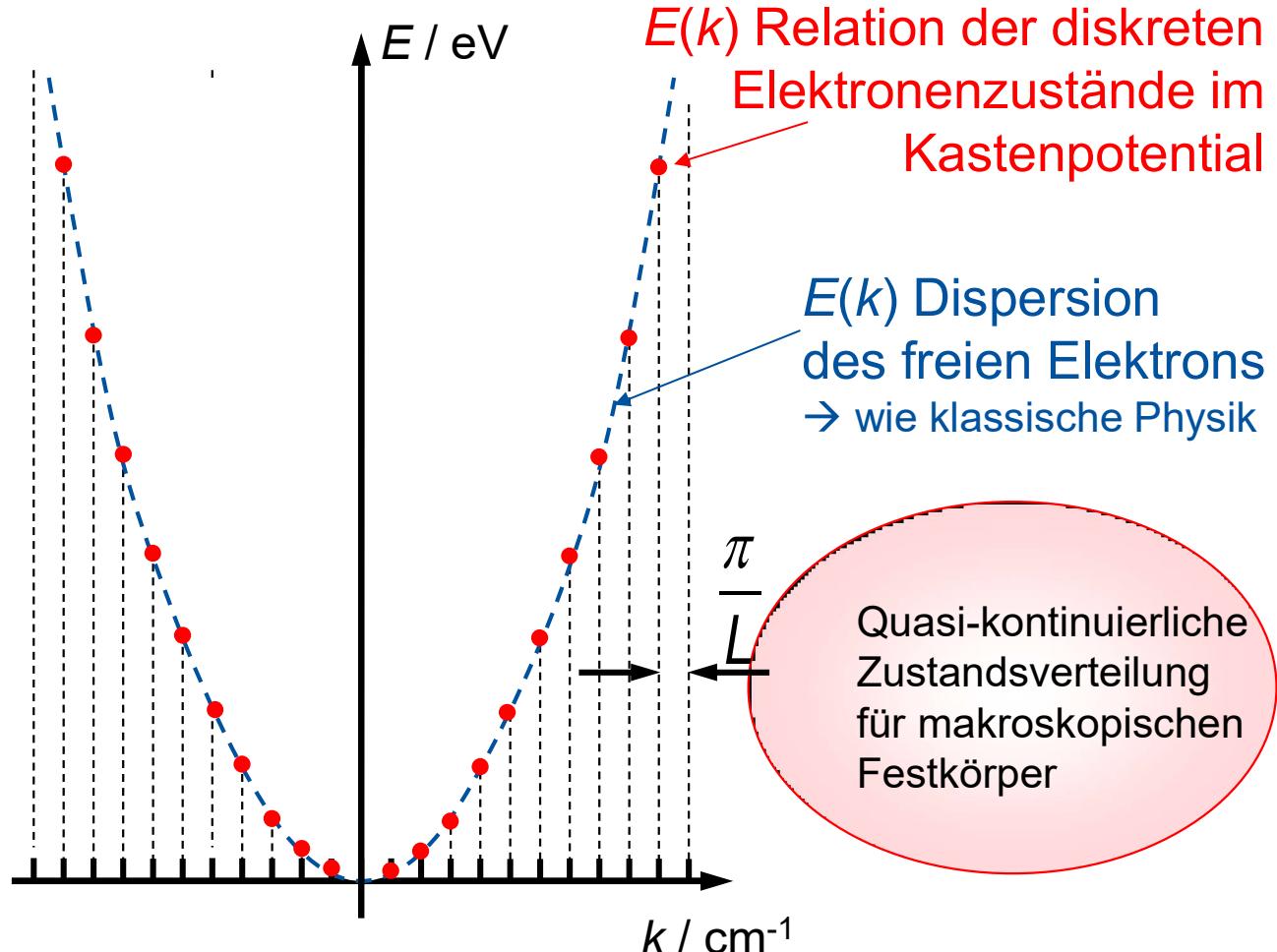
Einfachste Modell eines Festkörpers in 1D



Einfachste Modell eines Festkörpers in 1D



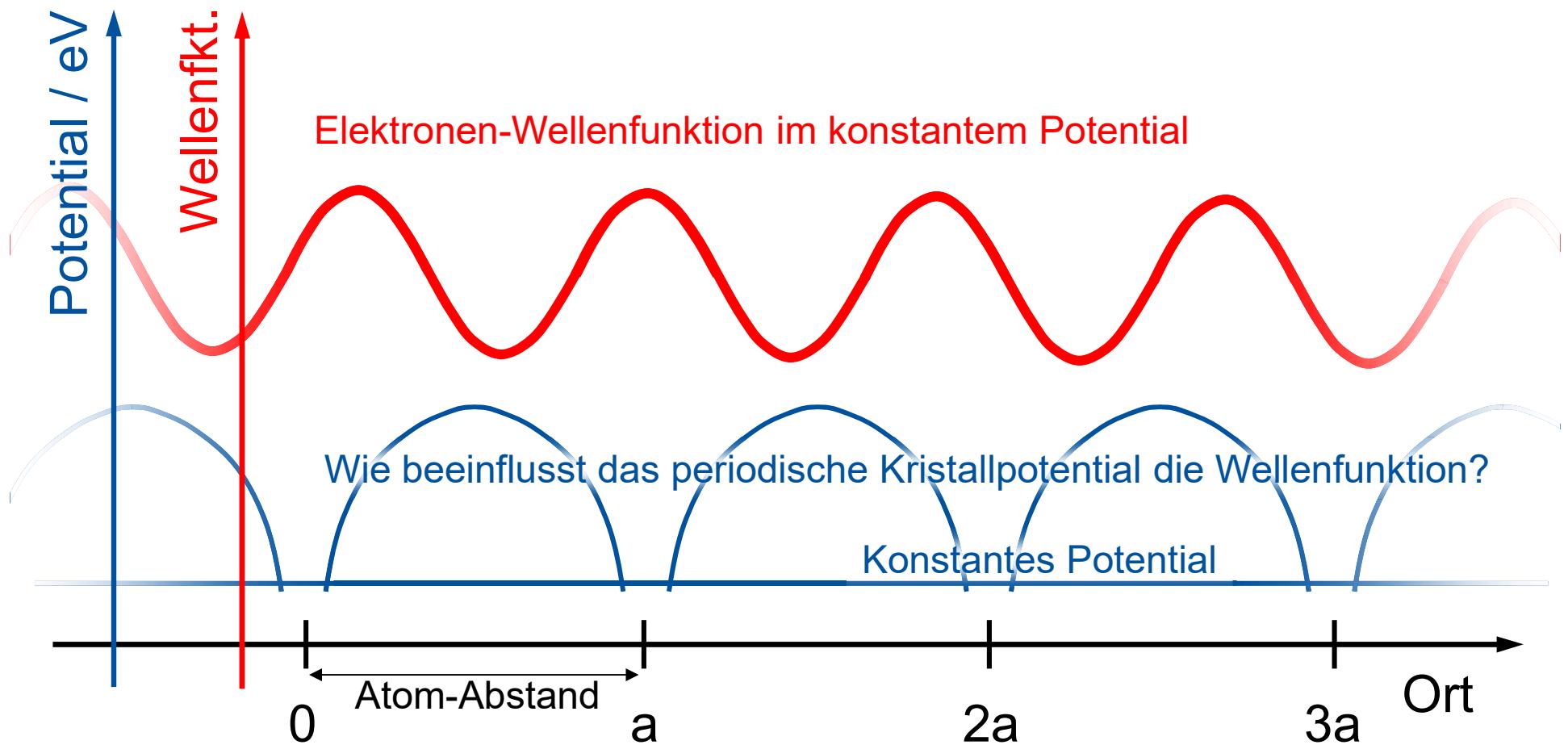
Elektron im Kastenpotential



Zusammenfassung bis hierhin:

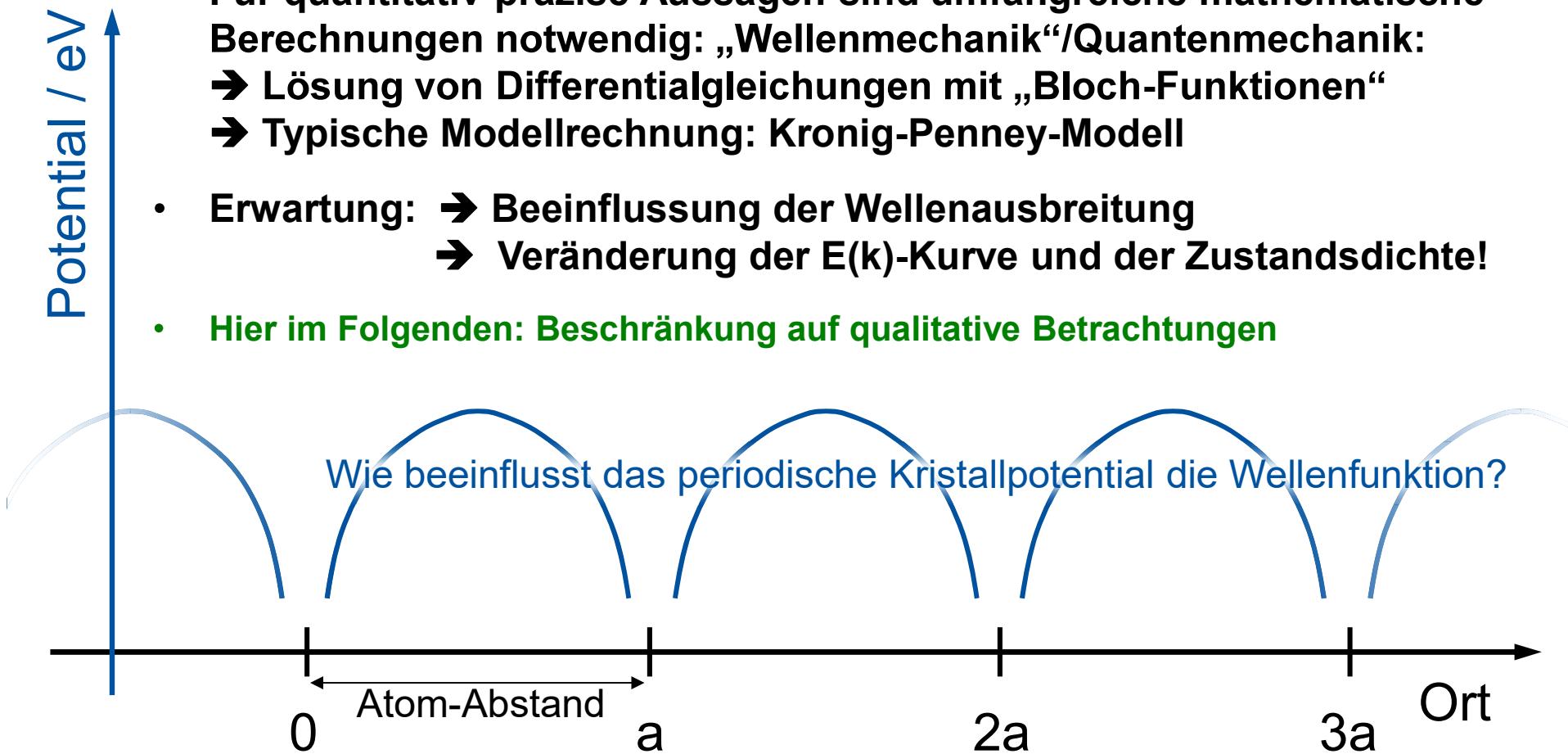
- Elektronenbewegung ist beschreibbar durch eine Wellenfunktion
- Überlagerung von (Elektronen-)Wellen kann dazu führen, dass es Orte gibt, an denen die Gesamt-Wellenfunktion immer den Wert „Null“ hat.
- Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons proportional zum Quadrat der Wellenamplitude: $|Wellenfunktion|^2$
- Beschränkung des Elektrons durch Potential (z.B. Kastenpotential) schränkt die möglichen Impuls- (und Energie-) Zustände ein.
- Dennoch: Elektronen im großen Kastenpotential verhalten sich ähnlich wie klassische freie Teilchen:
 $E = p^2/(2 m)$
- Elektronenzustandsdichte im großen Kastenpotential ist „quasi-kontinuierlich“ und daher ähnlich wie die freier Teilchen.

Auswirkung des periodischen Kristallpotentials



Auswirkung des periodischen Kristallpotentials

- Für quantitativ-präzise Aussagen sind umfangreiche mathematische Berechnungen notwendig: „Wellenmechanik“/Quantenmechanik:
→ Lösung von Differentialgleichungen mit „Bloch-Funktionen“
→ Typische Modellrechnung: Kronig-Penney-Modell
- Erwartung: → Beeinflussung der Wellenausbreitung
→ Veränderung der $E(k)$ -Kurve und der Zustandsdichte!
- Hier im Folgenden: Beschränkung auf qualitative Betrachtungen

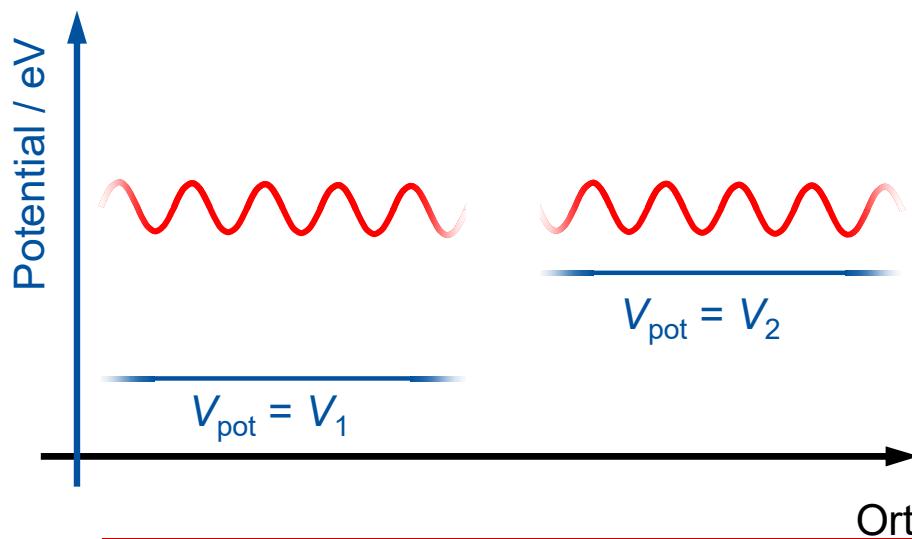


Auswirkung des periodischen Kristallpotentials

- Überlegung zur Teilchenbewegung bzw. Wellenausbreitung im Potential:

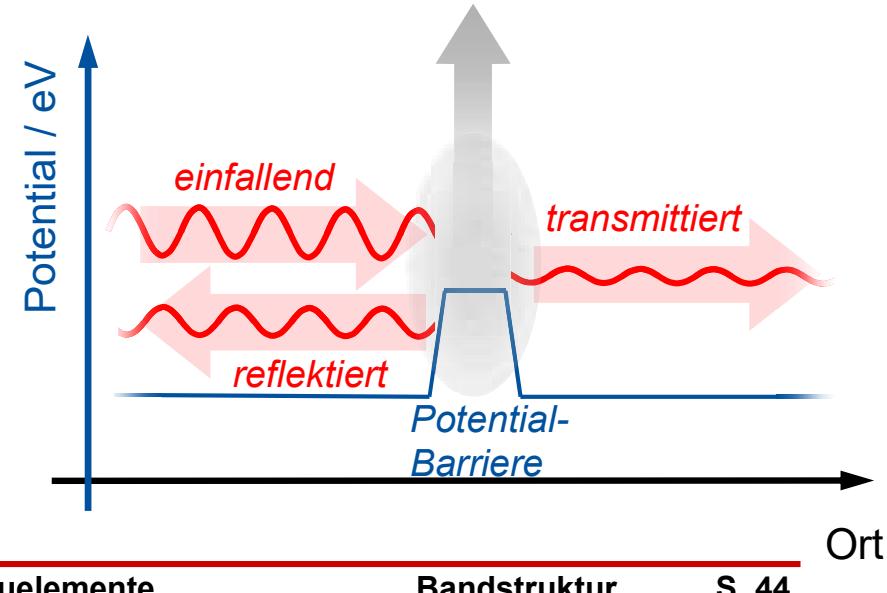
Konstantes Potential:

