

Vorlesung  
**Halbleiterphysik**  
mit Übungen

als Wahlpflichtfach für Studierende  
Physik Master und  
Lehramt Gymnasium

Fachbereich Physik  
Universität Konstanz  
Sommersemester 2019

# Vorstellung der Dozenten

## **Vorlesung:**

Prof. Dr. Alfred Leitenstorfer

Lehrstuhl für Ultrakurzzeitphysik und Photonik

email: aleitens@uni-konstanz.de

Telefondurchwahl: 3817

## **Organisation der Übungen:**

Alexander-Cornelius Heinrich

email: alexander-cornelius.heinrich@uni-konstanz.de

Telefondurchwahl: 3752

## **Forschungsgebiete:**

- Ultrakurzzeitphysik, Femtosekunden-Technologie, Nanophotonik, Quantenelektrodynamik

# Organisation von Vorlesung und Übungen

- Vorlesung: Montag 10<sup>00</sup> bis 11<sup>30</sup> Uhr, P603  
Donnerstag 10<sup>00</sup> bis 11<sup>30</sup> Uhr, P603
- Übung: Vorbesprechungen:  
Montag, 29. 04. 2019,  
8<sup>15</sup>-9<sup>45</sup> und 13<sup>30</sup>-15 Uhr in P812
- Wie viele Übungsgruppen? 2

Termine:  
Montag 8.15 – 9.45 in P812  
Montag 13.30 – 15.00 in P812

# Teilnehmende Studenten: Vorkenntnise + Erwartungen?

- 0 Diplom
- 11 Master
- 10 Bachelor
- 0 Lehramt
- 1 Informatik
- 6. bis 12. Semester
- Klassische Physik +  
Atome  
Theorie  
Elektromagnetismus  
Quantenmechanik  
Festkörperphysik
- Vorlesungssprache  
Deutsch oder Englisch?
- Aufbau Vorlesung: mehr  
Grundlagen oder mehr  
Details Bauelemente?

# Motivation Halbleiterphysik

- Physik der Halbleiter-Technologie, Optoelektronik, etc...
- Beispiel: CMOS-Transistoren der neuesten Generation  
Halbleiterbauelemente mit molekularen Dimensionen für  
den Haushalts-PC!  
Informationen: [www.intel.com/research/silicon](http://www.intel.com/research/silicon)
- Aber: Nach wie vor weist Halbleiterphysik großes Potenzial  
für Grundlagenforschung auf + es gibt eine enge  
Verzahnung von Experiment und Theorie!
- Beispiele:
  - Nobelpreise an K. v. Klitzing, H. Störmer, H. Krömer...
  - Quantenbauelemente wie z. B. Quanten-Kaskadenlaser

# Grundlegender Aufbau und Organisation

- Zwei Themenbereiche:
  - I) Grundlagen der Halbleiterphysik
  - II) Anwendung auf Halbleiter-Bauelemente
- Begleitend zur Vorlesung: Übungen
  - Vorträge der Studierenden  
(30 Minuten plus Diskussion)
  - Verständnisfragen der Tutoren in den Übungen,  
die den Vorlesungsstoff vertiefen (15-30 Minuten  
allgemeine Diskussion)
- Für pdf-Dateien der Vorlesungsfolien: siehe  
[www.ilias.uni-konstanz.de/](http://www.ilias.uni-konstanz.de/) → **Halbleiterphysik**  
Passwort: Halbleiter19

# Literatur

- P. Y. Yu, M. Cardona „Fundamentals of Semiconductors“ (Englisch), Springer-Verlag:  
Basis für Teil I, Physik und Materialeigenschaften
- S. M. Sze „Physics of Semiconductor Devices“ (Englisch), Verlag J. Wiley & Sons:  
Basis für Teil II, Halbleiter-Bauelemente
- K. Seeger „Semiconductor Physics“ (Englisch) Springer-Verlag: Ausgewählte Aspekte Teil I und II, insbesondere elektronischer Transport
- Diese Titel stehen in der Bibliothek als Präsenzexemplare zur Verfügung und sollten begleitend zur Vorlesung, sowie zur Vorbereitung auf die Prüfungen herangezogen werden!

# Teil I: Physikalische Grundlagen und Materialeigenschaften

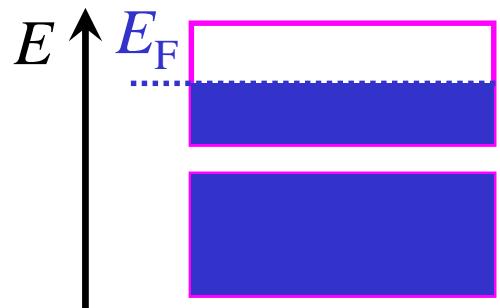
## I.1 Einleitung

### I.1.1: Halbleiter im Überblick

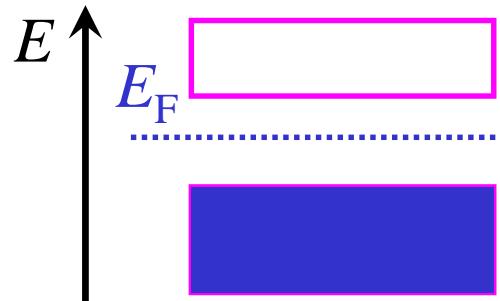
- Grundlegende Definition der Halbleiter als spezielle Gruppe von Festkörpern
- Übersicht der verschiedenen Halbleiter-Klassen und -Familien

# Metalle – Dielektrika

- Klassifikation von Festkörpern: elektronische Leitfähigkeit
- eng verknüpft mit dem Energiespektrum der elektronischen Zustände und deren Besetzung:

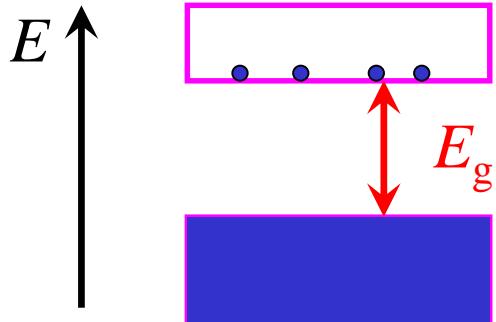


- Energiebänder mit erlaubten Zuständen
- Fermi-Energie  $E_F$  im erlaubten Bereich  
=> Band teilweise besetzt
- freie Elektronen, Beschleunigung im elektrischen Feld
- hohe elektrische Leitfähigkeit: Metall



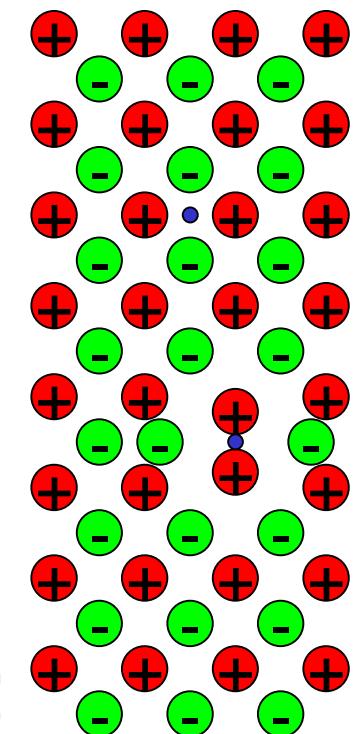
- Fermi-Energie  $E_F$  in Bandlücke
- Bänder im Grundzustand ( $T = 0$ ) des perfekten Kristalls voll besetzt oder leer
- ausschließlich gebundene Elektronen: Dielektrikum

# Halbleiter – Isolatoren



- **Dielektrika:** charakterisiert durch Energielücke (engl.: „energy gap“)  $E_g$ , die voll besetzte und leere Bänder trennt
- **verschwindende Leitfähigkeit** im Grundzustand ( $T \rightarrow 0$ ) des perfekten Kristalls höchster Reinheit
- Nächste Frage: Wie beweglich sind **zusätzliche Elektronen**, eingebracht z. B. durch
  - Defekte, Verunreinigungen bzw. gezielte Dotierung
  - thermische Anregung ( $kT \leftrightarrow E_g$ )
  - optische Anregung ( $h\nu > E_g$ ) ?

- Möglichkeit 1: Zusätzliche elektronische Ladung verzerrt Kristallgitter in seiner Umgebung erheblich, z.B. durch Coulomb-Wechselwirkung mit Gitter-Ionen
  - Lokalisation in selbstinduziertem Potenzialminimum, engl. „self trapping“
  - Beschreibung mit Einteilchen-Bandstruktur (basiert auf perfekter Translationssymmetrie) stark modifiziert
  - effektive Masse wird stark erhöht bzw. divergiert (starker Polaron-Effekt)
  - stark reduzierte bzw. verschwindende Beweglichkeit im elektrischen Feld
  - typisch für Materialien mit stark ionischer Bindung und großer Bandlücke  $E_g > 3 \text{ eV}$   
=> **Isolator**
  - Beispiel:  $\text{SiO}_2$  (kristallin, „Quarz“),  $E_g = 9 \text{ eV}$
  - aber: Diamant (C,  $\text{sp}^3$ -hybridisiert,  $E_g = 5.5 \text{ eV}$ ): kovalent gebunden, Halbleiter!



- Möglichkeit 2: Zusätzliche elektronische Ladung stört Kristallgitter nur schwach, delokalisiertes Bloch-Elektron
  - Bewegung im elektrischen Feld laut Bloch-Theorem
  - freie Ladungsträger, Leitfähigkeit je nach Dichte
  - typisch für kovalent gebundene Materialien mit meist geringerer Bandlücke  $E_g < 3 \text{ eV} \Rightarrow \text{Halbleiter}$
- Leitfähigkeit  $\sigma$  kann gezielt über extrem weite Bereiche variiert werden,  $\sigma \approx 10^{-2} \dots 10^9 \Omega\text{cm}$ , beispielsweise durch
  - Einbringen von Verunreinigungen (Dotierung)
  - äußere elektrische und magnetische Felder
  - Bestrahlung mit Licht
  - Temperatur-Änderung

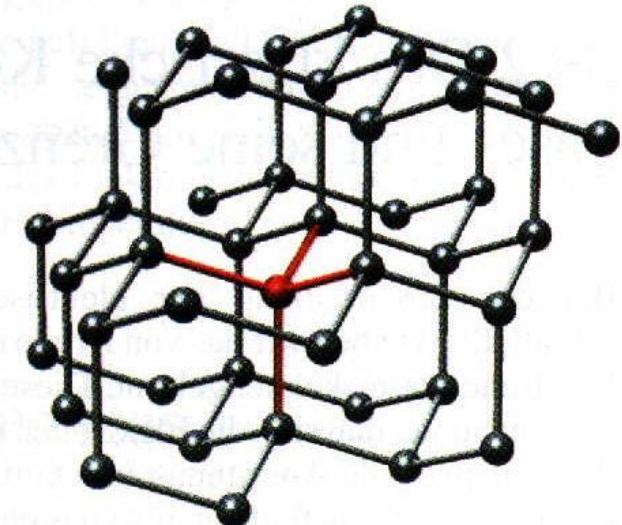
$\Rightarrow$  hohe technische Bedeutung der Halbleiter als Materialien für aktive Schalter, Sensoren etc...
- Paradebeispiel: Silizium Si mit  $E_g = 1.17 \text{ eV}$

# Klassifizierung von Halbleitern

- Auswahl grundlegender Einteilungsmöglichkeiten:
  - Elementhalbleiter (z.B. Si) – Verbindungshalbleiter (z.B. GaAs)
  - anorganische Halbleiter (z.B. Si, GaAs) – organische Halbleiter (z.B. Anthrazen-Kristalle)
  - kristalline Halbleiter (z.B. GaAs, Molekül-Kristalle) – amorphe Halbleiter (z.B. amorphes Silizium, Polymere)
  - schmal-lückige („narrow gap“, z.B. InAs,  $E_g = 0.42 \text{ eV}$ ), Standard- (z.B. GaAs,  $E_g = 1.52 \text{ eV}$ ), und weit-lückige Halbleiter („wide gap“, z.B. GaN,  $E_g = 3.4 \text{ eV}$ )
  - Halbleiter mit direkter („direct gap“, z.B. GaAs) und indirekter Bandlücke („indirect gap“, z.B. Si)

# IV-IV-Halbleiter

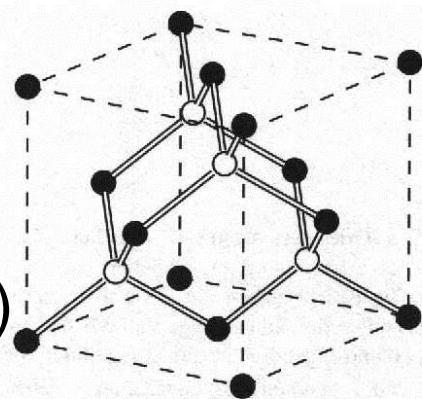
- IV. Hauptgruppe des Periodensystems: C, Si, Ge, Sn
- $sp^3$ -Hybridisierung, tetraedrische Bindung => „Diamantstruktur“
- Bandlücken: alle indirekt!
- Element-Halbleiter (rein kovalent):
  - Diamant C,  $E_g = 5.5$  eV
  - Silizium Si,  $E_g = 1.17$  eV
  - Germanium Ge,  $E_g = 0.74$  eV
  - graues Zinn  $\alpha$ -Sn,  $E_g = 0$  („Halbmetall“, verschwindende Zustandsdichte an der Fermikante, schlechter Leiter)
- Verbindungshalbleiter (schwach ionisch): Silizium-Carbid SiC,  $E_g = 2.4$  eV (Zinkblende) bzw.  $E_g = 3.3$  eV (Wurtzit)
- Silizium ist der technologisch wichtigste Halbleiter!



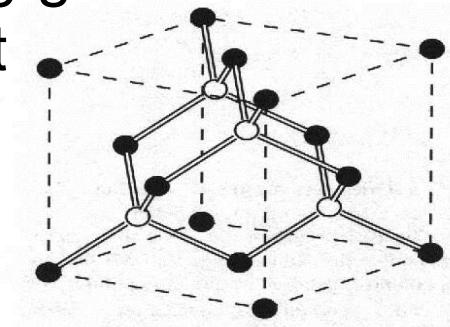
# III-V-Halbleiter

- Verbindungshalbleiter aus III. Hauptgruppe (B, Al, Ga, In) mit Elementen der V. Hauptgruppe (N, P, As, Sb)
- kovalente Bindung mit leicht ionischem Anteil:

- tetraedrisch,  
=> „Zinkblende-Struktur“  
(analog Diamant)



- einachsig gestaucht bzw. gestreckt  
=>  
„Wurtzit-Struktur“



- Bandlücken: direkt (z.B. InP) oder indirekt (z.B. GaP)
- ternäre (z.B.  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ) und quaternäre (z.B. InGaAsP) Mischkristalle, gitterangepasst an binäres Substrat (GaAs oder InP) → Halbleiter-Heterostrukturen (siehe I.7)
- technologische Bedeutung:
  - Optoelektronik, Halbleiterlaser (direkte Bandlücken!)
  - Höchstfrequenz-Elektronik (kleine effektive Massen!)

# Ausschnitt Periodensystem

1a	2a	3b	4b	5b	6b	7b	8		1b	2b	3a	4a	5a	6a	7a	8a	
<b>1 H</b> 1,00794 1s																<b>2 He</b> 4,002602 1s <sup>2</sup>	
<b>3 Li</b> 6,941 2s	<b>4 Be</b> 9,012182 2s <sup>2</sup>															<b>10 Ne</b> 20,1797 2s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	
<b>11 Na</b> 22,989768 3s	<b>12 Mg</b> 24,3050 3s <sup>2</sup>															<b>18 Ar</b> 39,948 3s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	
<b>19 K</b> 39,0983 4s	<b>20 Ca</b> 40,078 4s <sup>2</sup>	<b>21 Sc</b> 44,955910 3d4s <sup>2</sup>	<b>22 Ti</b> 47,88 3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	<b>23 V</b> 50,9415 3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	<b>24 Cr</b> 51,9961 3d <sup>5</sup> 4s	<b>25 Mn</b> 54,93805 3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	<b>26 Fe</b> 55,847 3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	<b>27 Co</b> 58,93320 3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	<b>28 Ni</b> 58,6934 3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	<b>29 Cu</b> 63,546 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	<b>30 Zn</b> 65,39 4s <sup>2</sup> 4p	<b>31 Ga</b> 69,723 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	<b>32 Ge</b> 72,61 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	<b>33 As</b> 74,92159 3d <sup>10</sup> + 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	<b>34 Se</b> 78,96 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>	<b>35 Br</b> 79,904 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	<b>36 Kr</b> 83,80 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>
<b>37 Rb</b> 85,4678 5s	<b>38 Sr</b> 87,62 5s <sup>2</sup>	<b>39 Y</b> 88,90585 4d5s <sup>2</sup>	<b>40 Zr</b> 91,224 4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>	<b>41 Nb</b> 92,90638 4d <sup>4</sup> 5s	<b>42 Mo</b> 95,94 4d <sup>5</sup> 5s	<b>43 Tc*</b> 98,9063 4d <sup>6</sup> 5s <sup>2</sup>	<b>44 Ru</b> 101,07 4d <sup>7</sup> 5s	<b>45 Rh</b> 102,90550 4d <sup>8</sup> 5s	<b>46 Pd</b> 106,42 4d <sup>10</sup>	<b>47 Ag</b> 107,8682 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>	<b>48 Cd</b> 112,411 5s <sup>2</sup> 5p	<b>49 In</b> 114,818 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	<b>50 Sn</b> 118,710 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>	<b>51 Sb</b> 121,757 4d <sup>10</sup> + 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>	<b>52 Te</b> 127,60 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup>	<b>53 I</b> 126,90447 5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup>	<b>54 Xe</b> 131,29
<b>55 Cs</b> 132,90543 6s	<b>56 Ba</b> 137,327 6s <sup>2</sup>	<b>57 La</b> 138,9055 5d6s <sup>2</sup>	<b>72 Hf</b> 178,49 5d <sup>2</sup> 6s <sup>2</sup>	<b>73 Ta</b> 180,9479 5d <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	<b>74 W</b> 183,84 5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	<b>75 Re</b> 186,207 5d <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	<b>76 Os</b> 190,23 5d <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	<b>77 Ir</b> 192,22 5d <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	<b>78 Pt</b> 195,08 5d <sup>9</sup> 6s	<b>79 Au</b> 196,96654 6s	<b>80 Hg</b> 200,59 6s <sup>2</sup>	<b>81 Tl</b> 204,3833 6s <sup>2</sup> 6p	<b>82 Pb</b> 207,2 6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	<b>83 Bi</b> 208,98037 6s <sup>2</sup> 6p <sup>3</sup>	<b>84 Po*</b> (209) (210) 6s <sup>2</sup> 6p <sup>4</sup>	<b>85 At*</b> (222) 6s <sup>2</sup> 6p <sup>5</sup>	<b>86 Rn*</b> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>6</sup>

Protonenzahl → Symbol → relative Atommasse

Elektronenkonfiguration  
(Grundzustand)



- IV-IV-Verbindungen (kovalent gebunden, indirekt)
- III-V-Verbindungen (schwach ionisch, teilweise direkt)
- II-VI-Verbindungen (ionisch, überwiegend direkt)
- I-VII-Verbindungen (stark ionisch, viele Isolatoren)
- Tendenz der Bandlücke: steigt mit ionischem Charakter und nimmt ab für höhere Kernladungszahlen

# Auswahl weiterer Halbleiter-Familien

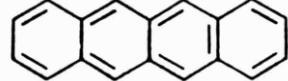
- oxidische Halbleiter:
  - Oxide meist Isolatoren, aber auch einige Halbleiter (z.B. CuO, Cu<sub>2</sub>O, ZnO)
  - stark korrelierte Elektronensysteme: Cuprate als Hoch- $T_c$ -Supraleiter, z.B. Y<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub> ( $E_g = 1.8$  eV,  $T_c = 90$  K für YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub>)  
VO<sub>2</sub>: Isolator-Metall-Übergang bei 60 °C
- magnetische Halbleiter
  - verdünnte magnetische Halbleiter (z.B. Cd<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>Te)
  - ferromagnetische Halbleiter bei Raumtemperatur?
- Schichthalbleiter (z.B. III-VI-Verbindung GaSe):  
kovalente Bindung in einer Ebene, van-der-Waals-Bindung senkrecht dazu!
- I-III-VI<sub>2</sub>-Halbleiter (z.B. AgGaS<sub>2</sub>), etc...

