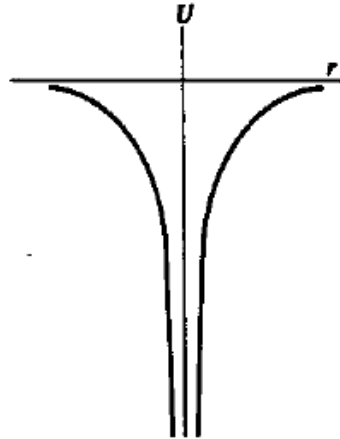

Kap. 14:

Elektronen im periodischen Potential:

Bandstrukturen

- 1. Allgemeine Eigenschaften: Bandstruktur, Energielücke, Bloch-Zustände**
- 2. Spezialfall Halbleiter: Bandstrukturen von Si, Ge, GaAs, intrinsisches Verhalten, Dotierung**

14. Gitterpotential (1)



← Coulomb-Potential eines Atomrumpfes

Figure 7.1 The bare ion Coulomb potential.

Coulomb-Potential einer periodischen Anordnung von Atomrümpfen →

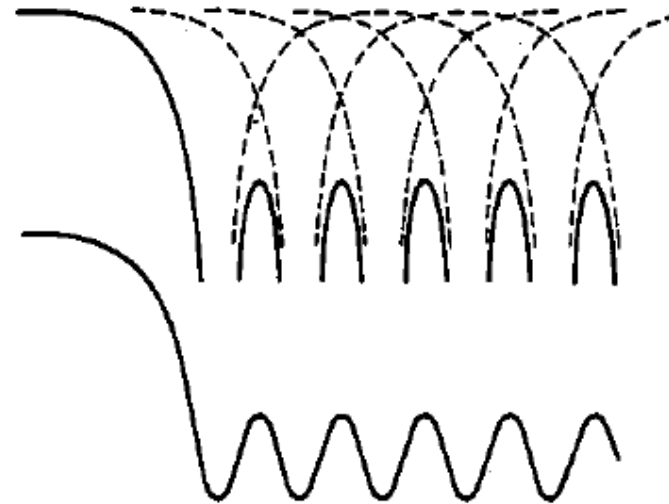


Figure 7.2 The electrostatic potential through a line of atoms in a crystal and parallel to such a line.

14. Ausgedehntes und reduziertes Zonenschema (6)

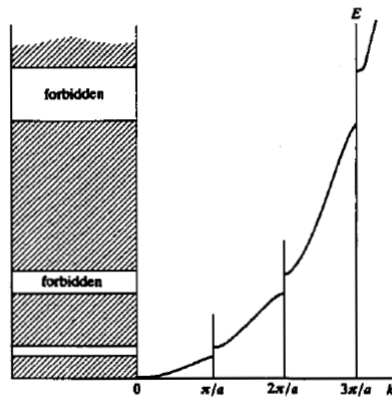
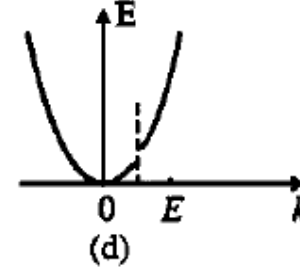
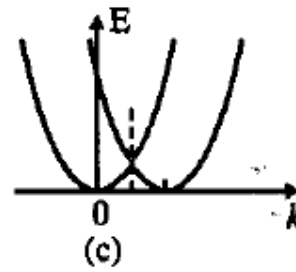
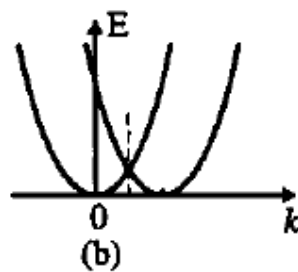
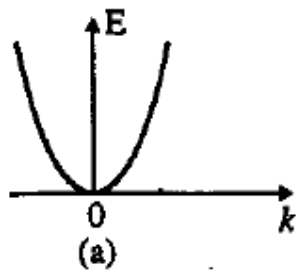
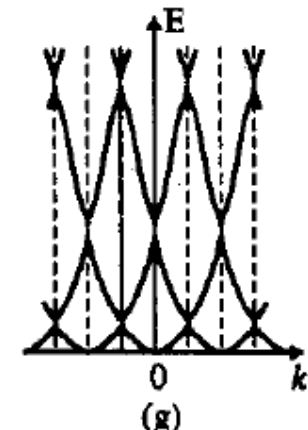
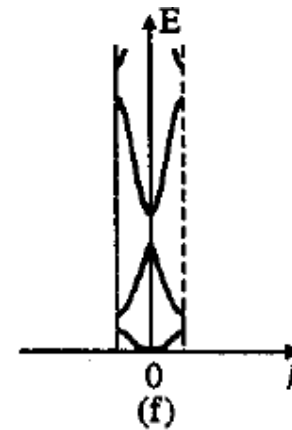
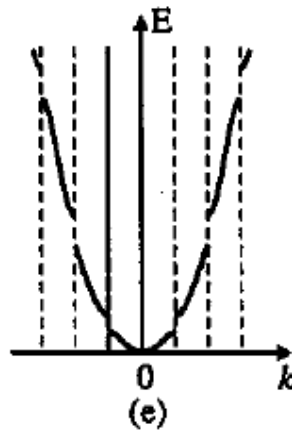


Figure 7.6 At the critical k values ($|k| = \pi/a$), the $E(k)$ relation becomes discontinuous. Energy gaps associated with the two possible charge distributions, as shown in Fig. 7.5, arise. In pure materials there are no eigenstates for electrons with energies lying within these energy gaps. Note that the higher the energy of the band the larger its width in energy.



Reduziertes
Zonenschema

Ausgedehntes
Zonenschema

Äquivalenter Informationsgehalt
bei Reduktion auf
erste Brillouinzone!

14. Bandstruktur und Zonenschema in 1D für schwaches Potential (7)

Dispersionsrelation $E(k)$ häufig nahezu parabolisch, analog zu freien Elektronen
 → Definition einer effektiven Masse zur Anpassung an experimentellen Verlauf

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

$$m_{eff} = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}$$

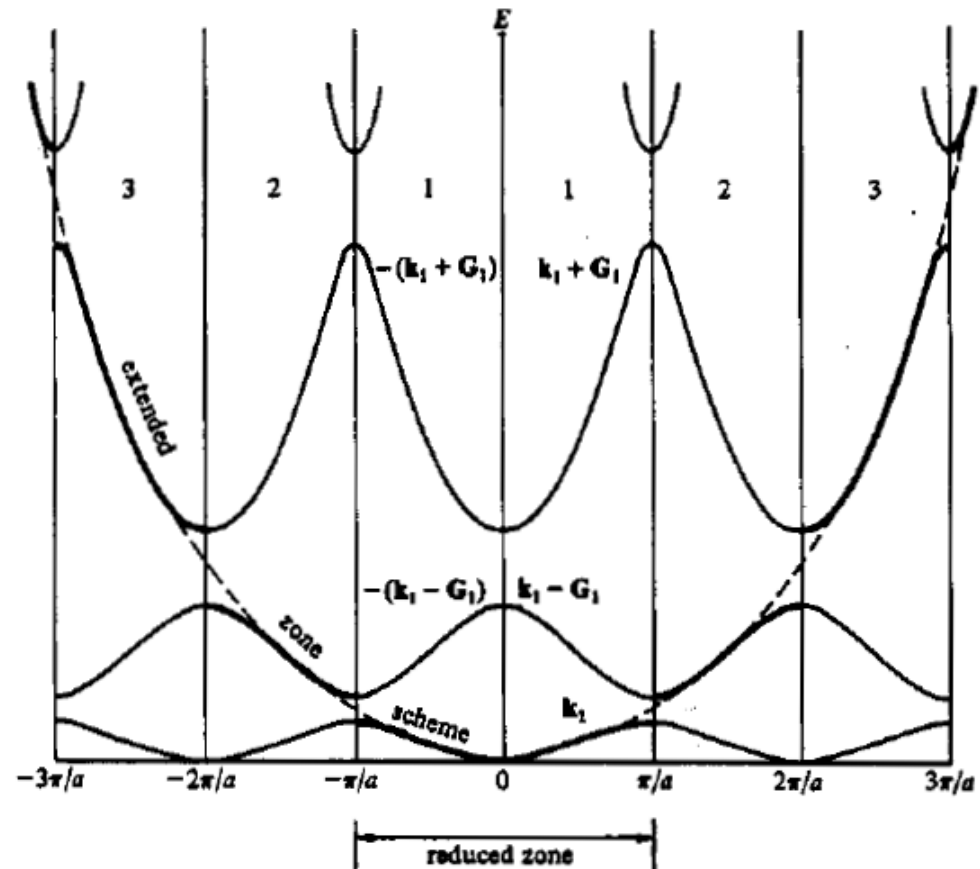


Figure 7.7 This diagram illustrates the properties of a linear lattice, but it is also typical of behaviour along any symmetry direction in a three-dimensional crystal. If we plot E as a function of monotonically increasing k then we obtain the thick curve, which, for a weak periodic potential, closely resembles the free electron parabola. This is the *extended zone scheme*. However, just as in our discussion of phonons, we may redraw this curve from all the possible origins of the reciprocal lattice and this leads to a series of continuous curves arranged one upon the other and extending throughout the whole of k space. This description is called the *periodic zone scheme*. It is sufficient if we confine attention to the thick black curve, but this extends over all the zones, of which only three are shown in the figure. In principle the electron may have any energy and an excited electron (before it leaves the sample) may be in a state within say the tenth zone. The *extended zone scheme* is instructive but inconvenient. We therefore use the *reduced zone*, i.e. all states with $|k| > \pi/a$ are translated an integral number of reciprocal lattice base vectors until they land in the first zone. Thus those states that are in the interval $-3\pi/a \leq k \leq -2\pi/a$ are shown as $-(k_1 + G_1)$, whereas those in the interval $2\pi/a \leq k \leq 3\pi/a$ are written as $k_1 + G_1$ and $0 \leq |k_1| \leq \pi/a$. All the possible k states may be remapped into the first zone; the description is known as the *reduced zone scheme*. The different bands may be numbered according to increasing energy. G_1 is the base vector of the reciprocal lattice.