- 1) Gesamt-Energie = kinetische Energie + potentielle Energie
- 2) Kinetische Energie = $\hbar\omega$
- 3) Welle bleibt „unbeeinflusst“: „freie Welle“



Potential-Barriere:

- 1) Welle teils transmittiert, teils reflektiert
- 2) Amplitudenänderung, Wellenlängen gleich
- 3) Details im Bereich der Barriere beschreibbar durch [Wellenmechanik/Quantenmechanik](#)



Auswirkung des periodischen Kristallpotentials

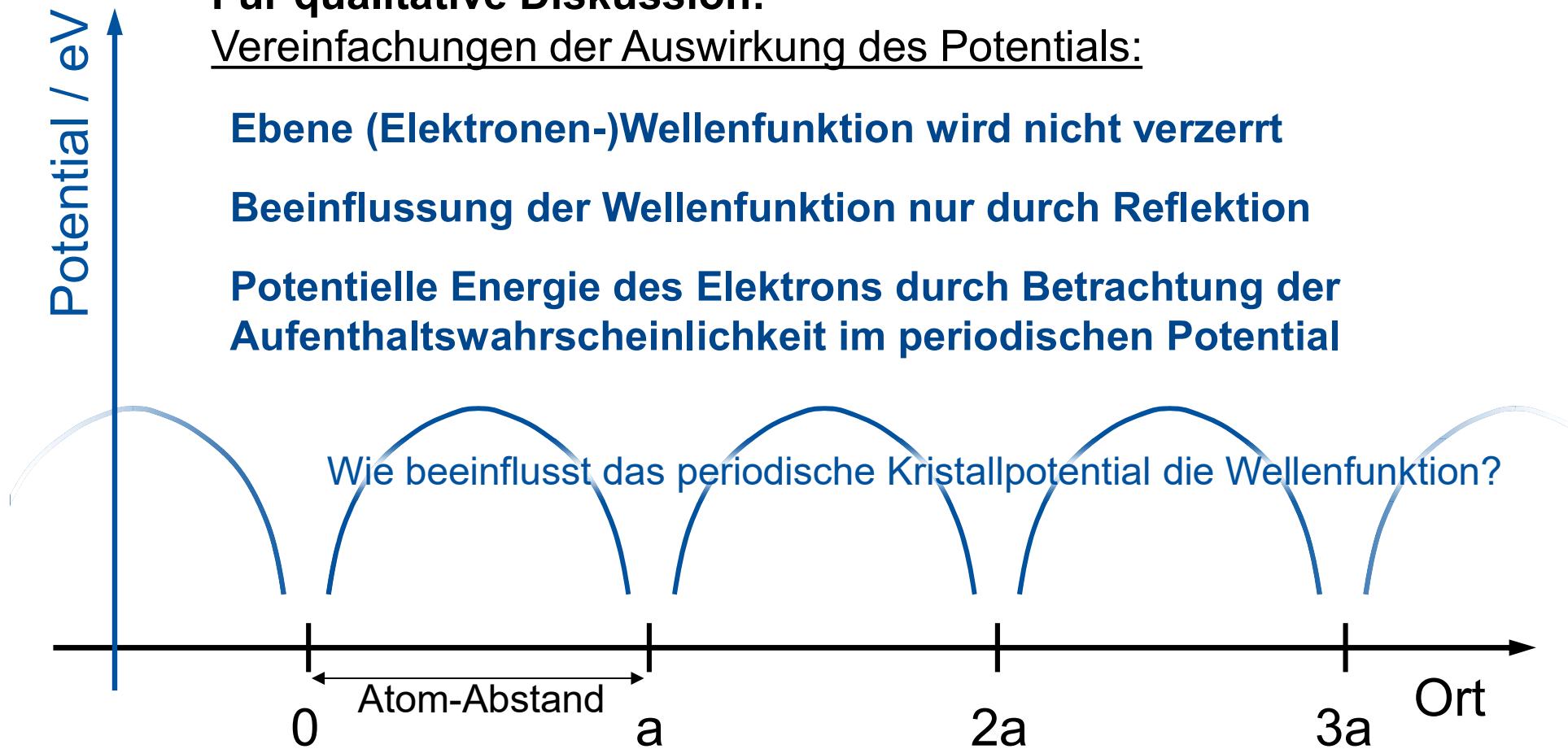
- Für qualitative Diskussion:

Vereinfachungen der Auswirkung des Potentials:

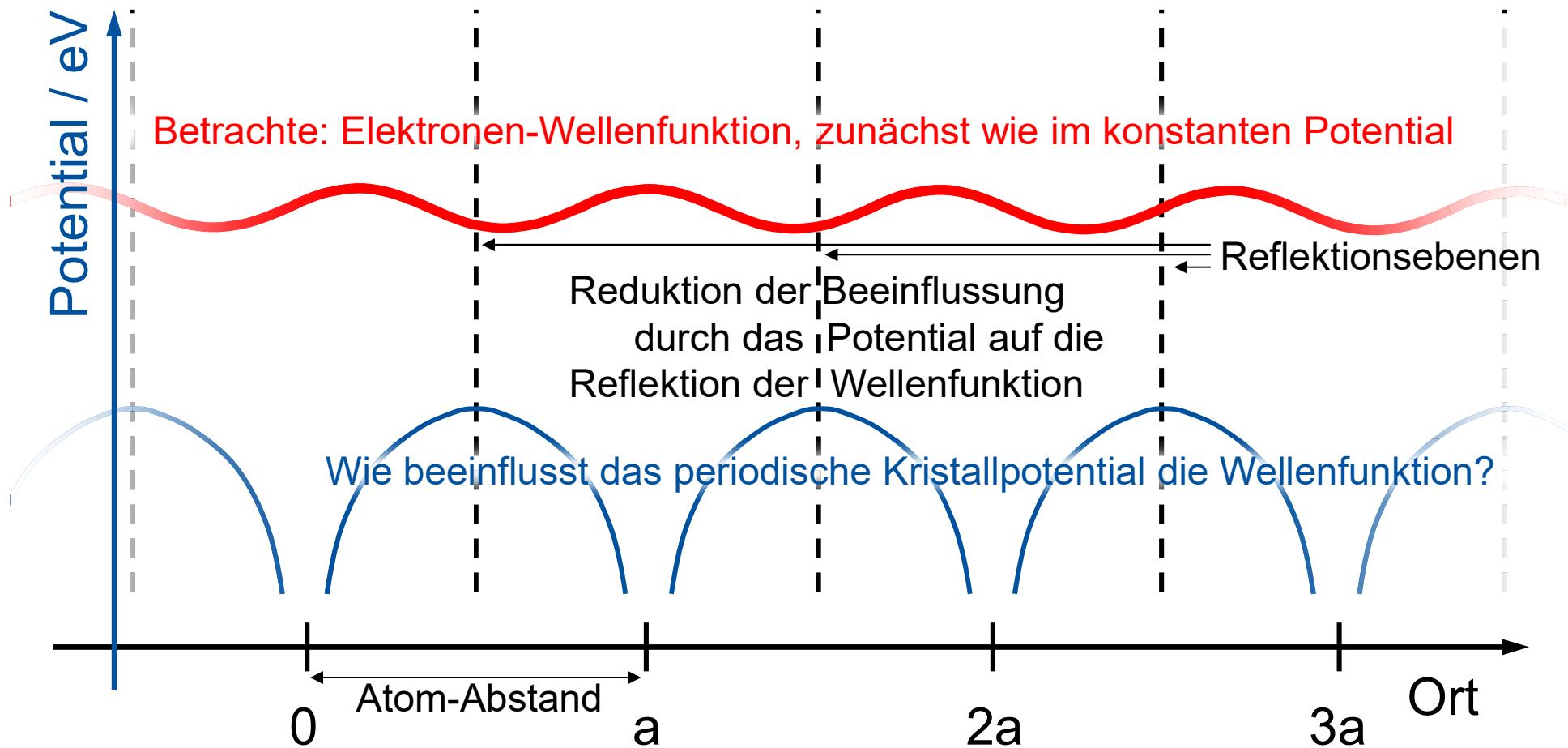
Ebene (Elektronen-)Wellenfunktion wird nicht verzerrt

Beeinflussung der Wellenfunktion nur durch Reflektion

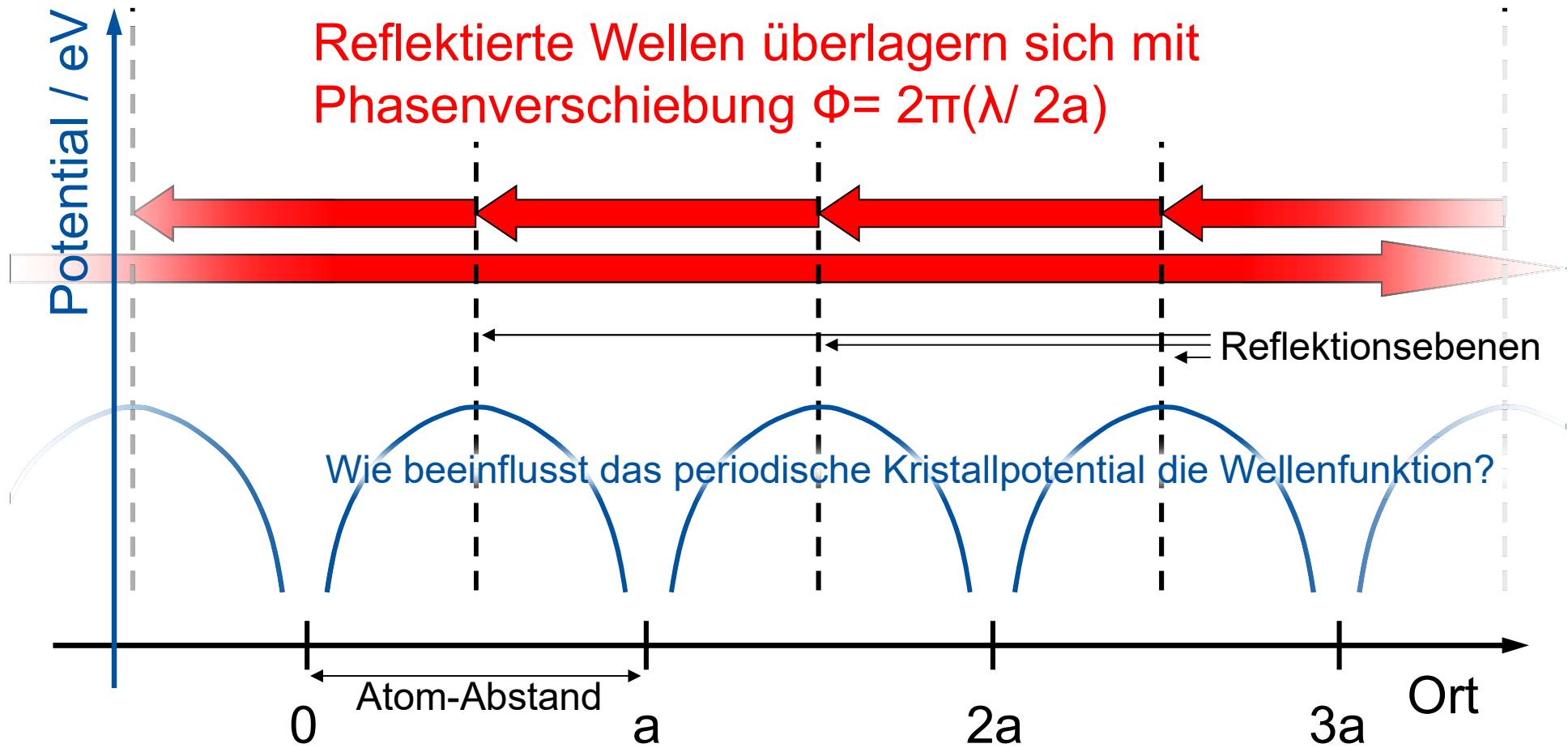
Potentielle Energie des Elektrons durch Betrachtung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit im periodischen Potential



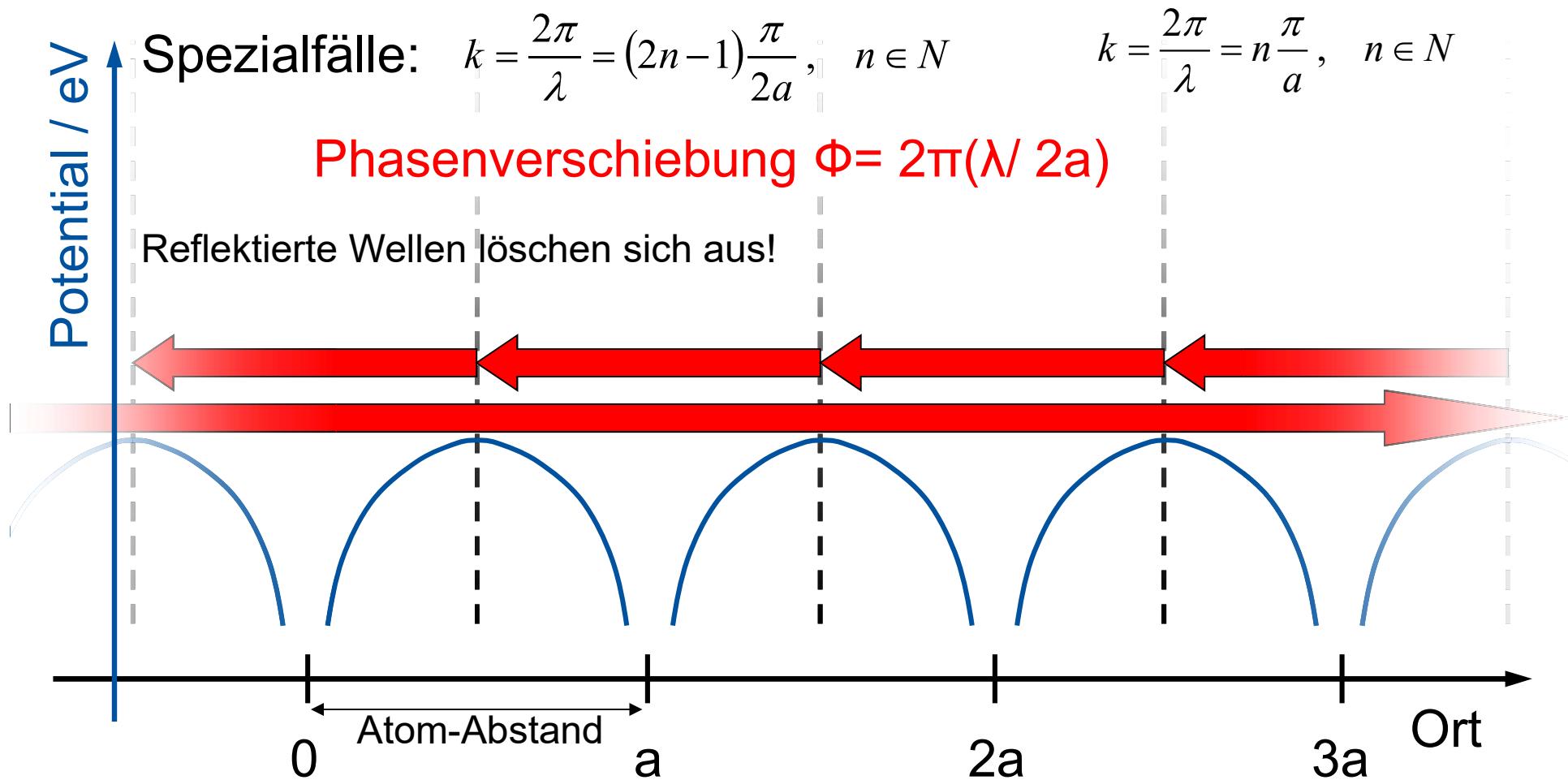
Auswirkung des periodischen Kristallpotentials