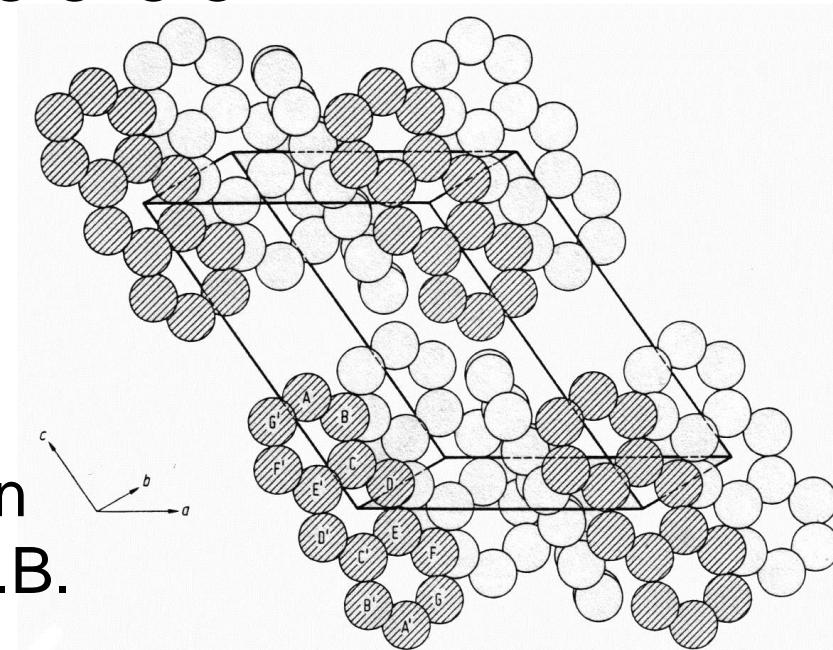
- organische Halbleiter:

- konjugierte Doppelbindungen C-C=C-C=
  - => delokalisierte  $\pi$ -Elektronen
  - => hohe intramolekulare Beweglichkeit

- a) Molekülkristalle:

- van-der-Waals-Bindungen zwischen kovalent gebundenen aromatischen Molekülen wie z.B.

Tetracen: 



Kristallstruktur Anthracen

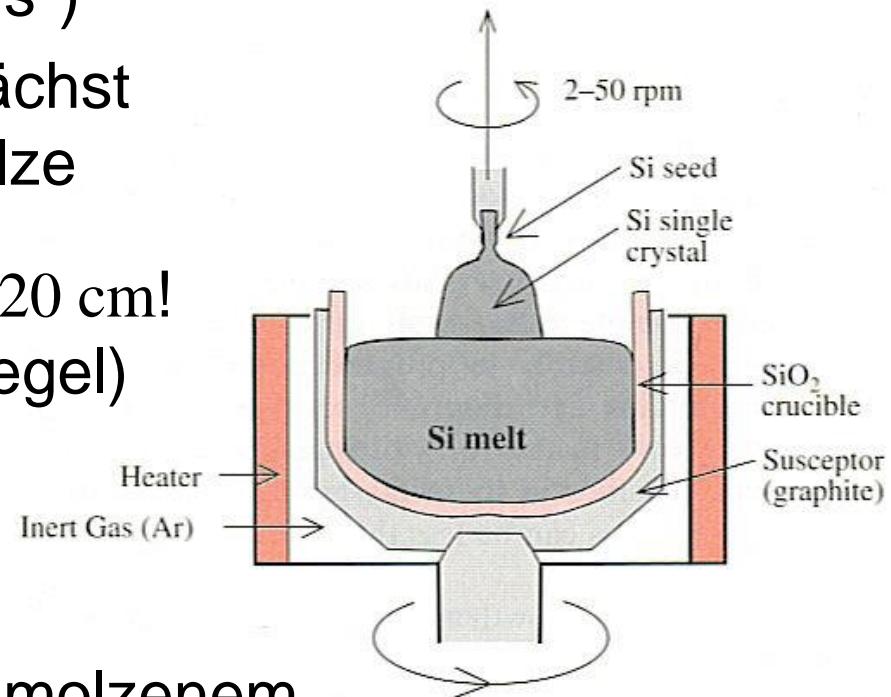
- b) leitende Polymere (Kettenmoleküle, Spaghetti-Struktur)
  - technologische Anwendung z.B. in Farb-Displays etc.: leicht großflächig herstellbar, billiges Ausgangsmaterial...
  - aber: intermolekularer Transport langsam („hopping“), begrenzte Haltbarkeit, Kontaktierung + Dotierung?

## I.1.2: Halbleiterwachstum: Techniken

- Warum sind Halbleiter wissenschaftlich + technisch so interessant? Zwei Antworten:
  - 1. Materialeigenschaften können gezielt variiert werden (siehe I.1.1)
  - 2. Halbleitermaterialien und -strukturen können mit höchster Präzision hergestellt werden
- Voraussetzung: Techniken für Kristallwachstum
  - Versetzungsdichten bis zu  $1000 \text{ cm}^{-3}$
  - Verunreinigungs-Konzentrationen bis zu  $10^{10} \text{ cm}^{-3}$
- wir unterscheiden drei technologische Schritte:
  - Ziehen möglichst perfekter Einkristalle als Substrate
  - eventuell Aufbringen von Schichtstrukturen (Epitaxie)
  - laterale Modifikation und Strukturierung zur Definition von Bauelementen

# Czochralski-Methode – Tiegelziehen

- wichtigste Methode für das Wachstum von Volumenkristallen (engl.: „bulk crystals“)
  - rotierender Impfkristall wächst durch Kontakt mit Schmelze
- Silizium: Durchmesser bis  $> 20$  cm!  
Verunreinigungen: C (aus Tiegel) und O (aus Luft)
- GaAs, InP: Anionen flüchtig  
 $\Rightarrow$  Liquid-Encapsulated Czochralski (LEC) mit geschmolzenem Bor-Oxid als Schutzschicht
- Volumenmaterial-Barren (engl. „ingot“) wird in dünne Scheiben zersägt und poliert  $\Rightarrow$  Wafer als Substrat für Epitaxie und laterale Strukturierung

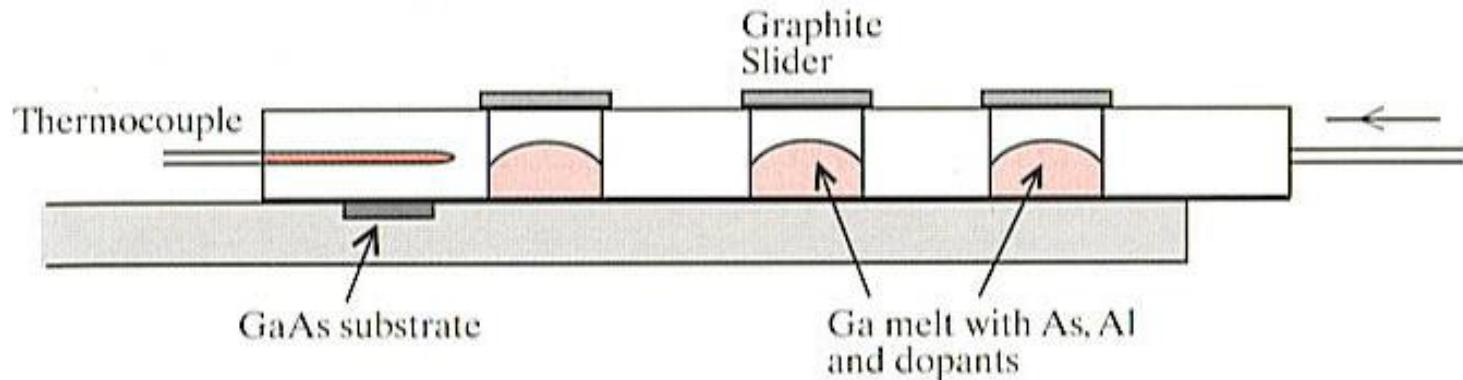


# Halbleiter-Epitaxie

- Tiegelziehen, Zonenschmelzen etc.: Wachstum von Bulk-Material, Reinheit und Perfektion begrenzt
- aber: Proben für Experimente und Bauelemente benötigen typischerweise nur eine Schichtdicke von 1 µm
- daher: Halbleiter-Epitaxie zur Herstellung dünner Filme und Schichtstrukturen mit höchster Perfektion!
- Voraussetzung: Substratmaterial und epitaktische Schicht haben ähnliche Eigenschaften bzgl. Gitterkonstante etc.
- Homo-Epitaxie: epitaktische Schicht und Substrat chemisch identisch; Beispiel: Si auf Si
- Hetero-Epitaxie: chemische Zusammensetzung differiert bei ähnlichen Gitter-Parametern; Beispiel:  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  auf InP

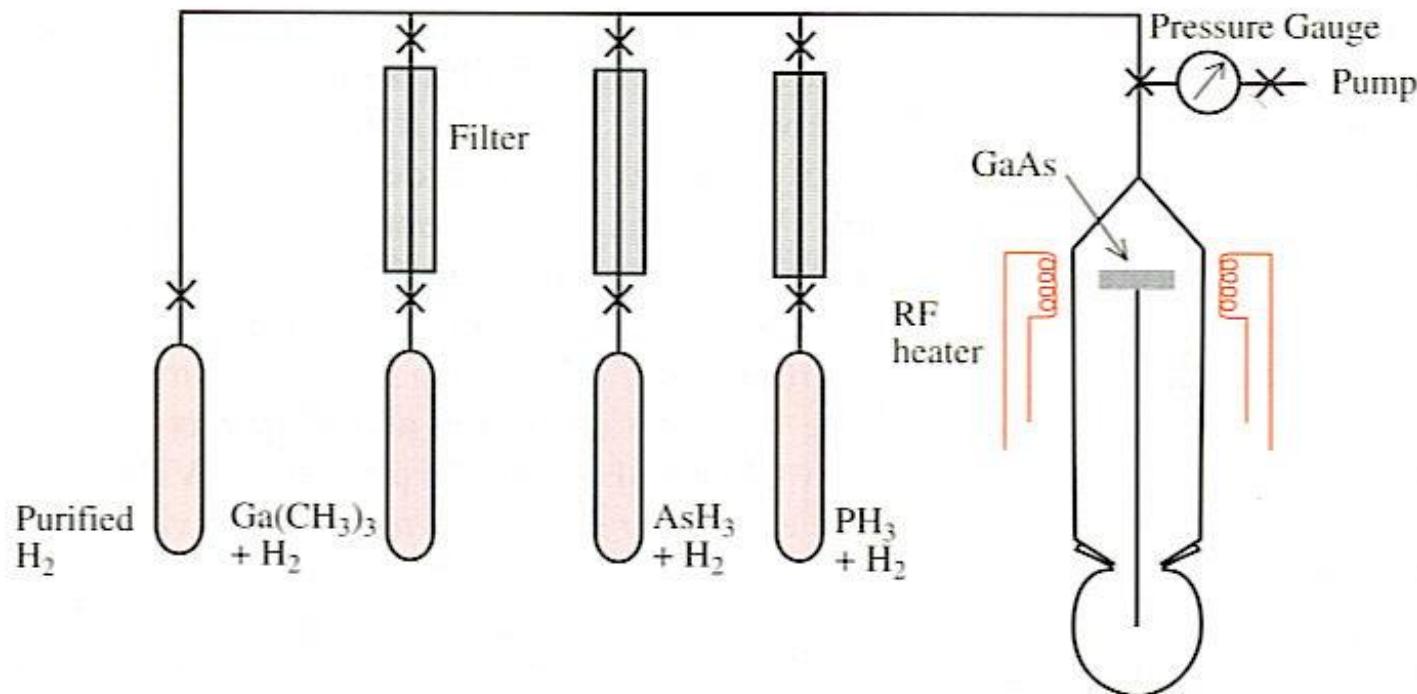
- Flüssigphasen-Epitaxie (engl.: „Liquid Phase Epitaxy“, LPE):

- Schlitten mit As- bzw. Al-gesättigter Ga-Schmelze wird über gekühltes GaAs-Substrat gezogen  
=> Nukleation von (Al)GaAs



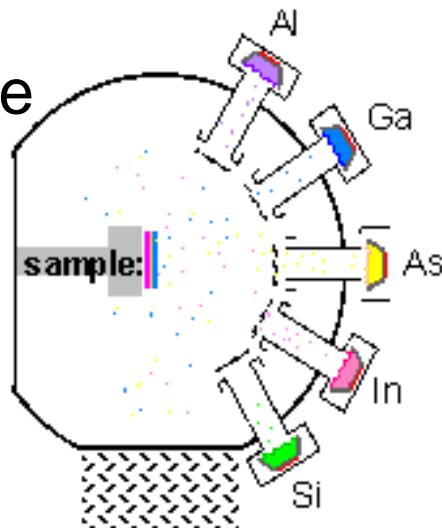
- Vorteile: billig und einfach zu handhaben, schnell  
=> industrielle Herstellung von Laserdioden
  - Nachteile: keine Kontrolle über Wachstum auf atomarem Niveau, Reinheit der Proben begrenzt (insbesondere Einbau von Kohlenstoff als Defekt)

- Gasphasen-Epitaxie: Chemical Vapor Deposition (CVD):
    - chemische Reaktion aus Gasphase (Druck: ca. 1 mBar) auf Substrat in einem Reaktor
    - Silizium:  $\text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si} + 2\text{H}_2$
    - (Al)GaAs:  $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3 + \text{AsH}_3 \rightarrow 3\text{CH}_4 + \text{GaAs}$
- Metal-Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD)

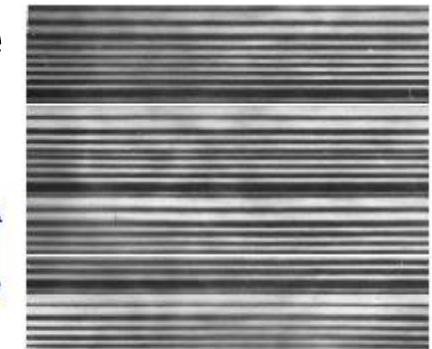


- Gasphasen-Epitaxie: Molekularstrahl-Epitaxie (engl.: „Molecular Beam Epitaxy“, MBE):
  - Herstellung epitaktischer Strukturen mit höchster Präzision (atomare Monolagen) und Reinheit durch Verdampfung der elementaren Halbleiter-Konstituenten aus Effusionszellen (Molekularstrahl)
  - Ultra-Hochvakuum erforderlich => teuer aber: Elektronen und Ionen als Indikatoren zur in-situ-Überwachung von Kristallwachstum und -Qualität nutzbar (Massenspektrometrie, LEED,...)

schematische  
Darstellung  
III-V-MBE



TEM-Aufnahme  
einer Quanten-  
kaskaden-  
struktur aus  
InGaAs/InAlAs,  
gewachsen auf InP-Substrat



# Einteilung Übungsgruppen

**Übungsgruppe I – Montag, 8<sup>15</sup>-9<sup>45</sup> Uhr – P812**

Xianyue	Ai
Julian	Bär
Maximilian	Brochnow
Lennart	Feuerer
Sebastian	Großenbach
Darius	Hashemi
Oliver	Irtenkauf
Hannah	Lange
Maximilian	Mattes
Melanie	Mehler
Onur	Sipahi
Vincent	Walla
Volker	Wiechert

# Einteilung Übungsgruppen

**Übungsgruppe II – Montag, 13<sup>30</sup>-15<sup>00</sup> Uhr – P812**

Emmanuel	Agbike
Jannik	Dornseiff
Niklas	Fritzsche
Nadine	Kirchmaier
Fabian	Klopfer
Tilman	König
Noemi	Mundhaas
Leon	Ruf
Margaretha	Sandor
Sarah	Sanz Alonso
Philipp	Sterk
Sebastian	Vollmer
Ellen	Zander

# I.2 Elektronische Bandstrukturen

## I.2.1: Quantenmechanische Zustände im periodischen Potenzial

- Lücken im Energiespektrum der elektronischen Zustände: spezielle Eigenschaften der Halbleiter
- Eigenzustände der Elektronen in Festkörper mit  $10^{23}$  Atomen pro  $\text{cm}^3$ : Berechnung, Klassifikation?
- ab initio: Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung für perfekten Kristall!

$$\left( \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_e} + \sum_j \frac{\mathbf{P}_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum_{j',j} \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}|} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i',i} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} \right) \Psi = E \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_j, \dots, \mathbf{R}_m)$$

- volles Vielteilchen-Problem:
    - zu kompliziert für Berechnung
    - selbst falls Lösung und Eigenwerte bekannt:  
wenig physikalische Information und Einsicht
  - bessere Strategie:
    - Ausnützung der hohen Symmetrie von Kristallen  
=> Gruppentheorie (siehe I.2.3)
    - physikalisch sinnvolle **Näherungen**
  - Näherung 1: unterscheide Rumpf- und Valenz-Elektronen
    - Rumpf-Elektronen: lokalisiert, atomare Eigenschaften  
Beispiel Si:  $1s^2, 2s^2, 2p^6$   
Rumpf-Elektronen und Atomkerne: Ionenrümpfe
    - Berechnung der Elektronenzustände getrennt  
für **Ionenrümpfe** (lokalisiert, atomare Niveaus) und  
**Valenz-Elektronen** (delokalisiert => Energiebänder)
- 10

- Näherung 2: Born-Oppenheimer-, adiabatische Näherung
  - Ionen erheblich schwerer als Elektronen:
  $m_p / m_e = 1836$ 

=> Elektronen- und Kernbewegung getrennt behandeln,  
Separation der entsprechenden Variablen
  - Elektronen bewegen sich schnell und sehen „eingefrorenes“ Potential der Ionenrümpfe!
  - dem entspricht folgende physikalische Beobachtung:  
Resonanzfrequenzen für Elektronen typisch  $> 10^{14}$  Hz  
(Interband-Übergänge typisch eV), wogegen Schwingungsfrequenzen Ionenrümpfe eher  $< 10^{13}$  Hz
  - Hamilton-Operator als Summe aus 3 Termen:

$$H = H_{ion}(\mathbf{R}_j) + \underline{H_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_{j0})} + H_{e-ion}(\mathbf{r}_i, \delta\mathbf{R}_j)$$

Ionenbewegung im  
adiabatischen Potenzial

siehe I.3!