14. Effektive Masse (8)

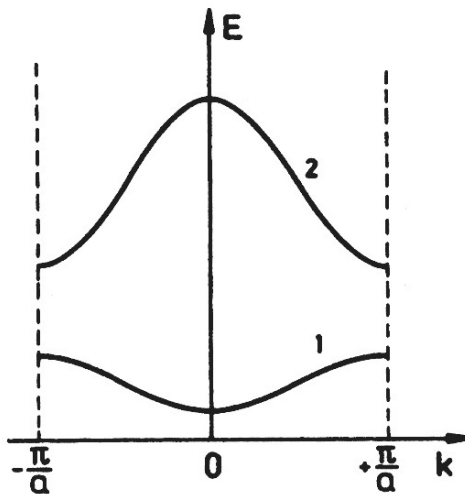
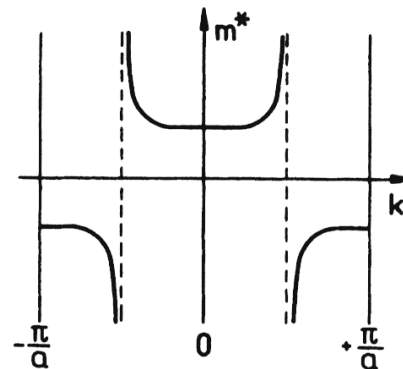
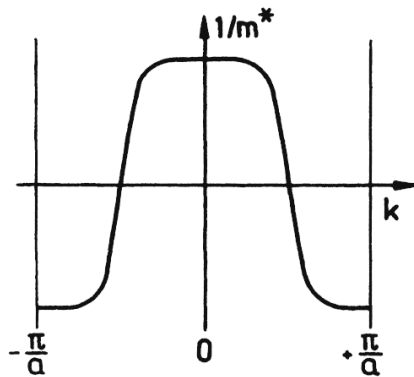


Fig. 3.8
Struktur zweier Energiebänder mit der unteren (1) und der oberen (2) Bandgrenze bei $k = 0$

Typische Bandstruktur in 1D:

- $E(k) = E(-k)$ wg. Inversionssymmetrie des Potentials
- Bänder und Bandlücken wechseln sich ab
- Positive und negative Krümmungen der Bänder für $k=0$ wechseln sich ab
- horizontale Tangenten im Zentrum und am Rand der Brillouin-Zone

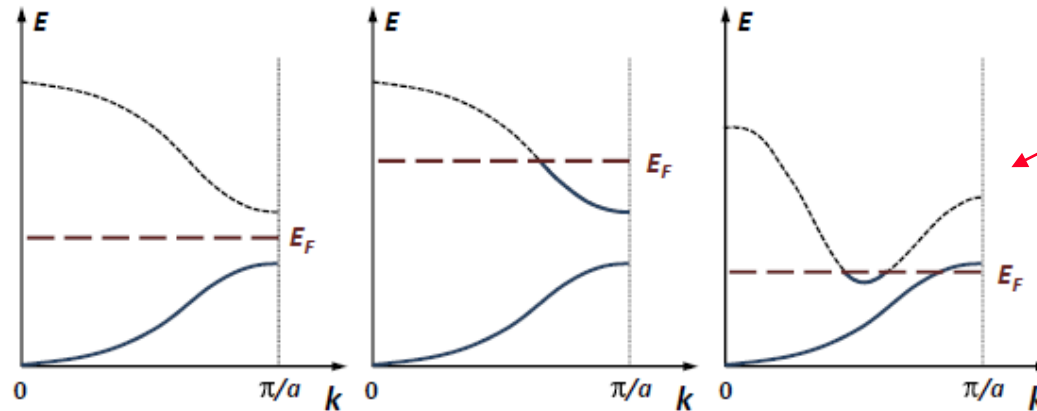


Effektive Masse für das erste Band:

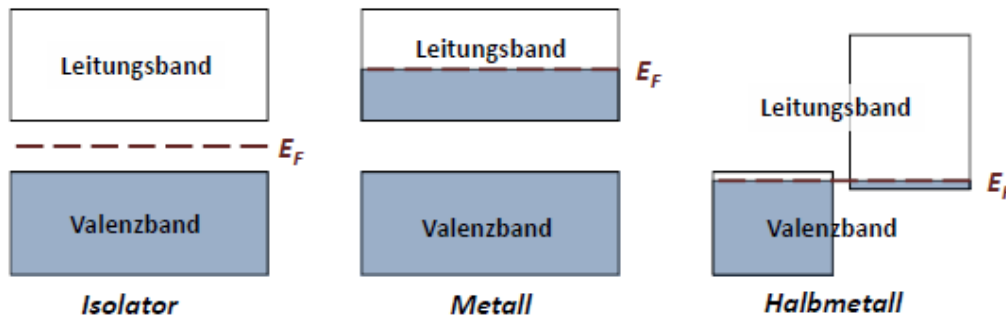
- im Zonenzentrum nahezu konstant
→ *Band wird gut durch Parabel genähert*
- zum Zonenrand hin starker Anstieg
→ *Bragg-Reflexion für k-Werte am Zonenrand kündigt sich an*

Fig. 3.24 Reziproke effektive Masse $1/m^*$ und effektive Masse m^* eines Kristallelektrons als Funktion der Wellenzahl k für eine Energiefunktion $E(k)$, die der Kurve 1 in Fig.3.8 entspricht

14. Metalle, Halbmetalle, Halbleiter, Isolatoren (10)



Achtung:
eine solche Bandstruktur
mit Bandüberlapp ist in 1D
nicht möglich!



Anzahl der
Elektronenzustände in
jedem Band: $2N$
(Kristall aus N Atomen)

bzw. Halbleiter,
falls Bandlücke
hinreichend
klein (≈ 1 eV)

Halbmetall	n_h (cm ⁻³)	n_e (cm ⁻³)
Arsen	2.12×10^{20}	2.12×10^{20}
Antimon	5.54×10^{19}	5.49×10^{19}
Wismuth	2.88×10^{17}	3.00×10^{17}
Graphit	2.72×10^{18}	2.04×10^{18}

Tabelle 8.2: Ladungsträgerdichte von Halbmetallen.

14. Bandstruktur von Aluminium: fast freie Elektronen (13)

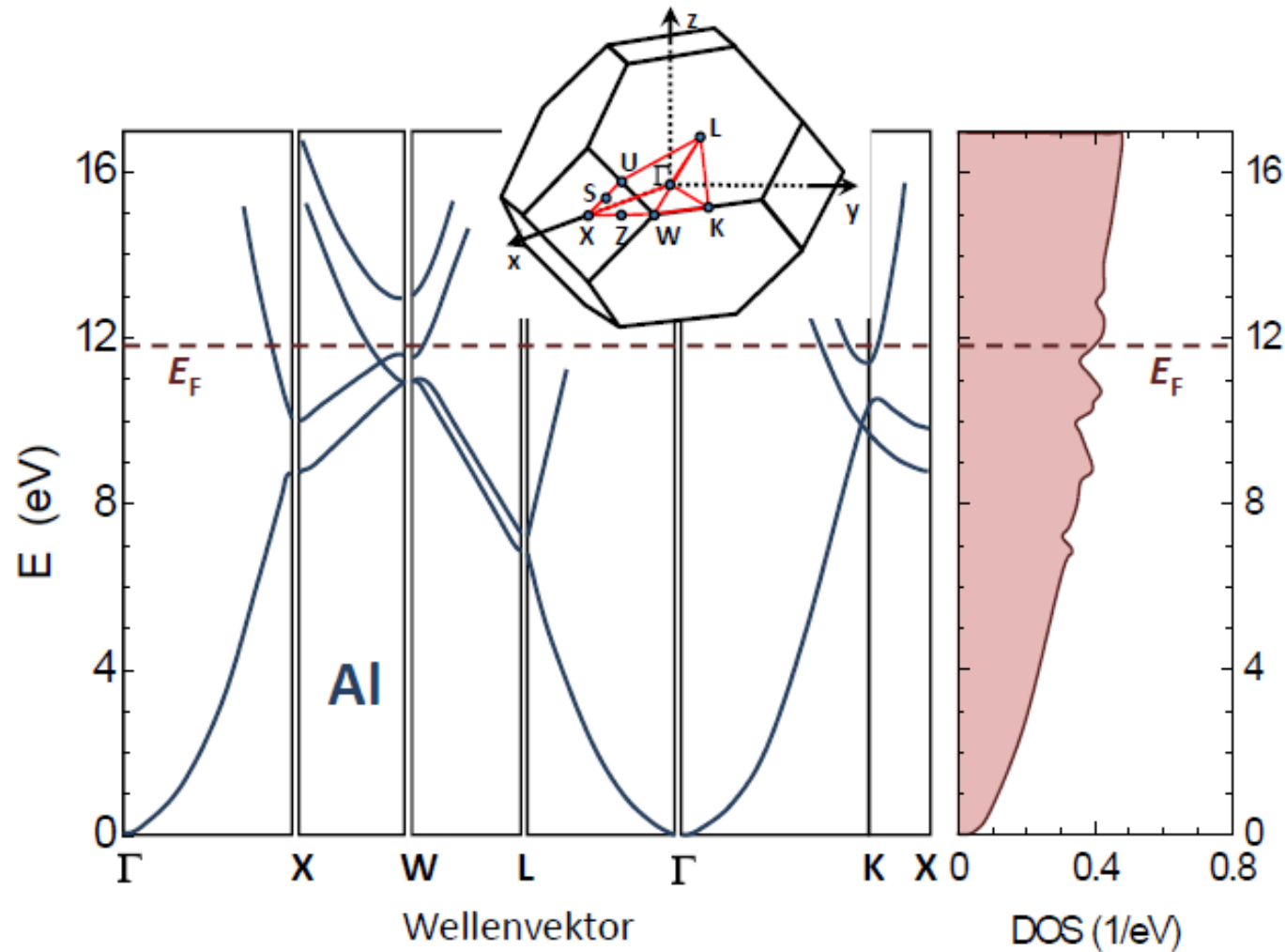


Abbildung 8.18: Bandstruktur von Aluminium entlang von Richtungen hoher Symmetrie (links). Der Γ -Punkt ist das Zentrum der 1. Brillouin-Zone (siehe Inset). Die Bandlücken an den Zonengrenzen sind klein und der Bandverlauf kann in weiten Teilen durch parabelförmige Kurven angenähert werden. Rechts ist die Zustandsdichte $D(E)$ gezeigt.