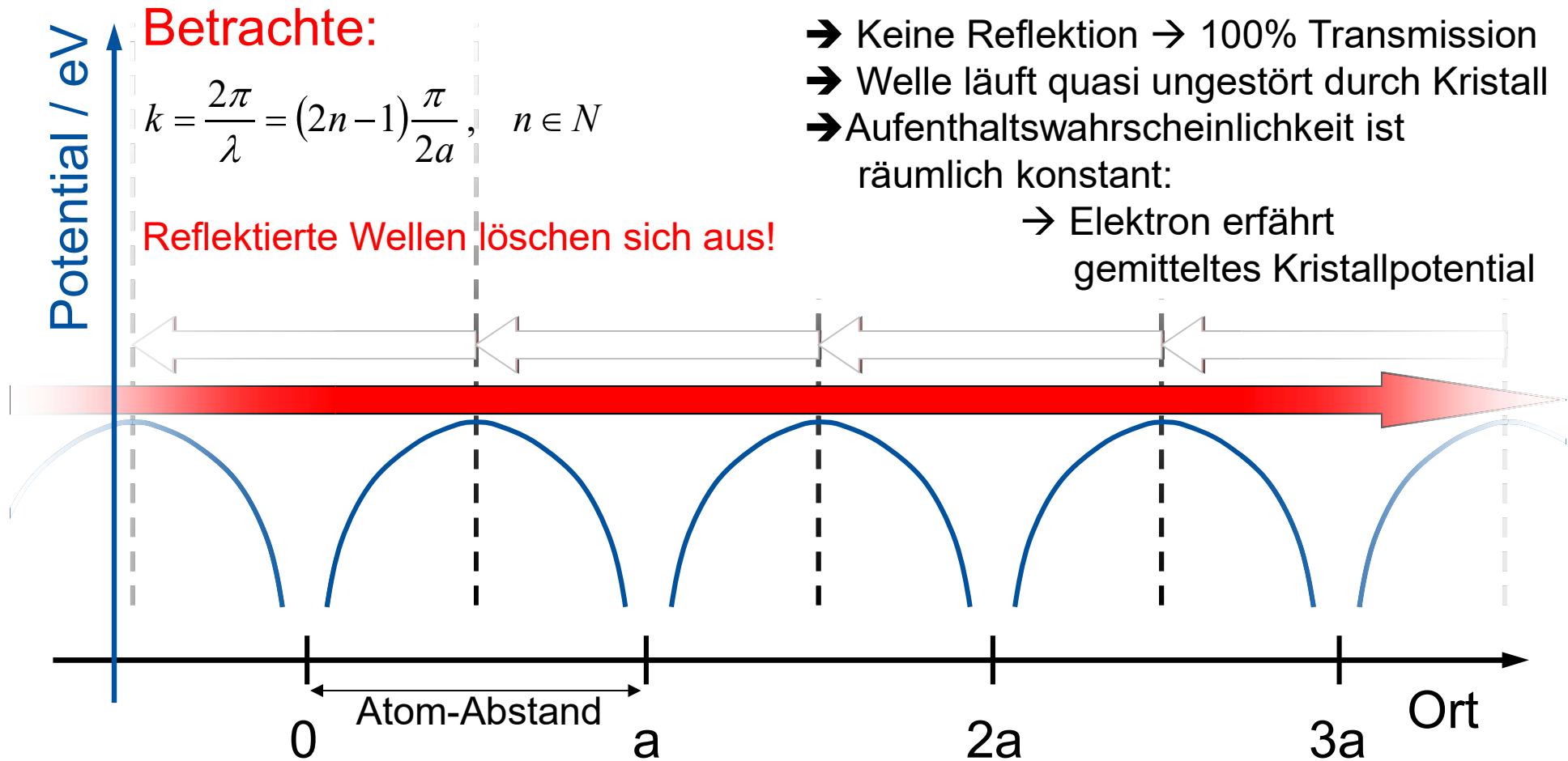
Auswirkung des periodischen Kristallpotentials



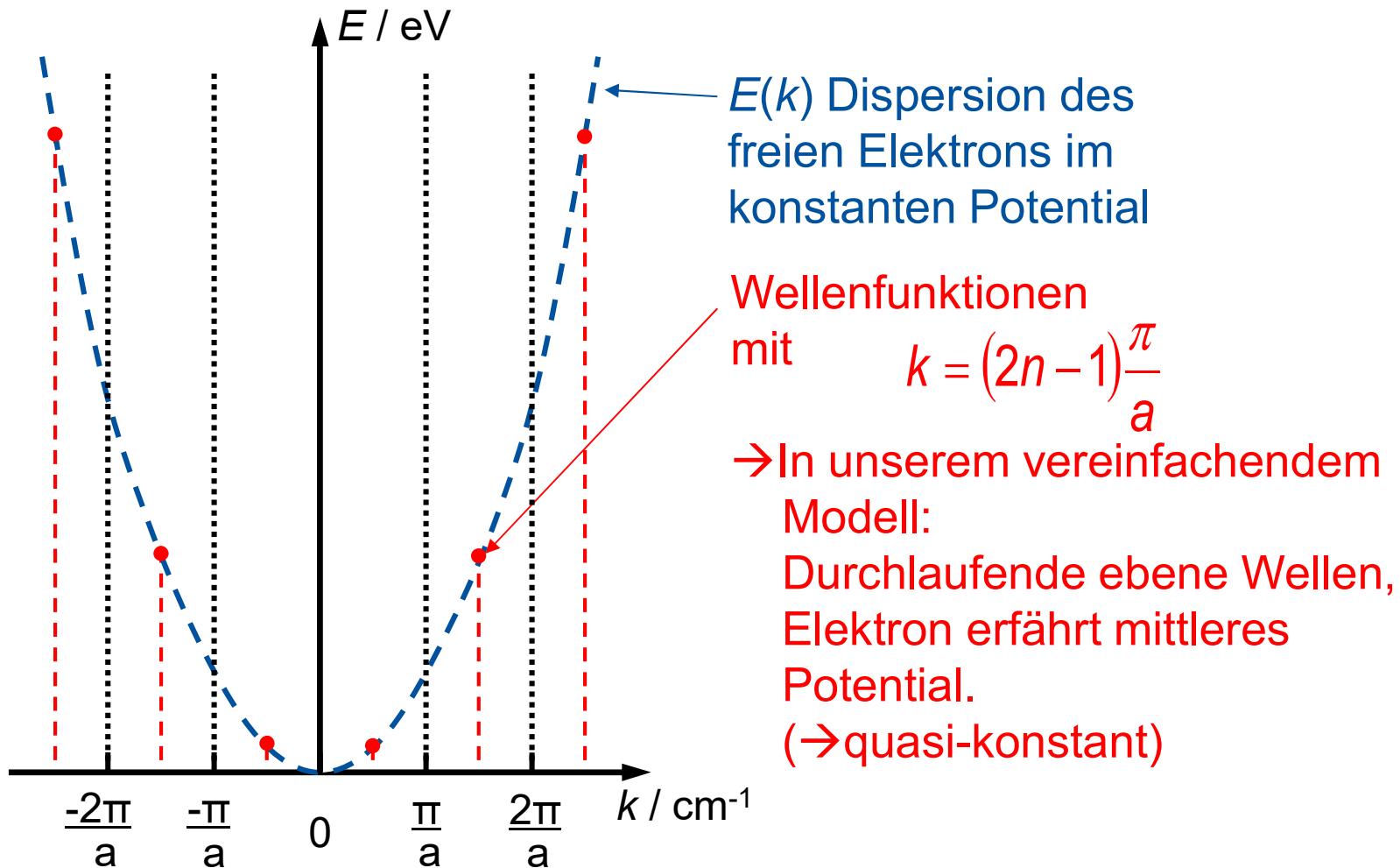
Auswirkung des periodischen Kristallpotentials



Auswirkung des periodischen Kristallpotentials

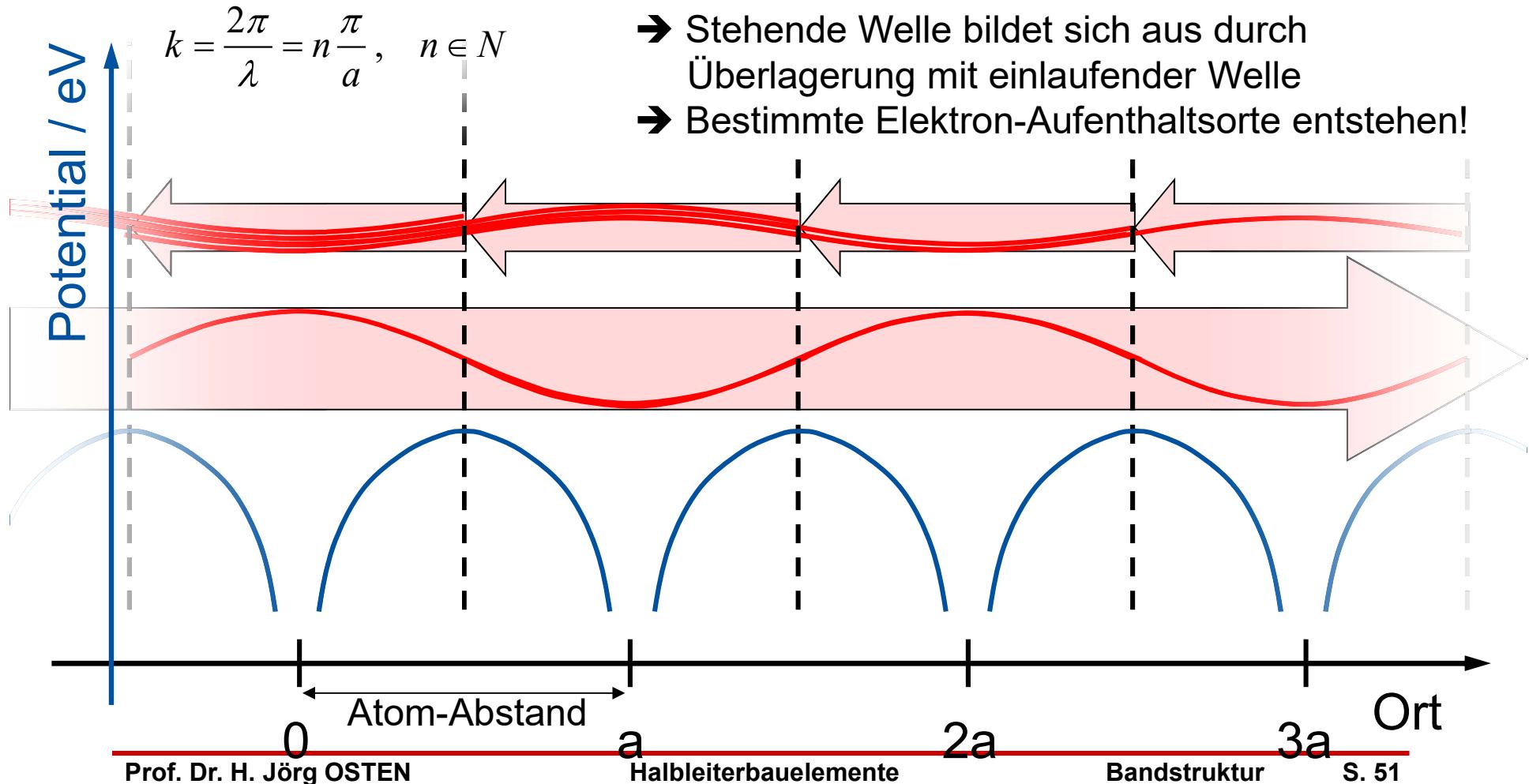


Auswirkung des periodischen Kristallpotentials



Auswirkung des periodischen Kristallpotentials

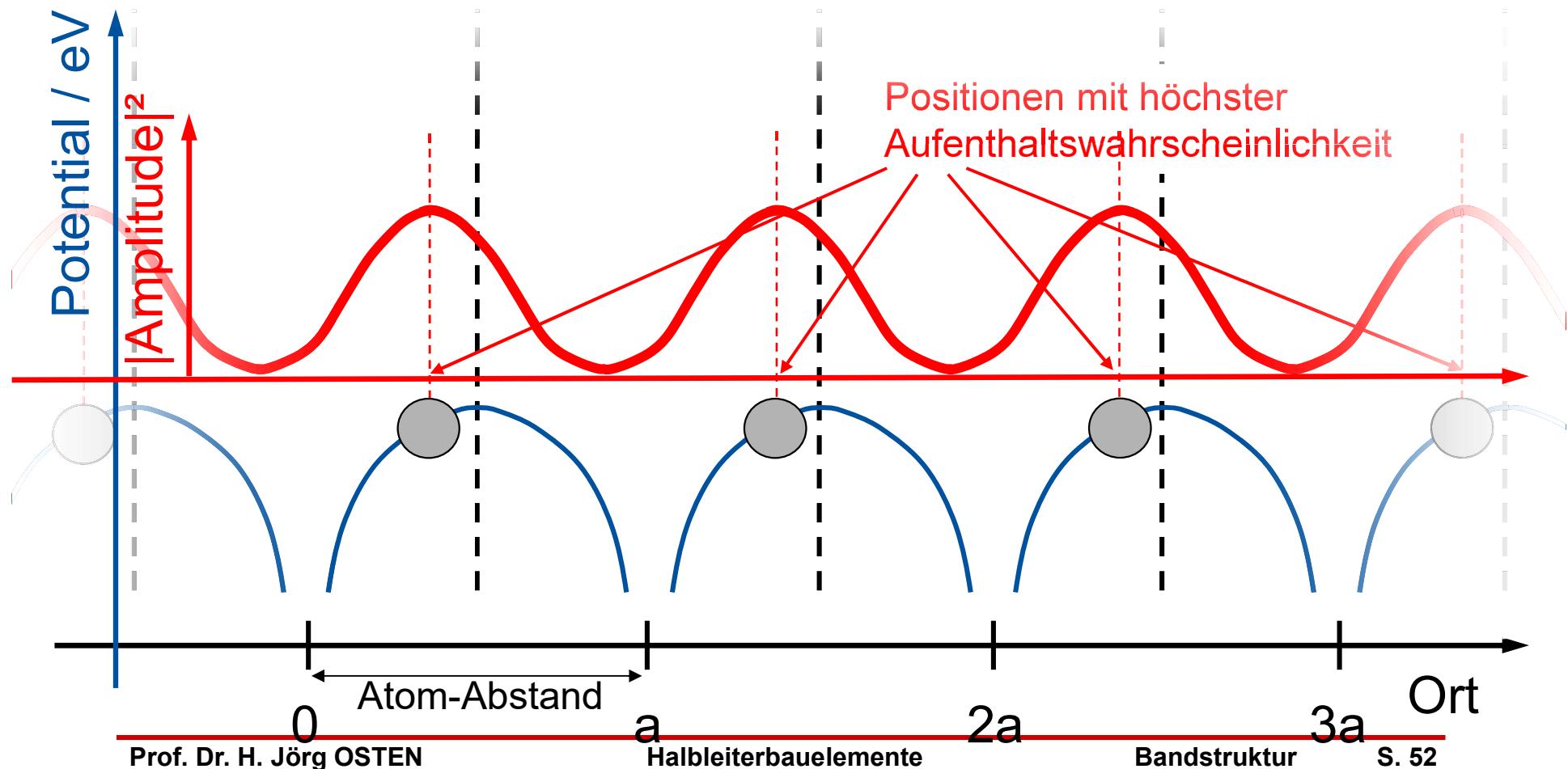
Betrachte:



Auswirkung des periodischen Kristallpotentials

Betrachte: $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{a}$

→ „Instabile Position“



Auswirkung des periodischen Kristallpotentials

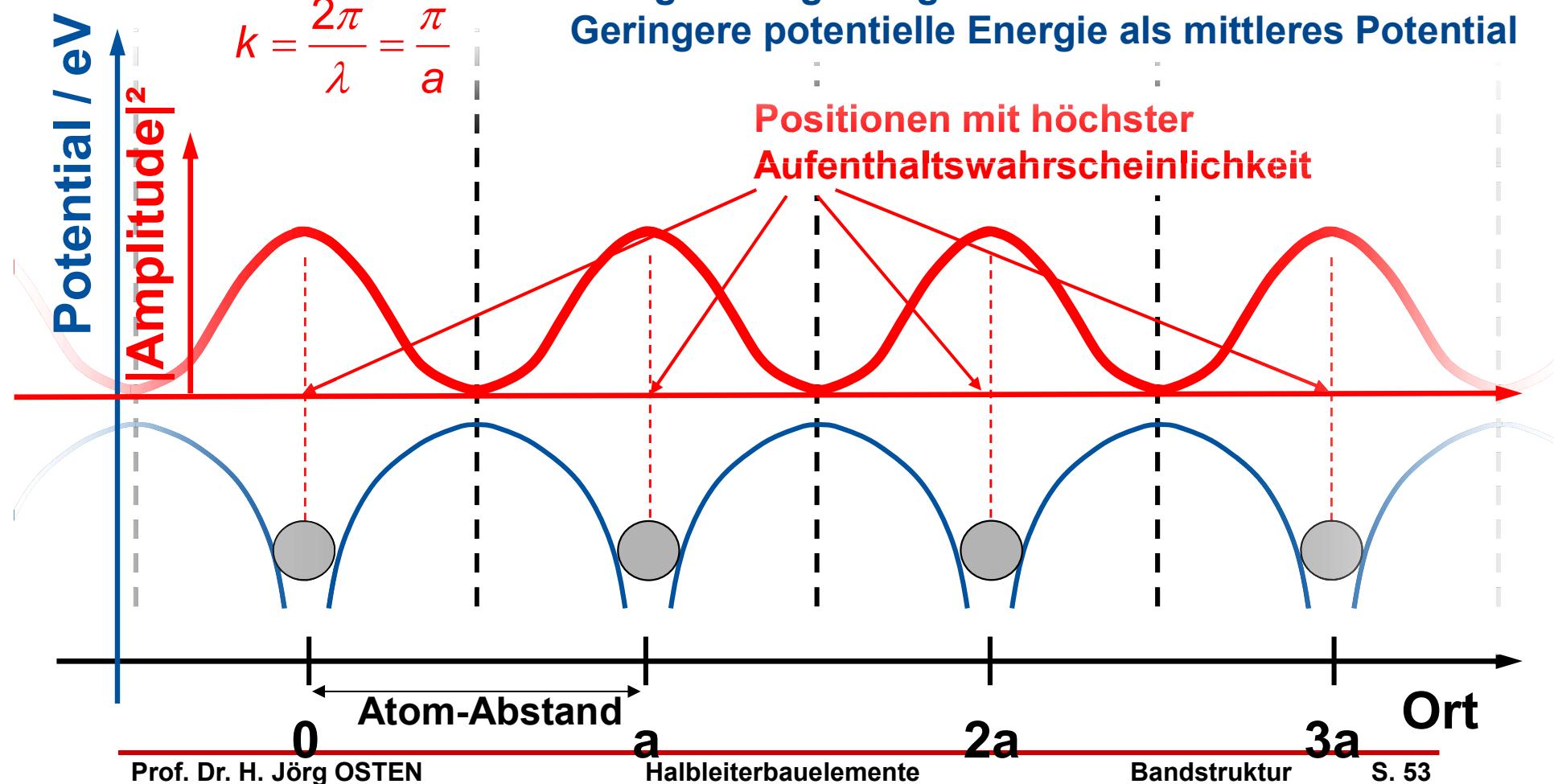
Betrachte:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{a}$$

→ Stabile Position („Eigenzustand“ des Systems)

→ Energetisch günstig!

Geringere potentielle Energie als mittleres Potential



Auswirkung des periodischen Kristallpotentials

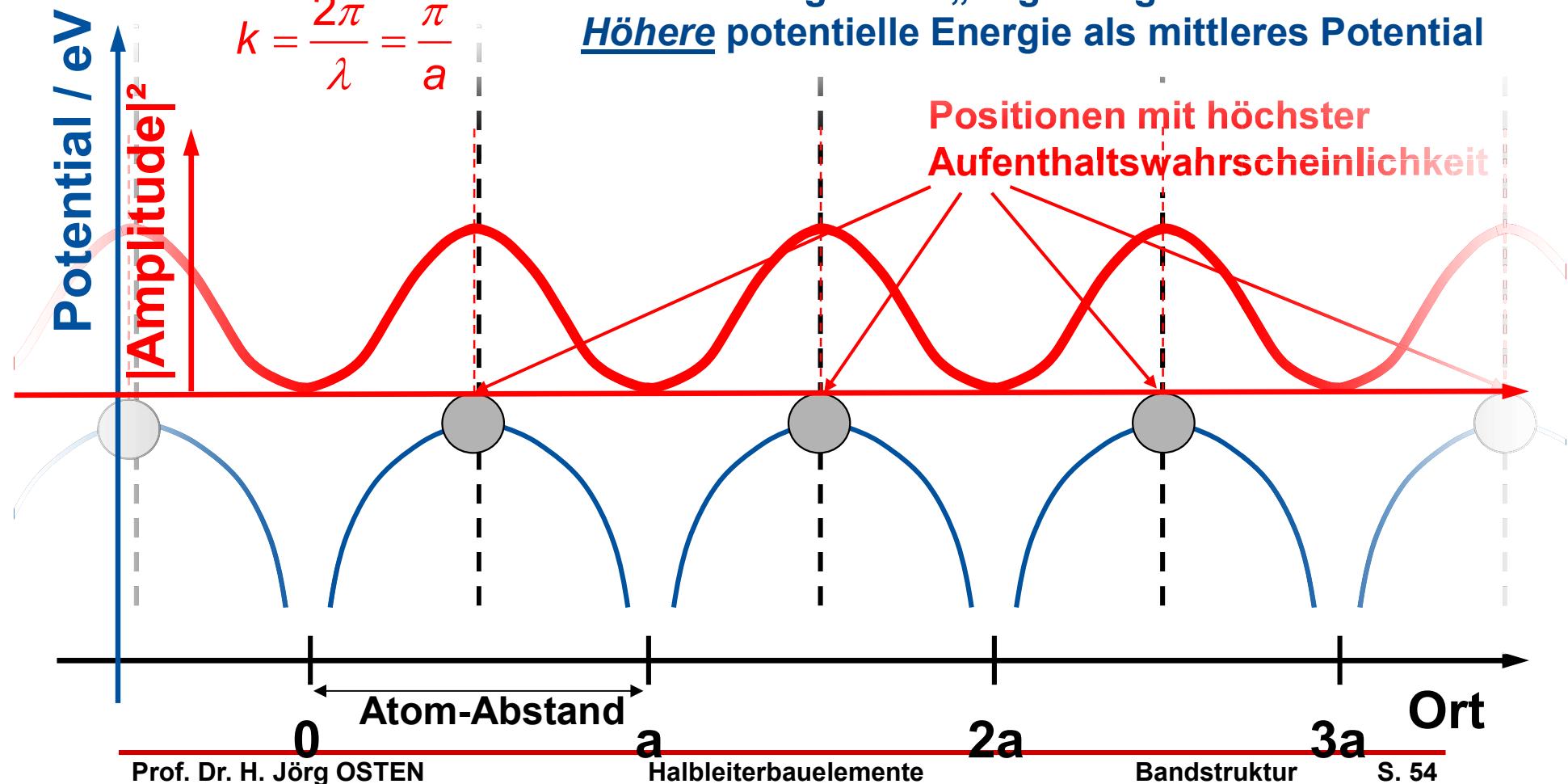
Betrachte:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{a}$$

→ Stabile Position („Eigenzustand“ des Systems)

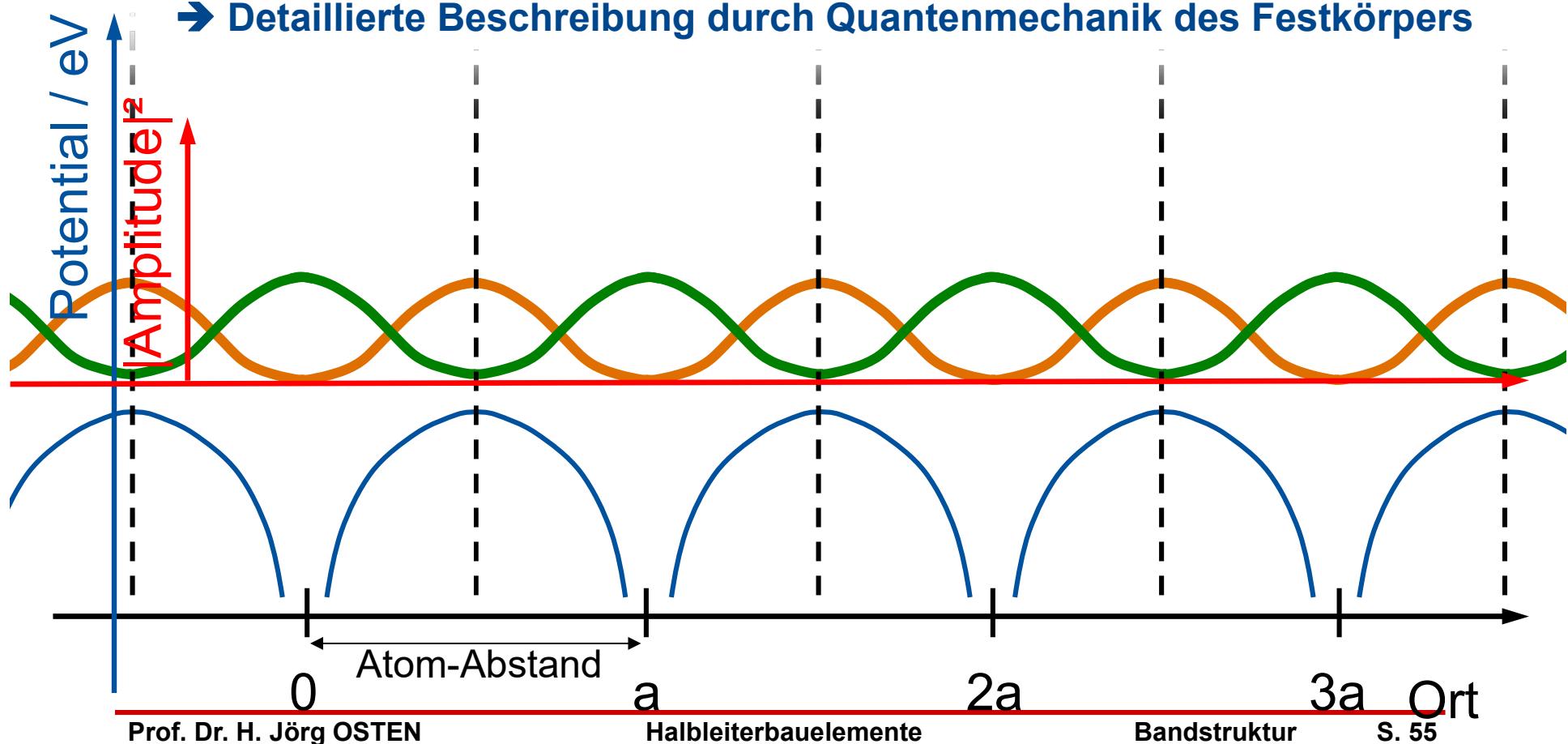
→ ... aber energetisch „ungünstig“!

Höhere potentielle Energie als mittleres Potential



Auswirkung des periodischen Kristallpotentials

- Wellen mit k -Wert = $n\pi/a$ erfahren nicht das „gemittelte Potential“
- Wellen mit gleichem k -Wert = $n\pi/a$ können
zwei energetisch unterschiedliche Zustände besetzen!
- Detaillierte Beschreibung durch Quantenmechanik des Festkörpers



Auswirkung des periodischen Kristallpotentials

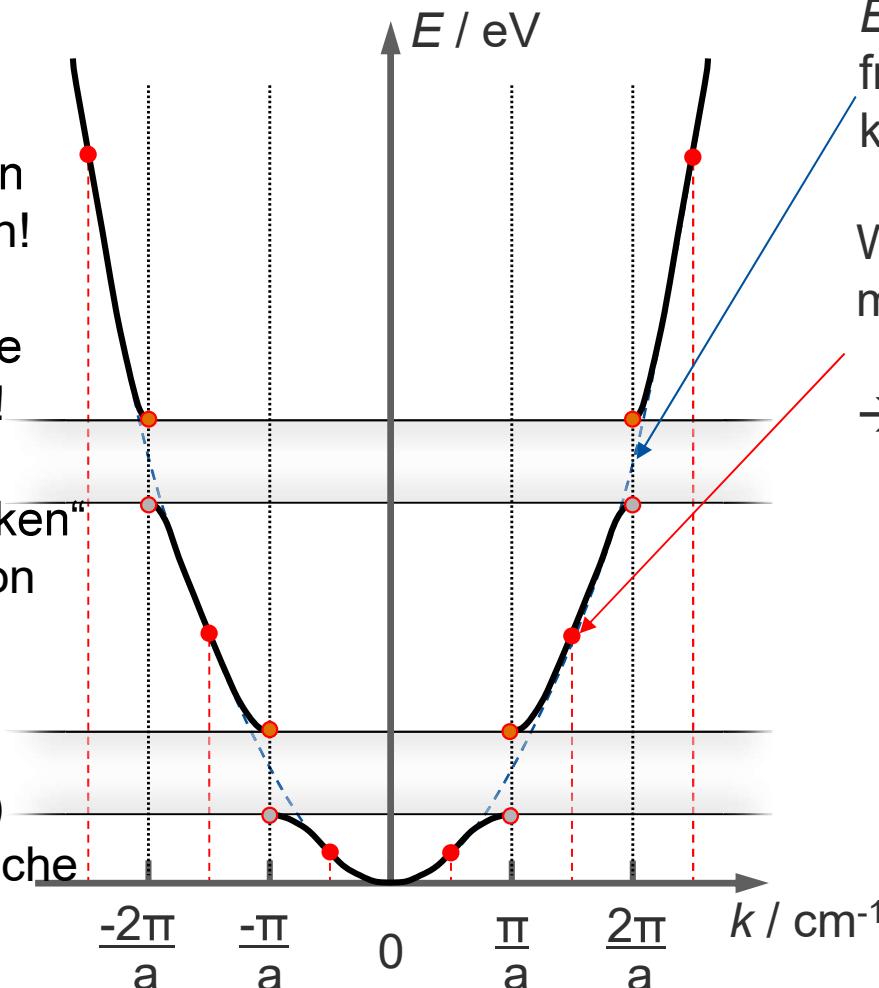
Wellenfunktionen
mit k -Wert = $n\pi/a$...

... sind stehende Wellen
→ unbeweglich!

... können verschiedene
Energien aufweisen!

... lassen „Energie-Lücken“
in der $E(k)$ -Dispersion
entstehen!
→ Bandlücken!

→ Zustandsdichte $D(E)$
enthält Energiebereiche
ohne Zustände!