Elektron-Phonon-  
Wechselwirkung

- jetzt: Konzentration auf elektronischen Anteil  $H_e$  des Hamilton-Operators  $H$ :

$$H_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_{j0}) = \sum_i \frac{\mathbf{p}^2_i}{2m_e} + \frac{1}{2} \sum_{i',i} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{j0}|}$$

mit den Gleichgewichtslagen der Ionenrümpfe  $\mathbf{R}_{j0}$

- Näherung 3 (drastisch): Molekularfeld-Näherung  
(engl.: „mean-field approximation“)
    - jedes Elektron sitzt in gleichem Potenzial  $V(\mathbf{r})$
    - Ein-Elektronen-Schrödinger-Gleichung:
- $$H_{1e} \Phi_n(\mathbf{r}) = \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}) \right) \Phi_n(\mathbf{r}) = E_n \Phi_n(\mathbf{r})$$
- Bestimmung des Ein-Elektronen-Potenziels  $V(\mathbf{r})$  (s. I.2.5)
  - Lösung => Eigenenergien  $E_n$  und Eigenzustände  $\Phi_n(\mathbf{r})$  für jeweils 2 Elektronen mit entgegengesetztem Spin

## I.2.2: Translations-Symmetrie und Brillouin-Zonen

- Symmetrie des Kristalls hilft bei Lösung der Ein-Elektronen-Schrödinger-Gleichung
- wichtigste Symmetrieeigenschaft von Kristallen:  
**Translations-Invarianz**
  - Gitter geht nach Translation in sich selbst über
  - vereinfacht die Klassifizierung elektronischer Zustände:  
**Wellenvektor  $\mathbf{k}$  ist Erhaltungsgröße, „gute Quantenzahl“**  
(Noethersches Theorem: „Zu jeder Symmetrie eines Systems existiert eine physikalische Erhaltungsgröße“)
- Beschränkung auf eindimensionales periodisches Potenzial mit Periode  $a$ : Translations-Operator  $T_a$  mit der Eigenschaft

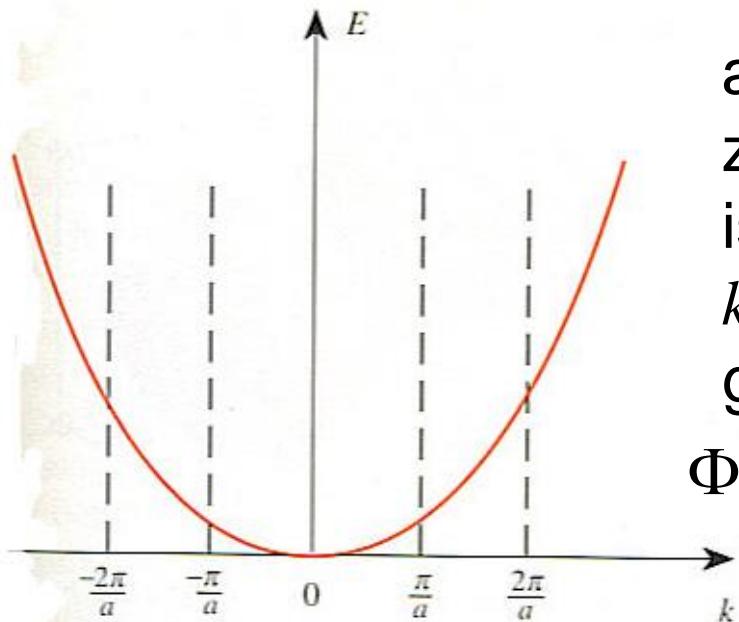
$$T_a f(x) = f(x+a)$$

- Definition Bloch-Funktion:  $\Phi_k(x) = \exp(ikx) u_k(x)$   
mit dem gitterperiodischen Anteil  $u_k(x + na) = u_k(x)$ ,  
überlagert von ebener Welle mit Wellenvektor  $k$
- Verhalten unter Translations-Operation:
 
$$T_a \Phi_k(x) = \Phi_k(x + a) = \exp(ika) \Phi_k(x)$$
  - Bloch-Funktionen sind Eigenfunktionen des Translations-Operators  $T_a$  mit Eigenwert  $\exp(ika)$
- Hamilton-Operator  $H_{1e}$  ist invariant unter Translation um  $a$   
 $\Rightarrow H_{1e}$  kommutiert mit  $T_a$   
 $\Rightarrow$  Eigenfunktionen von  $H_{1e}$  können durch Eigenfunktionen von  $T_a$  ausgedrückt werden
- Aufbau der Eigenfunktionen von  $H_{1e}$  über Linearkombination von Bloch-Funktionen:

$$\Phi(x) = \sum_k A_k \Phi_k(x) = \sum_k A_k \exp(ikx) u_k(x)$$

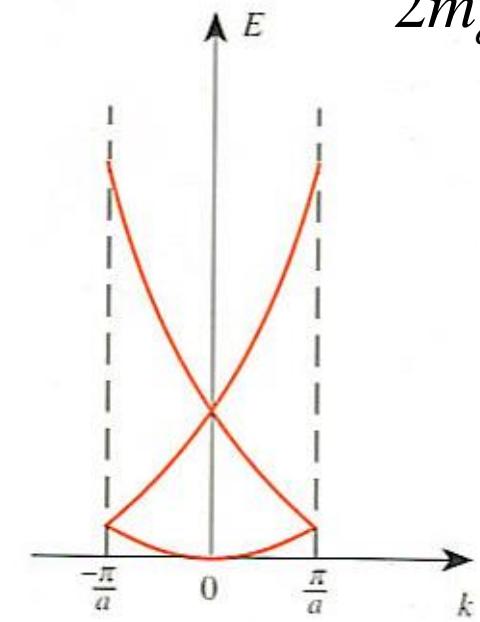
- Ein-Elektronen-Wellenfunktionen im periodischen Potenzial können durch Wellenvektor  $k$  klassifiziert werden
- **elektronische Bandstruktur** des Kristalls:  
Eigenenergien  $E_k$  der elektronischen Zustände  $\Phi_{nk}(\mathbf{r})$ , aufgetragen über dem Wellenvektor  $k$

- Beispiel: freies Elektron in einer Raumdimension  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$



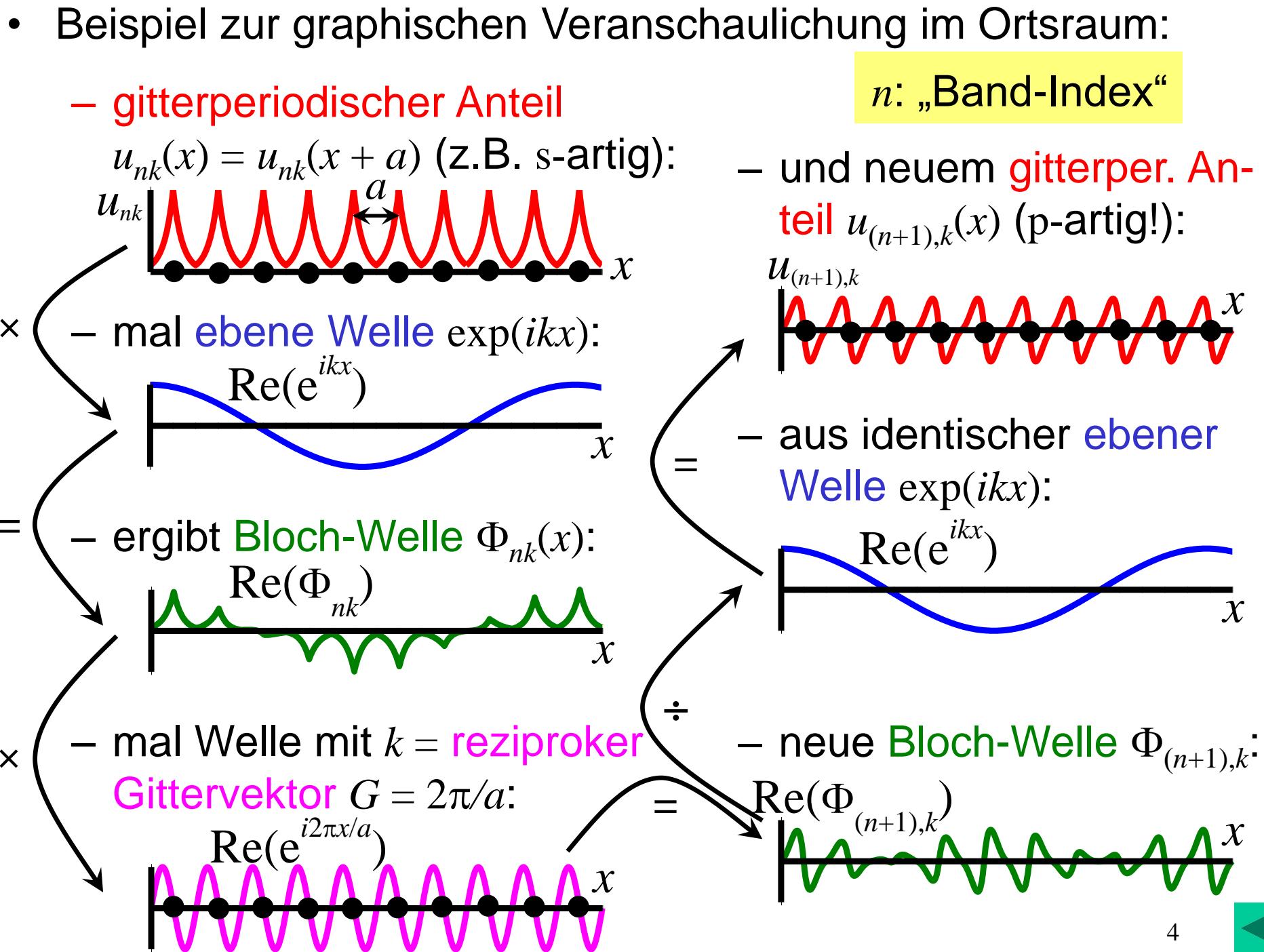
aber: Wahl von  $k$   
zur Klassifikation  
ist nicht eindeutig:  
 $k$  und  $k + (2n\pi/a)$   
geben Bloch-Welle

$$\Phi_k(x) = \exp(ikx) u_k(x)$$

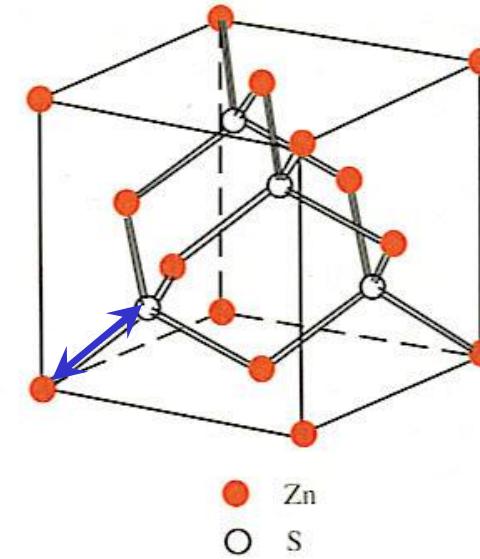
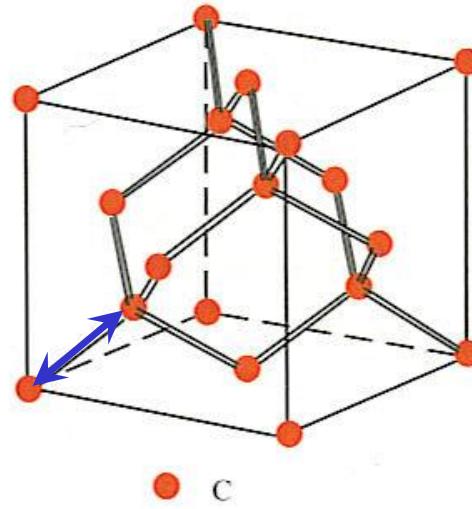


- daher: **reduziertes Banstrukturschema** im Intervall  $k = [-\pi/a, \pi/a] \Rightarrow$  1. Brillouin-Zone

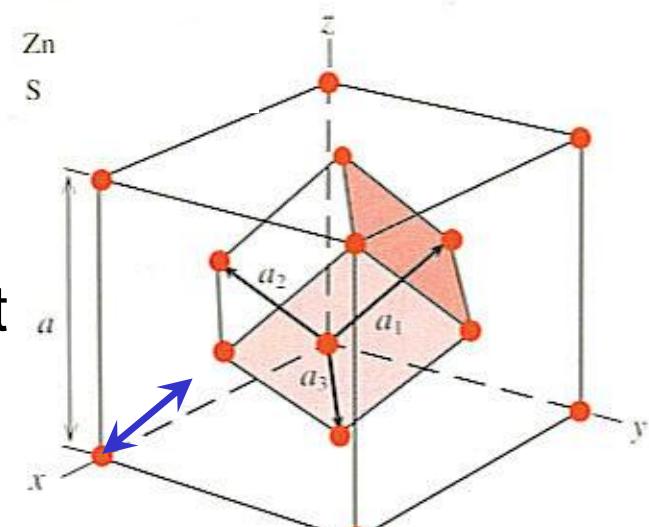




- Verallgemeinerung auf drei Raumdimensionen:  
primitive Gittervektoren  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$
- Beispiel: Diamant-Gitter und Zinkblende-Gitter



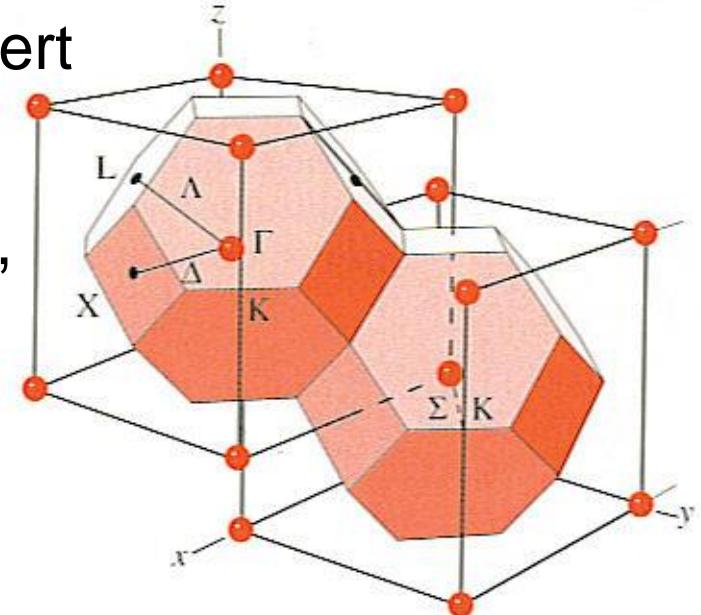
- Raumgitter (engl.: „direct lattice“):  
**Bravais-Gitter** kubisch-flächenzentriert  
(engl.: „face-centered cubic“, fcc)
- **Basis:** zwei-atomig  
(2 C in Diamant bzw. Zn und S in Zinkblende)



- Übergang in den reziproken Raum („ $\mathbf{k}$ -Raum“): primitive reziproke Gittervektoren  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  spannen primitive Einheitszelle des reziproken Gitters auf

$$\mathbf{b}_i = 2\pi \frac{\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3}$$

- reziprokes Gitter des kubisch-flächenzentrierten direkten Gitters: kubisch-raumzentriert (engl.: „body-centered cubic“, bcc)
- 1. Brillouin-Zone: kleinster Polyeder, eingeschlossen durch Flächen senkrecht auf reziproken Gittervektoren (analog zum Intervall  $[-\pi/a, \pi/a]$  in einer Raumdimension!)
- $\Gamma$  (Zentrum!), X, L, K: Punkte hoher Symmetrie  
 $\Delta, \Lambda, \Sigma$ : Linien hoher Symmetrie in der 1. Brillouin-Zone



# I.2.3: Dreh- und Spiegelsymmetrien, kristallographische Punktgruppen

## I.2.3.1: Gruppentheorie – eine rudimentäre Einführung

- Studium der Symmetrieeigenschaften eines Kristalls:  
Bestimmung der möglichen Symmetrie-Operationen
- mathematisches Werkzeug: **Gruppentheorie**
- Definition für Gruppe G:
  - Satz von Elementen  $\{a,b,c,\dots\}$ , für die eine Operation  $ab$  („Multiplikation“) zwischen zwei Elementen  $a$  und  $b$  definiert ist mit 4 Eigenschaften:
  - Geschlossenheit:  $ab$  ist wieder Element von G
  - Assoziativgesetz:  $(ab)c = a(bc)$
  - Identität:  $ae = a$
  - inverses Element:  $a^{-1}a = e$  für jedes Element aus G

- Symmetrie-Opterationen eines Kristalls oder Moleküls:  
**(Symmetrie)-Gruppe**
- Schönflies-Notation für Symmetrie-Operationen:
  - $C_n$ : Drehung um  $360^\circ/n$  an n-zähliger Rotationsachse
  - $\sigma$ : Spiegelung an Spiegelebene
  - $i$ : Inversion an Inversionszentrum
  - $S_n$ : Drehung  $C_n$  gefolgt von Spiegelung an Ebene senkrecht Rotationsachse („Dreh-Spiegelung“)

- es existieren 32 **kristallographische Punktgruppen**
- Beispiel: 24 Symmetrie-Operationen des  $\text{CH}_4$ -Moleküls (Tetraeder) bilden **Punktgruppe  $T_d \rightarrow$  Zinkblende-Gitter**
- Punktgruppe ist Untergruppe der vollen Raumgruppe G des Kristalls, die Translationen mit einschließt