14. Fermiflächen von Metallen (16)

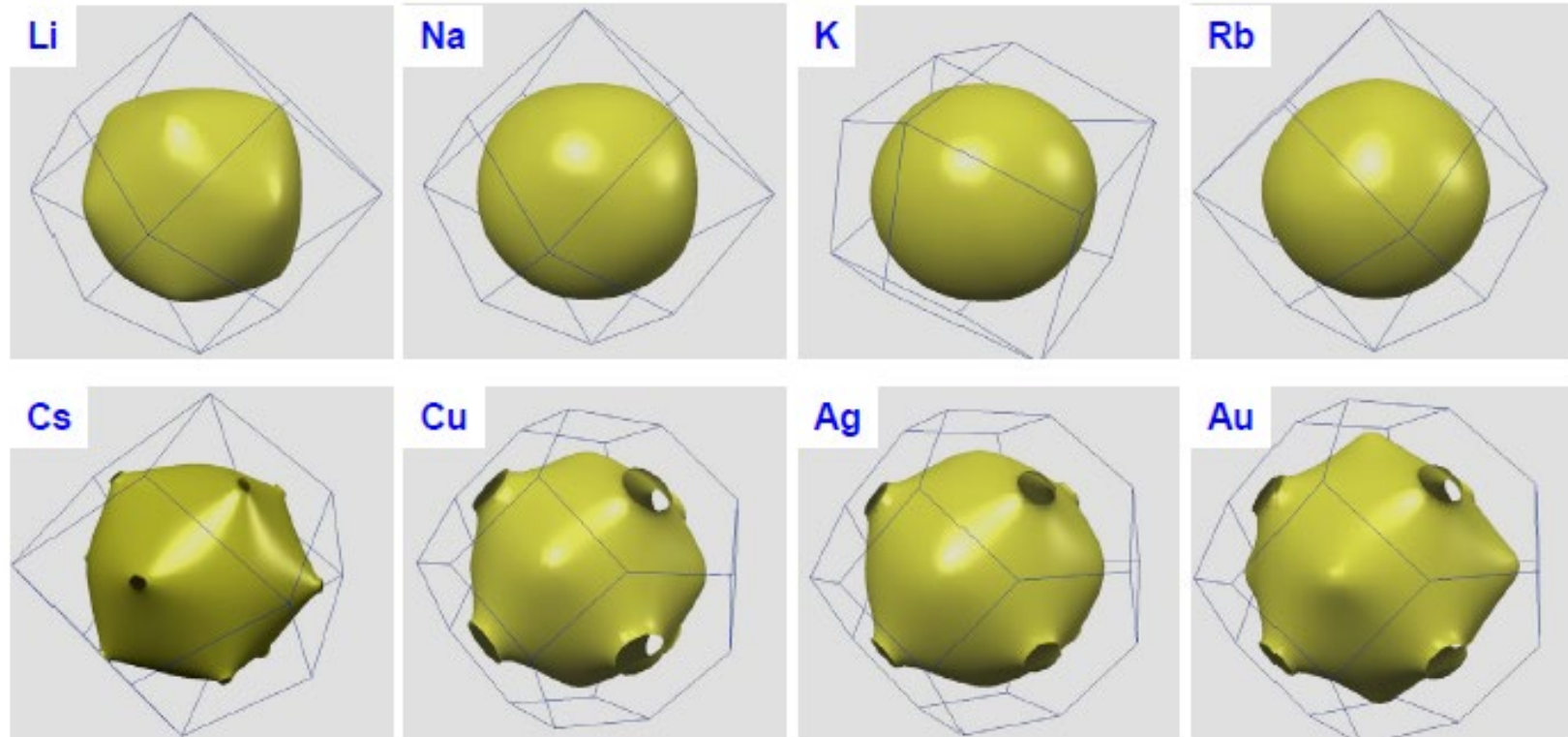


Abbildung 8.25: Fermi-Flächen von einfachen Metallen. Die Alkali-Metalle kristallisieren in einem bcc-Gitter, Cu, Ag und Au in einem fcc-Gitter (Quelle: Physics Department, University of Florida).

- Nur Elektronen an der Fermifläche bestimmen die elektrischen Eigenschaften!
- Bei Edelmetallen (Cu, Ag, Au) spielen dispersionsarme d-Bänder eine wichtige Rolle.
- Im allgemeinen ist die Fermifläche realer Metalle nicht exakt kugelförmig.

Erinnerung: Periodensystem der Elemente

Periodensystem der Elemente																	
1	2											13	14	15	16	17	18
1 1.01 H Wasserstoff																	4.00 He Helium
2 6.94 Li Lithium	9.01 Be Beryllium											10.81 B Bor	12.01 C Kohlenstoff	14.01 N Stickstoff	15.999 O Sauerstoff	18.998 F Fluor	20.18 Ne Neon
3 22.99 Na Natrium	24.31 Mg Magnesium											26.98 Al Aluminium	28.09 Si Silicium	30.97 P Phosphor	32.07 S Schwefel	35.45 Cl Chlor	39.95 Ar Argon
4 39.10 K Kalium	40.08 Ca Calcium	44.96 Sc Scandium	47.88 Ti Titan	50.94 V Vanadium	52.00 Cr Chrom	54.94 Mn Mangan	55.85 Fe Eisen	58.93 Co Cobalt	58.70 Ni Nickel	63.55 Cu Kupfer	65.38 Zn Zink	69.72 Ga Gallium	72.61 Ge Germanium	74.92 As Arsen	78.96 Se Selen	79.90 Br Brom	83.80 Kr Krypton
5 85.47 Rb Rubidium	87.52 Sr Strontium	88.91 Y Yttrium	91.22 Zr Zirkonium	92.91 Nb Niobium	95.94 Mo Molybdän	(98) Tc Technetium	101.07 Ru Ruthenium	102.91 Rh Rhodium	106.42 Pd Palladium	107.87 Ag Silber	112.41 Cd Cadmium	114.82 In Indium	118.71 Sn Zinn	121.76 Sb Antimon	127.60 Te Tellur	126.90 I Iod	131.29 Xe Xenon
6 132.91 Cs Cäsium	137.33 Ba Barium	La-Lu	178.49 Hf Hafnium	180.95 Ta Tantal	183.84 W Wolfram	186.21 Re Rhenium	190.23 Os Osmium	192.22 Ir Iridium	195.08 Pt Platin	196.97 Au Gold	200.59 Hg Quecksilber	204.38 Tl Thallium	207.2 Pb Blei	208.98 Bi Bismut	(209) Po Polonium	(210) At Astat	(222) Rn Radon
7 (223) Fr Francium	(226) Ra Radium	Ac-Lr	(261) Rf Rutherfordium	(262) Db Dubnium	(263) Sg Seaborgium	(262) Bh Bohrrium	(265) Hs Hassium	(266) Mt Meitnerium	(269) Ds Darmstadtium								

©Peter Wich - Experimentalchemie.de - Chemie erleben!

138.91 La Lanthan	140.12 Ce Cer	144.24 Pr Praseodym	144.24 Nd Neodym	(145) Pm Promethium	150.36 Sm Samarium	151.97 Eu Europium	157.25 Gd Gadolinium	158.93 Tb Terbium	162.50 Dy Dysprosium	164.93 Ho Holmium	167.26 Er Erbium	168.93 Tm Thulium	173.04 Yb Ytterbium	174.97 Lu Lutetium
227.03 Ac Actinium	232.04 Th Thorium	231.04 Pa Protactinium	238.03 U Uran	(237) Np Neptunium	(244) Pu Plutonium	(243) Am Americium	(247) Cm Curium	(247) Bk Berkelium	(251) Cf Californium	(252) Es Einsteinium	(257) Fm Fermium	(258) Md Mendelevium	(259) No Nobelium	(260) Lr Lawrencium

14. Halbleiter (17)

Elektronische Geräte sind allgegenwärtig u. basieren auf Halbleitern:

- Informationstechnik

Erzeugung,
Modulation,
Transport,
Verarbeitung
von Signalen



- Energietechnik

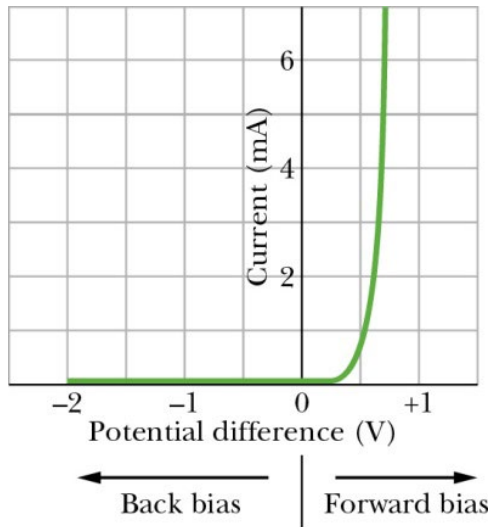
Gleichrichtung von Wechselspannung,
Wechselrichtung von Gleichspannung,
Vernetzung fluktuierender Quellen,
Echtzeitregelung



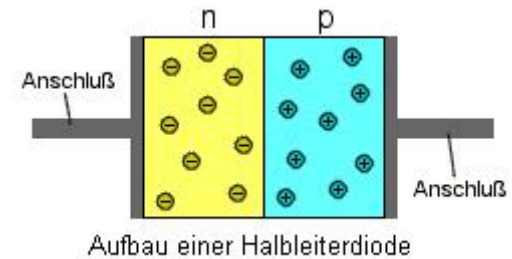
14. Halbleiter (18)