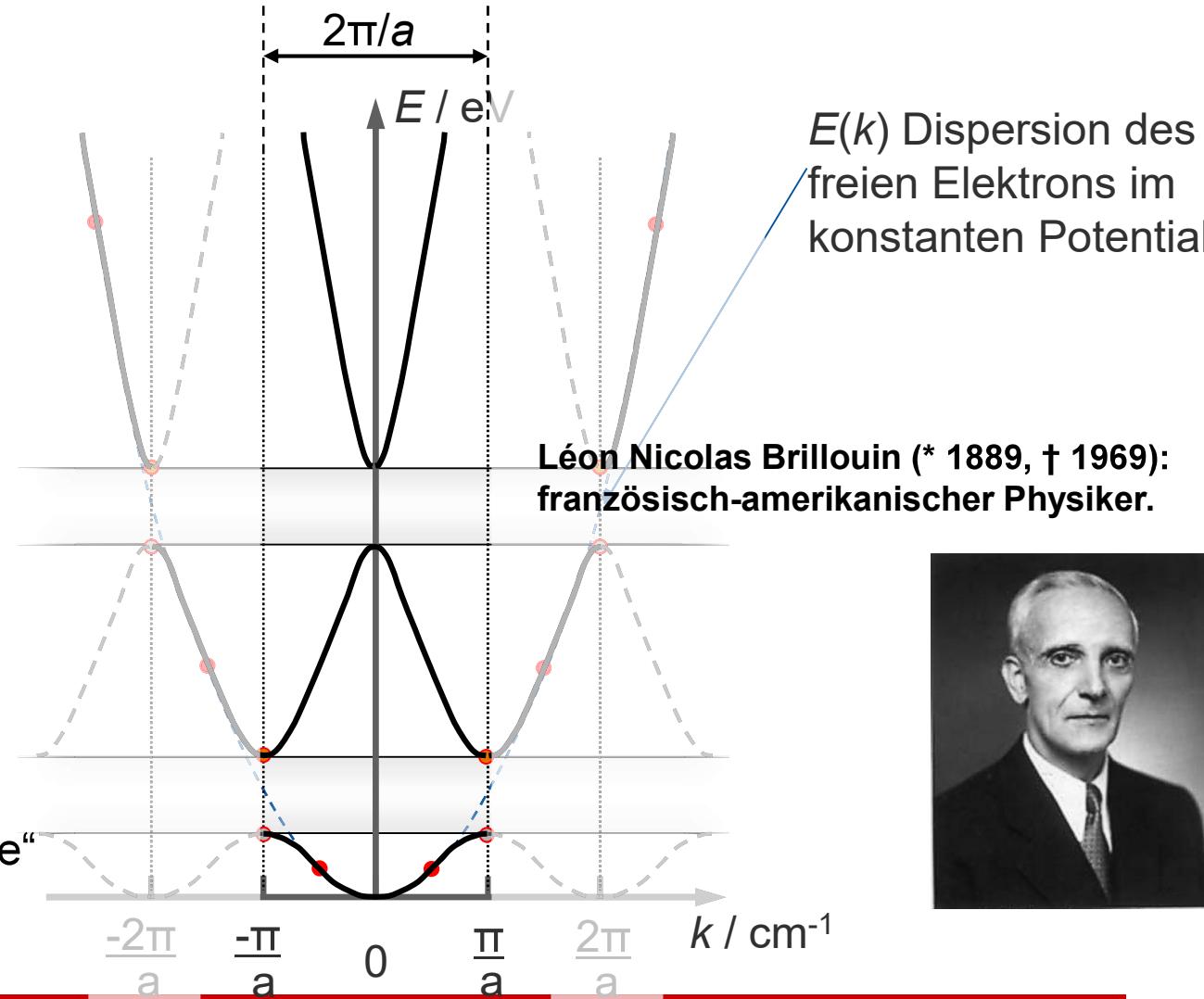
$E(k)$ Dispersion des
freien Elektrons im
konstanten Potential

Wellenfunktionen
mit $k = (2n-1)\frac{\pi}{a}$
→ In unserem
vereinfachendem
Modell:
Durchlaufende
ebene Wellen,
Elektron erfährt
mittleres Potential.
(→quasi-konstant)

Auswirkung des periodischen Kristallpotentials

Ergebnis der Quantenmechanik:

Elektronenzustände, d.h. Wellenfunktionen, die sich nur durch den k -Wert unterscheiden und diese Differenz $k_1 - k_2 = \pm n (2\pi/a)$ beträgt, sind ununterscheidbar!
 → identisch!



Léon Nicolas Brillouin (* 1889, † 1969): französisch-amerikanischer Physiker.



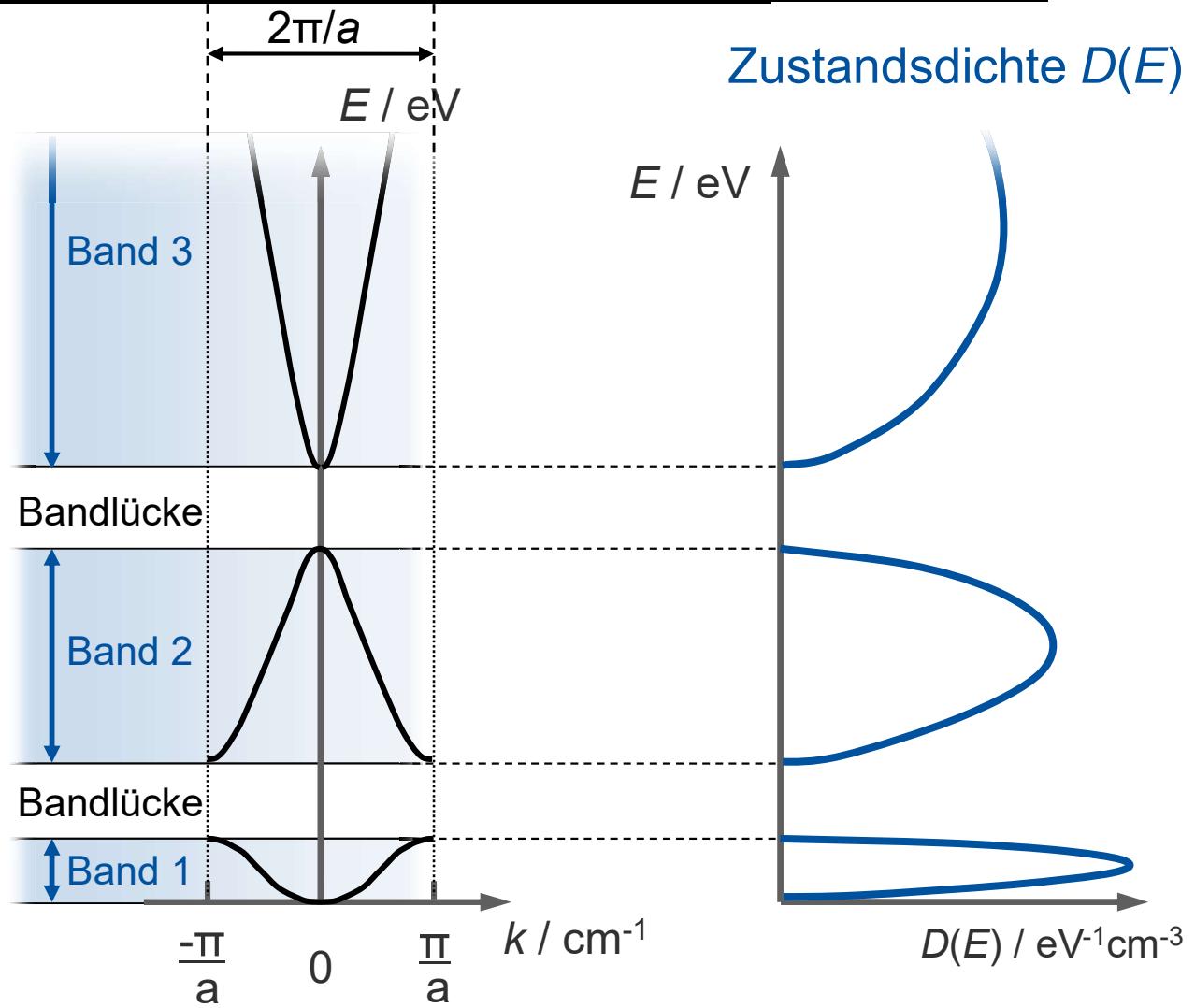
Es genügt also, nur die „erste Brillouin-Zone“ zu betrachten:
 $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$

Bandschema und Zustandsdichte

Ergebnis der Quantenmechanik:

Elektronenzustände, d.h. Wellenfunktionen, die sich nur durch den k -Wert unterscheiden und diese Differenz $k_1 - k_2 = \pm n (2\pi/a)$ beträgt, sind ununterscheidbar!
 → identisch!

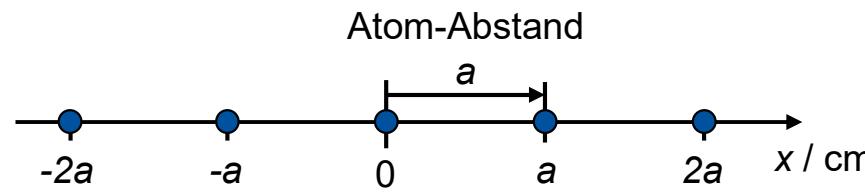
Es genügt also, nur die „erste Brillouin-Zone“ zu betrachten:
 $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$



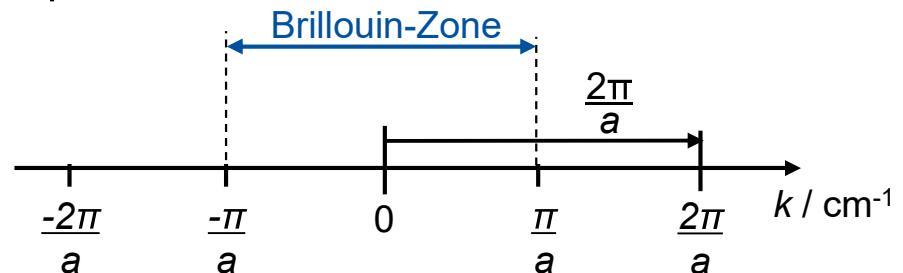
Die Brillouin Zone: Definition im „Reziproken Raum“

1-dimensionaler Fall:

Realer Raum:

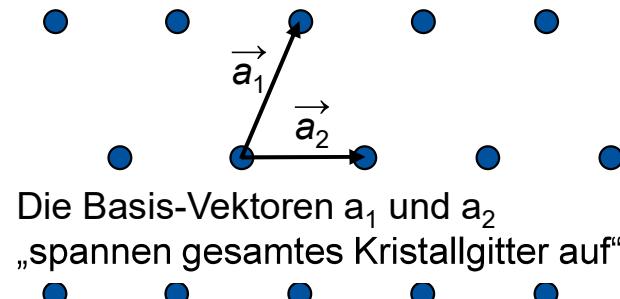


„Reziproker“ Raum:



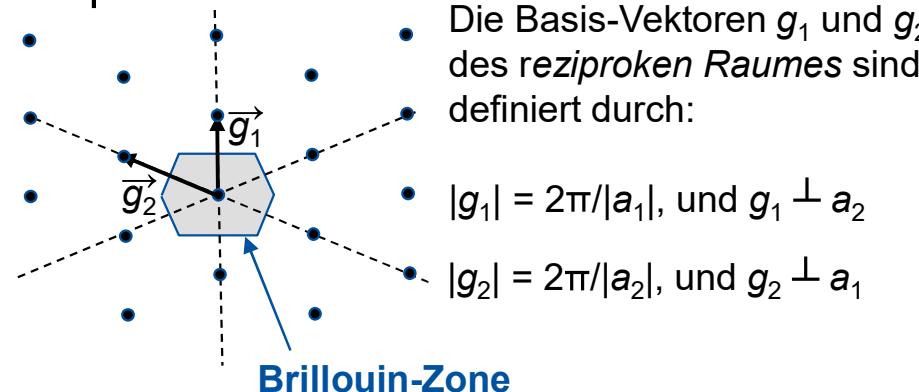
2-dimensionaler Fall:

Realer Raum:



Die Basis-Vektoren a_1 und a_2 „spannen gesamtes Kristallgitter auf“

„Reziproker“ Raum:



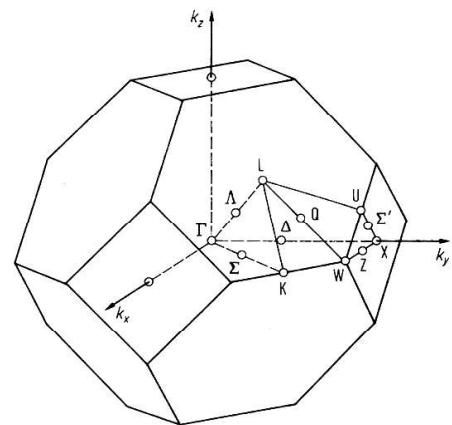
Die Basis-Vektoren g_1 und g_2 des reziproken Raumes sind definiert durch:

- $|g_1| = 2\pi/|a_1|$, und $g_1 \perp a_2$
- $|g_2| = 2\pi/|a_2|$, und $g_2 \perp a_1$

3-dimensionaler Fall:

Realer Raum:

Die Basis-Vektoren \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 und \mathbf{a}_3 spannen das gesamte Kristallgitter auf



„Reziproker“ Raum:

Die Basis-Vektoren \mathbf{g}_1 , \mathbf{g}_2 und \mathbf{g}_3 des *reziproken Raumes* sind definiert durch:

$$\vec{g}_1 \perp \vec{a}_2 \text{ und } \vec{g}_1 \perp \vec{a}_3, \text{ und } |\vec{g}_1| = 2\pi/(\|\vec{a}_1\| \cos \angle[\vec{a}_1, \vec{g}_1])$$

$$\vec{g}_2 \perp \vec{a}_3 \text{ und } \vec{g}_2 \perp \vec{a}_1, \text{ und } |\vec{g}_2| = 2\pi/(\|\vec{a}_2\| \cos \angle[\vec{a}_2, \vec{g}_2])$$

$$\vec{g}_3 \perp \vec{a}_1 \text{ und } \vec{g}_3 \perp \vec{a}_2, \text{ und } |\vec{g}_3| = 2\pi/(\|\vec{a}_3\| \cos \angle[\vec{a}_3, \vec{g}_3])$$

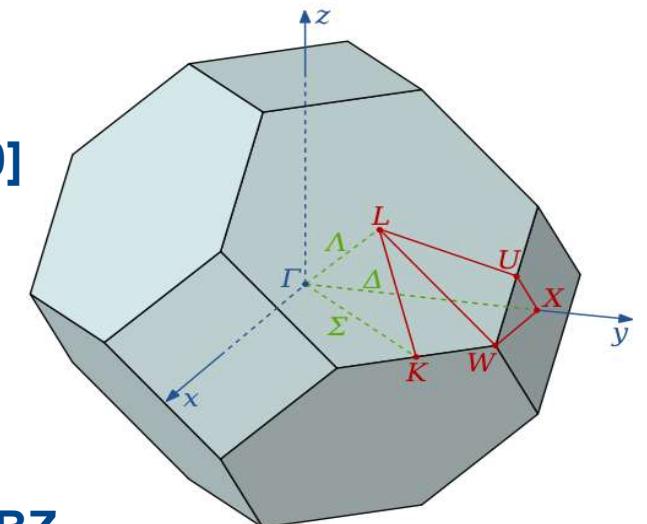
D.h.:

$$\vec{g}_h = 2\pi \frac{\vec{a}_k \times \vec{a}_l}{\vec{a}_h \cdot (\vec{a}_k \times \vec{a}_l)}$$