### I.2.3.2: Darstellungen und Charaktertafeln

- Wirkung einer Symmetrie-Operation auf ein Koordinatensystem ( $x, y, z$ ): Transformationsmatrix  $\mathbf{M}$

- Beispiel vierzählige Drehung um  $x$ -Achse:

$$x' = x, y' = z, z' = -y$$

- $\mathbf{r}' = \mathbf{M} \mathbf{r}$  mit Transformationsmatrix  $\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$

- Satz von Transformationsmatrizen für alle Symmetrie-Operationen: **Darstellung** der Gruppe
- Rezept, um Darstellung einer Gruppe zu generieren:

- wähle Funktion  $f(x, y, z)$  und wende darauf alle Symmetrie-Operationen  $O_i$  der Gruppe an  
=> Satz von Basisfunktionen  $f_i = O_i[f]$

- Geschlossenheit der Gruppe aus I.2.3.1:  $O[f_i] = \sum_j f_j a_{ji}$

- Koeffizienten  $a_{ji}$  bilden quadratische **Transformationsmatrix**
- Dimension der Transformationsmatrix: Anzahl der Elemente (Symmetrie-Operationen) in der Gruppe
- willkürliche Wahl der Basisfunktionen  $f_i \Rightarrow$   
Satz von Transformationsmatrizen  $\{A_i\}$  nicht eindeutig
- neuer Satz über Ähnlichkeitstransformationen  $A_i' = TA_iT^{-1}$
- falls dadurch Satz erreicht wird, bei dem alle  $A_i'$  in Blockform vorliegen:  
mit den quadratischen Matrizen  
 $\alpha, \beta, \gamma, \dots, \tau, \dots$   
dann sind alle  $\alpha, \beta, \gamma, \dots, \tau \dots$  selbst (einfachere) Darstellungen der Gruppe
- falls  $\alpha, \beta, \gamma, \dots, \tau, \dots$  nicht mehr weiter vereinfacht werden können: **irreduzible Darstellungen** der Gruppe

$$\begin{pmatrix} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & \dots & 0 \\ & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & & \gamma & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & & & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & & & & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & \dots & \tau \end{pmatrix}$$

- Drehachsen oder Spiegelebenen, die durch Symmetrieroberungen in einander übergehen, nennen wir **äquivalent**
- zwei wichtige Eigenschaften von Gruppen (ohne Beweis):
  - 1.: Die Spuren (Spur = Summe aller Diagonalelemente) aller Transformationsmatrizen äquivalenter Operationen innerhalb einer Darstellung sind identisch, wir bezeichnen sie als **Charakter**  $\chi_\varphi(i)$
  - 2.: Die **Anzahl irreduzibler Darstellungen** einer Gruppe **ist gleich** der **Anzahl der Klassen** äquivalenter Symmetrieroberungen
- **Charaktertafel:** Liste der Charaktere  $\chi_\varphi(i)$  aller irreduziblen Darstellungen  $\varphi$  und Klassen  $i$  von Symmetrieroberungen einer Symmetriegruppe
- extrem hilfreiches Werkzeug z. B. zur Symmetrisierung von Wellenfunktionen, Ableitung von Auswahlregeln etc...

- Beispiel: Charaktertafel der Tetraedergruppe  $T_d$
- 5 Klassen äquivalenter Symmetrie-Operationen:

$\{E\}$	$\{3 C_2\}$	$\{6 S_4\}$	$\{6 \sigma\}$	$\{8 C_3\}$	Basisfunktionen (Beispiel):
$A_1$	1	1	1	1	$xyz$
$A_2$	1	1	-1	-1	$x^4(y^2-z^2)+y^4(z^2-x^2)+z^4(x^2-y^2)$
$E$	2	2	0	0	$\{(x^2-y^2), z^2 - (x^2+y^2)/2\}$
$T_1$	3	-1	1	-1	$\{x(y^2-z^2), y(z^2-x^2), z(x^2-y^2)\}$
$T_2$	3	-1	-1	1	$\{x, y, z\}$

- 5 nicht-äquivalente irreduzible Darstellungen
- Charaktere  $\chi_\phi(i)$ : Spuren der Transformations-Matrizen
- Spuren der Matrizen für die Einheitstransformation  $\{E\}$ : Dimension der jeweiligen Darstellung
- $A_1$ : „totalsymmetrische“ Darstellung

- Bisher benutzte Notation der irreduziblen Darstellungen von  $T_d$ : gebräuchlich in Molekülphysik und Chemie
- Halbleiterphysik: elektronische Eigenfunktionen in der Mitte der Brillouin-Zone ( $\Gamma$ -Punkt, Wellenvektor  $k = 0$  !) transformieren wie Punktgruppe des Kristalls
- (leider) folgende unterschiedliche Notationen für Darstellungen von  $T_d$  gebräuchlich:

Molekular:	Koster:	BSW:
$A_1$	$\Gamma_1$	$\Gamma_1$
$A_2$	$\Gamma_2$	$\Gamma_2$
$E$	$\Gamma_3$	$\Gamma_{12}$
$T_2$	$\Gamma_4$	$\Gamma_{15}$
$T_1$	$\Gamma_5$	$\Gamma_{25}$

- Notationen und Charaktertafeln analog für alle übrigen Punktgruppen, z. B. auch für  $O_h$  (Diamant-Gitter)

- Anwendungsbeispiel: **Auswahlregeln** für optische Dipol-Übergänge, z. B. zwischen Elektronenzuständen oder Phononen am  $\Gamma$ -Punkt eines Zinkblende-Kristalls
- Fermis Goldene Regel: Wahrscheinlichkeit für Übergang von Zustand  $\Psi_1$  nach  $\Psi_2$  unter Emission bzw. Absortion eines Photons: proportional zum (**Dipol-Matrix-Element**)<sup>2</sup>

$$\mathbf{p}_{21} = \left\langle \Psi_2 | e\mathbf{r} | \Psi_1 \right\rangle = e \iiint_V d^3 r \Psi_2^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \Psi_1(\mathbf{r})$$

- Dipol-Operator  $e\mathbf{r}$ : Vektor,  $T_2$ - bzw.  $\Gamma_4$ -Symmetrie in  $T_d$
- Ausgangszustand  $\Psi_1$  habe z. B. ebenfalls  $T_2$ -Symmetrie
- Anwendung von  $e\mathbf{r}$  auf dreidimensionale Darstellung  $T_2$  ergibt reduzible Darstellung  $\Gamma$  mit 9 Dimensionen:

$$\Gamma = T_2 \otimes T_2$$

- $\otimes$ : **direktes (Matrix-) Produkt** von zwei Darstellungen

- direktes Produkt zweier Darstellungen liefert eine neue Darstellung  $\Gamma$ , deren Charaktere  $\chi_{\Gamma}(i)$  durch Produktbildung aus den  $\chi_{\phi}(i)$  der Ausgangsdarstellungen erhalten werden:

$$\begin{array}{c} \{E\} \quad \{3 C_2\} \quad \{6 S_4\} \quad \{6 \sigma\} \quad \{8 C_3\} \\ T_2 \quad \quad \quad 3 \quad \quad -1 \quad \quad -1 \quad \quad 1 \quad \quad 0 \\ \Gamma = T_2 \otimes T_2 \quad 9 \quad \quad \quad 1 \quad \quad \quad 1 \quad \quad \quad 1 \quad \quad 0 \end{array}$$

- Ausdrücken von  $\Gamma$  durch **direkte Summe**  $\oplus$  aus irreduziblen Darstellungen: Charaktere jeder Klasse werden addiert!
- durch Inspektion in Charaktertafel von  $T_d$  finden wir:

$$\Gamma = T_2 \otimes T_2 = T_1 \oplus T_2 \oplus E \oplus A_1$$

- Matrix-Element  $p_{21}$ : nur dann endlicher Wert und damit **Übergang „dipol-erlaubt“**, falls Endzustand  $\Psi_2$  zu einer der irreduziblen Darstellungen  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $E$  oder  $A_1$  gehört, ansonsten

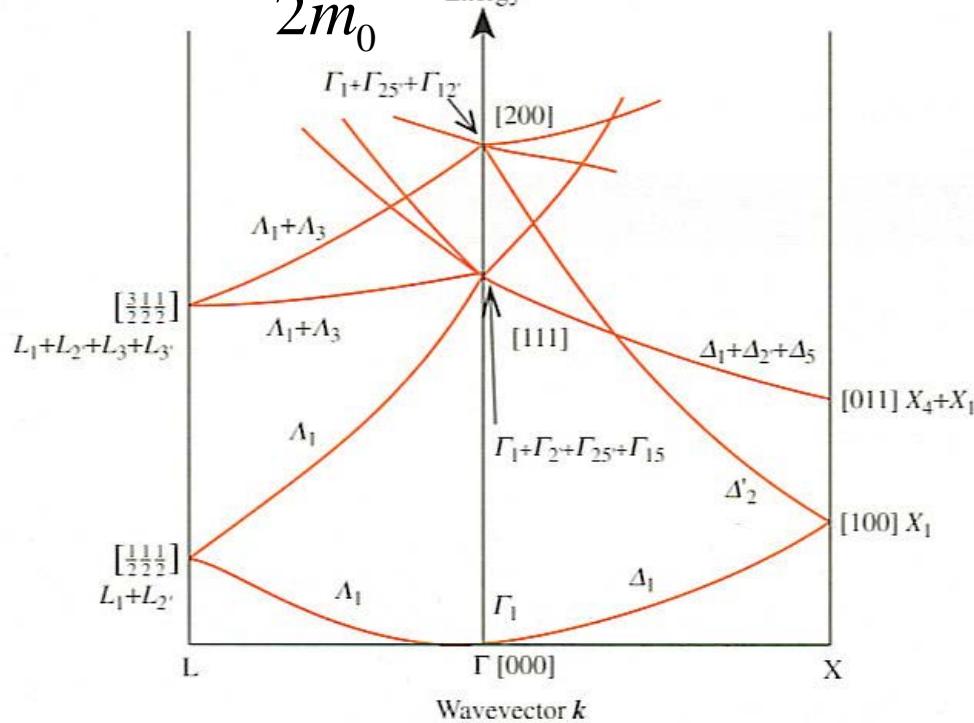
$$p_{21} = \langle \Psi_2 | e \mathbf{r} | \Psi_1 \rangle = \langle \Psi_2 | \Psi_3 \rangle = 0$$



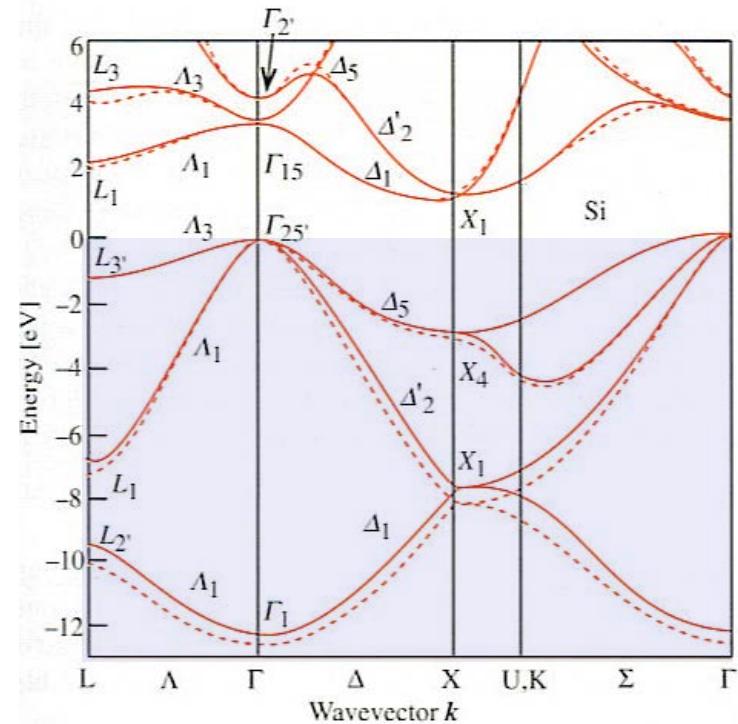
## I.2.4: Elektronische Bandstrukturen – qualitative Diskussion

- Bandstruktur: Energien  $E_n(k)$  der elektronischen Zustände in einem Kristallgitter aufgetragen über dem Wellenvektor  $k$ 
  - Bloch-Form der Wellenfunktion  
=> reduziertes Zonenschema
  - ebene Welle mit Wellenvektoren  $k$  innerhalb 1. Brillouin-Zone
  - gitterperiodischer Anteil  $u_{nk}(\mathbf{x})$ , charakteristisch für Band mit Index  $n$ , enthält gesamte Information über Struktur auf Längenskala < Elementarzelle
- Gruppentheorie: Symmetrisierung der Elektronenzustände in reduziertes Bandschema eines freien Elektrons in leerem Gitter (Potenzial  $V(\mathbf{r}) = \text{const.}$ ) mit Symmetriegruppe  $O_h$  des Diamantgitters:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \text{ in } O_h\text{-Symmetrie:}$$

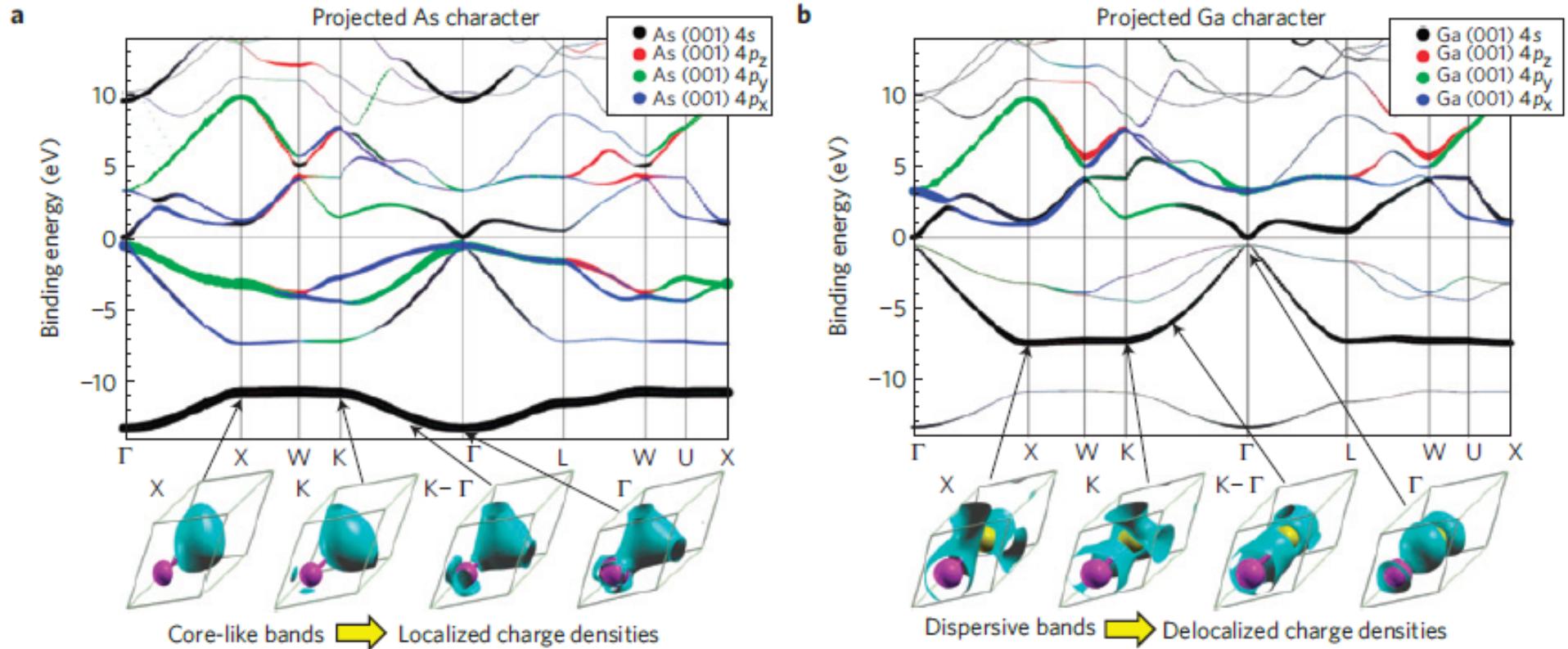


Bandstruktur von Si:



- „Einschalten“ des periodischen Potenzials: Energien von Zuständen verschiedener Darstellungen von  $O_h$ , die im freien Raum noch entartet waren, spalten auf => **Bandlücken**
- Trend 1:** schwere Elemente → starke Abschirmung Atomkerne durch Rumpf-Elektronen → geringe Modulationstiefe des Einelektronen-Potenzials → geringere Bandlücke  $E_g$
- Beispiel: C (5.5 eV) → Si (1.2 eV) → Ge (0.74 eV) →  $\alpha$ -Sn (0 eV)

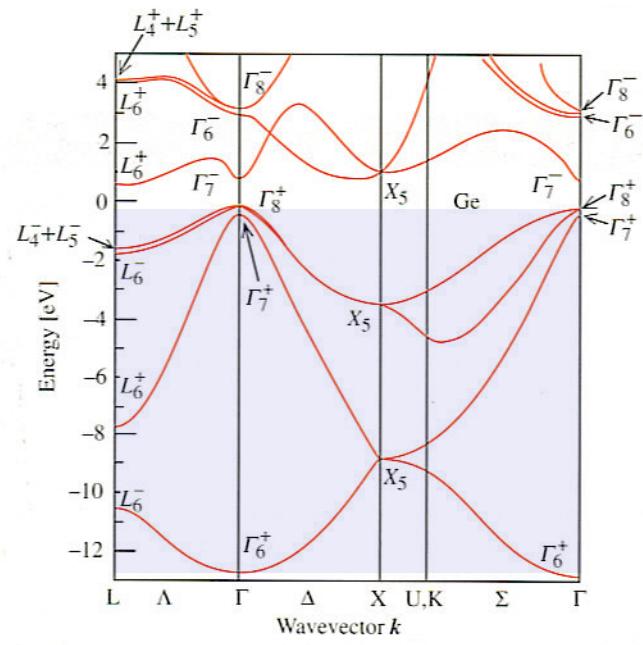
- Ab initio-Berechnung der Bandstruktur von GaAs mittels Dichtefunktionaltheorie:



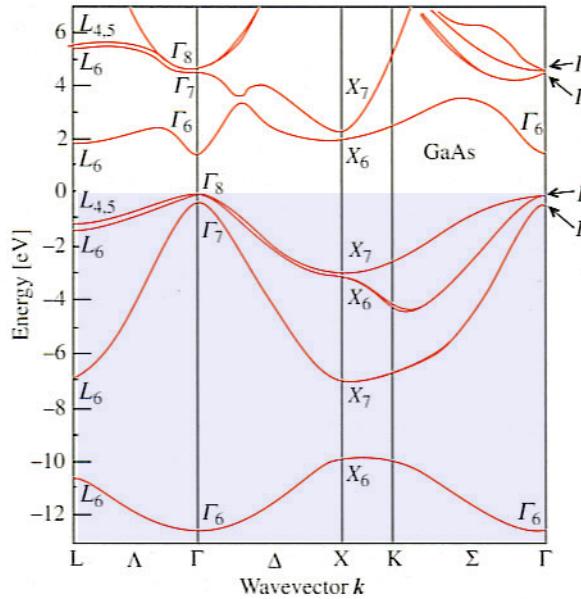
A. X. Gray et al., Nature Materials **10**, 759 (2010)

- Abbild der  $sp^3$ -hybridisierten Elektronenstruktur im reziproken Raum
- Valenzbänder: tendenziell höherer As-Anteil, bindend  
 Leitungsbänder: tendenziell höherer Ga-Anteil, antibindend

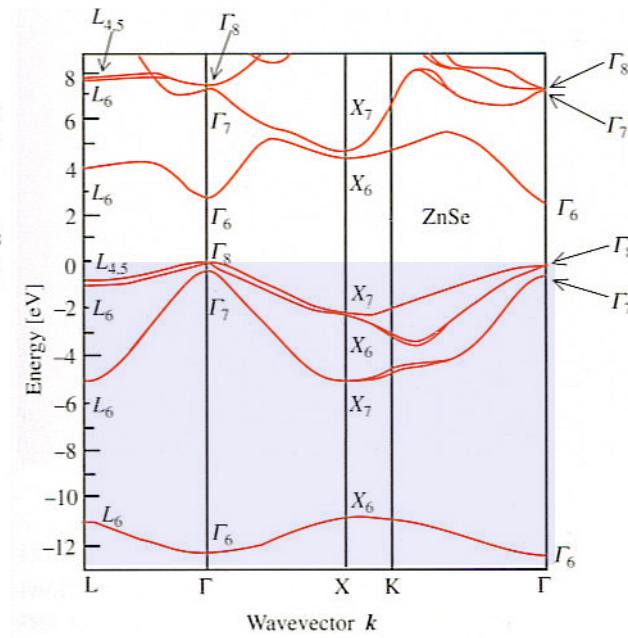
# Bandstruktur Ge:



# GaAs:

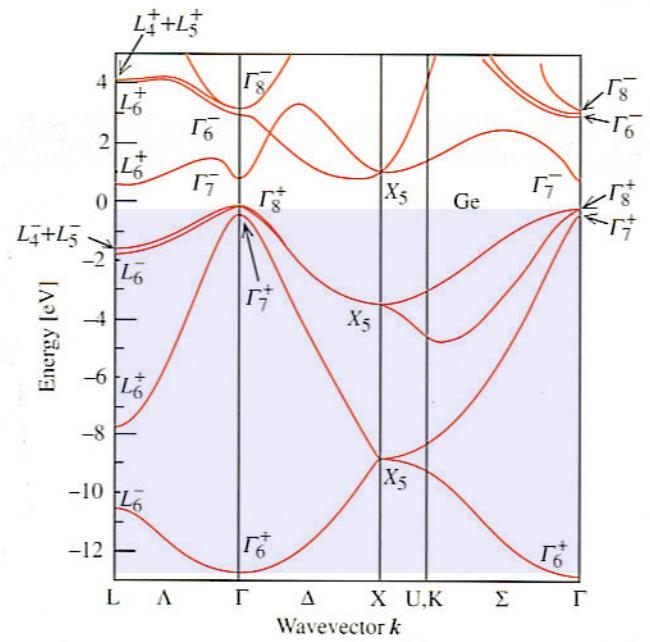


# ZnSe:

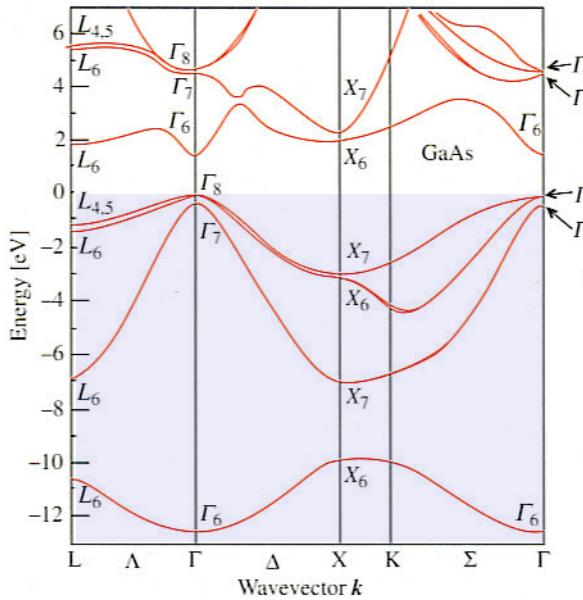


- ionischer Bindungsanteil → Zustände mit differierender Elektronendichte an den beiden Atomen in der Elementarzelle:
  - zusätzlich aufgehobene Entartungen beim Übergang  $O_h \rightarrow T_d$
  - generell stärkere Bandaufspaltungen in polareren Materialien
- **Trend 2:** stärker polarer Charakter → höhere Bandlücke  $E_g$  bei ansonsten isoelektronischer Struktur
- Beispiel: Ge (0.74 eV) → GaAs (1.52 eV) → ZnSe (2.82 eV)

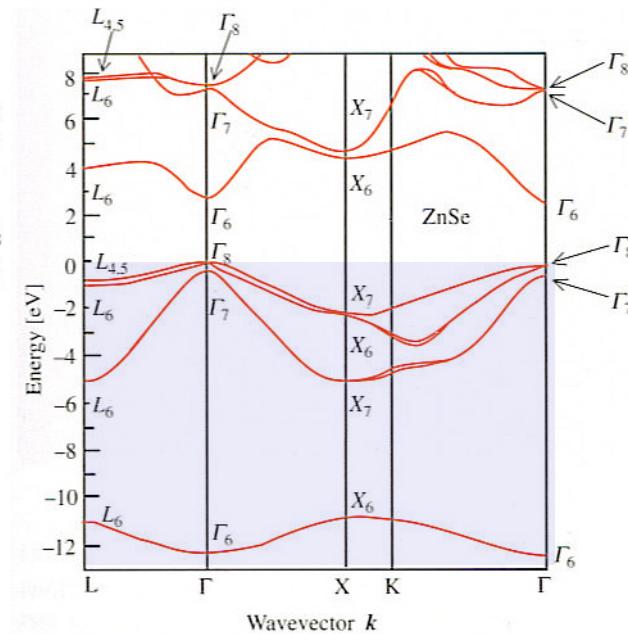
# Bandstruktur Ge:



# GaAs:



# ZnSe:



- volle Gittersymmetrie im Zentrum + Tendenz zu stärkerer Asymmetrie elektronischer Zustände am Rand der Brillouin-Zone!
  - Trend 2 wirkt sich überproportional stark auf die Bandaufspaltungen am Rand der Brillouin-Zone (L-, X-Täler...) aus
- **Trend 3:** stärker polarer Charakter → Tendenz zu direkter Bandlücke bei  $\Gamma$  für ansonsten isoelektronische Strukturen
- Beispiel: Ge (indirekt) → GaAs (direkt) → ZnSe (direkt)



# I.2.5: Elektronische Bandstrukturen – quantitative Berechnungsmethoden

## I.2.5.1: Die $k \cdot p$ -Methode

- Ausgangspunkt: Ein-Elektronen-Schrödinger-Gleichung

$$H_{1e} \Phi_n(\mathbf{r}) = \left( \frac{p^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}) \right) \Phi_n(\mathbf{r}) = E_n \Phi_n(\mathbf{r})$$

- allgemeine Form für Lösungen: Bloch-Funktion

$$\Phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

- Gleichung nur für gitterperiodischen Anteil:

$$\left( \frac{p^2}{2m_0} + \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

- Lösung vereinfacht, da  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  periodisch!

- Strategie: wir setzen uns auf bestimmten Punkt  $\mathbf{k}_0$  in der Brillouin-Zone, z. B. auf den  $\Gamma$ -Punkt  $\mathbf{k}_0 = (0,0,0)$

$$\left( \frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right) u_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{0}} u_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})$$

- hilfreich: Energie-Eigenwerte  $E_{n\mathbf{0}}$  aus Experimenten bekannt (optische Absorptionsspektren, Lumineszenz etc.)
- Lösungen  $u_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})$ : vollständige und orthogonale Basis
- Berechnung der vollständigen Bandstruktur  $E_n(\mathbf{k})$ : Entwicklung über nicht-entartete oder entartete Störungsrechnung ausgehend von  $\mathbf{k}_0$  mit Stör-Operatoren

$$\frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m_0} \quad \text{und} \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

- Beispiel: effektive Masse eines nicht-entarteten Bandes
- Annahme: Band besitzt Extremum der Energie bei  $\mathbf{k}_0$
- nicht-entartete Störungstheorie mit  $\mathbf{k}$  als kleiner Störung:

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle u_{n\mathbf{0}} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n'\mathbf{0}} \rangle}{E_{n\mathbf{0}} - E_{n'\mathbf{0}}} u_{n'\mathbf{0}}(\mathbf{r})$$

und

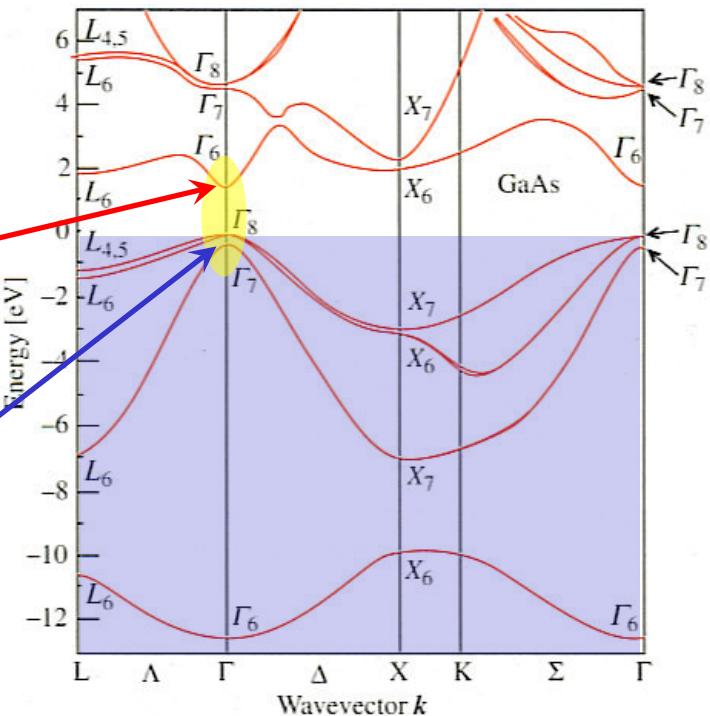
$$E_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{0}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n\mathbf{0}} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n'\mathbf{0}} \rangle|^2}{E_{n\mathbf{0}} - E_{n'\mathbf{0}}}$$

- Definition effektive Masse  $m^*$ :  $E_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{0}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$   
mit  $\frac{1}{m^*}$  proportional zur Krümmung des Bandes am Punkt  $\mathbf{k}_0$
- Matrixelemente  $\langle u_{n\mathbf{0}} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n'\mathbf{0}} \rangle$ : verknüpft mit Stärke der optischen Interband-Absorption  $\rightarrow$  experimentell messbar



- Ergebnis:  $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2 k^2} \sum_{n' \neq n} \frac{\left| \langle u_{n\mathbf{0}} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n'\mathbf{0}} \rangle \right|^2}{E_{n\mathbf{0}} - E_{n'\mathbf{0}}}$
- Beitrag des Bandes mit Index  $n'$  zur effektiven Masse des Bandes  $n$  nur, falls gilt  

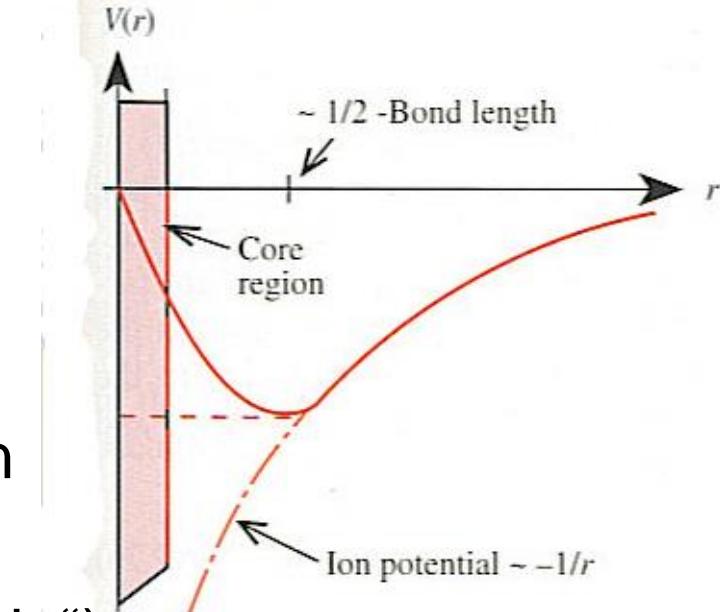
$$\langle u_{n\mathbf{0}} | \mathbf{p} | u_{n'\mathbf{0}} \rangle \neq 0$$
- Zinkblende-Halbleiter mit direkter Bandlücke: **effektive Masse  $m^*_{e\Gamma}$  im  $\Gamma$ -Tal des Leitungsbandes ( $\Gamma_6$ )**  
dominiert durch **Wechselwirkung mit den Maxima des Valenzbandes ( $\Gamma_8$  und  $\Gamma_7$  → Gruppentheorie!)**
- **Trend 4:** effektive Masse  $m^*_{e\Gamma}$  am  $\Gamma$ -Minimum ist kleiner als  $m_0$  und steigt mit Bandlücke  $E_g$
- Beispiel: InSb (0.24 eV,  $0.014 m_0$ ) → InAs (0.42 eV,  $0.024 m_0$ )  
→ InP (1.42 eV,  $0.077 m_0$ ) → GaN (3.5 eV,  $0.2 m_0$ )



- entartete Störungstheorie: Maximum der **Valenzbänder**
  - bei  $\Gamma$  analoge Struktur der Valenzbänder für alle Halbleiter mit Diamant- und Zinkblende-Gitter:
  - Band der **schweren Löcher** (engl. „heavy holes“), stark anisotrop (engl. „warped“)
  - bei  $\Gamma$  entartet mit Band der **leichten Löcher** (engl. „light holes“)
  - **Spin-Bahn abgespaltenes Valenzband** (engl. „split-off“) mit Spin-Bahn-Aufspaltung
  - **Trend 5:**  $\Delta_0$  als relativistischer Effekt skaliert mit Quadrat der Kernladungszahl  $Z^2$
  - $^{14}\text{Si}$  ( $\Delta_0 = 0.044 \text{ eV}$ )  $\rightarrow$   $^{32}\text{Ge}$  ( $\Delta_0 = 0.3 \text{ eV}$ )  $\rightarrow$   $\alpha\text{-}^{50}\text{Sn}$  ( $\Delta_0 = 0.8 \text{ eV}$ )
  - Elektronen am Maximum der Valenzbänder:  $m^* < 0$  !
  - freie Ladungsträger: fehlende (Defekt-)Elektronen = **Löcher**
  - Quasiteilchen! Verhalten im elektrischen Feld:  $m^* > 0$ ,  $q = +e$
-

## I.2.5.2: Pseudopotenzial-Methoden

- Ausgangspunkt: Modell nahezu freier Elektronen
- Pseudopotenzial: vereinfachende Annahmen über Potenzial und Wellenfunktionen im Bereich der Ionenrümpfe
- Parametrisierung  $V(\mathbf{r})$  durch sog. Formfaktoren (charakteristisch für Atom bzw. Ion)
- empirische Pseudopotenzial-Methoden: ausnützen experimenteller Information, z. B. Bandlücken-Energien
  - liefert realistische Bandstrukturen in gesamter Brillouin-Zone
- selbstkonsistente Methoden („ab initio“):
  - Genauigkeit hängt stark von Qualität der Näherungen ab
  - quantitative Ergebnisse nur nach Berücksichtigung von Vielteilchen-Effekten etc. → numerisch sehr aufwändig!