Basis: Bauelemente mit nicht-linearen Kennlinien

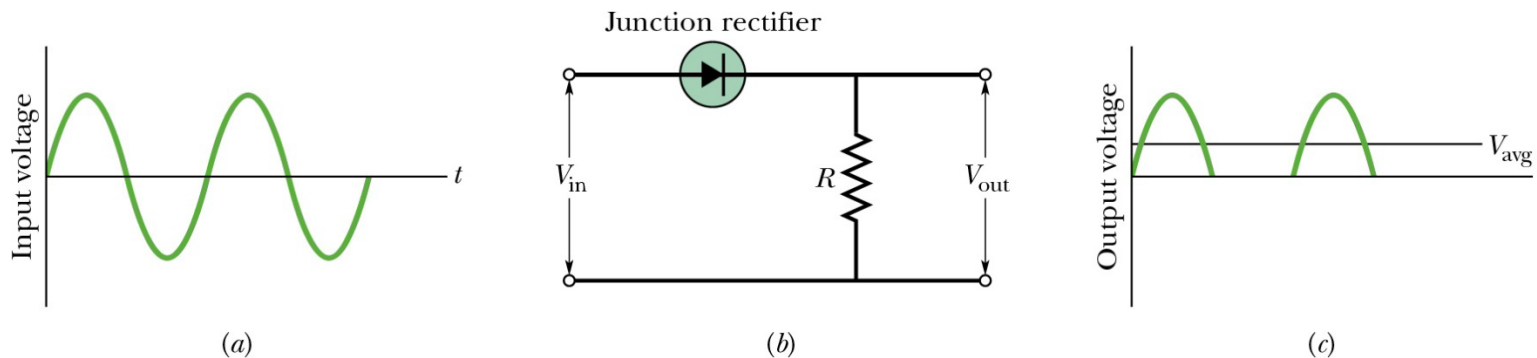
Beispiel: Diode



entspricht Ventil für elektrischen Strom



Anwendung u.a.:
Gleichrichtung von Wechselstrom



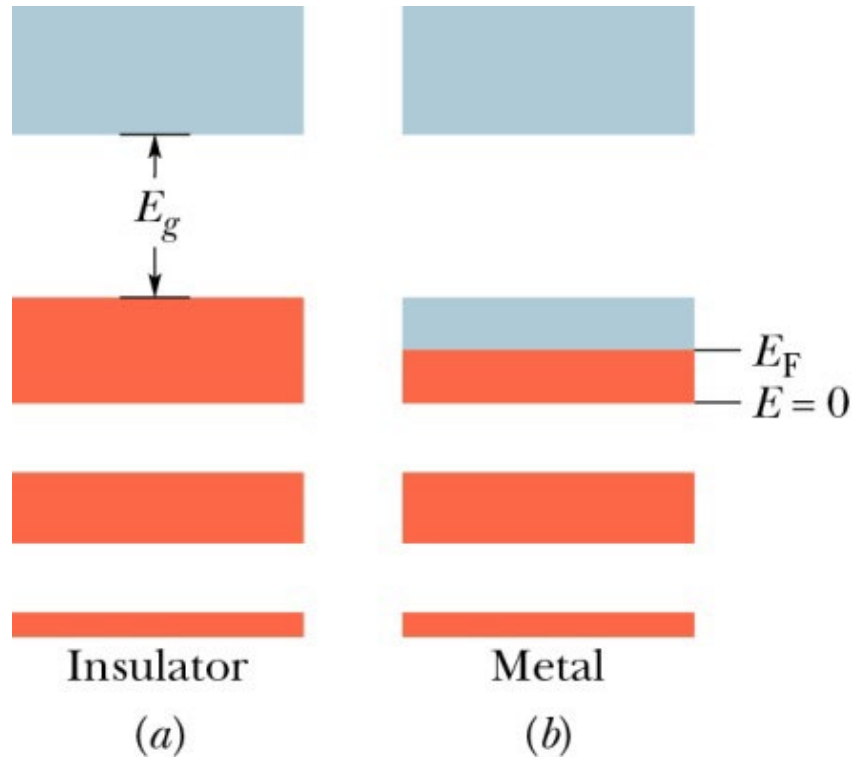
14. Halbleiter (19)

Voraussetzungen:

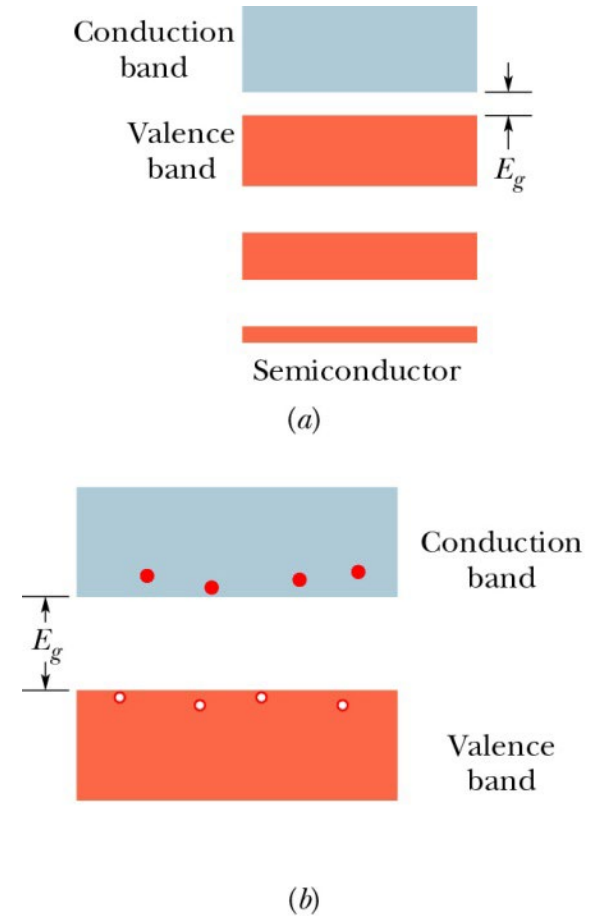
- **Material: Einstellbarkeit der Leitfähigkeit über viele Größenordnungen**
 - intrinsischer Halbleiter: Ausgangsmaterial mit Bandlücke (nicht zu groß)
 - extrinsischer Halbleiter: Modifikation durch Fremdatome (= Dotierung)
(n-Dotierung, p-Dotierung)
- **Bauelemente: Möglichkeit zur gezielten, temporären Veränderung**
 - Steuern von Ladungsträgerdichten in räumlich abgegrenzten Bereichen durch elektrische Felder bzw. Ströme
Grenzflächeneffekte: pn-Übergang (Diode)
 - Verstärkung von Signalen
Grenzflächeneffekte: npn- / pnp-Transistor
Feldeffekt-Transistor

14. Intrinsische Halbleiter (20)

Bandstruktur der Festkörper:



Spezialfall Halbleiter:



14. Intrinsische Halbleiter (21)

Materialien mit vollkommen gefüllten und leeren Bändern:

Isolatoren und Halbleiter; Unterschied nur quantitativer, nicht qualitativer Art.

Im (intrinsischen) Halbleiter gibt es eine gewisse Wahrscheinlichkeit, Ladungsträger thermisch über die Energielücke E_g zwischen besetztem Valenzband (VB oder V) und leerem Leitungsband (CB oder C: conduction band) anzuregen, aufgrund der thermischen Verschmierung der Fermi-Verteilungsfunktion.

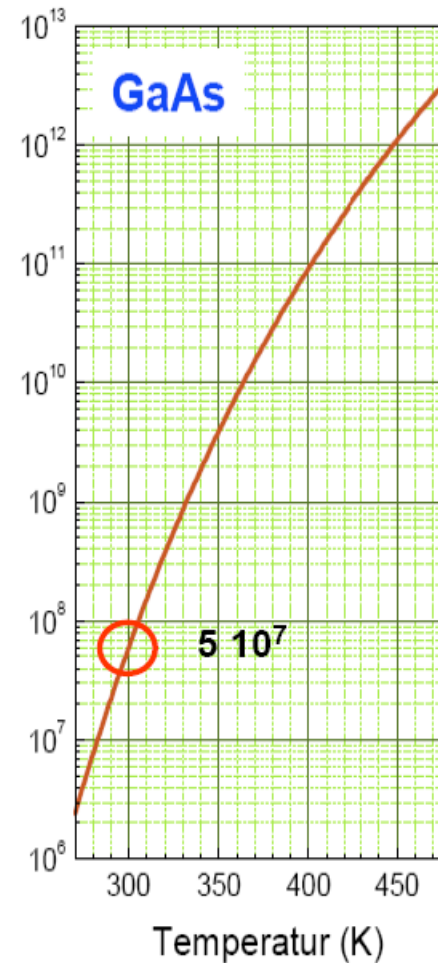
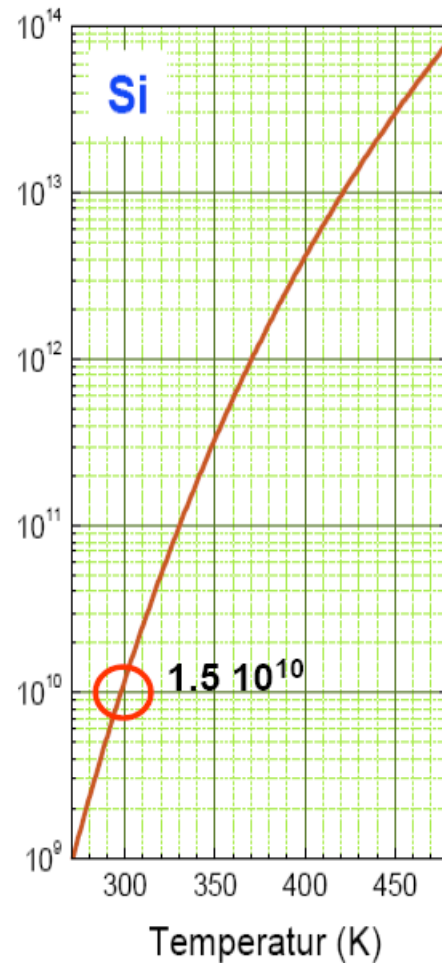
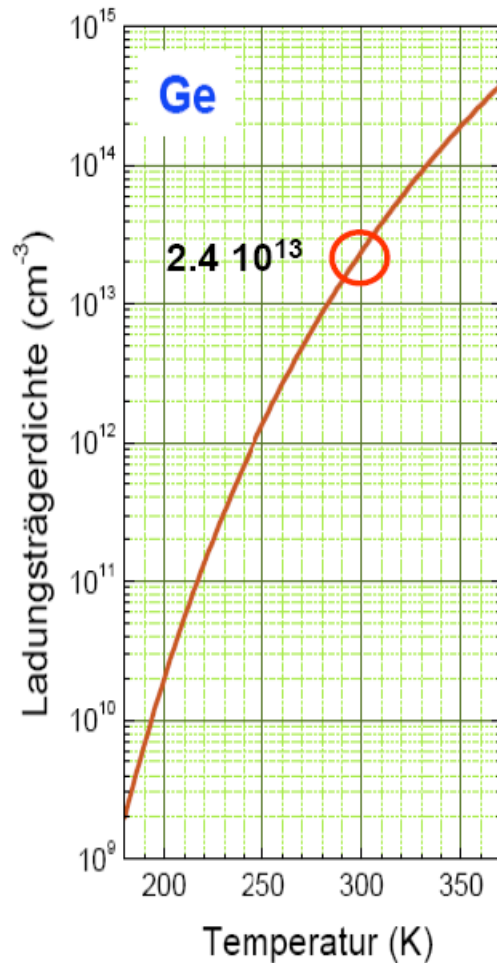
→ Anteil thermisch angeregter Ladungsträger: $n_{\text{therm}} \sim \exp(-E_g / 2k_B T)$

