

# 10 Halbleiter

## A10.1 Hall-Effekt und elektrische Leitfähigkeit von Halbleitern



Durch die Messung der elektrischen Leitfähigkeit und des Hall-Effekts als Funktion der Temperatur lassen sich zahlreiche charakteristische Parameter von Halbleitern bestimmen.

Da der Ladungstransport in Halbleitern sowohl durch die Elektronen im Leitungsband als auch die Löcher im Valenzband erfolgt, muss für den Hall-Koeffizienten der Zweiband-Ausdruck (vergleiche hierzu auch Aufgabe A7.10)

$$R_H = \frac{\sigma_h \mu_h - \sigma_e \mu_e}{(\sigma_e + \sigma_h)^2}.$$

verwendet werden, wobei  $\tau_{e,h}$  und  $m_{e,h}^*$  die Streuzeiten und effektiven Massen der beiden Ladungsträgersorten (Elektronen und Löcher) und  $\sigma_e = n_c e^2 \tau_e / m_e^*$  bzw.  $\sigma_h = p_v e^2 \tau_h / m_h^*$  die mit den beiden Ladungsträgertypen verbundenen elektrischen Leitfähigkeiten sind.

- (a) Leiten Sie den Ausdruck für  $R_H$  her und drücken Sie den Hall-Koeffizienten als Funktion der Beweglichkeiten und der Ladungsträgerdichten aus.
- (b) Leiten Sie Ausdrücke für den Hall-Koeffizienten eines Halbleiters bei reiner Eigenleitung und bei reiner Störstellenleitung (für  $n$ - und  $p$ -Halbleiter) ab und diskutieren Sie das Vorzeichen des Hall-Koeffizienten.
- (c) Wie lassen sich durch Messung der Temperaturabhängigkeit des Hall-Koeffizienten die Energielücke  $E_g$  eines Halbleiters sowie bei einem  $n$ -Typ Halbleiter der Abstand  $E_d$  des Donatorniveaus von der Leitungsbandkante bzw. bei einem  $p$ -Typ Halbleiter der Abstand  $E_a$  des Akzeptorniveaus von der Valenzbandkante bestimmen?
- (d) Lässt sich durch Messung des Hall-Effekts die Dichte  $n_D$  der Donatoren in einem  $n$ -Typ Halbleiter bzw. die Dichte  $n_A$  der Akzeptoren in einem  $p$ -Typ Halbleiter bestimmen? Wenn ja, in welchem Temperaturbereich muss die Messung stattfinden?
- (e) Wie kann man durch Messung der Hall-Konstanten und der elektrischen Leitfähigkeit die Beweglichkeiten  $\mu_e$  und  $\mu_h$  im Fall reiner Störstellenleitung und im Fall reiner Eigenleitung bestimmen?  
Hinweis: Nehmen Sie an, dass Sie die effektiven Massen  $m_e^*$  bzw.  $m_h^*$  bereits durch Messung der Zyklotronresonanz bestimmt haben.

### Lösung

- (a) Um den Zweiband-Modell-Ausdruck für den Hall-Koeffizienten abzuleiten, müssen wir nur beachten, dass sich die Ströme von Elektronen und Löchern addieren. Wir wiederholen zunächst die Ableitung des Hall-Koeffizienten  $R_H$  im Einband-Modell (gewöhnli-

cher Hall-Effekt) im Rahmen des Drude-Modells. Unter Berücksichtigung der Lorentz-Kraft verallgemeinert sich die Relaxationsgleichung für die elektrische Stromdichte  $\mathbf{J}_q$  (vergleiche hierzu Aufgabe A7.7, Gleichung A7.7.11):

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{J} = \frac{nq^2}{m^*} [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}] . \quad (\text{A10.1.1})$$

Unter Benutzung einer harmonischen Zeitabhängigkeit der Stromdichte  $\mathbf{J}(t) = \mathbf{J}_q \exp(-i\omega t)$  ergibt sich

$$\left( -i\omega + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{J}_q = \frac{nq^2}{m^*} [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}] . \quad (\text{A10.1.2})$$

Mittels der Zyklotronfrequenz  $\omega_c = \frac{q\mathbf{B}}{m^*}$  und der Stromdichte  $\mathbf{J}_q = qn\mathbf{v}$  erhalten wir im Limes  $\omega\tau \ll 1$ :

$$\mathbf{J}_q = \frac{nq^2\tau}{m^*} \mathbf{E} + \mathbf{J}_q \times \omega_c \tau , \quad (\text{A10.1.3})$$

bzw. mit der Leitfähigkeit  $\sigma_0 = \frac{nq^2\tau}{m^*}$  und  $\mathbf{s}_c = \omega_c \tau$

$$\mathbf{J}_q = \sigma_0 \mathbf{E} + \mathbf{J}_q \times \mathbf{s}_c . \quad (\text{A10.1.4})$$

Erweitern wir diese Gleichung mit dem Kreuzprodukt  $\times \mathbf{s}_c$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_q \times \mathbf{s}_c &= \sigma_0 \mathbf{E} \times \mathbf{s}_c + (\mathbf{J}_q \times \mathbf{s}_c) \times \mathbf{s}_c \\ &= \sigma_0 \mathbf{E} \times \mathbf{s}_c - \mathbf{s}_c^2 \mathbf{J}_q + \mathbf{s}_c (\mathbf{s}_c \cdot \mathbf{J}_q) , \end{aligned} \quad (\text{A10.1.5})$$

führt dies auf

$$\mathbf{J}_q = \frac{\sigma_0}{1 + \mathbf{s}_c^2} [\mathbf{E} - \mathbf{s}_c \times \mathbf{E} + \mathbf{s}_c (\mathbf{s}_c \cdot \mathbf{E})] . \quad (\text{A10.1.6})$$

Mit  $\mathbf{B} = B_z \mathbf{z}$  ergibt sich daraus

$$\mathbf{J}_q = \widehat{\sigma} \cdot \mathbf{E} = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c \tau)^2} \begin{pmatrix} 1 & +\omega_c \tau & 0 \\ -\omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + (\omega_c \tau)^2 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{E} . \quad (\text{A10.1.7})$$

Der inverse Zusammenhang zwischen  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{J}_q$  liefert den Widerstandstensor  $\widehat{\rho}$

$$\mathbf{E} = \widehat{\sigma}^{-1} \cdot \mathbf{J}_q = \widehat{\rho} \cdot \mathbf{J}_q . \quad (\text{A10.1.8})$$

Hierbei ist

$$\begin{aligned} \widehat{\rho} &= \frac{1}{\sigma_{xx}^2 \sigma_{zz} + \sigma_{xy}^2 \sigma_{zz}} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \sigma_{zz} & -\sigma_{xy} \sigma_{zz} & 0 \\ +\sigma_{xy} \sigma_{zz} & \sigma_{xx} \sigma_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{xy}^2 - \sigma_{zz}^2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sigma_0} \begin{pmatrix} 1 & +\omega_c \tau & 0 \\ -\omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sigma_0} \begin{pmatrix} 1 & +\mu B_z & 0 \\ -\mu B_z & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} , \end{aligned} \quad (\text{A10.1.9})$$

mit der Beweglichkeit  $\mu = \frac{q\tau}{m^*} = \frac{\omega_c}{B_z}$ . Nehmen wir an, dass  $\mathbf{J}_q = J_x \mathbf{x}$ , so gilt

$$E_y = \rho_{yx} J_x = -\frac{\omega_c \tau}{\sigma_0} J_x = -\frac{\mu B_z}{\sigma_0} J_x = R_H B_z J_x, \quad (\text{A10.1.10})$$

mit dem Hall-Koeffizienten

$$R_H = \frac{\rho_{yx}}{B_z} = \frac{1}{B_z} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} = -\frac{\mu}{\sigma_0} = -\frac{1}{nq}. \quad (\text{A10.1.11})$$

Wir betrachten nun den Fall, dass in einem Halbleiter sowohl Elektronen  $q = -e$  als auch Löcher  $q = +e$  zur Leitfähigkeit beitragen (Zweiband-Modell). In diesem Fall müssen wir die Ströme der Elektronen und der Löcher addieren:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_e + \mathbf{J}_h = (\widehat{\sigma}_e + \widehat{\sigma}_h) \cdot \mathbf{E}. \quad (\text{A10.1.12})$$

Für den Hall-Koeffizienten ergibt sich

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{1}{B_z} \frac{\sigma_{xy,e} + \sigma_{xy,h}}{(\sigma_{xx,e} + \sigma_{xx,h})^2 + (\sigma_{xy,e} + \sigma_{xy,h})^2} \\ &= \frac{1}{B_z} \frac{\sigma_h(1 + s_{c,e}^2)s_{c,h} + \sigma_e s_{c,e}(1 + s_{c,h}^2)}{\sigma_h^2(1 + s_{c,e}^2) + 2\sigma_e(\sigma_h + \sigma_h s_{c,e} s_{c,h}) + \sigma_e^2(1 + s_{c,h}^2)}, \end{aligned} \quad (\text{A10.1.13})$$

wobei wir die Beziehungen

$$\begin{aligned} s_{c,e} &= -\mu_e B_z = \omega_{c,e} \tau_e & s_{c,h} &= \mu_h B_z = \omega_{c,h} \tau_h \\ \mu_e &= \frac{e\tau_e}{m_e^*} & \mu_h &= \frac{e\tau_h}{m_h^*} \\ \sigma_e &= \sigma_{0,e} = n_c e \mu_e = \frac{n_c e^2 \tau_e}{m_e^*} & \sigma_h &= \sigma_{0,h} = p_v e \mu_h = \frac{p_v e^2 \tau_h}{m_h^*} \end{aligned}$$

benutzt haben. Hierbei ist  $p_v$  die Dichte der Löcher im Valenzband und  $n_c$  die Dichte der Elektronen im Leitungsband. Unter Vernachlässigung höherer Ordnungen in  $s_{c,e}$  und  $s_{c,h}$  erhalten wir

$$R_H \simeq \frac{1}{B_z} \frac{\sigma_e s_{c,e} + \sigma_h s_{c,h}}{(\sigma_e + \sigma_h)^2} = \frac{\sigma_h \mu_h - \sigma_e \mu_e}{(\sigma_e + \sigma_h)^2} = \frac{p_v \mu_h^2 - n_c \mu_e^2}{e(p_v \mu_h + n_c \mu_e)^2}. \quad (\text{A10.1.14})$$

(b) Bei reiner Eigenleitung ist  $n_c = p_v = n_i$  und für die Hall-Konstante ergibt sich

$$R_{H,i} = \frac{1}{n_i e} \frac{\mu_h - \mu_e}{\mu_h + \mu_e}. \quad (\text{A10.1.15})$$

Wir sehen, dass die Hall-Konstante positiv oder negativ sein kann, je nachdem ob  $\mu_h > \mu_e$  oder  $\mu_h < \mu_e$ .

Bei reiner Störstellenleitung können wir jeweils eine Ladungsträgersorte vernachlässigen und es ergibt sich aus (A10.1.15)

$$R_{H,e} = -\frac{1}{n_c e} \quad \text{oder} \quad R_{H,h} = +\frac{1}{p_v e}, \quad (\text{A10.1.16})$$

je nachdem ob reine  $n$ -Leitung ( $p_v$  vernachlässigbar) oder reine  $p$ -Leitung ( $n_c$  vernachlässigbar) vorliegt. Dieser Ausdruck entspricht dem bekannten Ergebnis für den Hall-Koeffizienten, das wir bei Vorliegen nur einer Ladungsträgersorte (Einband-Modell) erhalten.