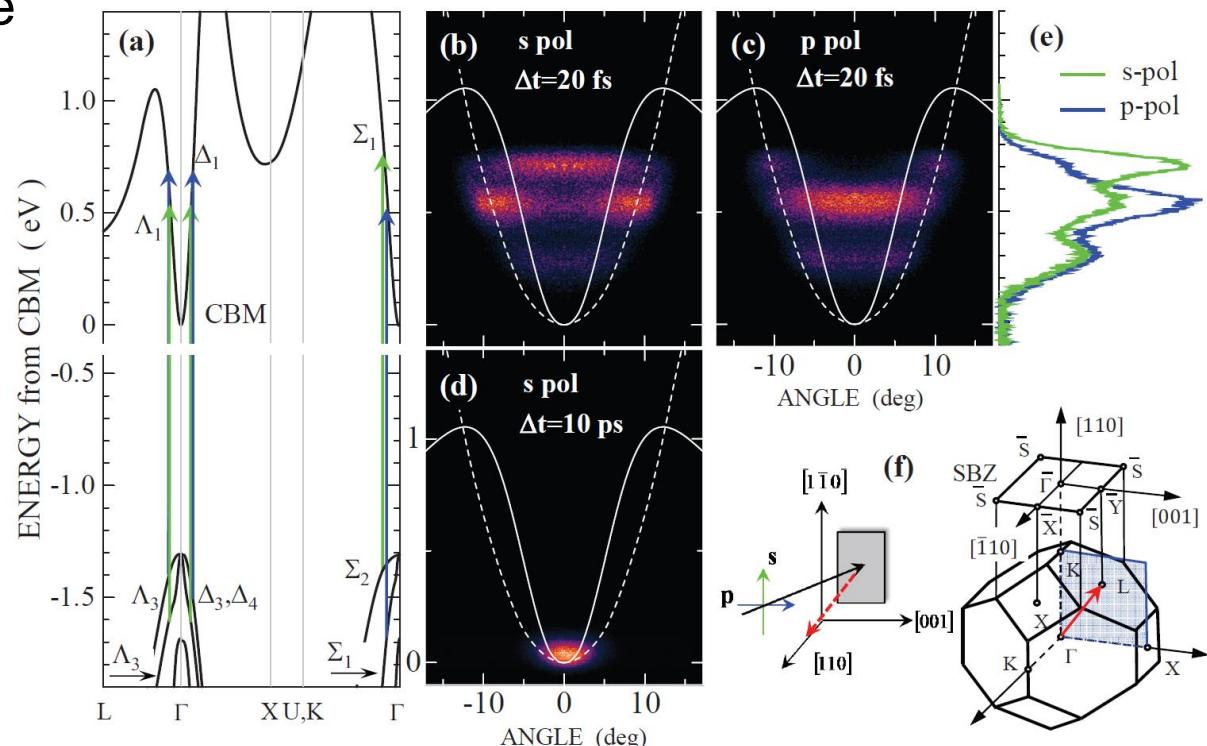


### I.2.5.3: Tight-Binding- bzw. LCAO-Näherung

- Ausgangspunkt: lineare Kombination der Elektronenorbitale der isolierten Konstituenten (Atome bzw. Ionen): engl. „Linear Combination of Atomic Orbitals“ (LCAO)
- Berechnung der Überlapp-Parameter und molekularer Orbitale für den Kristall, analog zur Quantenchemie bzw. Physik der chemischen Bindung
- Unterscheidung in Bänder mit bindendem (z. B. die obersten Valenzbänder,  $sp^3$ -Bindung, Elektronendichte zwischen Atomen lokalisiert) und anti-bindendem Charakter (z. B. niedrigstes Leitungsband, s-artig, Elektronen delokalisiert)
- falls nur Überlapp der Wellenfunktionen nächster Nachbarn berücksichtigt: lediglich gute Reproduktion der Valenzbänder
- realistische Bandstruktur in gesamter Brillouin-Zone: hoher Rechenaufwand, wenig intuitiv

# I.2.6: Bandstrukturen: Experimenteller Zugang

- Photoelektron-Emissionsspektroskopie:
  - Emission Elektronen ins Vakuum durch Bestrahlung mit UV-Photonen
  - Analyse emittierte Elektronenverteilung in Energie und Impuls
  - Bandstruktur aus Energie und Wellenvektor einfallendes Photon
  - Emission nur aus Tiefe weniger Monolagen
  - Oberflächen-sensitiv, „Bulk“-Eigenschaften?
  - erfordert extrem reine Oberfläche + Ultra-Hochvakuum
  - unbesetzte Zustände (Leitungsbänder!): optische Anregung und Abfragen mit ultrakurzen Lichtimpulsen:



# I.3: Schwingungs-Eigenschaften + Elektron-Phonon-Wechselwirkung

## I.3.1: Grundlagen

- Ausgangspunkt: Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung für perfekten Kristall (siehe I.2.1):

$$\left( \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_e} + \sum_j \frac{\mathbf{P}_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum_{j',j} \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}|} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i',i} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} \right) \Psi = E \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_j, \dots, \mathbf{R}_m)$$

- Born-Oppenheimer- („adiabatische“) Näherung (I.2.1): Bewegung (schwerer) Ionenrümpfe in effektivem Potenzial hervorgerufen durch (leichtes) Elektronensystem, das schnell („adiabatisch“) folgen kann

- Hamilton-Operator Gesamtsystem separiert in 3 Teile:

$$H = H_{ion}(\mathbf{R}_j) + H_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_{j0}) + H_{e-ion}(\mathbf{r}_i, \delta\mathbf{R}_j)$$

Ionenbewegung im  
adiabatischen Potenzial      Elektronenbewegung im  
„eingefrorenen“ Potenzial  
der Ionenrümpfe (I.2)      Elektron-  
Phonon-  
Wechselwirkung (I.3.3)

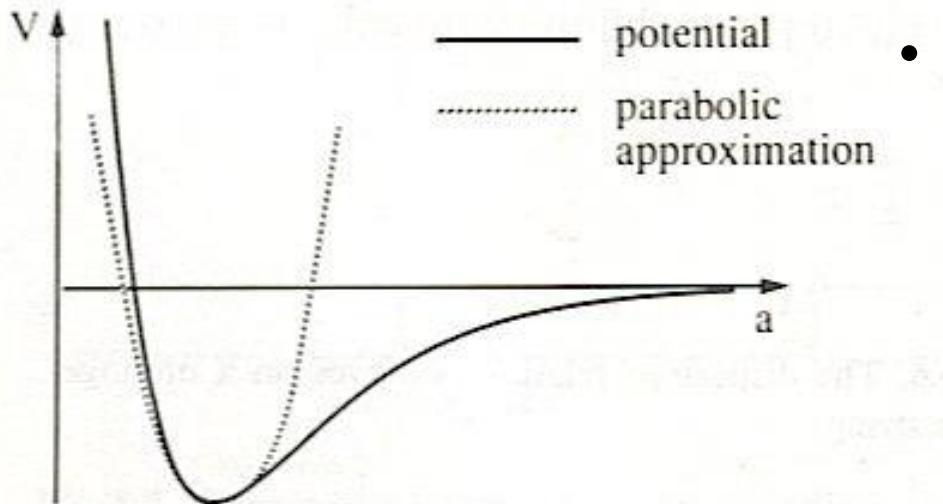
- parametrische Eigenlösungen von  $H_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)$   
 → Energie Elektronensystem als Funktion der Ionenpositionen

$$H_{ion} = \sum_j \frac{\mathbf{P}_j^2}{2M_j} + E_e(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_n)$$

- Berechnung aufwändig, aber machbar (Supercomputer!)
- hier: phänomenologischer Ansatz,  
**Entwicklung  $H_{ion}$  um Gleichgewichtslage**

$$H_{ion} = H_0(\mathbf{R}_{10}, \dots, \mathbf{R}_{n0}) + H'(\delta\mathbf{R}_{10}, \dots, \delta\mathbf{R}_{n0})$$

- Wie wird  $H'$  formal aussehen?
  - Terme 1. Ordnung können entfallen: **reine Translationsbewegung**
  - Terme 2. Ordnung: lineare Rückstellkraft, **Schwingungsbewegung**
- **harmonische Näherung:**
  - Ensemble gekoppelter harmonischer Oszillatoren
  - potenzielle Energie  $V$  als Funktion des Kern- Abstandes  $a$  in zweiatomigem Molekül:



- Festkörper: Potenzial noch näher am harmonischen Fall wegen Wechselwirkung mit nächsten Nachbarn (keine Dissoziation!)

- klassische Physik:
  - Schwingungen eines Gitters aus gekoppelten harmonischen Oszillatoren sind als voneinander unabhängige Superpositionen darstellbar, Projektion auf „Normalmoden“ (irreduzible Darstellungen, Gruppentheorie → I.2.3.1)
- Quantenmechanik:
  - Quantisierung der Energien des harmonischen Oszillators  
→ diskretes Energiespektrum mit äquidistantem Abstand  $\hbar\omega$
  - Elementaranregungen der Normalmoden: **Phononen**
- Phononen: Bosonen, gehorchen Bose-Einstein-Statistik
  - Verteilung im thermischen Gleichgewicht:

$$f_{BE} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} - 1}$$

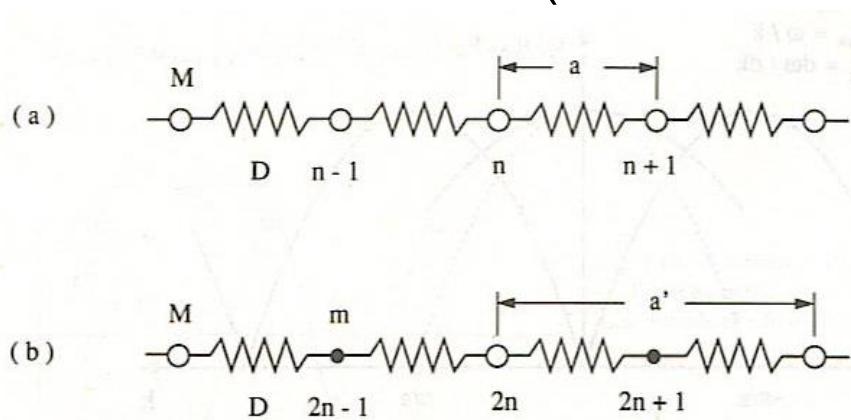
$\mu \equiv 0$  in Bose-Systemen mit nicht erhaltener Teilchenzahl!

vergleiche: Fermi-Dirac-Verteilung für Teilchen mit halbzahligem Spin:

$$f_{FD} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$$

## I.3.2: Phonon-Dispersionsrelationen

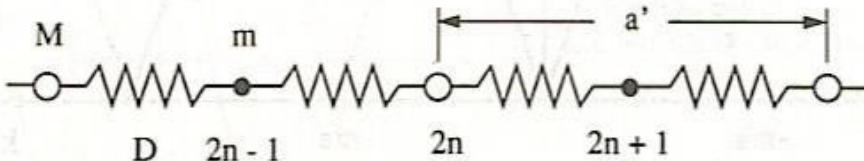
- einfaches Modell: eindimensionale lineare Kette
- harmonische Näherung: parabolisches Potential in dem die Atome im Festkörper sitzen (kleine Auslenkungen!)
- beachte: thermische Ausdehnung eines Kristalls oder Phonon-Phonon-Wechselwirkungen können im harmonischen Limit nicht beschrieben werden (Normalmoden!)



Fall 1: ein Atom pro Einheitszelle (z.B. einfache Metalle)

Fall 2: zwei Atome pro Einheitszelle  
(z.B. Diamant, Zinkblende, Wurtzit)

- Auslenkungen  $u_n$  des  $n$ -ten Atoms aus Ruhelage in linearer Kette mit Kraft-Konstante  $D$  und zwei Atomen der Massen  $M$  und  $m$  in Elementarzelle (Gitterkonstante  $a'$ ):



- Bewegungsgleichungen:
 
$$M \frac{\partial^2 u_{2n}}{\partial t^2} = D(u_{2n+1} - 2u_{2n} + u_{2n-1})$$

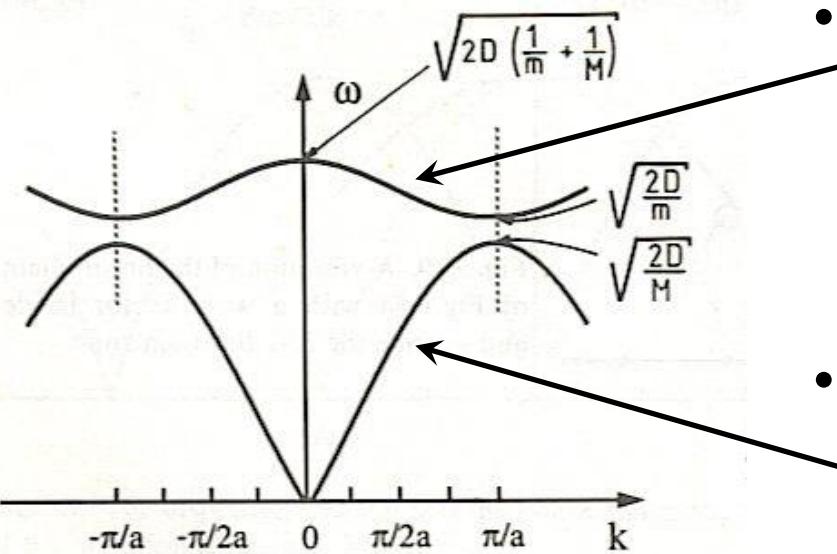
$$m \frac{\partial^2 u_{2n+1}}{\partial t^2} = D(u_{2n+2} - 2u_{2n+1} + u_{2n})$$
- Lösungsansatz:  
ebene Wellen
 
$$u_{2n} = u_{2n,0} \exp[i(2nak - \omega t)]$$

$$u_{2n+1} = u_{2n+1,0} \exp[i((2n+1)ak - \omega t)]$$
- Anfangsbedingungen:
 
$$u_{2n,0} = u_{2n+2,0} = A_M$$

$$u_{2n+1,0} = u_{2n-1,0} = A_m$$

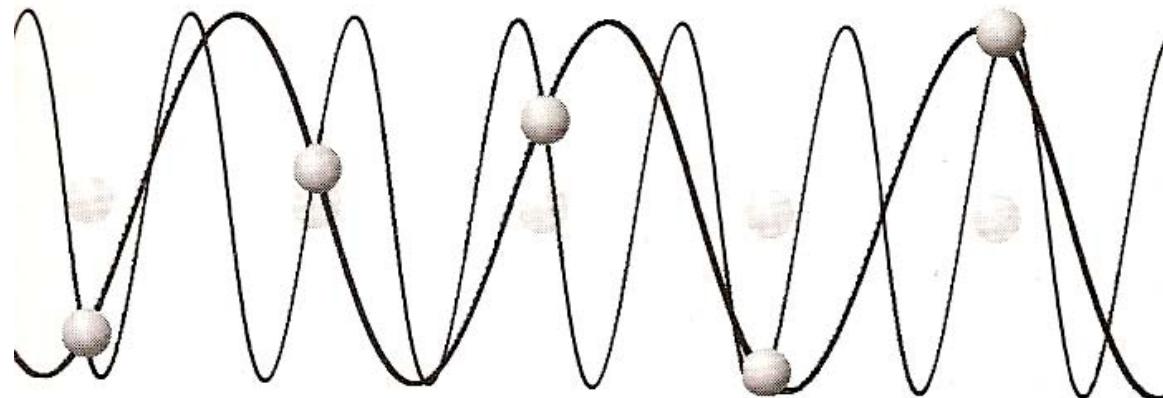
- einsetzen in Bewegungsgleichungen ergibt
 
$$(2D - \omega^2 M)A_M - 2D \cos(ka)A_m = 0$$

$$- 2D \cos(ka)A_M + (2D - \omega^2 m)A_m = 0$$
- nicht-triviale Lösung, falls Determinante der Koeffizienten verschwindet:
- **Phonon-Dispersionsrelation:** Frequenz  $\omega$  bzw. Quanten-Energie  $\hbar\omega$  der Eigenmoden als Funktion des Wellenvektors  $k$



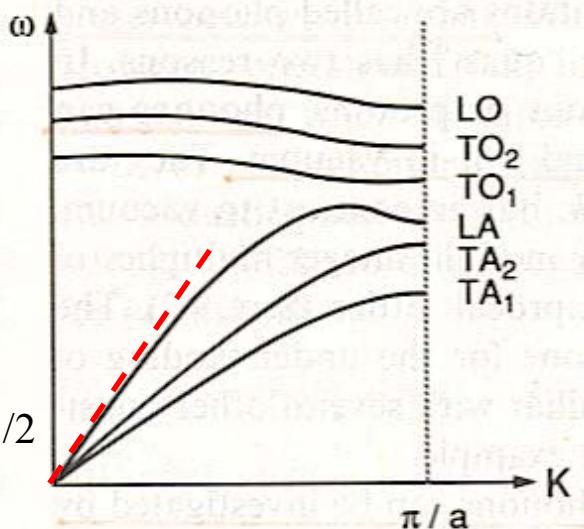
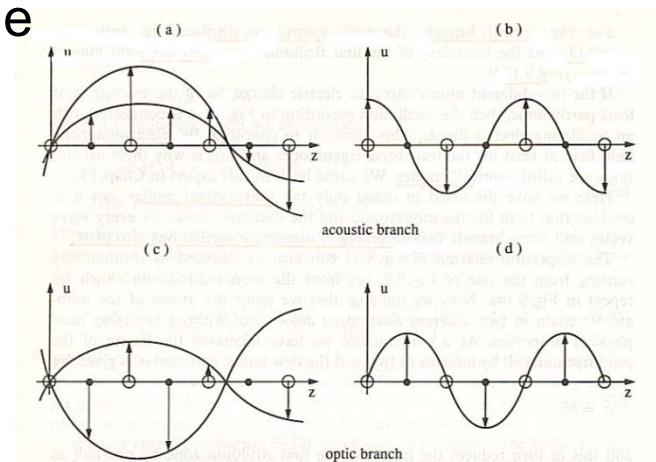
- optischer Zweig: Amplituden  $A_m$  und  $A_M$  haben entgegengesetztes Vorzeichen  
→ „optische Phononen“
- akustischer Zweig: Amplituden  $A_m$  und  $A_M$  gleches Vorzeichen  
→ „akustische Phononen“

- merke: Schwingungsmoden, die sich nur um einen reziproken Gittervektor  $\exp(iG_a)$  unterscheiden, sind identisch!