Bsp.: 300 K, $k_B T \cong 25 \text{ meV}$; $E_g = 0.5 \text{ eV} \Rightarrow n_{\text{therm}} \sim e^{-10} \sim 5 \cdot 10^{-5}$

Sowohl thermisch angeregte El. im CB als auch therm. angeregte Löcher im VB führen zu einer endlichen Leitfähigkeit, d.h. zu Halbleiter-Verhalten.
Halbleiter: i.a. $E_g < 2 \text{ eV}$ und $10^{-2} < \rho < 10^9 \Omega\text{cm}$.

14. Intrinsische Halbleiter (22)

Temperaturabhängigkeit der intrinsischen Ladungsträgerdichte von Si, Ge, GaAs



14. Materialien (23)

Elementhalbleiter:

- Si, Ge Diamantstruktur (IV. Hauptgruppe/Spalte im Periodensystem; 4-fach, tetraedische Koordination)
Si: zentrale Rolle in der Mikro-und Nanoelektronik sowie Informationstechnologie!

Binäre oder Verbindungs-Halbleiter:

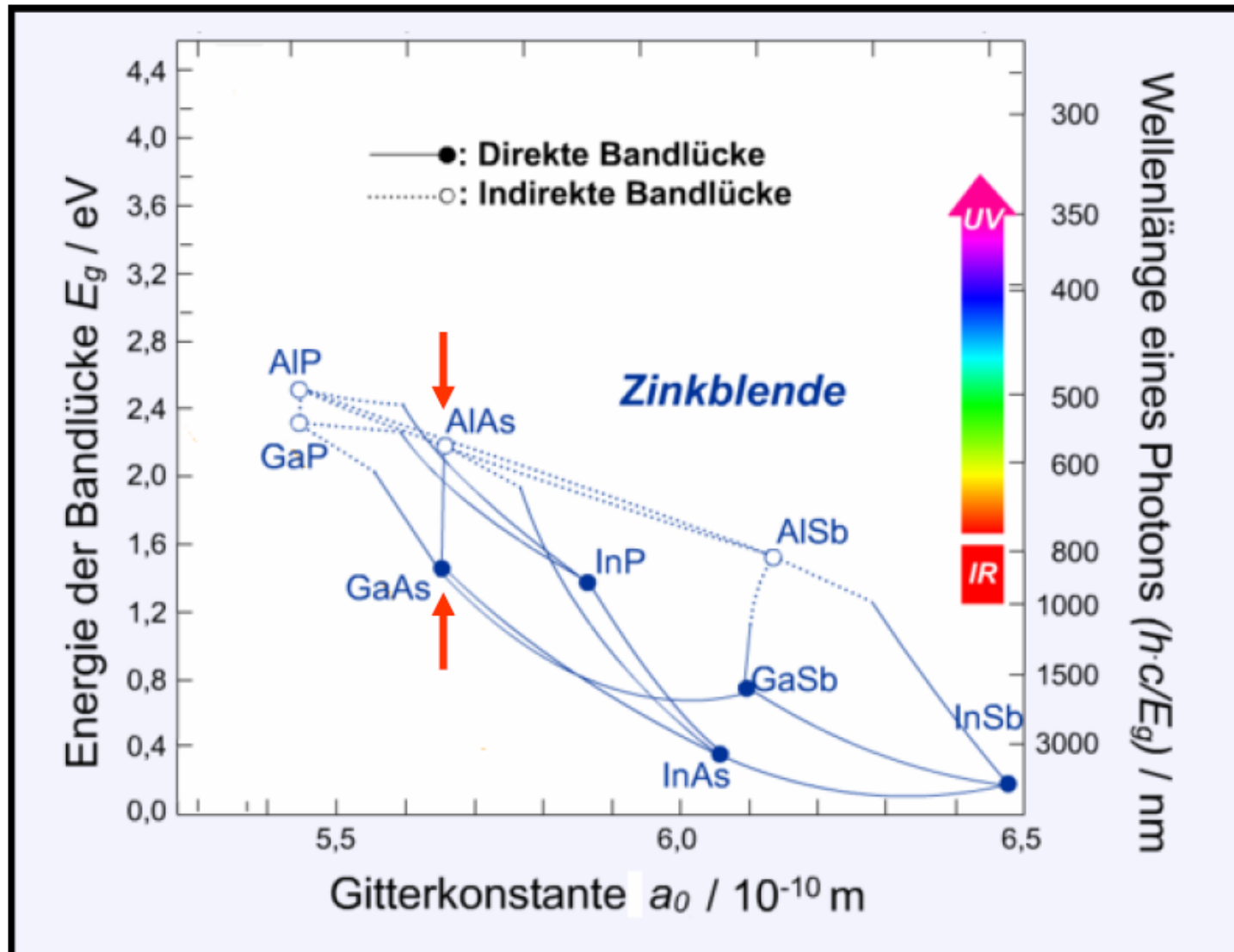
- III-V Halbleiter (z.B. GaAs: für Optoelektronik, schnelle Transistoren, Grundlagenforschung, wie Quanten-Hall-Effekt)
Übergang Gruppe IV → III-V: chem. Bindung mit partiellem ionischen Charakter und damit Erhöhung der Energielücke;
- II-VI Halbleiter (z.B. ZnS, ZnTe, HgTe etc.)
Noch grössere Energielücke für II-VI Halbleiter
(→ Anwendung für Displays und Laser);
Ausnahme: HgTe (kleine Energielücke → Infrarotdetektoren)
- IV-VI Halbleiter (PbS, PbTe, SnS: kleine Energielücken → IR-Detektoren)

14. Bandlücken (24)

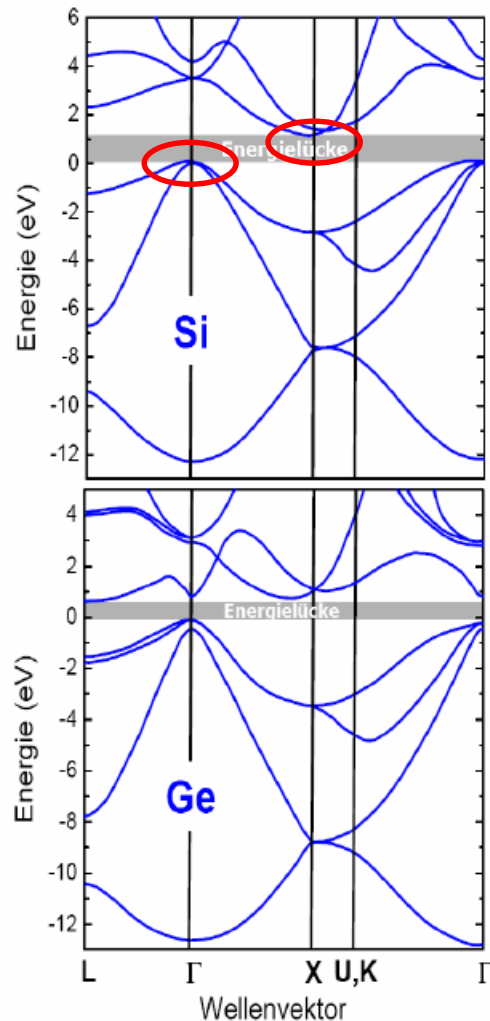
Halbleiter		$E_g(0\text{ K})$ (eV)	$E_g(300\text{ K})$ (eV)	Halbleiter		$E_g(0\text{ K})$ (eV)	$E_g(300\text{ K})$ (eV)
Si	indirekt	1.17	1.12	GaP	indirekt	2.32	2.26
Ge	indirekt	0.742	0.661	InP	direkt	1.421	1.344
GaAs	direkt	1.519	1.424	ZnO	direkt	3.44	3.2
InSb	direkt	0.24	0.17	ZnS	–	3.91	3.6
InAs	direkt	0.415	0.354	CdS	direkt	2.58	2.42
AlSb	indirekt	1.65	1.58	CdTe	direkt	1.61	1.45
GaN (Wurzit)	indirekt	3.47	3.39	GaN (ZnS)	direkt	3.28	3.20

Tabelle 10.2: Werte der Energielücken von einigen Halbleitern bei $T = 0\text{ K}$ (linear extrapolierte Werte) und bei 300 K. Quelle: *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, Vol. 1 and 2, edited by M. Levinstein, S. Rumyantsev and M. Shur, World Scientific, London (1996, 1999).