- (c) Wir wollen nun noch diskutieren, wie wir durch Messung von  $R_H$  als Funktion der Temperatur die Größen  $E_g$ ,  $E_d$  und  $E_a$  bestimmen können:

- Zur Erinnerung sei hier angemerkt, dass bei intrinsischen Halbleitern die Dichte der Elektronen im Leitungsband  $n_c(T)$  und der Löcher im Valenzband  $p_v(T)$  gegeben sind durch

$$n_c(T) = n_c^{\text{eff}} e^{-\frac{E_c - \mu}{k_B T}} \propto T^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_c - \mu}{k_B T}} \quad (\text{A10.1.17})$$

$$p_v(T) = p_v^{\text{eff}} e^{\frac{E_v - \mu}{k_B T}} \propto T^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_v - \mu}{k_B T}}, \quad (\text{A10.1.18})$$

mit den effektiven Ladungsträgerdichten

$$n_c^{\text{eff}} = 2 \left( \frac{m_{e,\text{DOS}}^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (\text{A10.1.19})$$

$$p_v^{\text{eff}} = 2 \left( \frac{m_{h,\text{DOS}}^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}.$$

Hierbei bezeichnet  $m_{e,\text{DOS}}^*$  und  $m_{h,\text{DOS}}^*$  die effektiven Zustandsdichtemassen  $m_{\text{DOS}}^* = p^{2/3} (m_1^* m_2^* m_3^*)^{1/3}$  mit dem Entartungsfaktor  $p$ . Bilden wir das Produkt aus  $n_c$  und  $p_v$ , so lässt sich das chemische Potenzial eliminieren:

$$n_c(T) \cdot p_v(T) = 4 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^3 (m_{e,\text{DOS}}^* m_{h,\text{DOS}}^*)^{3/2} e^{-\frac{E_g}{k_B T}}. \quad (\text{A10.1.20})$$

Hierbei ist  $E_g = E_c - E_v$ . Für intrinsische Halbleiter gilt  $n_v = p_v = n_i$  und wir können schreiben

$$\begin{aligned} n_i(T) &= \sqrt{n_c(T) \cdot p_v(T)} \\ &= 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_{e,\text{DOS}}^* m_{h,\text{DOS}}^*)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}. \end{aligned} \quad (\text{A10.1.21})$$

Zur Bestimmung der Energielücke  $E_g$  messen wir  $R_{H,i}(T)$  [vgl. Gl. (A10.1.15)] als Funktion der Temperatur im Bereich hoher Temperaturen, wo die Dichte der Ladungsträger durch die thermisch aus dem Valenzband ins Leitungsband angeregten Ladungsträger dominiert wird (Eigenleitung). Für diese Temperaturabhängigkeit der intrinsischen Ladungsträgerdichte gilt somit

$$n_i(T) \propto T^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}. \quad (\text{A10.1.22})$$

Der Term  $(\mu_h - \mu_e)/(\mu_h + \mu_e)$  in (A10.1.15) zeigt keine Temperaturabhängigkeit, da sich diese durch die Quotientenbildung heraushebt. Wir erhalten dann

$$R_{H,i}(T) \propto \frac{e^{\frac{E_g}{2k_B T}}}{T^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{A10.1.23})$$

oder

$$\ln \left[ |R_{H,i}(T)| T^{\frac{3}{2}} \right] = \text{const} + \frac{E_g}{2k_B T} . \quad (\text{A10.1.24})$$

Tragen wir also  $\ln[|R_{H,i}(T)| T^{\frac{3}{2}}]$  gegen  $1/T$  auf, so erhalten wir eine Gerade mit der Steigung  $E_g/2k_B$ .

- Zur Bestimmung der Ionisationsenergie  $E_d$  der Donatoren in einem  $n$ -Halbleiter mit Hilfe des Hall-Effekts müssen wir den Hall-Effekt bei tiefen Temperaturen messen. In diesem Bereich können wir die thermisch aus dem Valenzband ins Leitungsband angeregten Ladungsträger vernachlässigen. Die Ladungsträgerdichte wird hier durch das Ausfrieren der Ladungsträger, die aus den Donatorniveaus ins Leitungsband angeregt sind, dominiert (Störstellenreserve). Wir dürfen für  $n_c(T)$  dann den Ausdruck [vergleiche hierzu (A10.2.8) in Aufgabe A10.2]

$$n_c(T) = \frac{2n_D}{1 + \sqrt{1 + 4 \frac{n_D}{n_c^{\text{eff}}} e^{\frac{E_d}{k_B T}}}} \\ \stackrel{T \rightarrow 0}{\simeq} \sqrt{n_D n_c^{\text{eff}}} e^{-\frac{E_d}{2k_B T}} \propto T^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{E_d}{2k_B T}} \quad (\text{A10.1.25})$$

verwenden und erhalten

$$\ln \left[ |R_{H,e}(T)| T^{\frac{3}{4}} \right] = \text{const} + \frac{E_d}{2k_B T} . \quad (\text{A10.1.26})$$

Tragen wir wiederum  $\ln[|R_{H,e}(T)| T^{\frac{3}{4}}]$  gegen  $1/T$  auf, so erhalten wir eine Gerade mit der Steigung  $E_d/2k_B$ . Eine analoge Betrachtung gilt für die Bestimmung der Ionisierungsenergie  $E_a$  der Akzeptoren in einem  $p$ -Halbleiter.

- (d) In einem  $n$ -Halbleiter, der keine Akzeptoren enthält, ist in einem weiten mittleren Temperaturbereich die Ladungsträgerdichte

$$n_c(T) = \frac{2n_D}{1 + \sqrt{1 + 4 \frac{n_D}{n_c^{\text{eff}}} e^{\frac{E_d}{k_B T}}}} \stackrel{k_B T > E_d}{\simeq} n_D = \text{const} . \quad (\text{A10.1.27})$$

In diesem Temperaturbereich sind alle Donatoren ionisiert und die intrinsische Ladungsträgerdichte kann noch vernachlässigt werden (Störstellenerschöpfung). Nach (A10.1.23) gilt für diesen Bereich dann

$$n_D = -\frac{1}{R_{H,e} e} . \quad (\text{A10.1.28})$$

Für einen reinen  $p$ -Halbleiter ohne Donatoren gilt entsprechend

$$n_A = +\frac{1}{R_{H,h} e} . \quad (\text{A10.1.29})$$

- (e) Die Beweglichkeiten  $\mu_e$  und  $\mu_h$  hängen über die Streuzeiten  $\tau_e$  und  $\tau_h$  von der Temperatur ab. Für den Temperaturbereich, in dem reine Störstellenleitung vorliegt, erhalten wir die Beweglichkeiten durch eine kombinierte Messung von  $R_{H,e}$  bzw.  $R_{H,h}$  und  $\sigma$ . Aus (A10.1.23) folgt

$$\mu_e = R_{H,e} \sigma \quad \text{und} \quad \mu_h = R_{H,h} \sigma. \quad (\text{A10.1.30})$$

Bei genügend hohen Temperaturen, wo reine Eigenleitung ( $n_c = p_v = n_i$ ) vorliegt, gilt ferner

$$\sigma = e(n_c \mu_e + p_v \mu_h) = e n_i (\mu_e + \mu_h), \quad (\text{A10.1.31})$$

woraus sich mit Hilfe von (A10.1.15) die Beziehung

$$R_{H,i} \sigma = \mu_h - \mu_e. \quad (\text{A10.1.32})$$

ergibt. Um aus den beiden Gleichungen (A10.1.31) und (A10.1.32) die Beweglichkeiten  $\mu_e$  und  $\mu_h$  zu berechnen, benötigen wir außer den gemessenen Größen  $R_{H,i}$  und  $\sigma$  noch die Elektronendichte  $n_i(T)$  bei Eigenleitung. Diese können wir aus [vergleiche (A10.1.21)]

$$\begin{aligned} n_i(T) &= \sqrt{n_c(T) \cdot p_v(T)} \\ &= 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_{e,\text{DOS}}^* m_{h,\text{DOS}}^*)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} \end{aligned} \quad (\text{A10.1.33})$$

berechnen, wenn wir neben der Energielücke  $E_g$  noch die effektiven Massen  $m_e^*$  und  $m_h^*$  kennen. Letztere können z. B. mit Hilfe der Zyklotron-Resonanz bestimmt werden.

Insgesamt sehen wir, dass wir durch Messung der elektrischen Leitfähigkeit und des Hall-Effekts sowie durch die Bestimmung der effektiven Massen mit Hilfe der Zyklotronresonanz alle relevanten Halbleiterparameter wie  $E_g$ ,  $E_a$ ,  $E_d$ ,  $n_D$ ,  $n_A$ ,  $\mu_e$  oder  $\mu_h$  bestimmen können.



## A10.2 Ladungsträgerdichte von Halbleitern

Betrachten Sie einen Halbleiter mit einer Donatorkonzentration von  $10^{19} \text{ m}^{-3}$ . Die Ionisationsenergie der Donatoren soll  $E_d = 1 \text{ meV}$  und die effektive Masse der Elektronen im Leitungsband  $m^* = 0.01 m_e$  betragen. Schätzen Sie die Konzentration der Leitungselektronen bei 4 und 300 K ab. Welchen Wert hat der Hall-Koeffizient? Nehmen Sie bei der Rechnung an, dass keine Akzeptoratomte vorhanden sind und dass  $E_g \gg k_B T$  ist.

### Lösung

Für den Fall  $E_g \gg k_B T$  können wir die thermisch aus dem Valenzband ins Leitungsband angeregten Ladungsträger vernachlässigen. In diesem Fall ist die Dichte  $n_c$  der Elektronen im Leitungsband gleich der Dichte  $n_D^+$  der ionisierten Donatoren. Das heißt, es gilt  $n_c = n_D^+$ .

Für die Dichte  $n_D^0$  der besetzten Donatorniveaus gilt

$$n_D^0 = \frac{n_D}{e^{(E_D - \mu)/k_B T} + 1}, \quad (\text{A10.2.1})$$

woraus wir  $n_D^+ = n_D - n_D^0$  erhalten und damit

$$n_c \simeq n_D^+ = n_D - n_D^0 = n_D \left( 1 - \frac{1}{e^{(E_D - \mu)/k_B T} + 1} \right) = \frac{n_D}{1 + e^{\frac{\mu - E_D}{k_B T}}} . \quad (\text{A10.2.2})$$

Mit Hilfe der Beziehung

$$n_c = 2 \left( \frac{m_{e,\text{DOS}}^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(E_c - \mu)/k_B T} = n_c^{\text{eff}} e^{-(E_c - \mu)/k_B T} \quad (\text{A10.2.3})$$

können wir das chemische Potenzial durch

$$e^{\mu/k_B T} = \frac{n_c}{n_c^{\text{eff}}} e^{E_c/k_B T} \quad (\text{A10.2.4})$$

ausdrücken und erhalten nach Einsetzen in (A10.2.2)

$$n_c(T) \simeq \frac{n_D}{1 + \frac{n_c}{n_c^{\text{eff}}} e^{E_d/k_B T}} . \quad (\text{A10.2.5})$$

Hierbei haben wir den Abstand  $E_d = E_c - E_D$  des Donatorniveaus  $E_D$  von der Leitungsbandkante  $E_c$  benutzt. Aus (A10.2.5) erhalten wir die quadratische Gleichung

$$n_c + \frac{n_c^2}{n_c^{\text{eff}}} e^{E_d/k_B T} \simeq n_D , \quad (\text{A10.2.6})$$

die sich mit der Abkürzung  $n_d = n_c^{\text{eff}} \exp(-E_d/k_B T)$  wie folgt umformen lässt:

$$\begin{aligned} n_c^2 + n_d n_c - n_D n_d &\simeq 0 \\ n_c &\simeq \frac{n_d}{2} \left[ \sqrt{1 + 4 \frac{n_D}{n_d}} - 1 \right] = \frac{2n_D}{1 + \sqrt{1 + 4 \frac{n_D}{n_d}}} . \end{aligned} \quad (\text{A10.2.7})$$

Dies können wir durch Einsetzen von  $n_d$  auf die endgültige Form

$$n_c(T) \simeq \frac{2n_D}{1 + \sqrt{1 + 4 \frac{n_D}{n_c^{\text{eff}}} e^{E_d/k_B T}}} \quad (\text{A10.2.8})$$

bringen. Setzen wir die angegebenen Werte ein, so erhalten wir die Konzentrationen

$$\begin{aligned} n_c(4 \text{ K}) &= 2.75 \times 10^{18} \text{ m}^{-3} \\ n_c(77 \text{ K}) &= 0.99 \times 10^{19} \text{ m}^{-3} \\ n_c(300 \text{ K}) &= 1.00 \times 10^{19} \text{ m}^{-3} . \end{aligned}$$

Wir sehen, dass bereits bei 77 K aufgrund des kleinen Abstands  $E_d = 1 \text{ meV}$  des Donatorniveaus von der Leitungsbandkante alle Donatoren ionisiert sind, so dass  $n_c \simeq n_D$ .