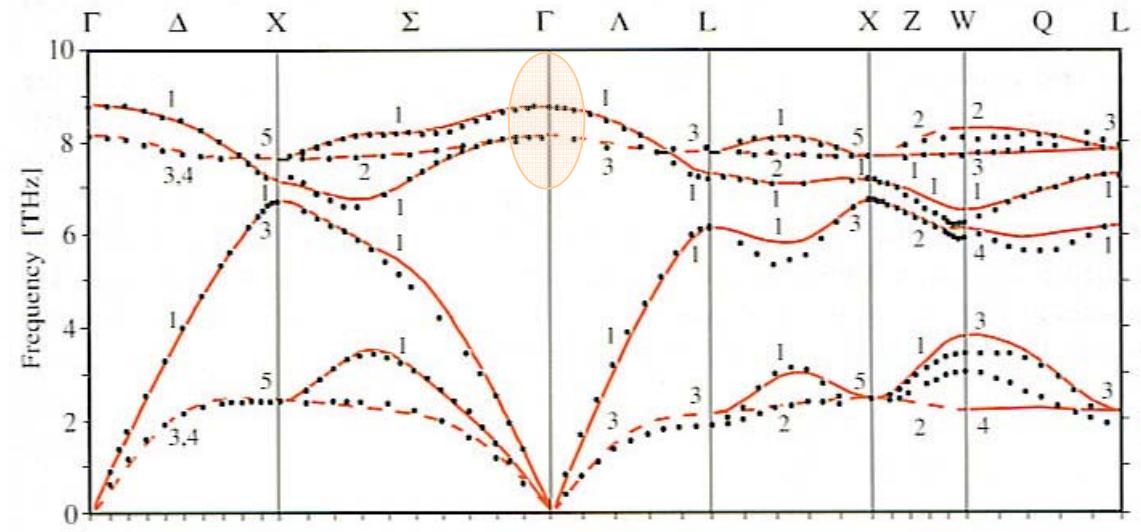
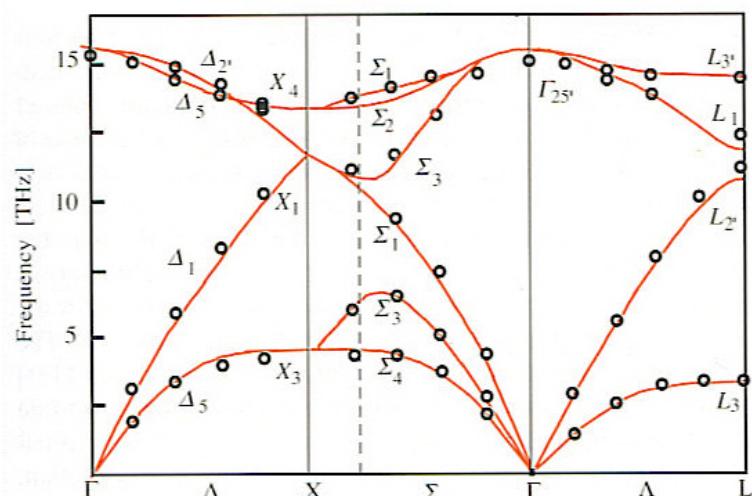
- Vergleich zur elektronischen Bandstruktur in 1. Brillouinzone:
  - Phonon-Dispersionrelation: kein Pendant zum gitterperiodischer Anteil beim Elektronensystem ( $u_n$ : nur (Punkt-)Information über Position  $n$ -tes Atom)  
=> keine "höheren Bänder" nach der Zonenfaltung, sondern exakt identische Eigenenergien bzw. -frequenzen
  - Zonenfaltung bei quantisierten Gitterschwingungen fundamental, da nur Wert am Schwerpunkt des Ionenrumpfes physikalisch relevant

- Verallgemeinerung lineare Kette auf drei Raumdimensionen:
  - zusätzlich zur **longitudinalen Auslenkung**, longitudinal-akustische bzw. LA-Phonen und longitudinal-optische (LO-)Phonen mit Auslenkung parallel  $\mathbf{k}$
- auch **transversale Auslenkung**, transversal-akustische (TA-)Phonen + transversal-optische (TO-)Phonen mit Auslenkung normal zu  $\mathbf{k}$
- allgemein für s Atome in Elementarzelle:
  - 3 akustische Zweige (ein LA, zwei TA)
  - 3s - 3 optische Zweige
- Kompressionsmodul  $\eta_L >$  Schermodul  $\eta_T$   
 $\rightarrow \omega_{LA} > \omega_{TA}$
- **Schallgeschwindigkeit**  $v_L \sim \eta_L^{1/2} > v_T \sim \eta_T^{1/2}$
- Ionenkristalle: Atome tragen elektrische Ladung  
 $\rightarrow$  optisches Phonon = mit  $\omega$  oszillierender elektrischer Dipol  
 $\rightarrow$  Kopplung an Strahlungsfeld (insbesondere TO-Phonen)

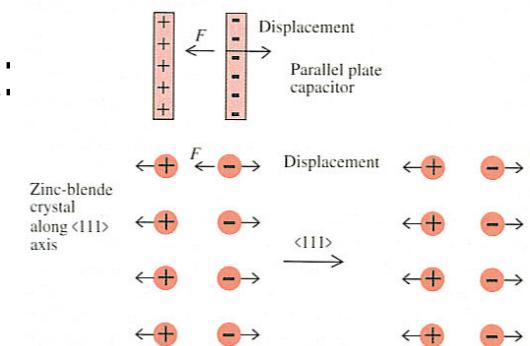


2

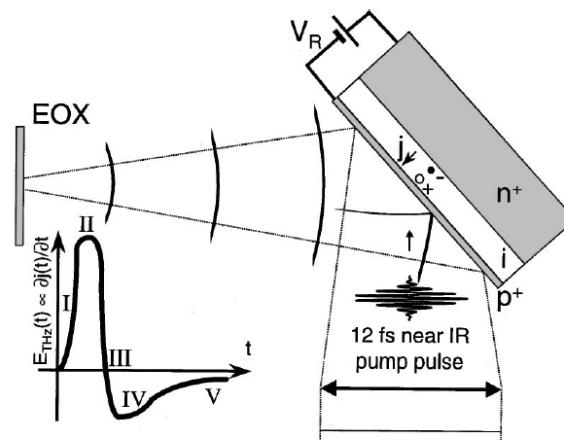
- Beispiele für Phonon-Dispersionsrelationen von Halbleitern:
- Si: Diamant-Struktur, kovalente Bindung zwei identische Atome in Elementarzelle:
- GaAs: Zinkblende-Struktur, leicht ionische Bindung, zwei verschiedene Atome in Elementarzelle:



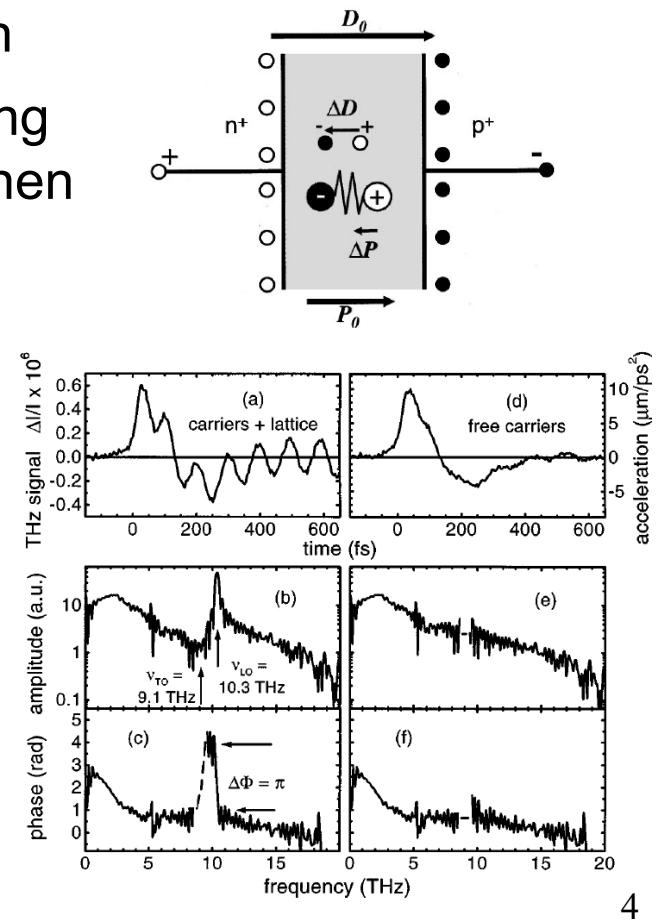
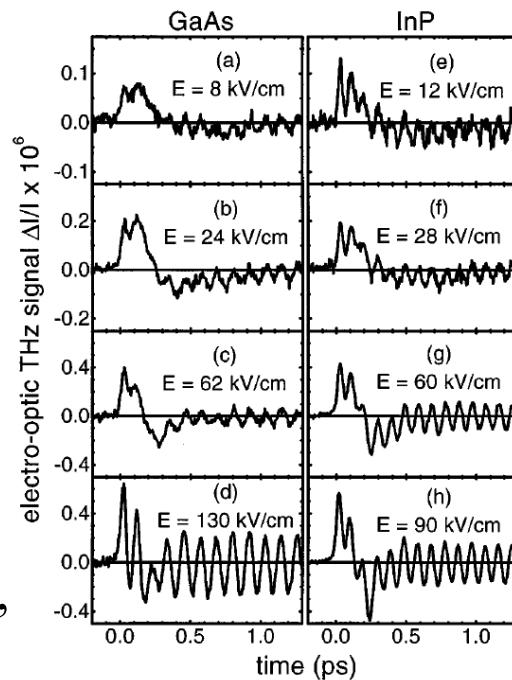
- Frequenz optische Phononen am  $\Gamma$ -Punkt:
  - Diamant-Struktur: entartet,  $\omega_{\text{LO}} = \omega_{\text{TO}}$
  - Zinkblende-Struktur:  $\omega_{\text{LO}} > \omega_{\text{TO}}$
- Aufhebung der Entartung im Ionenkristall:
  - zusätzliche elektrostatische Energie bei Kompression Gitterebenen
  - keine zusätzliche Rückstellkraft bei transversaler Verschiebung



- Phonon-Dispersionsrelationen: experimenteller Zugang
- (optische) Raman-Streuung (cw und impulsiv)
  - leicht verfügbar: Anregung mit Laser und hohe spektrale oder zeitliche Auflösung des inelastisch gestreuten Lichts
  - aber: nur Zentrum Brillouin-Zone zugänglich (Ausnahme: Nanostrukturen!)
  - Laufzeitmessungen in dünnen Schichten mit ultrakurzen Laserimpulsen: Schallgeschwindigkeit → akustische Phononen
  - Messung der Terahertz-Emission nach Anregung mit ultrakurzen Lichtimpulsen: optische Phononen



A. Leitenstorfer et al.,  
 Phys. Rev. Lett. **82**, 5140 (1999),  
 Phys. Rev. **B61**, 16647 (2000)



## • inelastische Neutronenstreuung

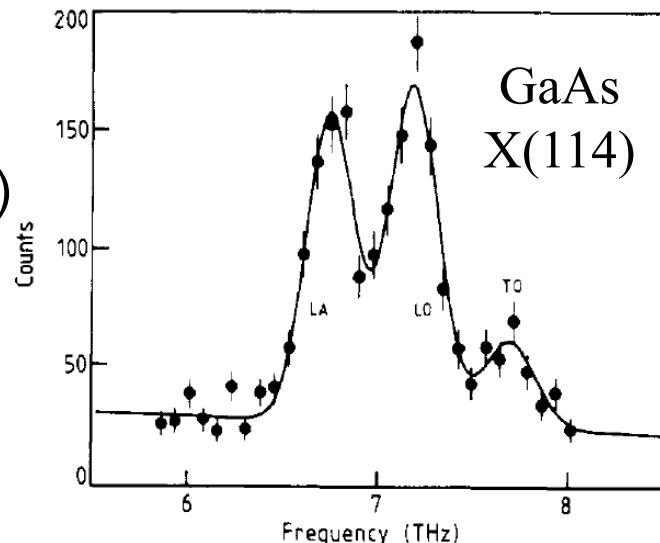
- „thermische“ Neutronen: (meV)-Energien und Impulse wie Phononen (Masse ähnlich Atom!)  
→ gesamte Brillouin-Zone zugänglich, hohe relative Energie- und Impulsänderungen
- Nachteil: nur an Großgeräten verfügbar (Forschungsreaktor, Spallationsquelle)

Anfangs-Energie kollimierter, mon energetischer Neutronenstrahl:

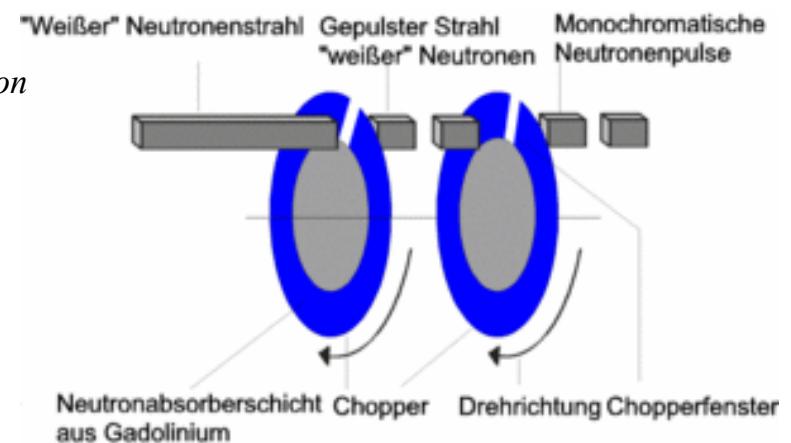
$$E_i = \frac{h^2 k_i^2}{2m_n}$$

Energie-Erhaltung:  $E_f = \frac{h^2 k_f^2}{2m_n} = E_i \pm \hbar\omega_{Phonon}$

Impuls-Erhaltung:  $k_f = k_i \pm k_{Phonon} + G$



C. Strauch and B. Dorner,  
J. Phys. C **19**, 2853 (1986)



## • inelastische Röntgenstreuung

- Wellenlänge Photon im Röntgenbereich:  
gleiche Größenordnung wie atomare Abstände im Festkörper  
→ Zugang zu Wellenvektoren von Phononen in gesamter Brillouin-Zone
- aber: Messung von meV-Änderungen von keV-Photon-Energien!  
hohe spektrale Brillanz + Energie-Auflösung → Synchrotron



### I.3.3: Elektron-Phonon-Wechselwirkungen

- bisher: **quantenmechanischer Zustand des Halbleiters** gegeben durch Kombination separierter Freiheitsgrade
  - **elektronisches System**, Besetzung von Zuständen in der Einteilchen-Bandstruktur (siehe I.2)
  - **Gitteranregungen**: Besetzungszahlen der Moden in Phonon-Dispersionsrelation (siehe I.3.2)
- jeweils **Eigenlösungen** der Teil-Hamiltonoperatoren  $H_{ion}$  und  $H_e$  aus Born-Oppenheimer-Näherung (siehe I.2.1):

$$H = H_{ion}(\mathbf{R}_j) + H_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_{j0}) + H_{e-ion}(\mathbf{r}_i, \delta\mathbf{R}_j)$$

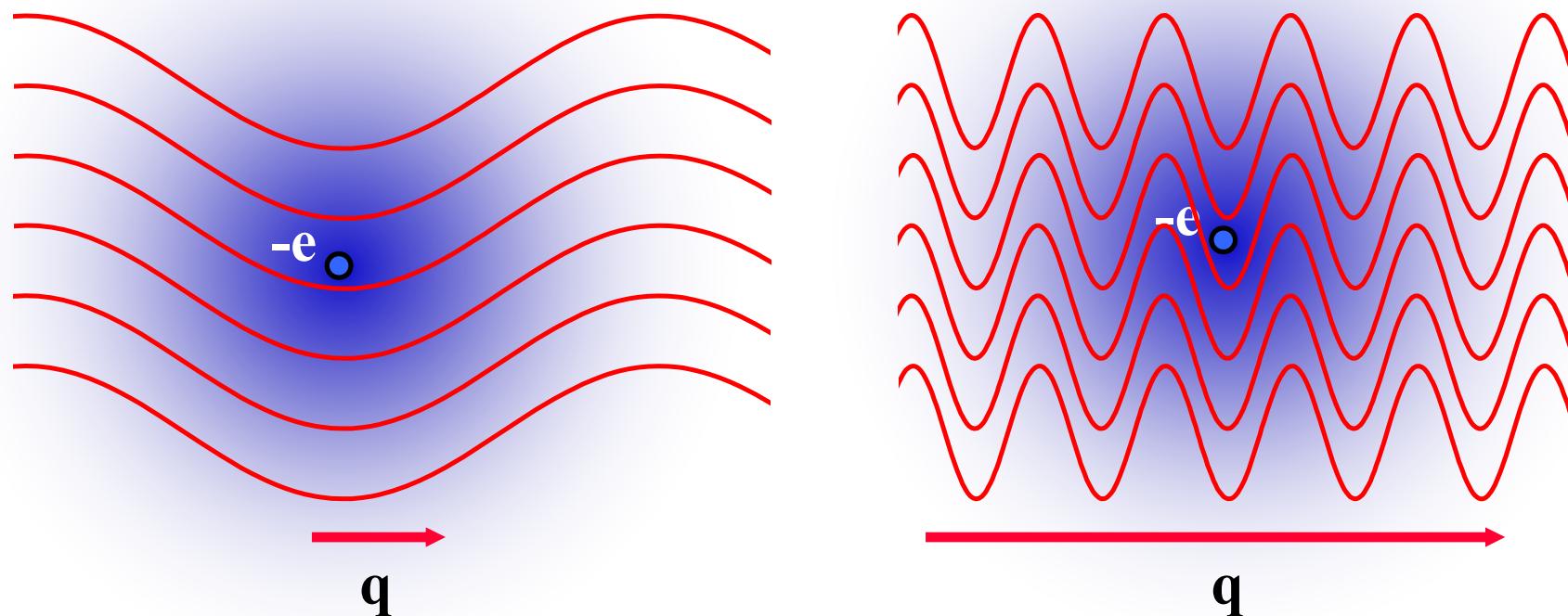
- Eigenzustände: **stationär**, keine Dynamik bzw. Relaxation!?
- aber: **elektrischer Widerstand** selbst im perfekten Kristall!
- Grund: **Elektron-Phonon-Wechselwirkungen**

- Auslenkungen  $\delta \mathbf{R}_j$  der Ionen aus ihren Ruhelagen  $\mathbf{R}_{j0}$ : sehr klein gegenüber der Gitterkonstante  $a$
- => Bandzustände der Elektronen und Phonon-Moden sind nahezu Eigenzustände des Systems
- Elektron-Phonon-Wechselwirkung als kleine Störung im Sinne der zeitabhängigen Störungstheorie:
  - suche nach physikalischen Phänomenen, über die eine Auslenkung („Verzerrung“) des Kristallgitters eine Änderung der Energie der Elektronenzustände bewirken
  - Einsetzen als Stör-Hamiltonoperator
- Resultat: Übergänge zwischen elektronischen Zuständen durch Emission bzw. Absorption von Phononen je nach
  - Stärke der Kopplung (aus Übergangs-Matrixelement)
  - Besetzung Anfangs- und Endzustände (Fermi bzw. Bose)
  - Energie- und Impuls-Erhaltung