14. III-V-Halbleiter für die Optoelektronik (25)



14. Bandstruktur von Silizium u. Germanium (26)



sp^3 -Hybridorbitale mit Ausbildung von 2 Subbändern mit Energielücke; deren Aufspaltung nimmt ab mit zunehmendem Abstand der Atome, d.h. E_g nimmt ab mit zunehmender Temperatur

Si: indirekter Halbleiter mit $E_g(0\text{ K}) = 1.17\text{ eV}$ zwischen Γ -Punkt und $0.8(\Gamma\text{-X})$

Ge: indirekter Halbleiter mit $E_g(0\text{ K}) = 0.75\text{ eV}$ zwischen Γ - und L-Punkt

Halbleiter	$E_g(0\text{ K})$ (eV)	$E_g(300\text{ K})$ (eV)	Halbleiter	$E_g(0\text{ K})$ (eV)	$E_g(300\text{ K})$ (eV)
Si	1.17	1.12	InP	1.42	1.35
Ge	0.75	0.67	ZnO	3.44	3.2
GaAs	1.52	1.43	ZnS	3.91	3.6
InSb	0.24	0.18	CdS	2.58	2.42
InAs	0.43	0.35	CdTe	1.61	1.45

Chelikowski, Cohen, Phys. Rev. B **14**, 556 (1976)

14. Bandstruktur von GaAs (27)

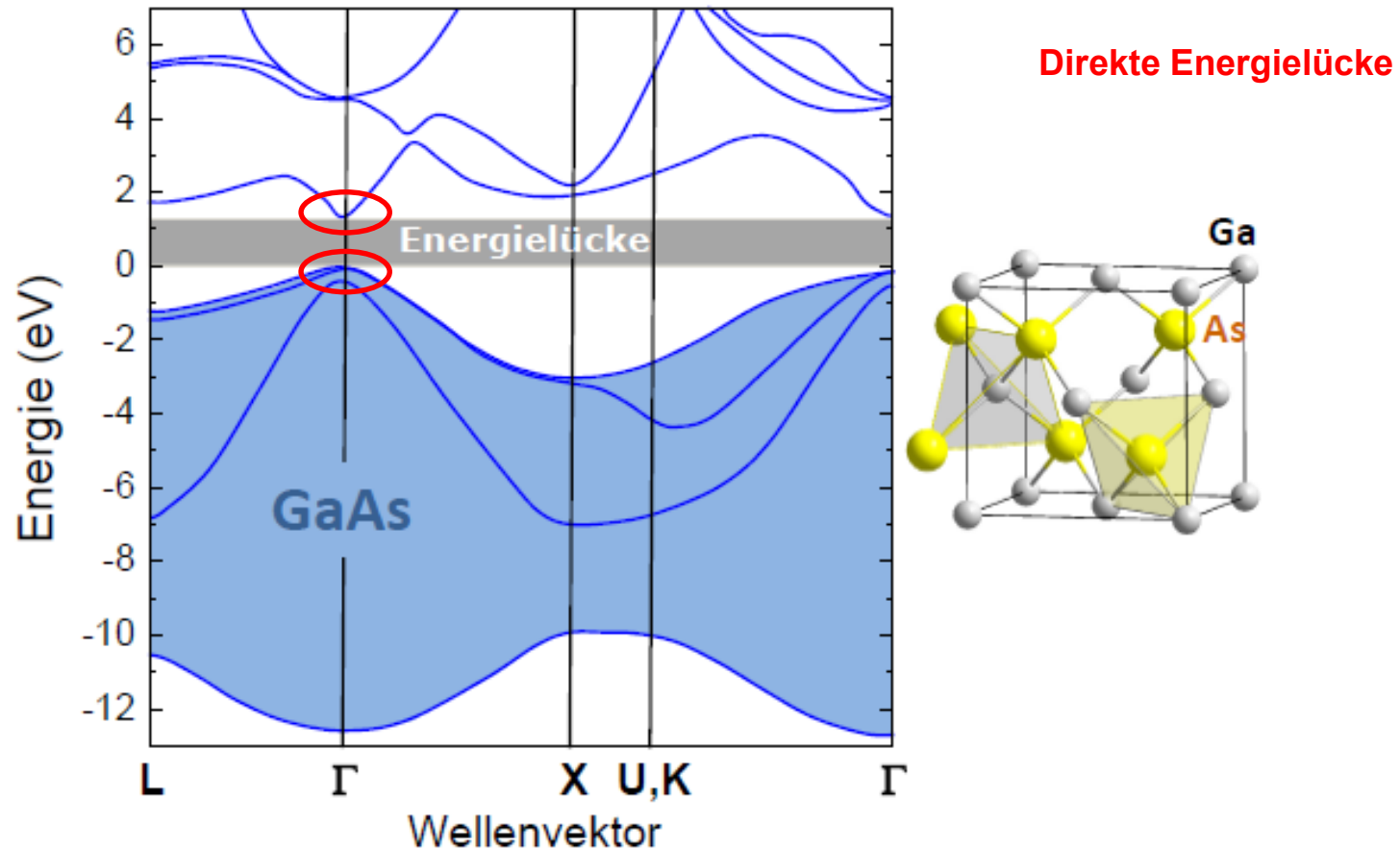


Abbildung 10.3: Berechnete Bandstrukturen von GaAs (nach J.R. Chelikowski und M.L. Cohen, Phys. Rev. B 14, 556 (1976)). Die vier Valenzbänder (unteres sp^3 -Subband) sind farbig hinterlegt. Rechts ist die Zinkblendestruktur von GaAs gezeigt.

14. Näherung der Bandstruktur in Halbleitern (28)

Approximation des Bandverlaufs an Oberkante E_V des VB bzw. Unterkante E_C des CB durch Parabel möglich:

$$E(\vec{k}) = E_C + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} k_i \left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} k_j \quad \text{Elektronen}$$

$$E(\vec{k}) = E_V - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} k_i \left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} k_j \quad \text{Löcher}$$

Der effektive Massetensor $\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij}$ ist reel und symmetrisch, d.h. können Satz von orthogonalen Hauptachsen finden, bezgl. der die Energien Diagonalform haben

$$E(\vec{k}) = E_C + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_{xx}^*} + \frac{k_y^2}{m_{yy}^*} + \frac{k_z^2}{m_{zz}^*} \right) \quad \text{Elektronen}$$

$$E(\vec{k}) = E_V - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_{xx}^*} + \frac{k_y^2}{m_{yy}^*} + \frac{k_z^2}{m_{zz}^*} \right) \quad \text{Löcher}$$

Flächen konstanter Energie: Ellipsoide mit 3 Hauptachsen und 3 effektiven Massen;

für Rotationsellipsoide: definieren zwei effektive Massen

- longitudinal $m_{e,l}^*$
- transversal $m_{e,t}^*$

14. Effektive Masse bei Halbleitern (29)

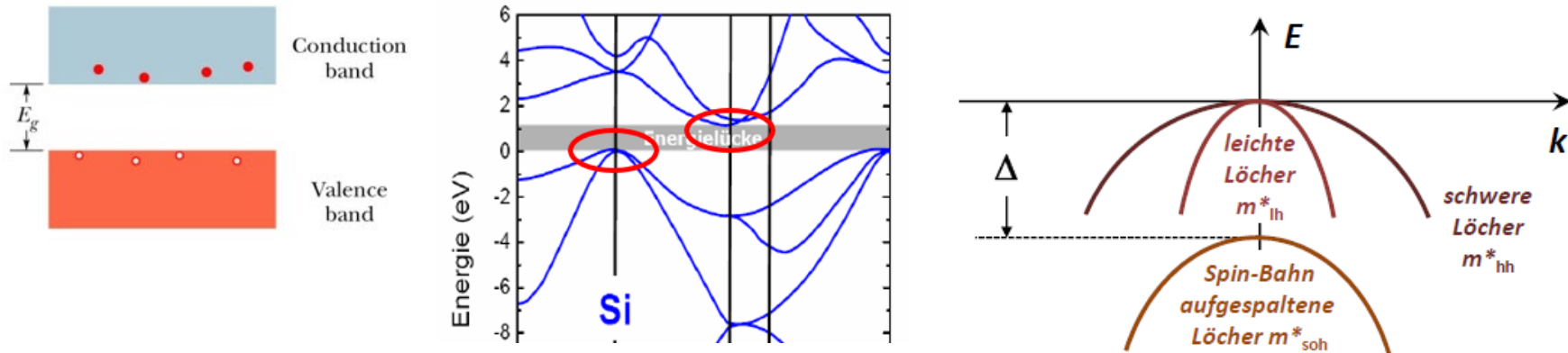


Abbildung 10.2: Qualitativer Verlauf der Bandstruktur von Si und Ge in der Nähe des Γ -Punktes. Δ ist die Spin-Bahn-Aufspaltung.

Halbleiter	m_e^*/m	m_{el}^*/m	m_{et}^*/m	m_{lh}^*/m	m_{hh}^*/m	m_{soh}^*/m	Δ (eV)
Si		0.19	0.98	0.16	0.49	0.24	0.044
Ge		0.081	1.59	0.043	0.33	0.084	0.295
GaAs	0.063			0.082	0.51	0.14	0.341
GaSb	0.041			0.04	0.4	0.15	0.80
GaP		1.12	0.22	0.14	0.79	0.25	0.08
InAs	0.023			0.026	0.41	0.16	0.41
InP	0.073			0.089	0.58	0.17	0.11
InSb	0.014			0.015	0.43	0.19	0.81

Spin-Bahn-Aufspaltung
grundsätzlich bei schweren
Atomen höher:
 $\Delta \sim Z^4$

Tabelle 10.3: Effektive Massen von Elektronen und Löchern sowie Spin-Bahn-Aufspaltung Δ für Si und Ge.
Quelle: *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, Vol. 1 and 2, edited by M. Levinstein, S. Rumyantsev and M. Shur, World Scientific, London (1996, 1999).

14. Intrinsische Halbleiter (30)

Intrinsische Leitfähigkeit: Freie Elektronen werden durch thermische Anregung vom VB ins CB erzeugt.