Es sei darauf hingewiesen, dass bei einer Energielücke von  $E_g = 1 \text{ eV}$  die intrinsische Ladungsträgerdichte

$$n_i(T) = \sqrt{n_c(T)p_v(T)} = 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_{e,\text{DOS}}^* m_{h,\text{DOS}}^*)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T} \quad (\text{A10.2.9})$$

aufgrund des immer noch sehr kleinen Exponentialfaktors bei 300 K nur etwa  $10^{14} - 10^{15} \text{ m}^{-3}$  beträgt (je nach Wert der effektiven Zustandsdichtemassen) und damit immer noch vernachlässigbar ist. Das heißt, dass die Ladungsträgerdichte des dotierten Halbleiters in einem weiten Temperaturbereich von weniger als 77 K bis weit oberhalb von Raumtemperatur in etwa konstant bleibt. Die in diesem Temperaturbereich beobachtete Variation des elektrischen Widerstands resultiert deshalb fast ausschließlich auf der Variation der Beweglichkeit.

Der Hall-Koeffizient  $R_H$  ist in dem Bereich reiner Störstellenleitung gegeben als  $R_H = -1/n_c e$ . Also  $R_H(4 \text{ K}) \approx -2.27 \frac{\text{m}^3}{\text{C}}$ ,  $R_H(77 \text{ K}) \approx -0.63 \frac{\text{m}^3}{\text{C}}$  und  $R_H(300 \text{ K}) \approx -0.625 \frac{\text{m}^3}{\text{C}}$ .



### A10.3 $p$ - $n$ Übergang

Wir betrachten eine Siliziumdiode mit einer Dotierung von  $n_D = 2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  und  $n_A = 2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  und einer Fläche von  $1 \text{ mm}^2$ . Berechnen Sie die Kapazität der Raumladungszone dieser  $p$ - $n$  Diode ( $\epsilon_{\text{Si}} = 11.7$ ). Wie ändert sich die Kapazität unter dem Einfluss einer angelegten Spannung?

#### Lösung

Zur Lösung der Aufgabe benutzen wir das Schottky-Modell (vergleiche R. Gross und A. Marx, *Festkörperphysik*, Walter de Gruyter (2018), Abschnitt 10.2.1). Wir gehen von einem abrupten  $p$ - $n$ -Übergang aus, bei dem sich die Konzentration der Dotieratome an der Grenzfläche, die senkrecht zur  $x$ -Achse verläuft, abrupt ändert:

$$n_A(x) = \begin{cases} n_A & \text{für } x < 0 \\ 0 & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (\text{A10.3.1})$$

$$n_D(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ n_D & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (\text{A10.3.2})$$

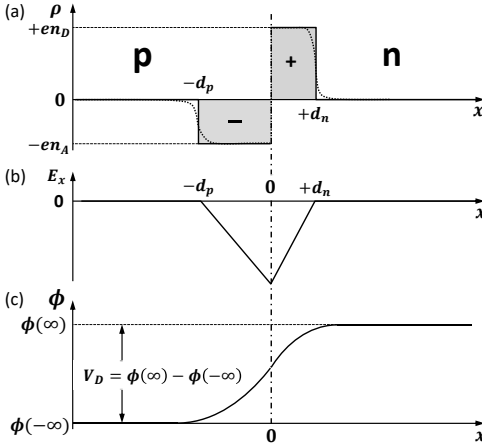
Nehmen wir an, dass alle Akzeptoren und Donatoren ionisiert sind, so ergibt sich die Ladungsdichte zu (siehe hierzu auch Abb. 10.1):

$$\rho(x < 0) = e [-n_A - n(x) + p(x)] \quad (\text{A10.3.3})$$

$$\rho(x > 0) = e [+n_D - n(x) + p(x)]. \quad (\text{A10.3.4})$$

Die ortsabhängigen Ladungsträgerkonzentrationen  $n(x)$  und  $p(x)$  hängen vom Abstand der jeweiligen Bandkante vom chemischen Potenzial  $\mu$  ab. Obwohl sich dieser Abstand nur langsam ändert, bewirkt die Fermi-Verteilungsfunktion, dass sich die Besetzungswahrscheinlichkeit innerhalb eines sehr schmalen Energiefensters von etwa  $2k_B T \simeq 50 \text{ meV}$ , das





**Abb. 10.1:** Schottky-Modell der Raumladungszone eines  $p$ - $n$ -Übergangs: (a) Raumladungsdichte  $\rho(x)$  (gestrichelt ist die realistische Form von  $\rho(x)$  angegeben, die im Rahmen des Schottky-Modells durch eine Stufenfunktion approximiert wird). (b) Verlauf des elektrischen Feldes  $E_x$  und (c) des Makropotenzials  $\phi(x)$ . Die potentielle Energie der Elektronen (Ladung  $-e$ ) beträgt  $-e\phi(x)$ .

viel kleiner als der Bandabstand  $E_g = 1.12 \text{ eV}$  von Silizium ist, von Null auf den maximalen Wert ändert. Vernachlässigen wir nun diese schmalen Übergangsbereiche, in denen diese Änderung erfolgt, so können wir die Konzentrationen  $n_D^+$  und  $n_A^-$  der geladenen Donatoren und Akzeptoren, die nicht durch freie Ladungsträger kompensiert werden, durch einfache Stufenfunktionen annähern (siehe Abb. 10.1). In dieser Näherung können wir die Raumladungsdichte schreiben als

$$\rho(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -d_p \\ -en_A & \text{für } -d_p < x < 0 \\ +en_D & \text{für } 0 < x < d_n \\ 0 & \text{für } x > d_n \end{cases} \quad (\text{A10.3.5})$$

Hierbei geben die Längen  $d_p$  und  $d_n$  die Ausdehnung der Raumladungszone im  $p$ - und  $n$ -Halbleiter an. Mit dieser stückweise konstanten Raumladungsdichte erhalten wir die Poisson-Gleichung  $-\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})/\epsilon\epsilon_0$  zu

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -d_p \\ \frac{+en_A}{\epsilon\epsilon_0} & \text{für } -d_p < x < 0 \\ \frac{-en_D}{\epsilon\epsilon_0} & \text{für } 0 < x < d_n \\ 0 & \text{für } x > d_n \end{cases} \quad (\text{A10.3.6})$$

Durch Integration ergibt sich

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi(-\infty) & \text{für } x < -d_p \\ \phi(-\infty) + \left(\frac{en_A}{2\epsilon\epsilon_0}\right)(d_p + x)^2 & \text{für } -d_p < x < 0 \\ \phi(+\infty) - \left(\frac{en_D}{2\epsilon\epsilon_0}\right)(d_n - x)^2 & \text{für } 0 < x < d_n \\ \phi(+\infty) & \text{für } x > d_n \end{cases} \quad (\text{A10.3.7})$$

Der Verlauf von  $\phi(x)$  und seiner 2. Ableitung (Raumladungsdichte) ist in Abb. 10.1 dargestellt.

Die Randbedingungen (Stetigkeit von  $\phi(x)$  und seiner 1. Ableitung) werden von der Lösung bei  $x = d_n$  und  $x = -d_p$  explizit erfüllt. Damit die 1. Ableitung von  $\phi(x)$  auch bei  $x = 0$  stetig ist, muss

$$n_D d_n = n_A d_p \quad (\text{A10.3.8})$$

gelten. Diese Forderung stellt sicher, dass die negative Raumladung im  $p$ -Halbleiter mit der positiven im  $n$ -Halbleiter übereinstimmt. Damit  $\phi(x)$  bei  $x = 0$  stetig ist, muss

$$\frac{e}{2\epsilon\epsilon_0} (n_D d_n^2 + n_A d_p^2) = \phi(+\infty) - \phi(-\infty) = V_D \quad (\text{A10.3.9})$$

gelten.

Aus (A10.3.8) und (A10.3.9) können wir bei bekannten Konzentrationen der Dotieratome die Ausdehnung der Raumladungszone berechnen. Wir erhalten

$$d_n = \left( \frac{2\epsilon\epsilon_0 V_D}{e} \frac{n_A/n_D}{n_A + n_D} \right)^{1/2} \quad (\text{A10.3.10})$$

$$d_p = \left( \frac{2\epsilon\epsilon_0 V_D}{e} \frac{n_D/n_A}{n_A + n_D} \right)^{1/2}. \quad (\text{A10.3.11})$$

Für Silizium können wir bei Raumtemperatur  $eV_D \simeq E_g = 1.12 \text{ eV}$  verwenden. Zusammen mit den angegebenen Konzentrationen der Dotieratome von  $n_A = 2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  und  $n_D = 2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  sowie der elektrischen Feldkonstante  $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ As/Vm}$  und der Permittivität von Silizium  $\epsilon_{\text{Si}} = 11.7$  erhalten wir dann

$$d_n = 257 \text{ nm}$$

$$d_p = 25.7 \text{ nm}.$$

Für die Berechnung der Kapazität der Raumladungszone benutzen wir die einfache Formel für einen Plattenkondensator. Dass wir dies tun dürfen, ist auf den ersten Blick nicht offensichtlich, da ja die Raumladung über die gesamte Dicke der Verarmungszone verteilt ist. Wir müssen aber berücksichtigen, dass wir zum Messen der Kapazität eine kleine Wechselspannung anlegen müssen, durch die Ladung nur an den Rändern der Verarmungszone hinzugefügt und entfernt wird, so dass die gemessene Kapazität nur durch die Permittivität des Halbleitermaterials, die Kontaktfläche und die Breite der Verarmungszone bestimmt wird. Bei einer Fläche von  $A = 1 \text{ mm}^2$  ergibt sich für die Kapazität der Raumladungszone

$$C_R = \frac{\epsilon_{\text{Si}} \epsilon_0 A}{d_p + d_n} = 3.66 \times 10^{-10} \text{ F}.$$

Wir können mit den obigen Werten noch die in der Raumladungszone herrschende elektrische Feldstärke zu

$$E = \frac{V_D}{d_p + d_n} = 3.96 \times 10^6 \text{ V/m} = 3.96 \times 10^4 \text{ V/cm}$$

abschätzen.