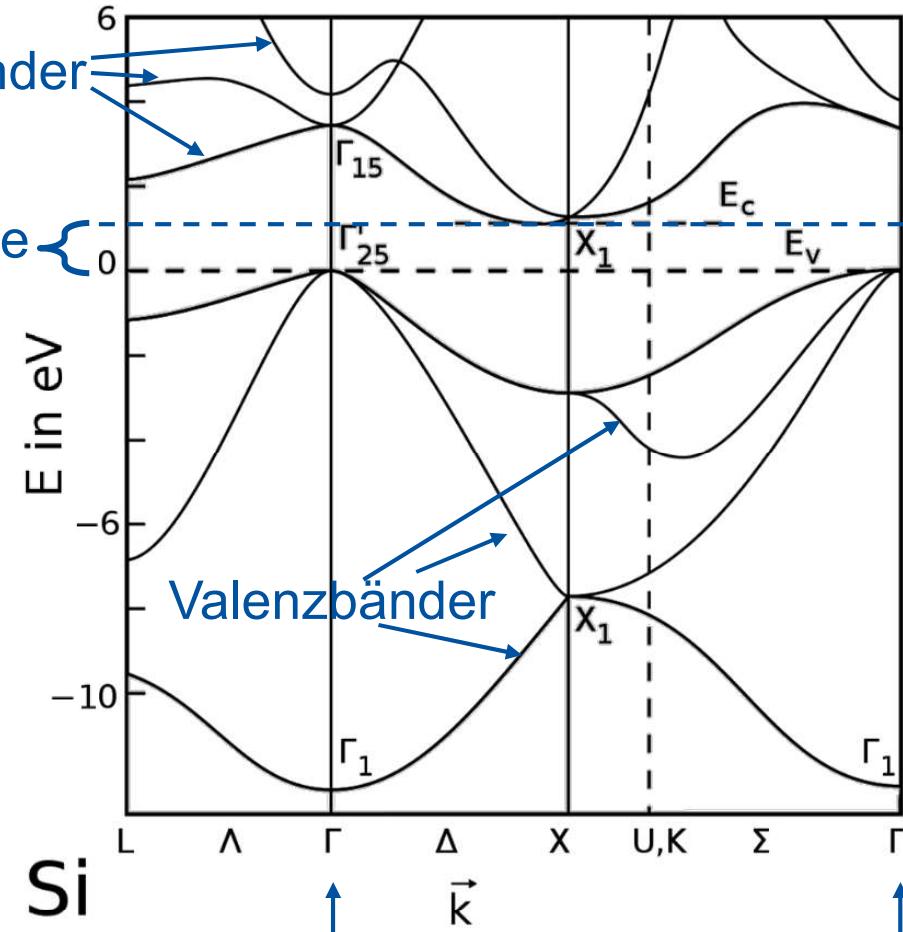
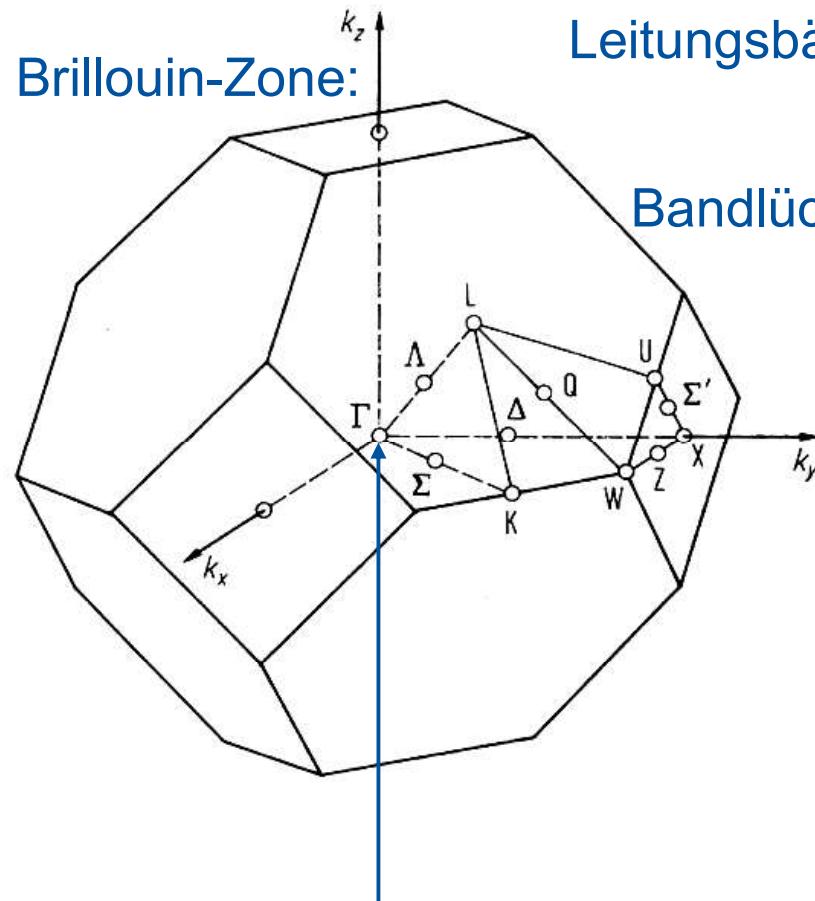
Der Reziproke Raum ist der Raum der k -Vektoren (Wellenvektoren).
Das 3-dimensionale $E(k)$ -Banddiagramm wird in der 3D-Brillouin-Zone dargestellt.

Brillouin-Zone: Beispiel

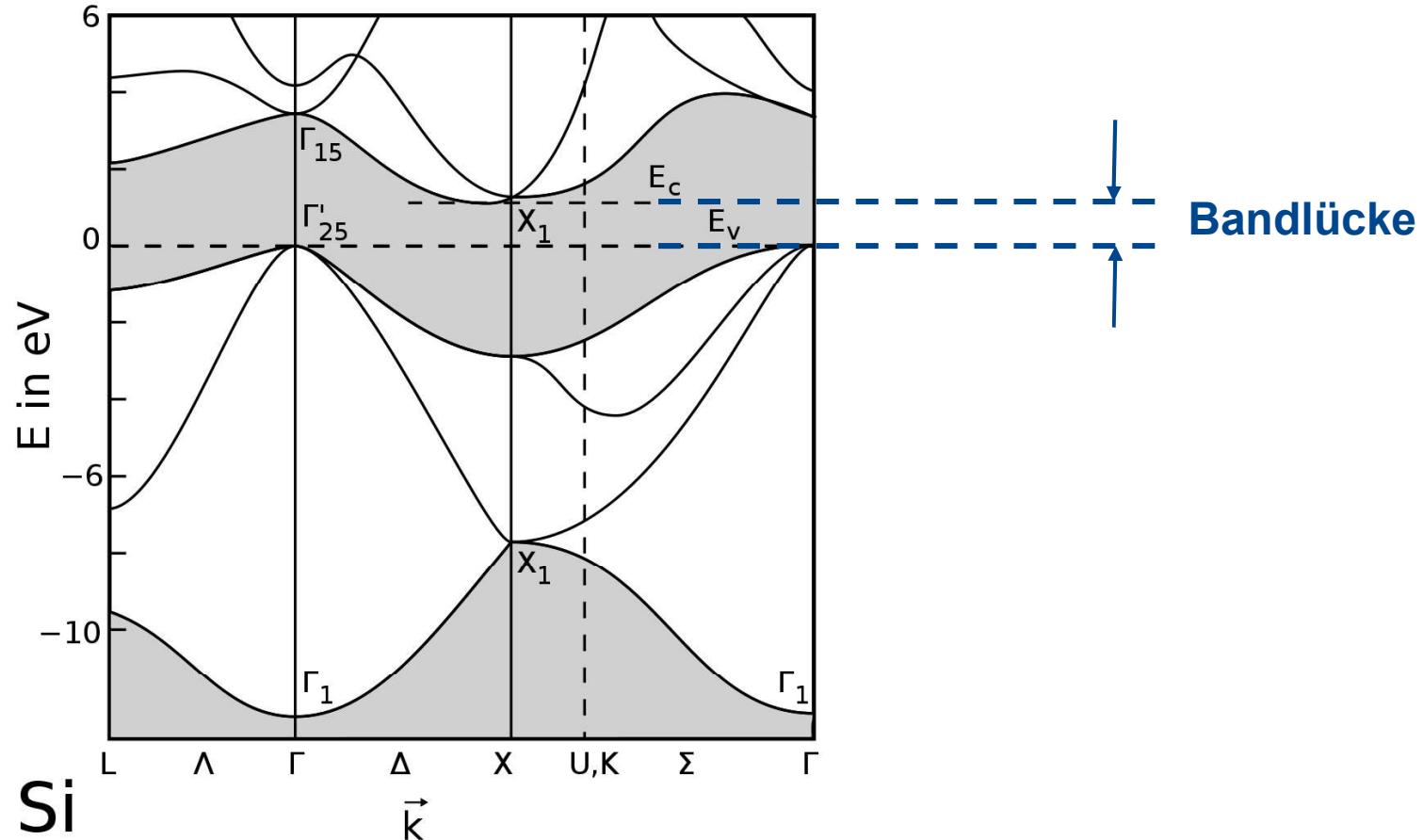
- Sie beschreiben symmetrische Polyeder im reziproken Gitter
 Die erste Brillouin-Zone ist ein (i. A. unregelmäßiger) Polyeder im Impulsraum.
- Innerhalb der ersten Brillouin-Zone (1. BZ) werden einige wichtige hochsymmetrische Punkte des fcc-Gitters benannt:
 - Γ-Punkt:** Das Zentrum der 1. BZ
 - X-Punkt:** Der Schnittpunkt der Achse [100] mit dem Rand der 1. BZ
 - L-Punkt:** Der Schnittpunkt der Raumdiagonale [111] mit dem Rand der 1. BZ
 - K-Punkt:** Der Schnittpunkt der Diagonale in einer Ebene [110] mit dem Rand der 1. BZ



Bandschema eines realen Kristalls: Silizium



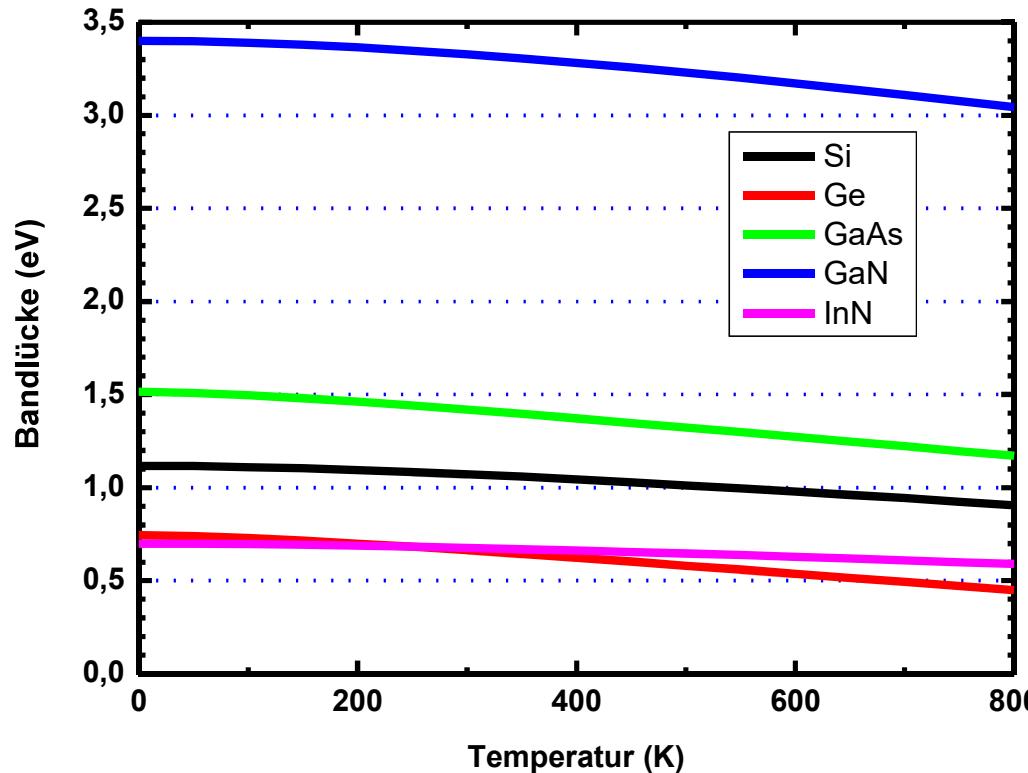
Bandstruktur von Silizium



nicht besetzte Zustände sind grau eingefärbt

- Teilchenbewegung wird durch „Wellenmechanik“ (Quantenmechanik) beschrieben
- Teilchenimpuls ($p = \hbar k$) bestimmt Wellenlänge $\lambda = h / p$
- Elektronen, deren k -Vektor innerhalb der Brillouin-Zone liegt, bewegen sich ähnlich wie freie Elektronen durch den Kristall
- Periodisches Kristallgitter stoppt resonante Wellen ($k = n\pi/a$), deren k -Vektor einem Randpunkt der Brillouin-Zone entspricht.
- Bandlücke (Lücke in der Zustandsdichte $D(E)$) ist eine Folge des periodischen Kristallgitters.
- Nicht die Periodizität allein, sondern die konkrete Atomanordnung führt zur Bandlücke!
 - Auch Metalle können Kristallstruktur aufweisen
- Auch nichtperiodische Änderungen in der Potential führen zur Bildung einer Bandstruktur
 - auch amorphe Materialien können eine Bandlücke aufweisen

Temperaturabhängigkeit der Bandlücke



→ Die Bandlücke wird mit steigender Temperatur kleiner

Temperaturabhängigkeit der Bandlücke

$$E_g(T) = E_g(T = 0K) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$$

Varshni-Formel
 (1967, benannt nach
 Y. P. Varshni (geb. 1932)

Varshni-Parameter für verschiedene Halbleiter

	$E_g(T = 0 K)$ in eV	α in 10^{-4} eV/K	β in K
Si	1,170	4,73	636
Ge	0,744	4,774	235
GaAs	1,515	5,405	204
GaN	3,4	9,09	830
AlN	6,2	17,99	1462
InN	0,7	2,45	624

Die Darstellung erfolgt im Impuls-Raum (k-Raum), dem kristallografische Richtungen zugeordnet werden können

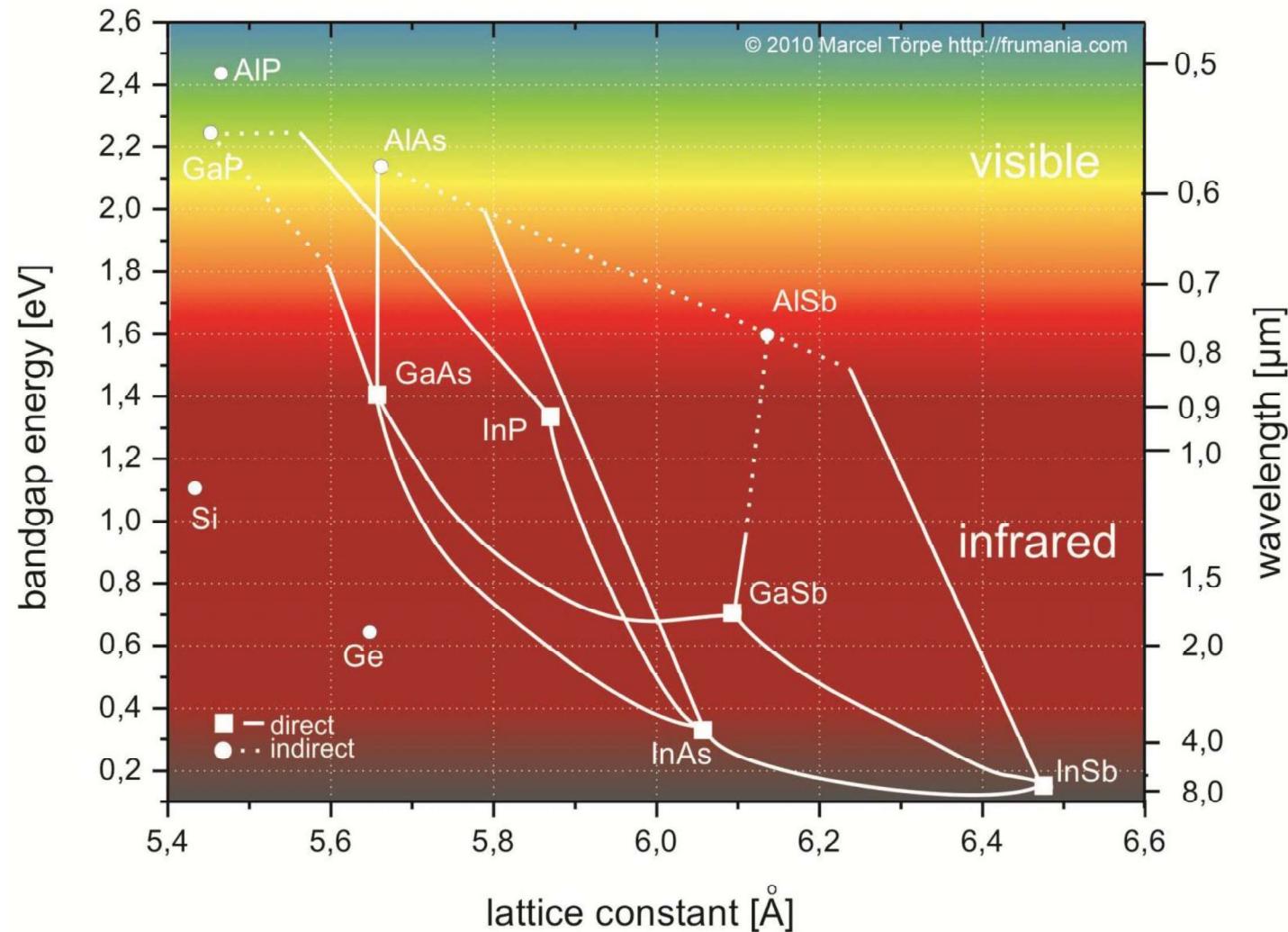
Die Energiebänder sind keine Geraden; sie hängen von der Lage (Richtung) im Kristall ab