Gesucht: Konzentration der Ladungsträger n_c (Elektronen) im CB und p_v (Löcher) im VB, die für die Transporteigenschaften von Halbleitern von zentraler Bedeutung sind.

$$n_c = \int_{E_c}^{\infty} D_c(E) f(E, T) dE \quad p_v = \int_{-\infty}^{E_v} D_v(E) [1 - f(E, T)] dE$$

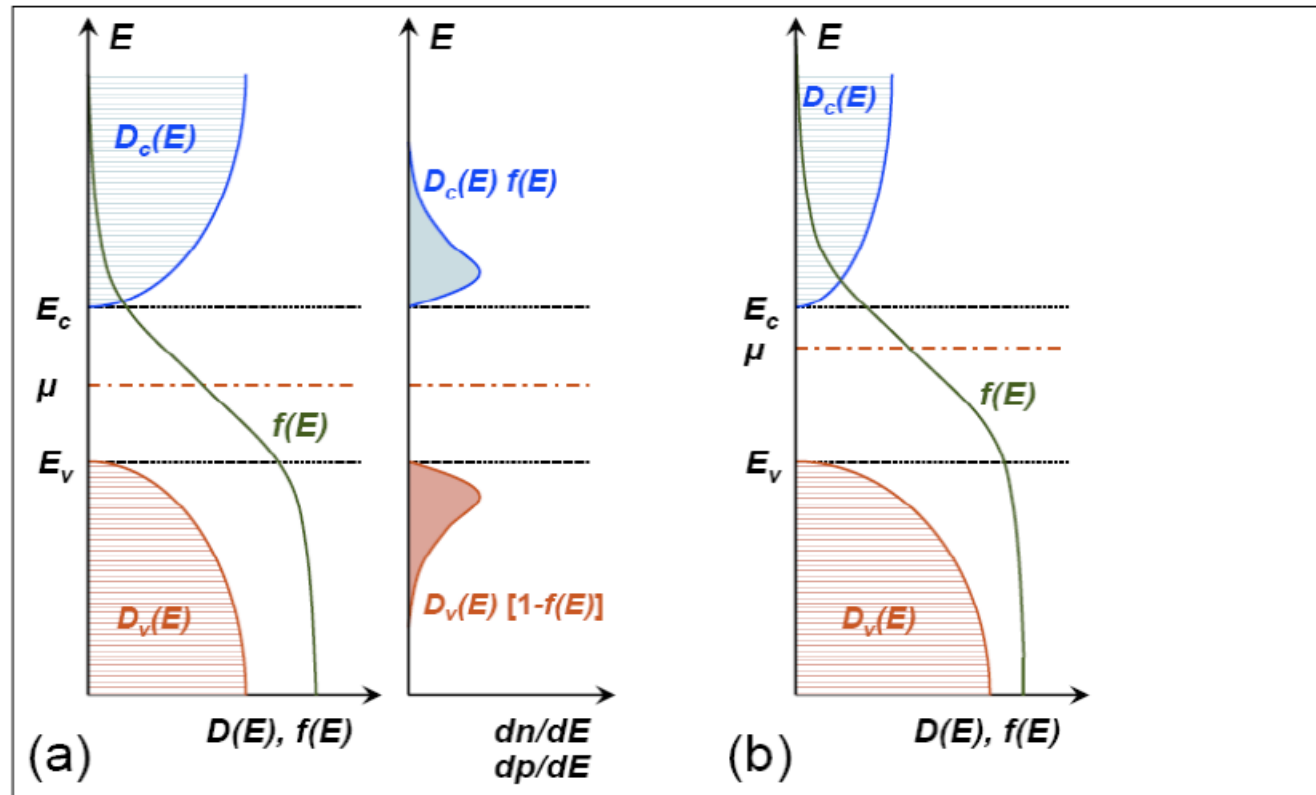
mit $D(E) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2}$ Zustandsdichte des freien Elektronengases pro Vol. und für beide Spinsorten

Hier für Parabelnäherung nahe der Bandkanten:

$$D_c(E) = \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} (E - E_c)^{1/2} \quad \text{für } E > E_c \quad D(E) \equiv 0 \quad \text{für } E_v < E < E_c$$

$$D_v(E) = \frac{(2m_h^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} (E_v - E)^{1/2} \quad \text{für } E < E_v$$

14. Zustandsdichte intrinsischer Halbleiter (31)



Anzahl Elektronen im CB ist gleich der Anzahl der Löcher im VB !
(Neutralitätsbedingung)

(a) Falls $m_e^* = m_h^*$ und damit $D_c(E) = D_v(E)$, so liegt das chemische Potential μ genau in der Mitte der Energielücke

(b) Falls $D_c(E) < D_v(E)$, dann verschiebt sich μ in Richtung CB-Kante, so dass die Integrale n_c und p_v gleich sind

**Rechnung
Intrinsische
Ladungsträgerdichte**

Intrinsische Ladungsträgerdichte

$$n_c = \frac{\text{Anzahl Ladungsträger}}{\text{Volumen}} = \frac{1}{V} \int_{E_c}^{\infty} dE D_c(E) \cdot f(E, T) = \int_{E_c}^{\infty} dE g_c(E) \cdot f(E, T)$$

$$e^{-\frac{E-\mu}{k_B T}} \approx \frac{1}{e^{\frac{(E-\mu)}{k_B T}} + 1}$$

1. $E > E_c$ und μ weit entfernt von der Bandkante E_c

$$n_c \approx \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot e^{\frac{\mu}{k_B T}} \int_{E_c}^{\infty} dE \sqrt{E-E_c} \cdot e^{-E/k_B T}$$

Substitution $x = \frac{E-E_c}{k_B T} \rightarrow dx = \frac{dE}{k_B T}$

$$\rightarrow n_c \approx \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\mu}{k_B T}} \int_0^{\infty} dx k_B T \sqrt{x} \sqrt{k_B T} e^{-(x + \frac{E_c}{k_B T})}$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} e^{-\frac{E_c-\mu}{k_B T}} \underbrace{\int_0^{\infty} dx \sqrt{x} e^{-x}}_{\sqrt{\pi}/2}$$

$$= \underbrace{2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}}_{=: n_0} \cdot e^{-\frac{E_c-\mu}{k_B T}}$$

$$\frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E-E_c}$$

m_e^* : effektive Elektronenmasse

Freie Leitungsbandelektronen ab $E=E_c$ (Nullpunktverschiebung gegenüber Kap. 4)

Somit $n_c = n_0 e^{-\frac{E_c - \mu}{k_B T}}$ mit $n_0 = n_0(T)$, aber vergleichsweise schwach temperaturabhängig

Analog ergibt sich

$$p_v = p_0 e^{-\frac{\mu - E_v}{k_B T}} \quad \text{mit} \quad p_0 = 2 \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$$

Für den intrinsischen Halbleiter gilt

$$n_c = p_v \quad \text{für alle Temperaturen!}$$

Interpretation der Exponentialterme: Boltzmann-Faktor, d.h. thermische Anregung über eine Energiebarriere ΔE gemäß $e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$ mit $\Delta E > 0$

$$\left. \begin{array}{l} \rightarrow n_c: \Delta E = E_c - \mu > 0 \\ p_v: \Delta E = \mu - E_v > 0 \end{array} \right\}$$

Das chemische Potential liegt in der Bandlücke: $E_c > \mu > E_v$

Rechnung: $n_c = p_v$ setzen u. nach μ auflösen
Ergebnis:

$$\mu = \mu(T) = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{m_h^*}{m_e^*}$$

14. Extrinsische Halbleiter (32)

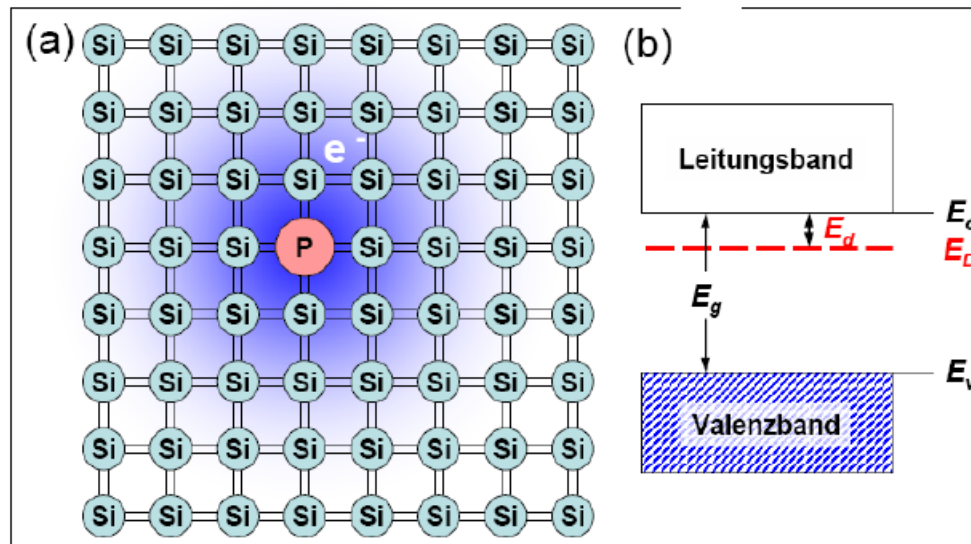
Extrinsische Halbleiter = dotierte Halbleiter

Die intrinsische Ladungsträgerdichte in Halbleitern ist für viele Anwendungen zu gering

⇒ müssen Dotieratome (elektrisch aktive Störstellen) einbringen

(a) n-Dotierung, Donatoren

Si: tetraedrische Koordination mit 4 kovalenten Bindungen;
bringen in Si-Gitter ein 5-wertiges Atom (P, As oder Sb) ein → es bleibt ein überschüssiges Valenzelektron ausserhalb der sp^3 -Hybridbindung