Wir wollen nun noch diskutieren, wie sich die Kapazität der Raumladungszone bei Anlegen einer Gleichspannung  $U_0$  ändert. Wir haben gesehen, dass im thermischen Gleichgewicht am  $p$ - $n$  Übergang eine Verarmungszone mit einer Breite von etwa 300 nm entsteht. Aufgrund der sehr geringen Ladungsträgerdichte in dieser Zone können wir in guter Näherung annehmen, dass im Fall einer angelegten Spannung diese vollkommen über die Verarmungszone abfällt. Das bedeutet, dass sich der Bandverlauf nur in dem Bereich der Raumladungszone ändert. Außerhalb der Raumladungszone verlaufen die Bänder und das Potenzial  $\phi(x)$  horizontal. Die Potenzialänderung über die Raumladungszone erhält mit der angelegten Spannung  $U_0$  den Wert

$$\phi(\infty) - \phi(-\infty) = V_D - U_0. \quad (\text{A10.3.12})$$

Die angelegte Spannung  $U_0$  verändert also die Breite der Raumladungszone, da die Größe  $V_D$  in (A10.3.10) und (A10.3.11) durch  $V_D - U_0$  ersetzt werden muss. Wir erhalten

$$d_n = d_n(U=0) \left(1 - \frac{U_0}{V_D}\right)^{1/2} \quad (\text{A10.3.13})$$

$$d_p = d_p(U=0) \left(1 - \frac{U_0}{V_D}\right)^{1/2}. \quad (\text{A10.3.14})$$

Wir sehen, dass die Breite der Raumladungszone für positive Spannungen (*Durchlassrichtung*) abnimmt, während sie für negative Spannungen (*Sperrrichtung*) zunimmt.

Um die Kapazität der Raumladungszone bei einer angelegten Gleichspannung  $U_0$  abzuschätzen, müssen wir wieder überlegen, welche Ladungsmenge durch eine kleine Wechselspannung  $\delta U$  an den Rändern der Verarmungszone hinzugefügt und entfernt wird. Die Ladungsmenge ist gegeben durch

$$\delta Q_R = en_D A \frac{d d_n}{d U} \Big|_{U_0} \delta U + en_A A \frac{d d_p}{d U} \Big|_{U_0} \delta U. \quad (\text{A10.3.15})$$

Hierbei können wir  $\delta Q_R$  als diejenige Ladungsmenge betrachten, die durch die Wechselspannung mit Amplitude  $\delta U$  auf einen Plattenkondensator der Fläche  $A$  geschoben wird. Wir können dann die spannungsabhängige Kapazität des  $p$ - $n$ -Übergangs schreiben als

$$C_R(U_0) = \left| \frac{d Q_R}{d U} \right| = \left[ en_D A d_n(0) + en_A A d_p(0) \right] \left| \frac{d}{d U} \left(1 - \frac{U}{V_D}\right)^{1/2} \right|_{U_0}. \quad (\text{A10.3.16})$$

Mit den Ausdrücken (A10.3.10) und (A10.3.13) erhalten wir

$$C_R(U_0) = A \left( \frac{n_A n_D}{n_A + n_D} \frac{e \epsilon \epsilon_0}{(V_D - U_0)} \right)^{1/2}. \quad (\text{A10.3.17})$$

Wir sehen, dass wir durch Messung der Raumladungskapazität  $C_R$  als Funktion der angelegten Gleichspannung Informationen über die Konzentrationen der Dotieratome gewinnen können. Für  $n_A \gg n_D$  erhalten wir

$$\frac{1}{C_R^2} = \frac{1}{A^2} \frac{1}{n_D} \frac{(V_D - U_0)}{e \epsilon \epsilon_0}. \quad (\text{A10.3.18})$$

Wir können deshalb  $1/C_R^2$  gegen  $U_0$  auftragen und aus der Steigung  $n_D$  bestimmen. Ferner können wir durch Extrapolation auf  $U_0 = 0$  die Diffusionsspannung  $V_D$  bestimmen.



#### A10.4 Solarzelle

Wir betrachten eine Silizium-Solarzelle, in deren Raumladungszone durch Lichtbestrahlung 0.01 Ladungsträger pro Sekunde und Si-Atom erzeugt werden.

- Berechnen Sie den Kurzschlussstrom und die Leerlaufspannung. Nehmen Sie hierzu eine Dicke der Raumladungszone von  $d = 100 \mu\text{m}$  und keine Rekombinationsverluste an.
- Berechnen Sie die optimale Arbeitsspannung bei einer Temperatur von  $20^\circ\text{C}$ .

#### Lösung

Zur Lösung der Aufgabe verwenden wir die folgenden Materialparameter von Silizium: Dichte  $\rho = 2336 \text{ kg/m}^3$ , Atommasse  $M_{\text{Si}} = 4.662 \times 10^{-26} \text{ kg}$ , Atomdichte  $n_{\text{Si}} = \rho/M_{\text{Si}} = 5.01 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$ .

- Zur Berechnung der Kurzschlussstromdichte  $J_L$  benutzen wir  $d = 100 \mu\text{m}$  und nehmen zur Vereinfachung ferner an, dass alle erzeugten Ladungsträger eingesammelt werden, dass also keine Rekombinationsverluste auftreten.<sup>1</sup> Mit dieser Annahme und der angegebenen Ladungsträgererzeugungsrate von  $r = 0.01 \text{ s}^{-1}$  pro Si-Atom erhalten wir

$$\begin{aligned} J_L &= e r n_{\text{Si}} d = 1.602 \times 10^{-19} \cdot 0.01 \cdot 5.01 \times 10^{28} \times 10^{-4} \text{ A/m}^2 \\ &= 8 \times 10^3 \text{ A/m}^2. \end{aligned} \quad (\text{A10.4.1})$$

Mit einem AM 1.5 Spektrum, das in etwa die Sonnenbestrahlung in Deutschland wiedergibt, wird in Si-Solarzellen eine theoretisch mögliche Kurzschlussstromdichte von nur  $460 \text{ A/m}^2$  erzeugt. Für die angegebene Erzeugungsrate von 0.01 Ladungsträgern pro Sekunde und Si-Atom müsste man deshalb eine sehr starke Lichtquelle verwenden.

Zur Bestimmung der Leerlaufspannung  $U_{\text{oc}}$  setzen wir die Gesamtstromdichte  $J$  (siehe Strom-Spannungs-Kennlinie in Abb. 10.2) durch die Solarzelle Null

$$J = 0 = J_s \left( e^{eU_{\text{oc}}/k_B T} - 1 \right) - J_L \quad (\text{A10.4.2})$$

und erhalten durch Auflösen nach  $U_{\text{oc}}$

$$U_{\text{oc}} = \frac{k_B T}{e} \ln \left( \frac{J_L}{J_s} + 1 \right) \simeq \frac{k_B T}{e} \ln \left( \frac{J_L}{J_s} \right). \quad (\text{A10.4.3})$$

Hierbei ist  $J_s$  die Sättigungsstromdichte, die bei nicht allzu hohen Temperaturen üblicherweise wesentlich kleiner als die durch die Beleuchtung verursachte Kurzschlussstromdichte  $J_L$  ist. Wir sehen aber, dass bei einer durch die Beleuchtungsstärke vorgegebenen Kurzschlussstromdichte die Kurzschlussspannung durch Erniedrigung der Sättigungsstromdichte erhöht werden kann.

<sup>1</sup> Da Si ein indirekter Halbleiter ist, muss die Breite der Raumladungszone typischerweise größer als etwa  $100 \mu\text{m}$  sein, um das einfallende Licht möglichst vollständig in der Raumladungszone zu absorbieren.

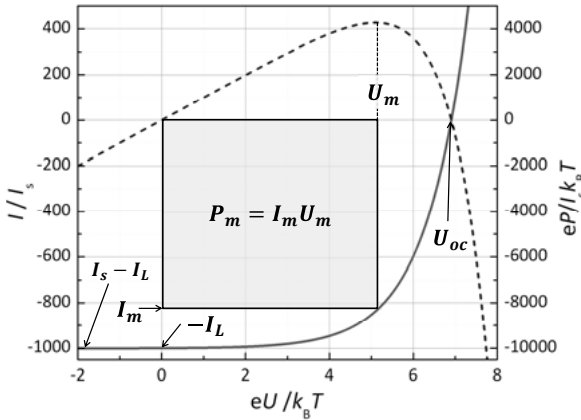


Abb. 10.2: Strom-Spannungs-Kennlinie einer Solarzelle für  $I_L/I_s = 1000$ . Die Leistung  $P = U \cdot I$  ist gestrichelt eingezeichnet. Sie besitzt ein Maximum bei der Spannung  $U_m$ . Die maximale Leistung der Solarzelle ergibt sich aus der grau eingezeichneten maximalen Fläche  $P_m = I_m \cdot U_m$ .

Die Sättigungsstromdichte

$$J_s = \left( \frac{eD_p}{L_p} p_n + \frac{eD_n}{L_n} n_p \right) \quad (\text{A10.4.4})$$

ist durch die Minoritätsladungsträgerdichten  $n_p$  (Elektronen im  $p$ -Halbleiter) und  $p_n$  (Löcher im  $n$ -Halbleiter) sowie die zugehörigen Diffusionskonstanten und Diffusionslängen gegeben. Wir benutzen  $p_n n_n = n_i^2$  und  $p_p n_p = n_i^2$  (Massenwirkungsgesetz) sowie  $n_n \simeq n_D$  und  $p_p \simeq n_A$ , so dass wir

$$\begin{aligned} J_s &= \left( \frac{eD_p}{L_p n_D} + \frac{eD_n}{L_n n_A} \right) n_i^2 \\ &= \left( \frac{eD_p}{L_p n_D} + \frac{eD_n}{L_n n_A} \right) 4 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^3 (m_{e,\text{DOS}}^* m_{h,\text{DOS}}^*)^{3/2} e^{-E_g/k_B T} \\ &= C T^\gamma e^{-E_g/k_B T} \end{aligned} \quad (\text{A10.4.5})$$

erhalten. Hierbei ist  $C$  eine temperaturunabhängige Materialkonstante und  $\gamma \simeq 3$ , da die Diffusionskonstanten und Diffusionslängen meist nur eine schwache Temperaturabhängigkeit besitzen. Für  $U_{oc}$  erhalten wir mit diesem Ausdruck

$$U_{oc} = \frac{k_B T}{e} \left[ \ln J_L - \ln C - \gamma \ln T + \frac{E_g}{k_B T} \right]. \quad (\text{A10.4.6})$$

Bei Raumtemperatur beträgt  $\frac{k_B T}{e} \gamma \ln T = 0.442 \text{ V}$ , so dass wir für eine Silizium-Solarzelle ( $V_g = E_g/e = 1.12 \text{ V}$ ) die Leerlaufspannung  $U_{oc} \simeq 0.678 \text{ V} + 0.0258 \text{ V} (\ln J_L - \ln C)$  erhalten. Die Leerlaufspannung hängt also auch von der Kurzschlussstromdichte  $J_L$  ab, die wiederum durch die Beleuchtungsstärke gegeben ist. Wir erwarten eine Zunahme von  $U_{oc}$  mit dem Logarithmus der Bestrahlungsstärke. Für Solarzellen auf der Basis von kristallinem Silizium werden Werte bis zu  $0.730 \text{ V}$  für ein AM 1.5 Spektrum gemessen.