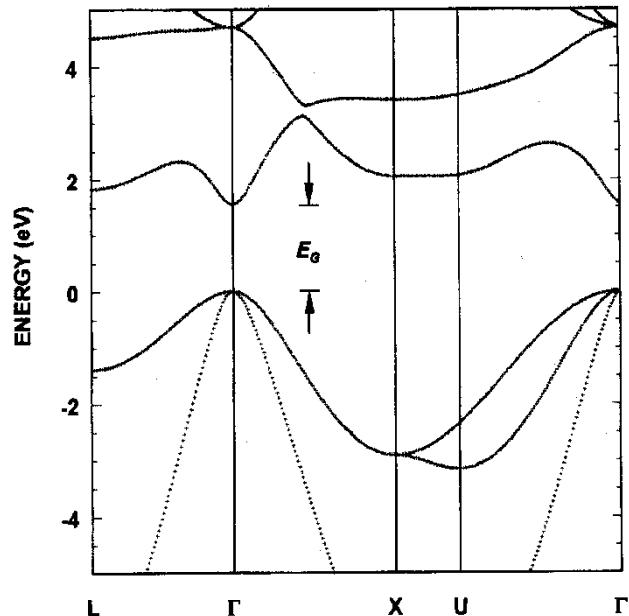
Die energetisch günstigsten Übergänge finden immer zwischen Minimum des Leitungsbandes und Maximum des Valenzbandes statt (geringste Energie E_g)

Der Bandlücke kann eine Wellenlänge zugeordnet werden

$$\lambda(E_g) = \frac{hc}{E_g} = \frac{1240\text{nm} \cdot eV}{E_g(eV)}$$

Direkte und indirekte Verbindungshalbleiter

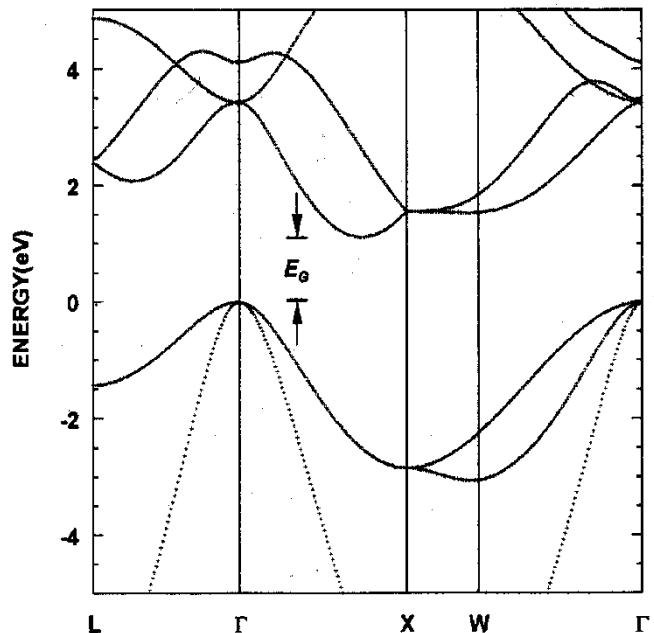




Das Minimum des LB und das Maximum des VB liegen beim selben k-Wert

→ Beim Übergang muss ein Elektron des Valenzenbandes die Energie $E_g = E_{LB} - E_{VB}$ aufnehmen, um in das Leitungsbandminimum beim selben k-Wert zu gelangen

- Das Elektron ändert seinen Impuls ($p \sim k$) dabei nicht!
- Ein derartiger Übergang ist energetisch einfach
- Wir sprechen vom **DIREKTEN Halbleiter**

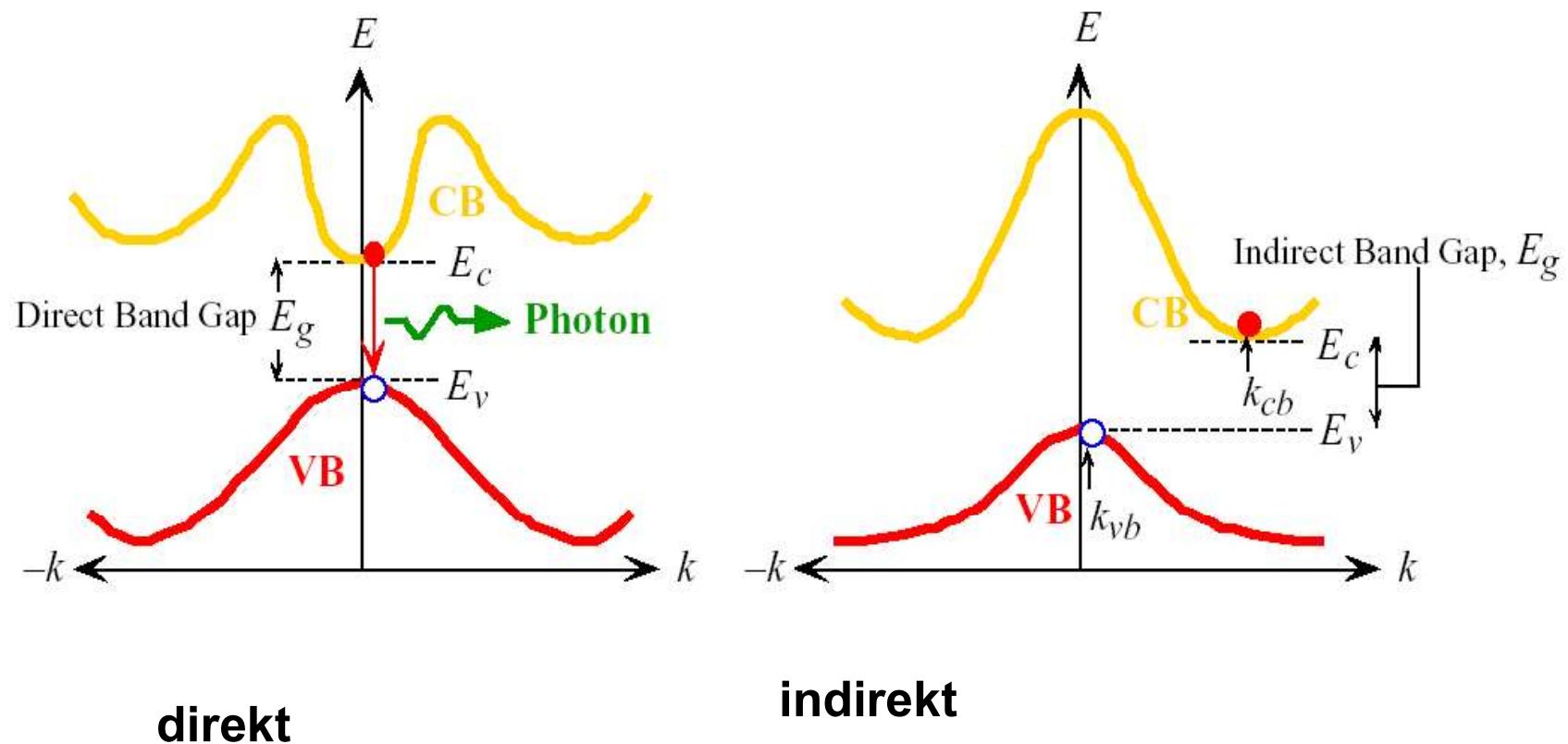


Das Minimum des LB und das Maximum des VB liegen beim verschiedenen k-Werten

→ Beim Übergang muss man dem Elektron des Valenzenbandes neben der Energie $E_g = E_{LB} - E_{VB}$ auch noch einen Impuls $\Delta p \sim (k_{LB} - k_{VB})$ zuführen, um in das Leitungsbandminimum zu gelangen

- Das Elektron muss seinen Impuls ändern!
- Ein derartiger Übergang ist energetisch wenig wahrscheinlich
- Wir sprechen vom **INDIREKTEN Halbleiter**

Direkter vs. Indirekter Übergang (schematisch)



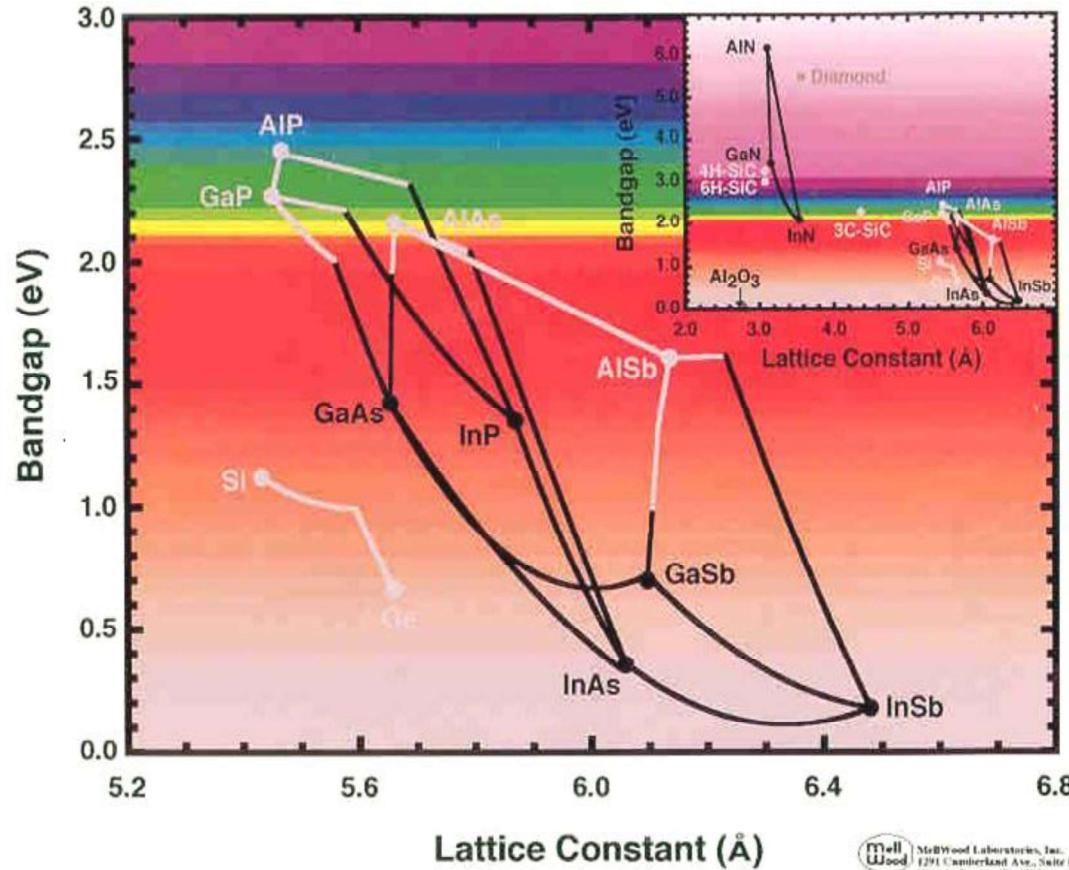
Indirekter Halbleiter und Optik: Beispiel Si

- $E_g = 1.12 \text{ eV}$ (bei RT)
→ Licht $< 1.1 \mu\text{m}$ ($h\nu > E_g$) wäre nötig um ein Valenzelektron ins Leitungsband zu heben
aber
- Der zusätzlich notwendige Impuls beträgt
 $\Delta p = h 0.85/a$ (a - Gitterkonstante = $5.43 \times 10^{-10} \text{ m}$)
Impuls des Photonen: $p_{\text{phon}} = h/\lambda$
für $\lambda = 1.1 \mu\text{m}$: $p_{\text{phon}}/\Delta p = 0.0006$
→ $\Delta p \sim 1700 p_{\text{phon}}$
→ Die Absorption eines Photons reicht nicht aus für einen Übergang zwischen VB und LB.
→ **Indirekte Halbleiter sind optisch nicht aktiv!**

Direkter vs. Indirekter Halbleiter

	Direkt	Indirekt
$E_V(\text{max})$ und $E_C(\text{min})$ bei	gleichem k	verschiedenen k
Impulsänderung beim Übergang	nein	notwendig
Übergangs- und damit Rekombinationswahrscheinlichkeit	hoch	niedrig
Lebensdauer angeregter Ladungsträger	kurz	lang
Optoelektronik (LED, Laser usw.)	ja	nein
Vertreter	Verbindungs-halbleiter	Si, Ge

Bandlücke und Gitterkonstante

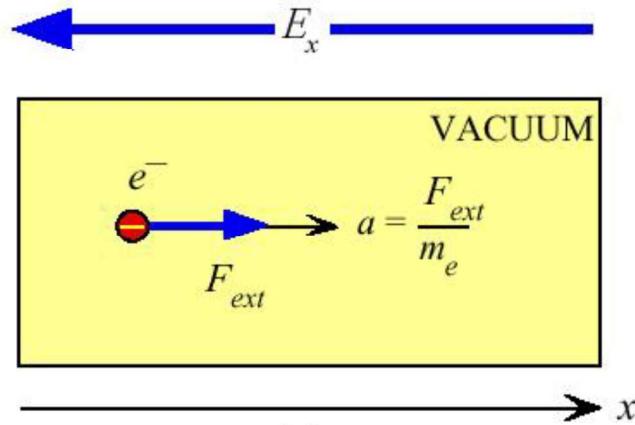


Weiß:
Schwarz:

indirekter Halbleiter
direkter Halbleiter

 McB Wood Laboratories, Inc.
1291 Cumberland Ave., Suite E
West Columbia, SC 29169

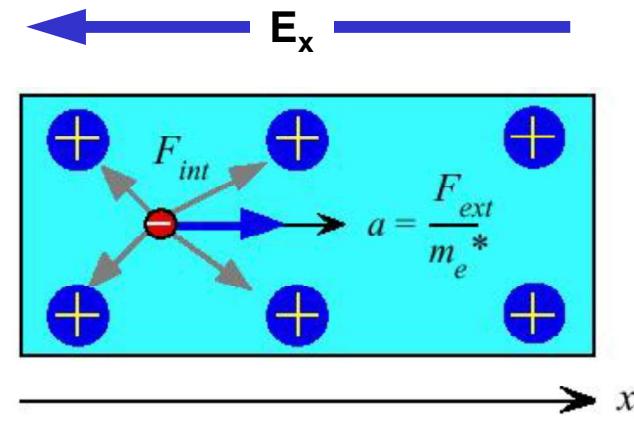
Modell der freien Elektronen



(a)

Elektron im Vakuum

Elektronenmasse m_e



(b)

Elektron im Kristall

Elektronenmasse m_e^*

**Einfluss des Kristalls wird berücksichtigt durch die Einführung der
Effektiven Masse m_e^***

	Si	Ge	GaAs	GaP
E_g (eV)	1.12	0.66	1.43	2.24
Entspricht Licht der Wellenlänge	1.1 µm	1.85 µm	860 nm	550 nm
Elektronenmasse	0.32 m₀	0.22 m₀	0.07 m₀	0.34 m₀
Löchermasse	0.69 m₀	0.37 m₀	0.50 m₀	0.50 m₀

m_0 = Masse eines freien Elektrons

→ Löcher- und Elektronenmassen sind unterschiedlich!