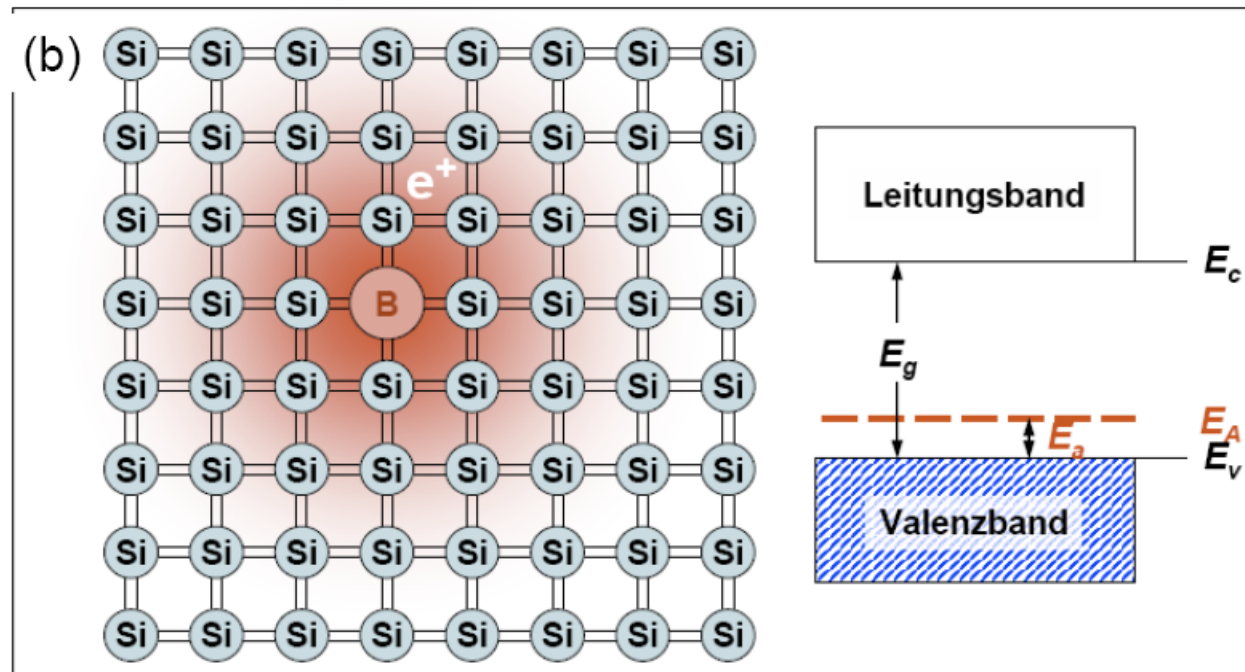
E_D : Grundzustand des Donatoratoms

E_d : Ionisierungsenergie des Donatoratoms, um Elektron ins CB anzuregen

14. Extrinsische Halbleiter (33)

(b) p-Dotierung, Akzeptoren

Bauen ein 3-wertiges Fremdatom (B, Al, Ga, In) ins Si-Gitter ein → der sp^3 -Hybrid kann ein zusätzliches Elektron aus dem VB unter Erzeugung eines Defektelektrons (Lochs) aufnehmen (Akzeptor).



14. Extrinsische Halbleiter (34)

Berechnung der Energieniveaus der Dotieratome: Bohrsches Atommodell ist ausreichend!

Bohrsches Atommodell

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

$n=1$ Ionisierungsenergie: 13.6 eV (sehr gross!)

In Materie: a) $m \rightarrow m^*$

b) Abschirmung des Coulombpotentials durch
Dielektrizitätskonstante ϵ

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

Si: $m_e^* \cong 0.3 m_0$, $\epsilon = 11.7 \Rightarrow E_1 \sim 30 \text{ meV}$

$$E_d = E_C - E_D \cong 30 \text{ meV} \sim k_B T (= 300 \text{ K}) \cong 25 \text{ meV}$$

Ge: $m_e^* \cong 0.12 m_0$, $\epsilon = 15.8 \Rightarrow E_1 \sim 6 \text{ meV}$

14. Extrinsische Halbleiter (35)

Bohr-Radius des Donatoratoms: $r_d = \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0\hbar^2}{m_e^*e^4}$

mit $r_d = \frac{\epsilon \cdot m_0}{m_e^*} r_{Bohr}$, $r_{Bohr} = 0.53 \text{ \AA}$

$r_d(\text{Si}) \cong 30 \text{ \AA}$, mit $a(\text{Si}) = 2.35 \text{ \AA} \rightarrow 100$ Gitterabstände,
damit ist Verwendung von ϵ
für Abschirmung gerechtfertigt

Achtung:

Wirkung von Donatoren und Akzeptoren kann sich aufheben!

Kompensierte Halbleiter: Donatoren und Akzeptoren im Halbleiter,

Elektron eines Donators kann zu Akzeptor diffundieren und dort das fehlende Elektron ersetzen \rightarrow Wirkung von Donatoren und Akzeptoren heben sich gegenseitig auf

14. Extrinsische Halbleiter (36)

Thermische Ionisierung dotierter Halbleiter:

Elektron im dotierten Halbleiter ist thermisch aktiviert entweder aus dem Valenzband oder von einem Donatorniveau; analog für Loch

Dichte aller vorhandenen Donatoren N_D bzw. aller Akzeptoren N_A ist gegeben durch die neutralen (N_D^0 , N_A^0) und die ionisierten (N_D^+ , N_A^-) Donatoren bzw. Akzeptoren:

$$N_D = N_D^0 + N_D^+$$

$$N_A = N_A^0 + N_A^-$$

Lage des Fermi-Niveaus im homogenen Halbleiter ist festgelegt durch die Neutralitätsbedingung

$$n + N_A^- = p + N_D^+$$

Summenregeln

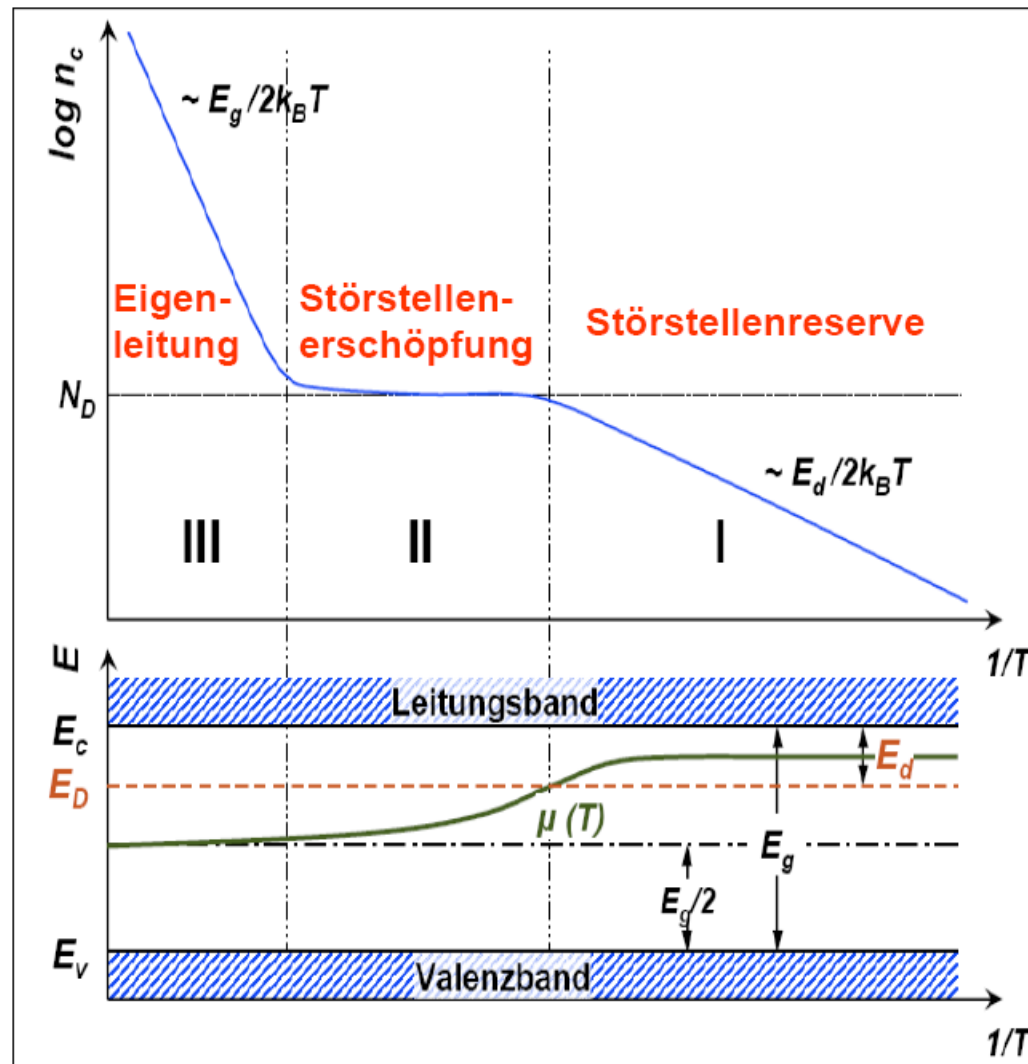
Betrachten reinen n-Halbleiter, in dem nur Donatoren vorhanden sind.
Für die Besetzung der Donatorniveaus mit Elektronen gilt:

$$n_D = N_D^0 = N_D \frac{1}{\exp\left(\frac{E_D - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

Fermi-Dirac-Statistik

14. Extrinsische Halbleiter (37)

Dotierter Halbleiter: Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerdichte und des chemischen Potentials



Rechnung hierzu im Sommersemester

14. Ausblick: weitere Halbleiter-Materialien (38)

Organische Halbleiter:

- z.B. Polyacetylen; Anwendungen: OLEDs (Organic Light Emitting Diodes), OFETs (Organic Field Effect Transistors); Herstellung preiswert; leicht modifizierbar hinsichtlich elektr. u. opt. Eigensch., aber Haltbarkeitsproblem.

Oxidische Halbleiter:

- CuO, CuO₂, ZnO
- La₂CuO₄ ($E_g \cong 2$ eV), wird durch Lochdotierung mittels Ba oder Sr metallisch und supraleitend für $T < T_c \cong 40$ K!
La_{2-x}Ba_xCuO₄ war Ausgangsmaterial für die Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleiter durch G.Bednorz und K.A. Müller (1986)

Schicht-Halbleiter:

- PbI₂, MoS₂, GaSe; Bindung innerhalb der Schichten kovalent, dazwischen van der Waals Bindung; intrinsisch 2D Elektronensysteme; Variation der Kopplung zwischen Schichten durch Interkalation (Einbringung von Fremdatomen)

Magnetische Halbleiter: hohes Interesse wegen Anwendung als Injektoren für spinpolarisierte Ströme in Halbleiter (Spinelektronik)

- EuO ($T_c = 69$ K), EuS ($T_c = 16$ K)
- Ga_{1-x}Mn_xAs ($T_c \cong 170$ K) → DMS (diluted magnetic semiconductors)
- Zn_{1-x}Mn_xO