Für die Temperaturabhängigkeit der Leerlaufspannung erhalten wir

$$\frac{dU_{oc}}{dT} = -\frac{k_B}{e} \gamma (1 + \ln T) + \frac{dV_g}{dT}. \quad (\text{A10.4.7})$$

Die Temperaturabhängigkeit der Bandlücke können wir mit der Varshni-Formel

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{aT^2}{T+b} \quad (\text{A10.4.8})$$

abschätzen (Si:  $a = 4.73 \times 10^{-4}$  eV/K,  $b = 636$  K; Ge:  $a = 4.774 \times 10^{-4}$  eV/K,  $b = 235$  K, GaAs:  $a = 5.405 \times 10^{-4}$  eV/K,  $b = 204$  K). Für Si-Solarzellen erhalten wir bei Raumtemperatur  $dU_{oc}/dT \approx -2$  mV/K.

- (b) Um die optimale Arbeitsspannung  $U_m$  zu bestimmen, betrachten wir die von der Solarzelle abgegebene Leistung

$$P = UI = UI_s (e^{eU/k_B T} - 1) - UI_L \quad (\text{A10.4.9})$$

und setzen ihre Ableitung gleich Null:

$$\frac{dP}{dU} = 0 = I_s e^{eU_m/k_B T} + I_s \frac{eU_m}{k_B T} e^{eU_m/k_B T} - I_s - I_L. \quad (\text{A10.4.10})$$

Daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} I_s \left( 1 + \frac{eU_m}{k_B T} \right) e^{eU_m/k_B T} &= I_s \left( 1 + \frac{I_L}{I_s} \right) \\ \ln \left( 1 + \frac{eU_m}{k_B T} \right) + \frac{eU_m}{k_B T} &= \ln \left( 1 + \frac{I_L}{I_s} \right) \\ U_m &= \frac{k_B T}{e} \ln \left( \frac{1 + \frac{I_L}{I_s}}{1 + \frac{eU_m}{k_B T}} \right). \end{aligned} \quad (\text{A10.4.11})$$

Verwenden wir den Ausdruck (A10.4.3) für  $U_{oc}$ , so können wir dies umschreiben in

$$U_m = U_{oc} - \frac{k_B T}{e} \ln \left( \frac{eU_m}{k_B T} + 1 \right). \quad (\text{A10.4.12})$$

Wir sehen, dass die optimale Arbeitsspannung  $U_m$  um einige  $k_B T/e = 25.8$  mV bei  $T = 300$  K unterhalb der Kurzschlussspannung  $U_{oc}$  liegt. Ersetzen wir in dem logarithmischen Term  $U_m$  näherungsweise durch  $U_{oc}$  und verwenden  $U_{oc} \approx 700$  mV, so erhalten wir  $U_m \approx 610$  mV.



### A10.5 Elektrischer Transport und Wärmetransport in Metallen und Halbleitern

Vergleichen Sie Metalle und Halbleiter hinsichtlich ihrer elektrischen und thermischen Transporteigenschaften:

- (a) Skizzieren Sie die Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstands für ein Metall und für einen intrinsischen Halbleiter. Welches sind die charakteristischen Temperaturabhängigkeiten, die Größenordnungen der Absolutwerte und welches sind die physikalischen Ursachen für die unterschiedlichen Beiträge?

- (b) Diskutieren Sie dasselbe für die thermische Leitfähigkeit von Metallen und Halbleitern bzw. Isolatoren.

### Lösung

- (a) **Metall:** Bei sehr tiefen Temperaturen wird der spezifische Widerstand  $\rho$  in Metallen konstant, da hier die temperaturunabhängige Streuung der Ladungsträger an Verunreinigungen dominiert. Mit ansteigender Temperatur wird dann die Streuung an Phononen wichtig. Für  $T < \Theta_D$  gilt  $\rho = \text{const} + T^\alpha$  mit  $\alpha$  im Bereich zwischen 2 und 5. Bei hohen Temperaturen gilt  $\rho \propto T$ , weil die Zahl der Phononen und damit die Elektron-Phonon-Streuung proportional zu  $T$  zunimmt. Typische Werte des spezifischen Widerstands von „guten“ Metallen liegen bei Raumtemperatur im Bereich weniger  $\mu\Omega \text{ cm}$ .

**Halbleiter:** Für die meisten Halbleiter ist die Energielücke  $E_g$  groß gegen  $k_B T$ . Für undotierte Halbleiter ist deshalb die Ladungsträgerdichte  $n_i \propto e^{-E_g/2k_B T}$ . Diese starke Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerdichte dominiert die Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstands  $\rho = 1/\sigma = 1/n_i e \mu \propto e^{2E_g/k_B T}$ . Die Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit  $\mu$  kann meist vernachlässigt werden. Sie wird aber bei dotierten Halbleitern wichtig, wo die Ladungsträgerdichte in einem weiten Temperaturbereich konstant ist (vergleiche hierzu Aufgabe A10.1 und A10.2). Der spezifische Widerstand von intrinsischen Halbleitern liegt bei Raumtemperatur typischerweise oberhalb von  $1 \Omega \text{ cm}$ .

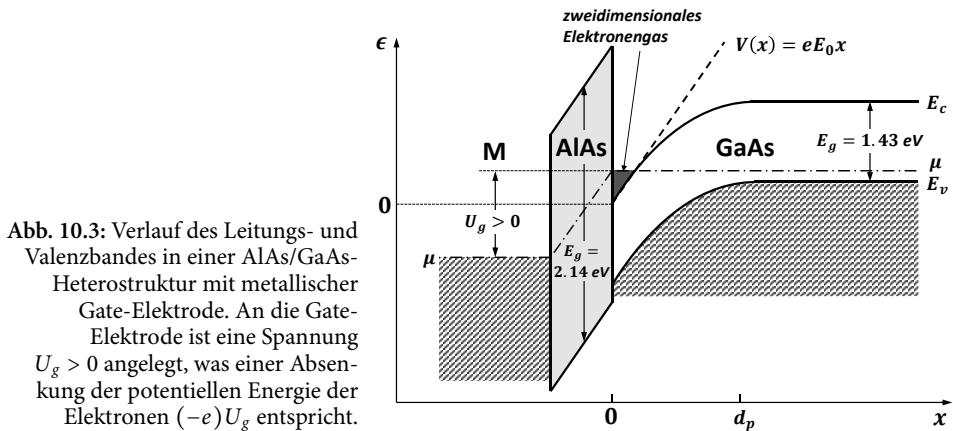
- (b) **Metall:** Das Wiedemann-Franz-Gesetz,  $\kappa = L \cdot \sigma T$  ( $L$  = Lorenz-Zahl), sagt eine lineare Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit bei tiefen Temperaturen voraus, da hier  $\sigma = 1/\rho = \text{const}$ . Oberhalb von  $\Theta_D$  ist  $\sigma = 1/\rho \propto 1/T$  und damit  $\kappa$  konstant. Der Anteil der Phononen an der thermischen Leitfähigkeit kann bei Metallen üblicherweise wegen der starken Streuung der Phononen an den Elektronen vernachlässigt werden. Die maximale Wärmeleitfähigkeit von reinen Metallen liegt im Bereich 100 bis 1000 W/mK.

**Halbleiter/Isolator:** Die thermische Leitfähigkeit von Halbleitern oder Isolatoren wird aufgrund der geringen Ladungsträgerdichte durch die Phononen dominiert. Bei hohen Temperaturen ( $T \gg \Theta_D$ ) ist  $\kappa \propto 1/T$ , weil die mittlere freie Weglänge der Phononen aufgrund der mit steigender Temperatur zunehmenden Phonon-Phonon-Streuung abnimmt. Bei sehr tiefen Temperaturen wird die mittlere freie Weglänge konstant (die Streuung an Verunreinigungen oder an Probenoberfläche dominiert). Die Wärmeleitfähigkeit variiert in diesem Temperaturbereich proportional zu  $T^3$ , da die Anzahl der Phononen proportional zu  $T^3$  mit steigender Temperatur zunimmt. Hochreine Halbleiter und Isolatoren können Wärmeleitfähigkeiten oberhalb von 1000 W/mK besitzen, also ähnliche Werte wie die besten Metalle. Allerdings basiert bei Metallen die Wärmeleitfähigkeit auf dem Elektronensystem, bei Halbleitern und Isolatoren dagegen auf dem Phononensystem.

### A10.6 Quantentrog in AlAs-GaAs-Heterostruktur

An der Grenzfläche der in der Abb. 10.3 gezeigten Struktur lässt sich mittels einer angelegten Spannung  $U > 0$  eine hochleitfähige zweidimensionale Elektronenschicht aufbauen. Das





elektrische Feld in der GaAs-Schicht an der Grenzfläche zum AlAs sei  $E_0 = 2 \times 10^5 \text{ V/cm}$  und die Dichte der Elektronen sei  $n_{2D} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

- (a) Berechnen Sie die Energiezustände der Elektronen in dem dreieckförmigen Potenzialtopf

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x \leq 0 \\ eE_0x & \text{für } x > 0 \end{cases}.$$

Das in Abb. 10.3 gezeigte endliche Grenzflächenpotenzial an der AlAs-GaAs Grenzfläche wird zur Vereinfachung als unendlich hoch angenommen.

- (b) Berechnen Sie die Fermi-Energie des zweidimensionalen Elektronengases, das sich im Potenzialtopf bildet.  
 (c) Wie beeinflussen die Elektronen das Potenzial und welche Auswirkungen hat dies für die Eigenenergien?

### Lösung

- (a) Die Schrödinger-Gleichung für unser eindimensionales Problem lautet:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + eE_0x \right] \Psi = \epsilon_n \Psi. \quad (\text{A10.6.1})$$

Durch Umformen erhalten wir

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - \left[ \frac{2m^*eE_0}{\hbar^2}x - \frac{2m^*\epsilon_n}{\hbar^2} \right] \Psi = 0. \quad (\text{A10.6.2})$$

Mit den Abkürzungen  $a = \frac{2m^*eE_0}{\hbar^2}$  und  $b_n = -\frac{2m^*\epsilon_n}{\hbar^2}$  wird daraus

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - (ax + b_n) \Psi = 0. \quad (\text{A10.6.3})$$



Man beachte, dass für die Einheiten von  $a$  und  $b_n$  gilt:  $[a] = \text{m}^{-3}$  und  $[b_n] = \text{m}^{-2}$ . Wir substituieren nun

$$\begin{aligned}\xi &= a^{1/3}x + a^{-2/3}b_n \\ x &= a^{-1/3}\xi - a^{-1}b_n \\ ax + b_n &= a^{2/3}\xi \\ \frac{d^2}{dx^2} &= a^{2/3} \frac{d^2}{d\xi^2}\end{aligned}\quad (\text{A10.6.4})$$

und erhalten

$$a^{2/3} \frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} - a^{2/3}\xi\Psi(\xi) = 0. \quad (\text{A10.6.5})$$

Wir können also Gleichung (A10.6.2) umschreiben in

$$\frac{\partial^2\Psi(\xi)}{\partial\xi^2} - \xi\Psi(\xi) = 0. \quad (\text{A10.6.6})$$