Effektive Masse

Zusammenhang zwischen Energie und Wellenzahl eines freien Elektrons:

$$E = \frac{m}{2} V^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Zusammenhang zwischen Energie und Wellenzahl:

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m} = \hbar V$$

Festkörper

Im Leitungsbandminimum ist:

und

$$\frac{dE}{dk} = 0 (= \hbar V)$$

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

Es ergibt sich die Definition einer formalen (effektiven) Masse:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

- Je flacher das Leitungsband am Minimum, desto schwerer wird die effektive Masse der Elektronen
- Massen können abhängig von kristallografischen Richtungen werden
- es gibt „schwere“ und „leichte“ Massen
(z.B. hh: *heavy holes* und lh: *light holes*)
- Zum Ladungstransport tragen alle Massen gewichtet nach ihren Anteilen (Zustandsdichte) bei
- Analoges gilt auch für Löcher im Valenzband

Elektrische Leitfähigkeit von Halbleitern

Geschwindigkeit der Ladungsträger ist proportional zur elektrische Feldstärke

$$V_n = -\mu_n E \quad V_p = \mu_p E$$

Die Proportionalitätskonstante wird als **Beweglichkeit** bezeichnet

$$\mu_n = \frac{q\tau_n}{m_n *}, \quad \mu_p = \frac{q\tau_p}{m_p *}$$

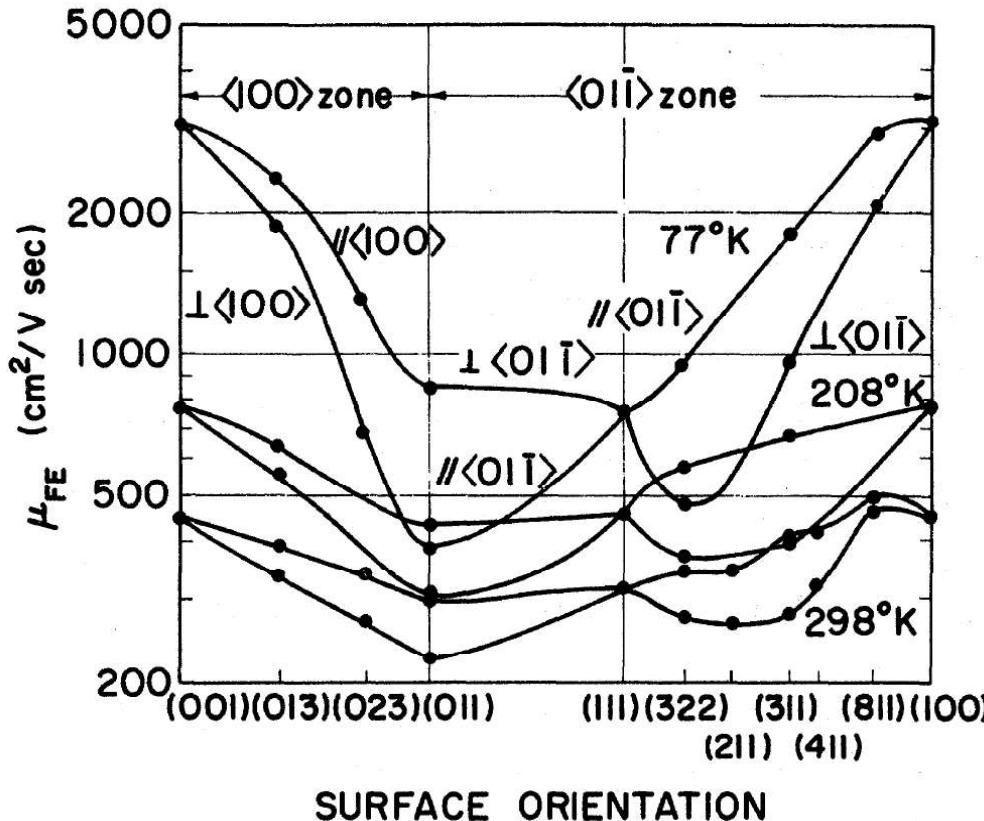
wobei:

m^* - effektive Masse

τ – Relaxationszeit (mittlere Flugzeit)

- Die Beweglichkeit von Löchern und Elektronen ist unterschiedlich
- Unterschiede in der Geschwindigkeit bei Transistoren die durch Elektronen (NMOS) bzw. durch Löcher (PMOS) funktionieren!!

Beweglichkeit ist richtungsabhängig!

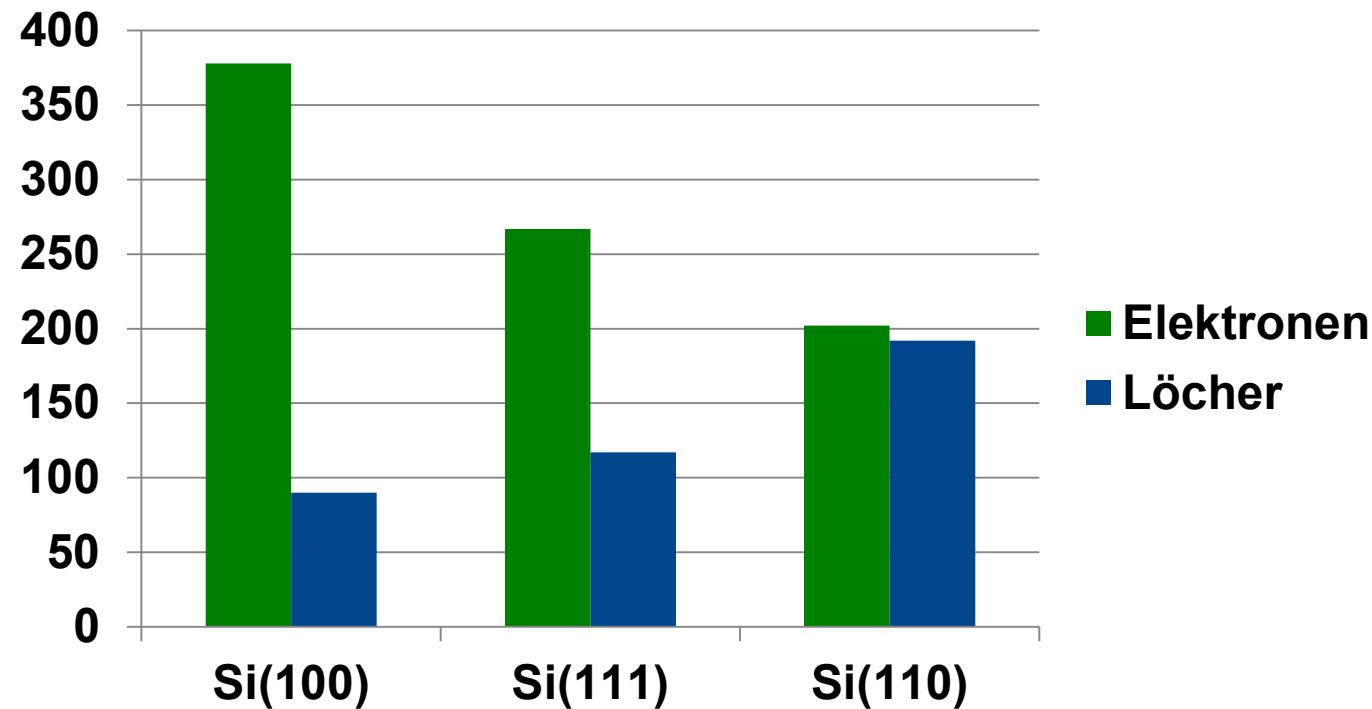


Theorie

basiert auf der
Anisotropie der
effektiven Massen

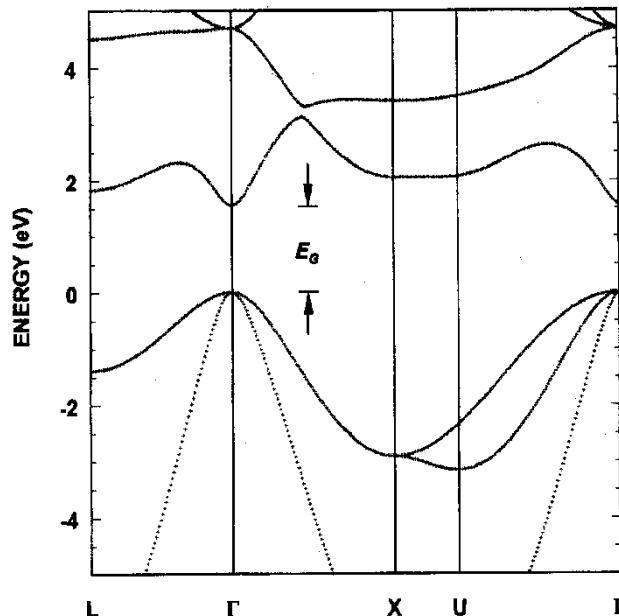
T. Sato et al. Phys. Rev B 4 (1971) 1950

Elektronen- und Löcherbeweglichkeiten in Si



gemessen an 20 µm Transistoren auf entsprechenden Substraten
bei 20 °C, $N_{inv} = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

B. Mereu et al. J. Appl. Phys. 100 (2006) 014504.

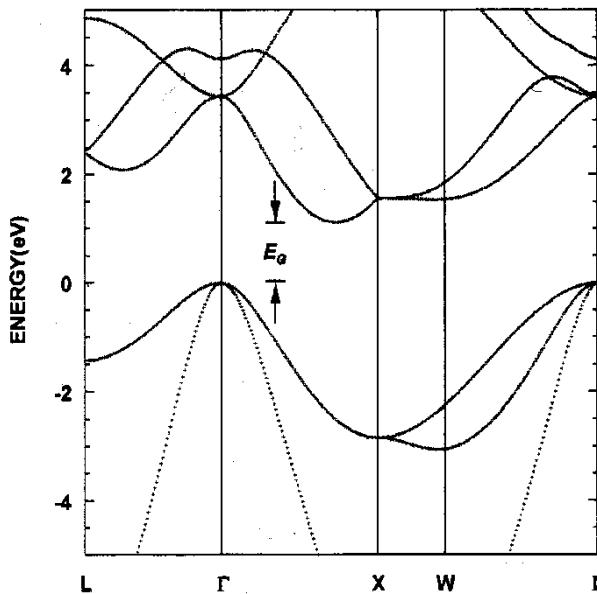


Beispiel: GaAs

Das Valenzband ist am Maximum entartet

- Es existieren zwei verschiedene $E(k)$ -Funktionen
- Zwei unterschiedliche effektive Löchermassen (hh und Ih)
- aber nur eine Elektronenmasse

Leichte und Schwere Massen



Beispiel: Silizium

- Indirekter Halbleiter
- Entarte Zustände für Elektronen und Löcher
- Leichte und schwere Massen tragen zur Leitung bei

Effektive Massen in unverspanntem Silizium

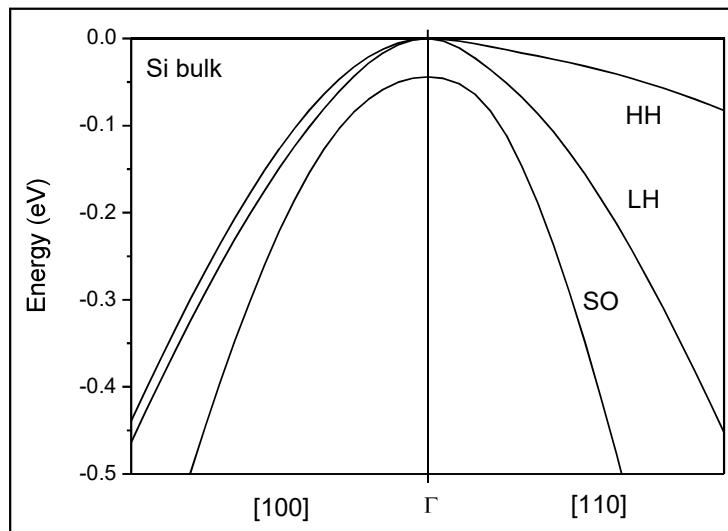
Effektive Elektronenmasse (s)	0.19
Effektive Elektronenmasse (p)	0.91
Effektive Elektronenmasse*	0.32
Effektive Löchermasse (lh)	0.16
Effektive Löchermasse (hh)	0.52
Effektive Löchermasse*	0.69

* Die effektiven Massen ergeben sich als gewichtete Mittelwert aller Massen in den entarteten Zuständen

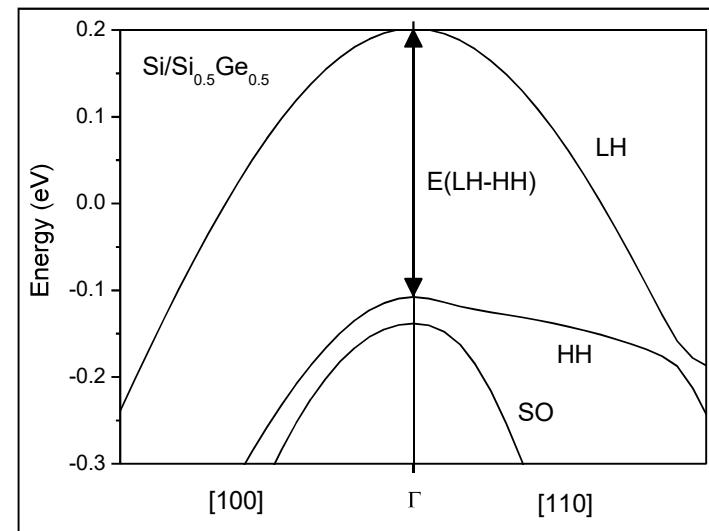
Spannungseinfluss auf das Valenzband

Schematische Darstellung

unverspannt



verspannt



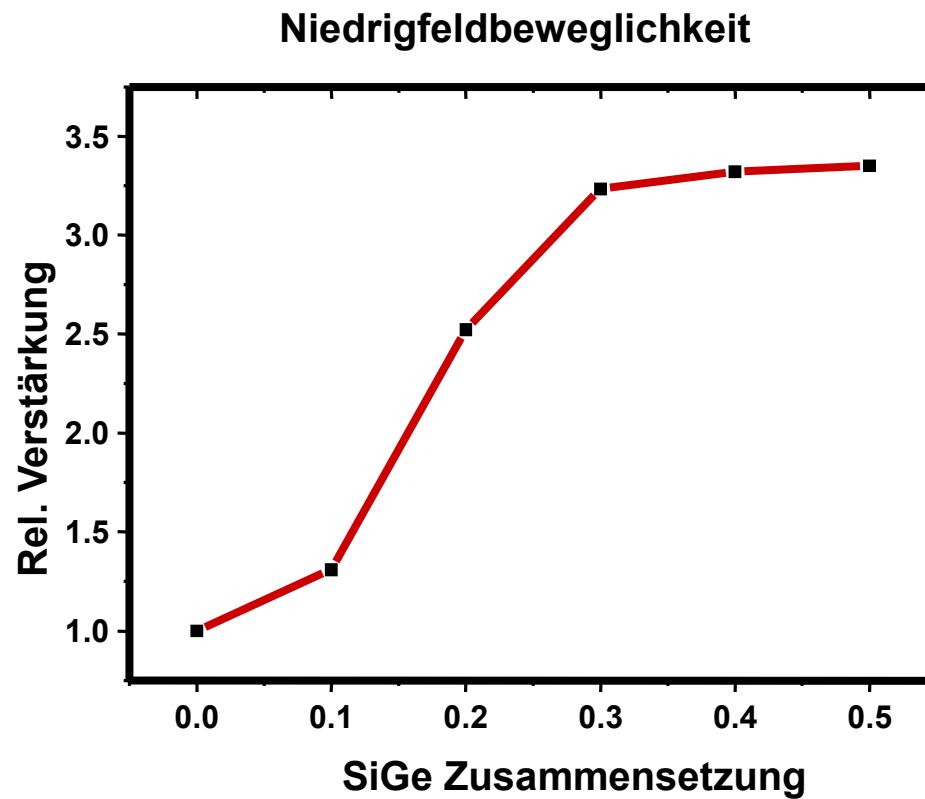
→ Aufhebung der Entartung

→ Die leichten Löcher werden energetisch günstiger für den Transport

Nutzung: verspannte Si-Schichten

- Die Struktur wird von kubisch zu tetragonal geändert
 - die Entartung der Bänder wird aufgehoben
 - die leichten Löcher liegen energetisch günstiger
- Es tragen nur noch die leichten Löcher zum Stromtransport in der Schichtebene bei
 - die effektive Masse der zum Stromfluss beitragenden Löcher wird deutlich kleiner
- die Elektronen können nicht mehr zwischen den nun nicht mehr energetisch identischen Zuständen springen (*intervalley scattering* wird reduziert)
 - Reduzierung der Streuung
 - Erhöhung der Ladungsträgerbeweglichkeit
- Dasselbe gilt auch für Elektronen

→ deutliche Erhöhung der Ladungsträgerbeweglichkeiten



Löcherbeweglichkeit versus Verspannung

- **Interferenz**
Verstärkung, Auslöschung, Weg- bzw. Phasenunterschied
- **Elektronen als Welle**
De Broglie Beziehung, Impuls, Wellenzahl usw.
- **Überlagerung von zwei Wellen**
Gleiche Wellen, entgegenlaufende Wellen, stehende Welle
- **Elektronen im Kastenpotential**
Einfacher Kasten, periodisches Kristallgitter
- **Bandstruktur von Halbleitern**
Bandlücke, Brillouin-Zone
Temperaturabhängigkeit
- **Direkte und indirekte Halbleiter**
- **Effektive Massen**
- **verspanntes Silizium**