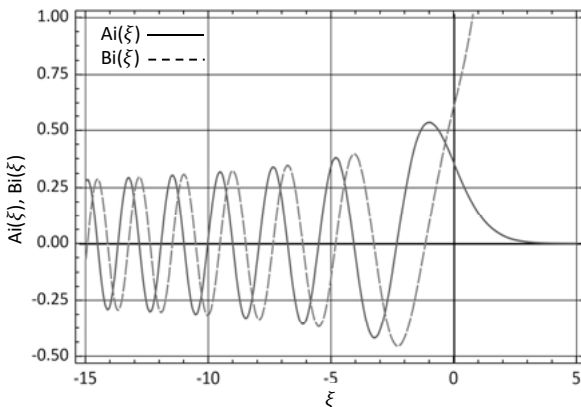
Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lautet

$$\Psi(\xi) = C_1 \text{Ai}(\xi) + C_2 \text{Bi}(\xi). \quad (\text{A10.6.7})$$

Hierbei sind Ai und Bi die Airy-Funktionen (siehe hierzu Abb. 10.4), die auf den englischen Mathematiker und Astronomen George Bidell Airy (1801–1892) zurückgehen,  $C_1$  und  $C_2$  sind Integrationskonstanten. Die Definitionen für Ai und Bi lauten

$$\text{Ai}(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dt \cos\left(\frac{t^3}{3} + \xi t\right) \quad (\text{A10.6.8})$$

$$\text{Bi}(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dt \left[ \exp\left(-\frac{t^3}{3} + \xi t\right) + \sin\left(\frac{t^3}{3} + \xi t\right) \right]. \quad (\text{A10.6.9})$$



**Abb. 10.4:** Die Airy-Funktionen Ai und Bi.

Die Funktion  $\text{Bi}(\xi)$  ist für große  $\xi$  divergent und somit unphysikalisch. Damit erhalten wir

$$\Psi(\xi) = C_1 \text{Ai}(\xi) = C_1 \text{Ai}(a^{1/3}x + a^{-2/3}b_n). \quad (\text{A10.6.10})$$

Da das Grenzflächenpotenzial an der AlAs-GaAs Grenzfläche als unendlich hoch angenommen wird, muss  $\Psi(x=0) = 0$  gelten. Die Eigenwerte der Energie  $\epsilon_n$  sind damit durch die Nullstellen (Knoten) der Airy-Funktionen gegeben:

$$\begin{aligned} x &= a^{-1/3}\xi - a^{-1}b_n = 0 \\ \xi &= a^{-2/3}b_n = -\frac{\epsilon_n}{\left(\frac{\hbar^2}{2m^*}e^2E_0^2\right)^{1/3}} \equiv -c_n. \end{aligned} \quad (\text{A10.6.11})$$

Wir erkennen, dass die Nullstellen der Airy-Funktion auf der negativen reellen Achse bei  $\xi = -c_n$  der Quantisierungsbedingung

$$\epsilon_n = c_n \cdot \left(\frac{\hbar^2 e^2 E_0^2}{2m^*}\right)^{1/3} \quad (\text{A10.6.12})$$

entsprechen. Die ersten Nullstellen der Airy-Funktion  $\text{Ai}(\xi = -c_n)$  lauten

$$\begin{aligned} c_1 &= 2.33811 \\ c_2 &= 4.08795 \\ c_3 &= 5.52056 \\ c_4 &= 6.78671 \\ c_5 &= 7.94413 \\ &\vdots \end{aligned}$$

Für große  $n$  lassen sich die Nullstellen in der asymptotischen Form

$$\begin{aligned} c_n &= t_n \left(1 + \frac{5}{48} \frac{1}{t_n^3} + \dots\right) \\ t_n &= \left[\frac{3\pi}{2} \left(n - \frac{1}{4}\right)\right]^{2/3} \end{aligned}$$

darstellen.

Eine einfachere Abschätzung der Eigenenergien können wir mit Hilfe der JWKB-Näherung (nach Harold Jeffreys, 1923 sowie Wentzel, Kramers und Brillouin, 1916) für die Schrödinger-Gleichung<sup>2</sup>

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = [\epsilon_n - V(x)] \Psi(x) \quad (\text{A10.6.13})$$

<sup>2</sup> siehe hierzu zum Beispiel *Quantenmechanik*, L. D. Landau, E. M. Lifschitz, Band III, Akademie-Verlag Berlin, (1979), Seite 159 ff.

unter Benutzung der Bohr-Sommerfeld-Quantisierung vornehmen. Zur Erinnerung sei hier angemerkt, dass die WKB-Näherung von dem Ansatz

$$\Psi(x) = ae^{iS(x)/\hbar} \quad (\text{A10.6.14})$$

ausgeht, in dem  $S(x)$  ein skalares Wirkungsfeld darstellt. Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung liefert

$$\frac{S'^2(x) - i\hbar S''(x)}{2m^*} = \epsilon_n - V(x). \quad (\text{A10.6.15})$$

Hier bedeutet  $S' = dS(x)/dx$  und  $S'' = d^2S(x)/dx^2$ . Setzen wir für  $S(x)$  folgende Entwicklung nach Potenzen in der Planckschen Konstante  $\hbar$  an

$$S(x) = S_0(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2(x) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^3 S_3(x) + \dots, \quad (\text{A10.6.16})$$

so erhalten wir in führender Ordnung

$$\frac{S_0'^2(x) - i\hbar [S_0''(x) + 2S_0'(x)S_1'(x)]}{2m^*} = \epsilon_n - V(x) \quad (\text{A10.6.17})$$

mit

$$\begin{aligned} S_0'(x) &= \sqrt{2m^* [\epsilon_n - V(x)]} \equiv p(x) \\ S_0(x) &= \int dx p(x) \\ S_1'(x) &= -\frac{S_0''(x)}{2S_0'(x)} = -\frac{p'(x)}{2p(x)} \\ S_1(x) &= -\frac{1}{2} \ln p(x). \end{aligned} \quad (\text{A10.6.18})$$

Damit lautet die Wellenfunktion in führender Ordnung der quasi-klassischen Näherung

$$\Psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} e^{i \int dx p(x)} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-i \int dx p(x)}. \quad (\text{A10.6.19})$$

Mit  $\epsilon_n = eE_0 x_n$  können wir dann die Bohr-Sommerfeld-Quantisierung in der folgenden Form schreiben<sup>3</sup>

$$\begin{aligned} \oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} &= 2 \int_0^{x_n} dx p(x) = 2 \int_0^{x_n} dx \sqrt{2m^* [\epsilon_n - V(x)]} = (n + \gamma) 2\pi\hbar \\ \pi(n + \gamma) &= \int_0^{x_n} dx \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} [\epsilon_n - eE_0 x]}. \end{aligned} \quad (\text{A10.6.20})$$

<sup>3</sup> siehe hierzu zum Beispiel *The Physics of Low Dimensional Semiconductors*, J. H. Davies, Cambridge University Press, Cambridge (1998).

Der Phasenfaktor  $\gamma$  beschreibt die quantenmechanische Nullpunktsbewegung und es gilt  $\gamma = 1/2$  für das Oszillatorpotenzial  $V(x) = m\omega^2 x^2/2$  und  $\gamma = -1/4$  für das lineare Potenzial  $V(x) = eE_0 x$ . Setzen wir [vergleiche (A10.6.12)]

$$\epsilon_n = c_n^{\text{WKB}} \cdot \left( \frac{\hbar^2 e^2 E_0^2}{2m^*} \right)^{1/3}, \quad (\text{A10.6.21})$$

so erhalten wir

$$\pi(n + \gamma) = \int_0^{x_n} dx \sqrt{a^{2/3} c_n^{\text{WKB}} - ax} = a^{1/3} \int_0^{x_n} dx \sqrt{c_n^{\text{WKB}} - a^{1/3} x}. \quad (\text{A10.6.22})$$

Unter Benutzung von

$$\int dx \sqrt{\alpha x + \beta} = \frac{2}{3\alpha} (\alpha x + \beta)^{3/2}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} \pi(n + \gamma) &= a^{1/3} \left\{ \frac{2}{3a^{1/3}} \left[ (c_n^{\text{WKB}})^{3/2} - \underbrace{(c_n^{\text{WKB}} - a^{1/3} x_n)^{3/2}}_{=0} \right] \right\} \\ &= \frac{2}{3} (c_n^{\text{WKB}})^{3/2} \end{aligned} \quad (\text{A10.6.23})$$

bzw.

$$c_n^{\text{WKB}} = \left[ \frac{3\pi}{2} (n + \gamma) \right]^{2/3} \equiv t_n \quad (\text{A10.6.24})$$

Mit der Identifikation  $\gamma = -1/4$  haben wir somit gezeigt, dass die Bohr-Sommerfeld-Quantisierung auf

$$c_n^{\text{WKB}} \equiv t_n = \left[ \frac{3\pi}{2} \left( n - \frac{1}{4} \right) \right]^{2/3} \quad (\text{A10.6.25})$$

führt und somit der Näherung für die Nullstellen der Airy-Funktion  $\text{Ai}(\xi = -c_n) = 0$  für große  $n$  entspricht. Die niedrigsten Werte für die genäherten Nullstellen  $c_n^{\text{WKB}}$  lauten:

$$\begin{aligned} c_1^{\text{WKB}} &= 2.32025 \quad (0.766\%) \\ c_2^{\text{WKB}} &= 4.08181 \quad (0.150\%) \\ c_3^{\text{WKB}} &= 5.51716 \quad (0.061\%) \\ c_4^{\text{WKB}} &= 6.78445 \quad (0.032\%) \\ c_5^{\text{WKB}} &= 7.94248 \quad (0.020\%) \\ &\vdots \end{aligned}$$

In Klammern ist jeweils der relative Fehler  $(c_n - c_n^{\text{WKB}})/c_n$  angegeben. Wir erkennen, dass die WKB-Näherung eine relative Genauigkeit im Sub-Prozentbereich liefert. Für  $n = 1$  und  $n = 2$  erhalten wir aus (A10.6.12) die Werte  $\epsilon_1 = 0.1434 \text{ eV}$  und  $\epsilon_2 = 0.2504 \text{ eV}$ .

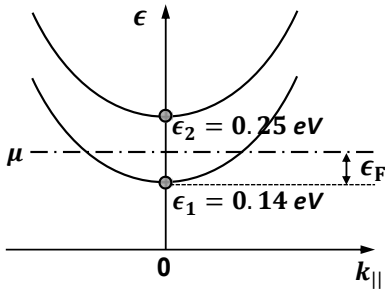


Abb. 10.5: Energieparabeln der 2D-Subbänder. Da das Fermi-Niveau nur 0.0342 eV über dem Grundzustandsniveau  $\epsilon_1 = 0.14$  eV liegt, ist nur ein Subband besetzt.

- (b) Mit der Dichte  $(L/2\pi)^2$  der Zustände im zweidimensionalen  $\mathbf{k}$ -Raum und der Fläche  $\pi k_F^2$  des Fermi-Kreises erhalten wir unter Berücksichtigung der Spin-Entartung

$$2 \left( \frac{L}{2\pi} \right)^2 \pi k_F^2 = N \quad (\text{A10.6.26})$$

und damit

$$k_F = \sqrt{\frac{2\pi N}{L^2}} = \sqrt{2\pi n_{2D}}. \quad (\text{A10.6.27})$$

Hieraus erhalten wir die Fermi-Energie

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} = \frac{\pi n_{2D} \hbar^2}{m^*}. \quad (\text{A10.6.28})$$

Mit  $n_{2D} = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  und  $m^* = 0.07 m_e$  erhalten wir  $\epsilon_F = 0.0342$  eV. Das Fermi-Niveau liegt also um 0.0342 eV über dem Grundzustandsniveau  $\epsilon_1 = 0.14$  eV. Da der nächst höhere Zustand bei  $\epsilon_2 = 0.25$  eV liegt, ist nur ein 2D-Subband besetzt (siehe hierzu Abb. 10.5).

- (c) Für die Bestimmung der Eigenenergien  $\epsilon_n$  müssen wir die exakte Form des Potentials  $V(x)$  kennen. Bei Halbleitern muss dabei die Existenz von Raumladungen berücksichtigt werden. Das bedeutet, dass  $V(x)$  von der Dichte der freien Elektronen und der ionisierten Dotieratome abhängt und deshalb die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\Psi(x)|^2$  in das Potenzial über die Elektronendichte eingeht. Wir müssen deshalb ein selbstkonsistentes Lösungsverfahren wählen. In einfachster Näherung sind wir oben von einem reinen Dreieckspotenzial ausgegangen. Wir wollen jetzt noch den Einfluss der Elektronendichte auf das Potenzial in einem Korrekturschritt erster Ordnung berücksichtigen. Wir können das durch die Elektronen selbst erzeugte elektrische Feld mit Hilfe des Gaußschen Theorems bestimmen. Hierzu starten wir mit der Poisson-Gleichung

$$-\Delta \phi(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon \epsilon_0}, \quad (\text{A10.6.29})$$

die uns den Zusammenhang zwischen einer Ladungsdichte  $\rho$  und dem resultierenden elektrostatischen Potenzial  $\phi$  angibt. Mit  $\Delta = \nabla \cdot \nabla$  und  $E = -\nabla \phi$  erhalten wir folgende Gleichung

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{E} dV = \int_V \frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon \epsilon_0} dV. \quad (\text{A10.6.30})$$

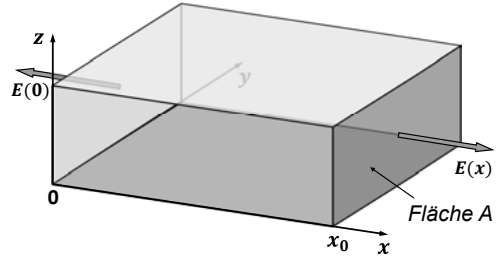


Abb. 10.6: Zur Ableitung der Form des Potentials unter Berücksichtigung der Existenz von Raumladungen.

Wir können nun den Gaußschen Satz verwenden und das Integral auf der linken Seite in ein Oberflächenintegral umwandeln. Da wir in unserem eindimensionalen Problem  $E \parallel x$  haben, müssen wir nur die Flächen senkrecht zur  $x$ -Richtung bei  $x = 0$  und  $x = x_0$  berücksichtigen (siehe hierzu Abb. 10.6). Die Ladungsdichte können wir schreiben als  $e|\Psi|^2 n_{2D}$ , wobei  $n_{2D}$  die Ladungsdichte senkrecht zur  $x$ -Richtung angibt, und das Volumenelement als  $dV = A dx$ . Damit erhalten wir

$$\oint_A \mathbf{E} \cdot d\mathbf{A} = \int_0^{x_0} \frac{e|\Psi(x)|^2 n_{2D}}{\epsilon \epsilon_0} A dx$$

$$E(x_0)A - E(0)A = \int_0^{x_0} \frac{e|\Psi(x)|^2 n_{2D}}{\epsilon \epsilon_0} A dx . \quad (\text{A10.6.31})$$

Mit  $E(x_0) = -E(0)$  erhalten wir

$$E(x_0) = \frac{en_{2D}}{2\epsilon\epsilon_0} \int_0^{x_0} |\Psi(x)|^2 dx . \quad (\text{A10.6.32})$$

Der resultierende Verlauf des Potentials ist in Abb. 10.7 schematisch dargestellt.

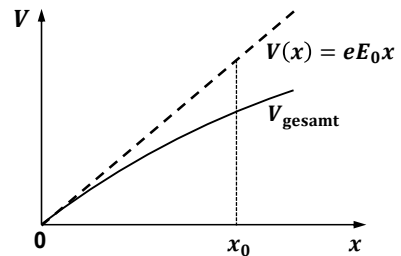
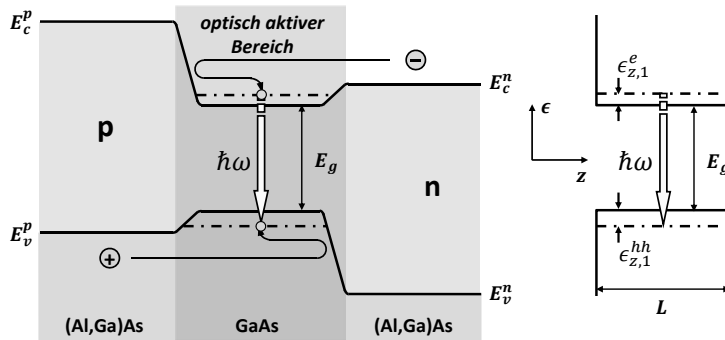


Abb. 10.7: Verlauf des exakten Potentials  $V(x)$  im Vergleich zu einem reinen dreieckförmigen Potentialtopf  $V(x) = eE_0 x$ .



### A10.7 Quantum Confinement und Halbleiter-Laser

Der III-V-Halbleiter GaAs besitzt eine Energielücke von 1.43 eV. Sie wollen mit diesem Material mittels Quantum Confinement einen Laser herstellen, dessen Emission im roten Spektralbereich bei 1.62 eV liegt. Nehmen Sie an, dass das Quantum Confinement in  $z$ -Richtung



**Abb. 10.8:** Schematische Darstellung des Bandverlaufs in einem Halbleiter-Laser mit einer optisch aktiven Zone der Breite  $L$ . Die optisch aktive Zone in der Mitte ist getönt markiert. Rechts ist der idealisierte Potenzialverlauf mit unendlich hohen Potenzialbarrieren an den (Al,Ga)As-GaAs Grenzflächen gezeigt.

durch zwei unendlich hohe Potenzialbarrieren mit Abstand  $L$  erfolgt und es sich bei dem Laser-Übergang um einen elektronischen Übergang aus einem Elektronenzustand im Leitungsband ( $m_e^* = 0.07 m_e$ ) in einen schweren Lochzustand ( $m_{hh}^* = 0.68 m_e$ ) im Valenzband handelt. Wie groß muss die Breite  $L$  des Quantentopfs sein?

### Lösung

Der Potenzialverlauf in einem (Al,Ga)As-GaAs Laser mit Quantum Confinement ist schematisch in Abb. 10.8 gezeigt. Die optisch aktive Zone stellt einen Potenzialtopf für Elektronen und Löcher statt. Für unsere Rechnung verwenden wir den in Abb. 10.8 rechts gezeigten Potenzialverlauf, d.h. wir betrachten einen Potenzialtopf der Breite  $L$  in  $z$ -Richtung mit unendlich hohen Wänden. Die erlaubten Wellenzahlen sind

$$k_z = n \frac{\pi}{L} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A10.7.1})$$

Damit erhalten wir die Confinement-Energie für den Elektronenzustand

$$\epsilon_{z,1}^e = \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( \frac{\pi}{L} \right)^2 \quad (\text{A10.7.2})$$

und äquivalent für den Lochzustand

$$\epsilon_{z,1}^{hh} = -\frac{E_g}{2} - \frac{\hbar^2}{2m_{hh}^*} \left( \frac{\pi}{L} \right)^2 \quad (\text{A10.7.3})$$

Der energetische Abstand zwischen den beiden Zuständen ergibt sich somit zu

$$\Delta\epsilon = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( \frac{\pi}{L} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{hh}^*} \left( \frac{\pi}{L} \right)^2. \quad (\text{A10.7.4})$$

Lösen wir diese Gleichung nach  $L$  auf, so erhalten wir

$$\begin{aligned}
 L^2 &= \pi^2 \frac{m_e^* + m_{hh}^*}{2m_e^* m_{hh}^*} \frac{\hbar^2}{\Delta\epsilon - E_g} \\
 &= \pi^2 \frac{0.07 + 0.68}{2m_e \cdot 0.07 \cdot 0.68} \frac{\hbar^2}{\Delta\epsilon - E_g}.
 \end{aligned} \quad (\text{A10.7.5})$$

Mit  $\Delta\epsilon - E_g = 0.19 \text{ eV}$  erhalten wir  $L = 58 \text{ nm}$ . Bei einer Gitterkonstante  $a = 5.6 \text{ \AA}$  von GaAs entspricht dies gerade einer Potenzialtopfbreite von etwa 10 Gitterkonstanten.



### A10.8 MOSFET

Ein  $n$ -Kanal MOSFET (metal-oxide-semiconductor field effect transistor) auf einem  $p$ -Typ Silizium-Wafer (siehe Abb. 10.9) soll eine Oxidschichtdicke von  $d = 12 \text{ nm}$  besitzen. Die Dotierung des  $p$ -Siliziums sei homogen und habe den Wert  $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Die Bandlücke beträgt  $E_g = 1.15 \text{ eV}$ , die Dielektrizitätskonstanten von Si und  $\text{SiO}_2$  sind  $\epsilon = 11.9$  und  $4$ , die longitudinale und transversale effektive Masse der Elektronenzustände im Leitungsband beträgt  $m_{el} = 0.19m_e$  und  $m_{et} = 0.98m_e$ , diejenige der schweren und leichten Löcher im Valenzband  $m_{hh} = 0.54m_e$  und  $m_{lh} = 0.15m_e$ .

- Berechnen Sie die Gate-Spannung  $U_g$ , die notwendig ist, um die Leitungsbandkante an der Grenzfläche Si/SiO<sub>2</sub> auf die Höhe des chemischen Potentials  $\mu$  zu bringen.
- Berechnen Sie die elektrische Feldstärke an der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche und die Breite  $d_p$  der Raumladungszone im  $p$ -Silizium?

### Lösung

Wir betrachten die in der Abbildung gezeigte ideale Metall-Isolator-Halbleiter (MIS) Struktur. Bei Verwendung von SiO<sub>2</sub> wird diese auch MOS-Diode genannt.

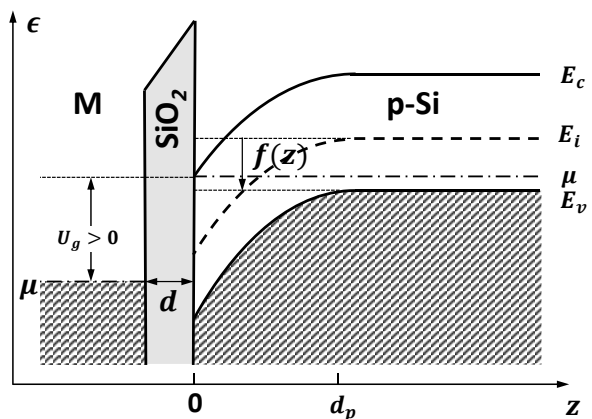


Abb. 10.9: Verlauf des Leitungs- und Valenzbandes in einem MOSFET. An die metallische Gate-Elektrode ist eine Spannung  $U_g > 0$  angelegt, was einer Absenkung der potentiellen Energie der Elektronen um  $(-e)U_g$  entspricht.



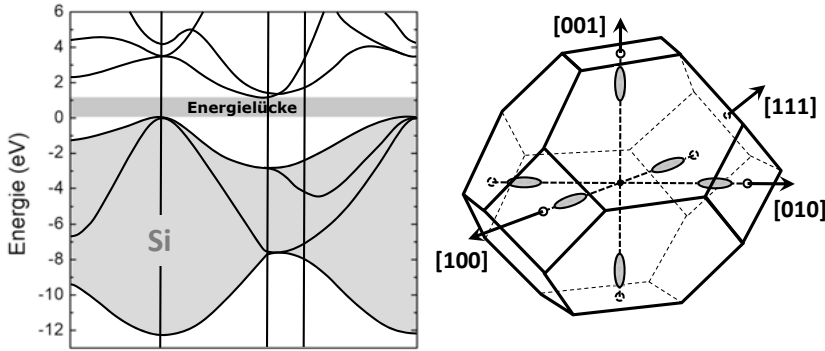


Abb. 10.10: Berechnete Bandstruktur von Si. Die vier Valenzbänder (unteres  $sp^3$ -Subband) sind grau hinterlegt. Rechts sind die Flächen konstanter Energie in der Nähe des Minimums des Leitungsbandes gezeigt. Aus Gründen der Symmetrie treten mehrere Bandminima in äquivalente Richtungen des  $k$ -Raums auf. Für Si sind dies die  $\{001\}$ -Richtungen.

(a) Mit der Dichte der Elektronen im Leitungsband

$$n_c = n_c^{\text{eff}} e^{-(E_c - \mu)/k_B T}, \quad (\text{A10.8.1})$$

wobei  $n_c^{\text{eff}}$  mit der mittleren Elektronenmasse  $m_e^*$  und der Entartung der sechs Leitungsbandtöler (Valley-Entartung) in Si ( $p = 6$ ) (siehe hierzu Abb. 10.10) durch

$$n_c^{\text{eff}} = 2 \cdot p \cdot \left( \frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (\text{A10.8.2})$$

gegeben ist, können wir mit dem Energienullpunkt  $E_v = 0$  bzw.  $E_c = E_g$  die Lage des Fermi-Niveaus zu

$$\mu = E_g + k_B T \ln \frac{n_c}{n_c^{\text{eff}}} \quad (\text{A10.8.3})$$

bestimmen. Die Ladungsträgerkonzentration  $n_c$  kann mittels des Massenwirkungsgesetzes

$$\begin{aligned} n_c \cdot p_v &= n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}} e^{-E_g/k_B T} \\ &= 4 \cdot p \cdot \left( \frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \left( \frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-E_g/k_B T} \end{aligned} \quad (\text{A10.8.4})$$

berechnet werden. Hierbei wurde die Dichte der Löcher im Valenzband

$$p_v = (p_{v,hh}^{\text{eff}} + p_{v,lh}^{\text{eff}}) e^{-\mu/k_B T} = \left( \frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\mu/k_B T} \quad (\text{A10.8.5})$$

mit der mittleren Lochmasse

$$m_h^* = \left( m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2} \right)^{2/3} \quad (\text{A10.8.6})$$

verwendet. Wir nehmen nun zur Vereinfachung an, dass alle Akzeptoren ionisiert sind:

$$p_v \approx n_A = 2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} . \quad (\text{A10.8.7})$$

Dies ist bei Raumtemperatur nur eine grobe Näherung, da die Akzeptor-Energie

$$E_{A,n} = \frac{m^*}{m_e \epsilon^2} E_{H,n} = \frac{m_h^* e^4}{2(4\pi\epsilon\epsilon_0 \hbar)^2} \frac{1}{n^2} \quad (\text{A10.8.8})$$

in unserem Fall für  $n = 1$  und  $\epsilon = 11.9$  den Wert  $E_{A,1} = 56.6 \text{ meV}$  ergibt. Hierbei sind  $E_{H,n}$  die Energieniveaus des Wasserstoffatoms,  $m_e$  die freie Elektronenmasse und  $\epsilon$  die Dielektrizitätskonstante.

Mit der Vereinfachung  $p_v \approx n_A$  ergibt sich

$$\begin{aligned} n_c &= \frac{n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}}}{n_A} e^{-E_g/k_B T} \\ &= 4 \cdot p \cdot \frac{\left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}}{n_A} e^{-E_g/k_B T} . \end{aligned} \quad (\text{A10.8.9})$$

Unter Berücksichtigung der leichten  $m_{lh}^*$  und schweren  $m_{hh}^*$  Löcher im Valenzband des  $p$ -Siliziums kann die mittlere Löchermasse  $m_h^*$  zu

$$m_h^* = \left( m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2} \right)^{2/3} \simeq 0.59 m_e \quad (\text{A10.8.10})$$

berechnet werden. Des Weiteren erhalten wir die mittlere Elektronenmasse  $m_e^*$  aus den longitudinalen  $m_{el} = 0.19 m_e$  und transversalen  $m_{et} = 0.98 m_e$  effektiven Massen zu

$$m_e^* = \left( m_{el}^* \cdot m_{et}^{*2} \right)^{1/3} \simeq 0.57 m_e . \quad (\text{A10.8.11})$$

Setzen wir die Werte für diese mittleren effektiven Massen, die Bandlücke und  $n_A = 2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  in Gleichung (A10.8.9) ein, so erhalten wir für  $T = 300 \text{ K}$

$$n_c \simeq 1.6 \times 10^4 \text{ cm}^{-3} \ll p_v . \quad (\text{A10.8.12})$$

Mittels Gleichung (A10.8.3) ergibt sich somit

$$\mu = E_g + k_B T \ln \frac{n_c}{n_c^{\text{eff}}} \simeq 0.282 \text{ eV} . \quad (\text{A10.8.13})$$

Um die Leitungsbandkante an der Grenzfläche  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  auf die Höhe des chemischen Potenzials zu bringen, müssen wir durch die angelegte Spannung  $U_g$  eine Potenzialdifferenz  $(E_g - \mu)/e \simeq 0.87 \text{ V}$  erzeugen. Bei tiefer Temperatur stimmt diese Spannung, die wir unten noch berechnen, mit der Schwellenspannung des MOSFETs überein.

(b) Zur Berechnung der Raumladungszone verwenden wir die Poisson-Gleichung

$$-\nabla^2 \phi = -\frac{\partial^2 \phi(z)}{\partial z^2} = \frac{\rho(z)}{\epsilon \epsilon_0}. \quad (\text{A10.8.14})$$

Hierbei ist

$$\rho(z) = e [n_D^+(z) - n_A^-(z) - n_c(z) + p_v(z)]. \quad (\text{A10.8.15})$$

Die Neutralisationsbedingung für  $z = \infty$  lautet

$$n_D^+ - n_A^- = n_c - p_v \simeq -n_A. \quad (\text{A10.8.16})$$

Für die Ladungsträgerdichte als Funktion des Makropotenzials  $\phi(z)$  können wir schreiben:

$$n_c(z) = n_c^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{E_c - e\phi(z) - \mu}{k_B T}\right) = n_c(0) \exp\left(+\frac{e\phi(z)}{k_B T}\right) \quad (\text{A10.8.17})$$

$$p_v(z) = p_v^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{\mu - E_v + e\phi(z)}{k_B T}\right) = p_v(0) \exp\left(-\frac{e\phi(z)}{k_B T}\right). \quad (\text{A10.8.18})$$

Setzen wir diese Ausdrücke zusammen mit  $n_D^+ - n_A^- = n_c(0) - p_v(0)$  und der Näherung  $p_v(0) = n_A$  in die Poisson-Gleichung ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 \phi(z)}{\partial z^2} &= \frac{e}{\epsilon \epsilon_0} \left\{ p_v(0) \left[ \exp\left(-\frac{e\phi(z)}{k_B T}\right) - 1 \right] - n_c(0) \left[ \exp\left(+\frac{e\phi(z)}{k_B T}\right) - 1 \right] \right\} \\ &\simeq \frac{e}{\epsilon \epsilon_0} [-p_v(0)] \simeq \frac{e}{\epsilon \epsilon_0} [-n_A]. \end{aligned} \quad (\text{A10.8.19})$$

Hierbei haben wir angenommen, dass  $\exp(-e\phi(z)/k_B T) \ll 1$  und dass ferner  $n_c(0) \exp(+e\phi(z)/k_B T) \ll p_v$ . Letztere Annahme ist nur gültig, solange  $\phi(z) < E_c - \mu$ . Nur unter dieser Bedingung erhalten wir die einfache Näherung aus (A10.8.19). Ansonsten müssen wir den Exponentialterm mitnehmen, wodurch die nachfolgende Integration etwas schwieriger wird. Dies soll hier aber nicht getan werden.

Wir erhalten also als Näherung für den Verarmungsfall (wenn wir wieder annehmen, dass alle Akzeptoren ionisiert sind)

$$\frac{\partial^2 \phi(z)}{\partial z^2} = \begin{cases} +\frac{en_A}{\epsilon \epsilon_0} & \text{für } 0 < z < d_p \\ 0 & \text{für } z \geq d_p \end{cases}. \quad (\text{A10.8.20})$$

Integrieren wir dies auf, so erhalten wir

$$\frac{\partial \phi(z)}{\partial z} = -E(z) = -\frac{en_A}{\epsilon \epsilon_0} (d_p - z) \quad (\text{A10.8.21})$$

$$\phi(z) = \frac{en_A}{\epsilon \epsilon_0} \frac{(d_p - z)^2}{2}. \quad (\text{A10.8.22})$$

Für  $z = 0$  erhalten wir, wenn wir mit der angelegten Spannung die Leitungsbandkante auf die Höhe des chemischen Potenzials gebracht haben (der Energienullpunkt ist hierbei zu  $E_v = 0$  gewählt, so dass  $E_c = E_g$ )

$$e\phi(z=0) = \frac{e^2 n_A d_p^2}{2\epsilon\epsilon_0} = E_g - \mu = 0.87 \text{ eV} . \quad (\text{A10.8.23})$$

Lösen wir diese Gleichung nach  $d_p$  auf, so erhalten wir für die Breite der Verarmungszone

$$d_p = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0}{e^2 n_A} (E_g - \mu)} = 238 \text{ nm} . \quad (\text{A10.8.24})$$

Für die Feldstärke an der Grenzfläche erhalten wir

$$E(0) = \frac{en_A}{\epsilon\epsilon_0} d_p = 7.29 \times 10^4 \text{ V/cm} . \quad (\text{A10.8.25})$$

Die Spannung, die wir an die Gate-Elektrode anlegen müssen, ist gegeben durch

$$U_g = U_i + \phi(0) , \quad (\text{A10.8.26})$$

wobei  $U_i$  die über dem Isolator abfallende Spannung ist. Aus der Neutralitätsbedingung  $Q_M = Q_s$ , wobei  $Q_M$  die Flächenladung auf der Metall- und  $Q_s$  die Flächenladung auf der Halbleiterseite ist, erhalten wir zum einen [hierbei benutzen wir die Näherung  $(-\partial\phi/\partial z)_{z=0} \simeq \phi(0)/d_p = E(0)$ ]

$$Q_s = \frac{\epsilon_0\epsilon_{\text{Si}}}{d_p} A E(0) d_p = \epsilon_0\epsilon_{\text{Si}} A E(0) \quad (\text{A10.8.27})$$

und zum anderen

$$Q_s = \frac{\epsilon_0\epsilon_{\text{SiO}_2}}{d_{\text{SiO}_2}} A U_i . \quad (\text{A10.8.28})$$

Hieraus ergibt sich

$$\epsilon_0\epsilon_{\text{Si}} A E(0) = \frac{\epsilon_0\epsilon_{\text{SiO}_2}}{d_{\text{SiO}_2}} A U_i \quad (\text{A10.8.29})$$

bzw.

$$U_i = \frac{\epsilon_{\text{Si}}}{\epsilon_{\text{SiO}_2}} E(0) d_{\text{SiO}_2} \quad (\text{A10.8.30})$$

und schließlich

$$U_g = E(0) d_{\text{SiO}_2} \frac{\epsilon_{\text{Si}}}{\epsilon_{\text{SiO}_2}} + \phi(0) = 0.26 \text{ V} + 0.87 \text{ V} = 1.13 \text{ V} . \quad (\text{A10.8.31})$$