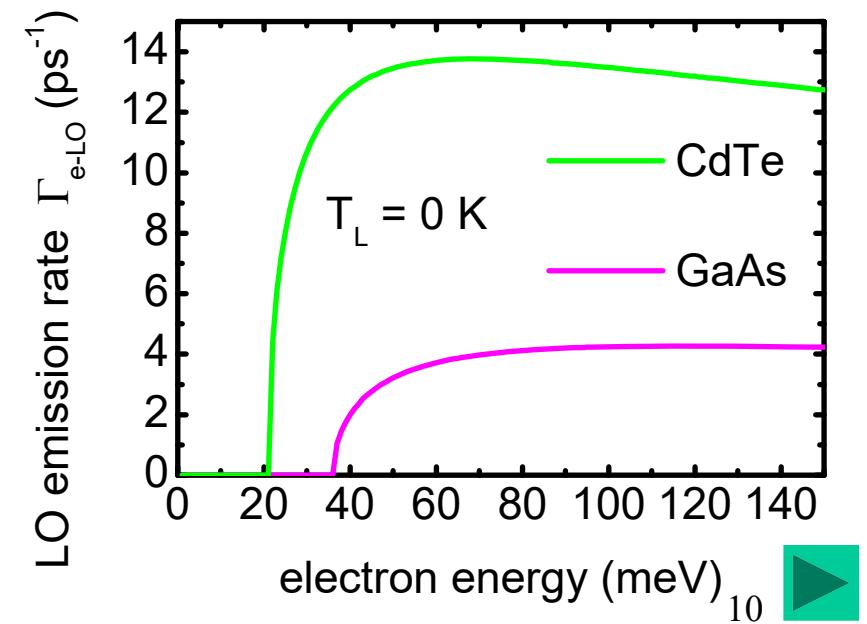
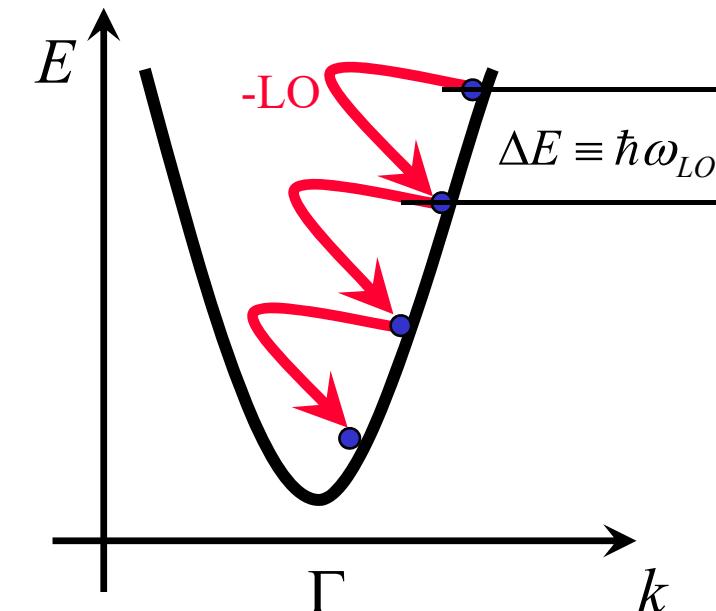
- **Typ 1:** Wechselwirkung über das **Deformations-Potenzial** (Bardeen und Shockley, 1950; Pikus und Bir, 1960)
- lokale Wechselwirkung über **Verzerrung des Gitters**: Änderung des periodischen Potenzials bewirkt **Verschiebungen in der Bandstruktur**
- Wechselwirkung mit **optischen Phononen**:  $H_{e-OP} = \mathbf{D}_{opt} \cdot \delta\mathbf{R}(\mathbf{r})$ 
  - optisches Deformations-Potenzial  $\mathbf{D}_{opt}(n, \mathbf{k})$ : Energieverschiebung Elektron im Band  $n$  mit Wellenvektor  $\mathbf{k}$  pro lokaler Auslenkung optisches Phonon  $\delta\mathbf{R}(\mathbf{r})$
  - $H_{e-OP}$  unabhängig vom Phonon-Wellenvektor  $\mathbf{q}$
- Wechselwirkung mit **akustischen Phononen**:  $H_{e-AP} = \sum_{ij} \mathcal{E}_{ij} \mathbf{S}_{ij}$ 
  - akustisches Deformations-Potenzial  $\mathcal{E}_{ij}(n, \mathbf{k})$
  - Verzerrungstensor des Kristallgitters  $\mathbf{S}_{ij}$ : Änderung der Gitterauslenkung pro Längeneinheit
  - $H_{e-AP} \propto |\mathbf{q}|$ :  $q \rightarrow 0$  entspricht nur Verschiebung des Kristalls

- **Typ 2: polar-optische Wechselwirkung**  
mit longitudinal-optischen (LO-)Phononen  
(nur in polaren Materialien; H. Fröhlich, 1937)
- elektrostatische Kopplung **dielektrische Verschiebung  $\mathbf{D}$**  des Elektrons – **Gitterpolarisation  $\mathbf{P}$**  des LO-Phonons  
Wechselwirkung nur mit longitudinal optischen Phononen:

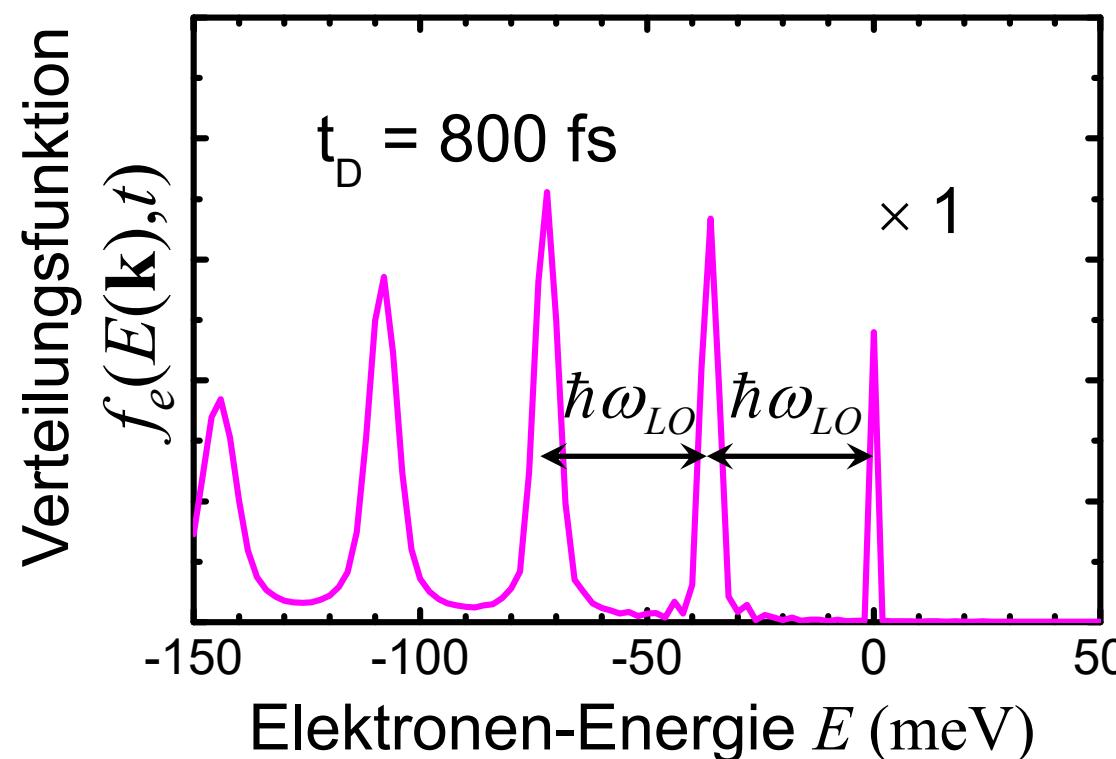
$$H_{e-LO} = -\frac{1}{\epsilon_0} \iiint_V \mathbf{D}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}) d^3r \propto \frac{1}{|\mathbf{q}|}$$



- Beispiel: LO-Phonon-Emission von Elektronen im  $\Gamma$ -Tal des Leitungsbandes eines direkten Zinkblende-Halbleiters:
- für tiefe Gittertemperatur  $T_L$  mit  $k_B T_L \ll \hbar\omega_{LO}$ :
  - Besetzungszahl  $n_q$  der Phonon-Moden  $n_q = 0$
  - spontane Emissionsrate  $\Gamma_{e-LO}$
  - Kopplung steigt mit polarem Charakter:
- endliche Temperatur  $T_L$ : mittlere Phonon-Besetzung  $\langle n_q \rangle \neq 0$ 
  - zusätzlich Phonon-Absorption und stimulierte Emission
  - Gesamtstreurate  $\Gamma_{e-LO}$  steigt

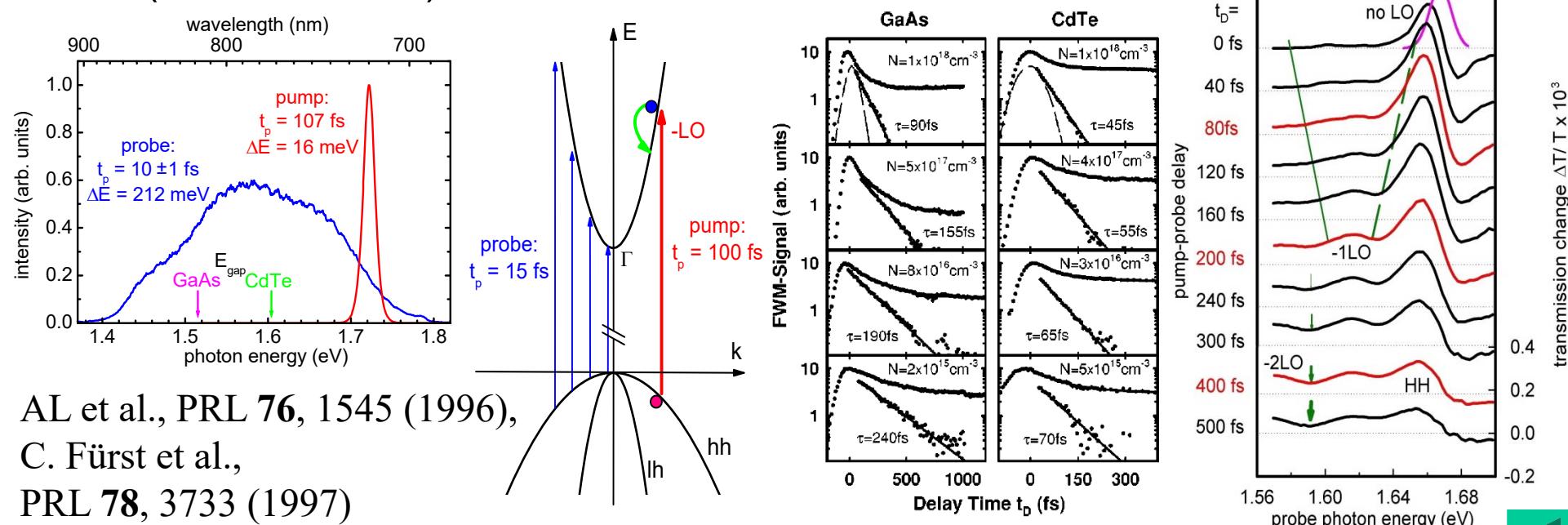


- Relaxation und Dynamik im Halbleiter: beschrieben durch
  - Verteilungsfunktionen  $f_{e,h}(\mathbf{k},t)$  für Elektronen bzw. Löcher
  - Besetzungszahlen der Phononen  $n_m(\mathbf{q},t)$
- Beispiel: Relaxation hochenergetischer Elektronen durch Emission longitudinal-optischer Phononen
- Leitungsband von GaAs:  $\Gamma_{e-LO}^{-1} \approx 250$  fs,  $\hbar\omega_{LO} = 36$  meV  
 $v_{LO}^{-1} = 115$  fs (Phononfrequenz),  $\alpha = 0.06$  (Fröhlich-Kopplungskonstante)



• analytisch lösbar in einer Dimension,  
 lineare Bandstruktur  
  
 V. Meden, C. Wöhler,  
 J. Fricke, K. Schönhammer,  
 Z. Phys. B 99, 357 (1996),  
 Phys. Rev. B 52, 5624 (1995)

- experimenteller Zugang zur Elektron-Phonon-Streuung
- indirekt über Transport-Messungen (Leitfähigkeit etc., siehe I.5)
- direkt: optische Messungen mit Femtosekunden-Zeitauflösung
  - Anregung Nichtgleichgewichts-Elektronenverteilung durch Interband-Übergang aus Valenz- ins Leitungsband, gepumpt mit 100 fs-Lichtimpuls
  - Abtasten Elektronenverteilung durch zeitlich verzögerten 10 fs-Lichtimpuls (extrem breitbandig, spektrale Selektion nach Transmission durch Probe)
  - Messung: zeitliche und spektrale Auflösung der Transmission-Zunahme („Ausbleichen“) durch Pauli-Blockade besetzter Zustände



# I.4 Elektronische Eigenschaften von (Punkt-)Defekten

## I.4.1: Einführung

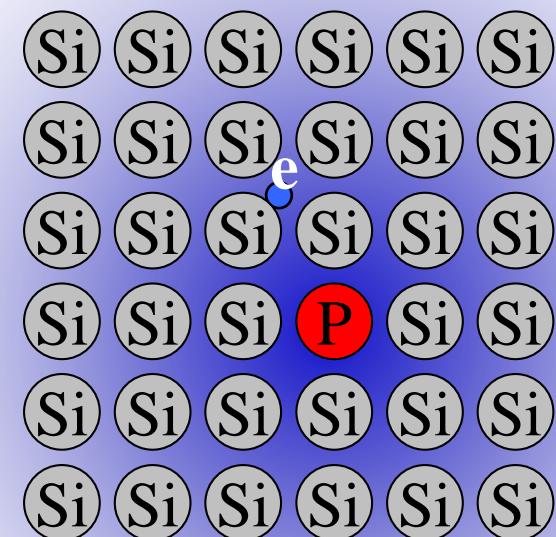
- bisher: Halbleiter als perfekter Kristall, unendlich ausgedehnt
- aber: Technologie basiert weitgehend auf gezielter **Modifikation der Material-Eigenschaften** von Halbleitern, z.B. durch Dotierung mit Fremdatomen
- jetzt: Behandlung der **Physik atomarer Punktdefekte** (nicht: Gitterversetzungen, Oberflächen...)
- wir unterscheiden im Wesentlichen **zwei große Gruppen** von Punktdefekten: flache Störstellen und tiefe Zentren

- grobe Unterscheidung der beiden Gruppen:
- **flache Störstellen** (engl. „shallow impurities“):
  - elektronische Eigenschaften können durch Näherung mit effektiver Masse beschrieben werden
  - Wasserstoff-artige Zustände für Elektronen bzw. Löcher, energetisch nahe des Leitungsband-Minimums bzw. Valenzband-Maximums
  - thermisch leicht zu ionisieren => große technische Bedeutung als **Donatoren** bzw. **Akzeptoren**
- **tiefe Störstellen** (engl. „deep centers“):
  - stark lokalisiert, nicht mit effektiver Masse beschreibbar
  - Zustände energetisch tiefer in Bandlücke
  - oft technisch störend (z.B. als Rekombinationszentren...)

# I.4.2: Flache bzw. Wasserstoff-artige Störstellen

## I.4.2.1: Einführung

- Beispiel: **substitutionelles Donator-Atom** auf Gitterplatz, der im perfekten Kristall von Atom mit einem Elektron weniger in der Valenz-Schale besetzt ist, wie
  - P in Silizium („P<sub>Si</sub>“) oder
  - Ge auf Ga-Platz in GaAs („Ge<sub>Ga</sub>“)
- intuitives Modell: zusätzliche positive Ladung des Kerns und zusätzliches Elektron behandeln wie Wasserstoff-Atom im Halbleiter-Kristall:
- analog: **substitutionelles Akzeptor-Atom** auf Gitterplatz, der im perfekten Kristall von Atom mit einem Elektron mehr in der Valenz-Schale besetzt ist, wie
  - B<sub>Si</sub> in Silizium oder Be<sub>Ga</sub> in GaAs



- generelle Überlegungen:
- Coulomb-Potenzial der zusätzlichen positiven Kernladung abgeschirmt durch Valenz-Elektronen des Wirtskristalls  
=> Wechselwirkung renormiert durch dielektrische Funktion  $\varepsilon(\omega)$  (siehe I.6.2)
- falls klassische Umlauf-Frequenz des Elektrons klein gegenüber Resonanzfrequenzen des Kristalls (insbesondere  $\omega_{LO}$ ), genügt statischer Grenzwert, Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon_s$
- effektives Störstellen-Potenzial des Donator-Ions:

$$V_S(r) = \frac{1}{4\pi \varepsilon_s \varepsilon_0} \frac{|e|}{r}$$

- zusätzlich: Elektron bewegt sich in Kristall-Potenzial, repräsentiert durch Hamilton-Operator  $H_0$
- Schrödinger-Gleichung für Donator-Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r})$ :

$$(H_0 + U) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad \text{mit} \quad U = -|e| V_S$$

## I.4.2.2: Effektive-Massen-Näherung

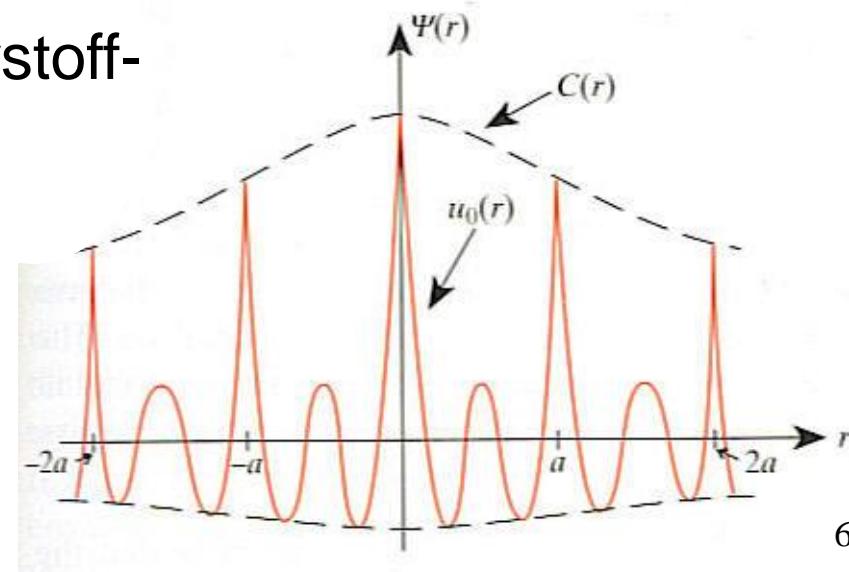
- Lösungsstrategie für Schrödinger-Gleichung des Donators (qualitative Diskussion):
  - starke Abschirmung der Coulomb-Kraft im Dielektrikum ( $\epsilon_s \approx 10$ ) => Donator-Elektron über viele Gitterplätze räumlich „delokalisiert“
  - keine Gitter-Deformation bzw. -Relaxation an Störstelle, geringe Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons => Störstelle als Punktladung unendlicher Masse
  - Fourier-Theorem: große Ausdehnung von  $\Psi(\mathbf{r})$  im Ortsraum => zusammensetzbare als Wellenpaket aus Bloch-Wellen, die im  $k$ -Raum ein geringes Segment belegen, das durch effektive Masse  $m^*$  charakterisiert ist
  - isotropes, nicht entartetes und parabolisches Band im Zentrum der Brillouin-Zone:

$$W_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}$$

- man kann zeigen, dass sich die Donator-Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r})$  näherungsweise als Produkt des gitterperiodischen Anteils  $u_0(\mathbf{r})$  der Bloch-Wellen bei  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$  und einer **Einhüllenden-Wellenfunktion  $C(\mathbf{r})$**  schreiben lässt:  $\Psi(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) C(\mathbf{r})$
- die Envelopen-Wellenfunktionen  $C(\mathbf{r})$  und die Energie-Eigenwerte  $E$  für die Zustände des Donator-Elektrons sind näherungsweise durch folgende Wellengleichung gegeben:

$$\left[ -\left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + U(\mathbf{r}) \right] C(\mathbf{r}) = [E - E_n(0)] C(\mathbf{r})$$

- formal äquivalent zum Wasserstoff-Problem, renormiert durch effektive Masse  $m^*$  und Dielektrizitäts-Konstante  $\epsilon_s$
- **schematisches Beispiel einer typischen Donator-Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r})$  im Ortsraum:**



### I.4.2.3: Wasserstoff-artige bzw. flache Donatoren

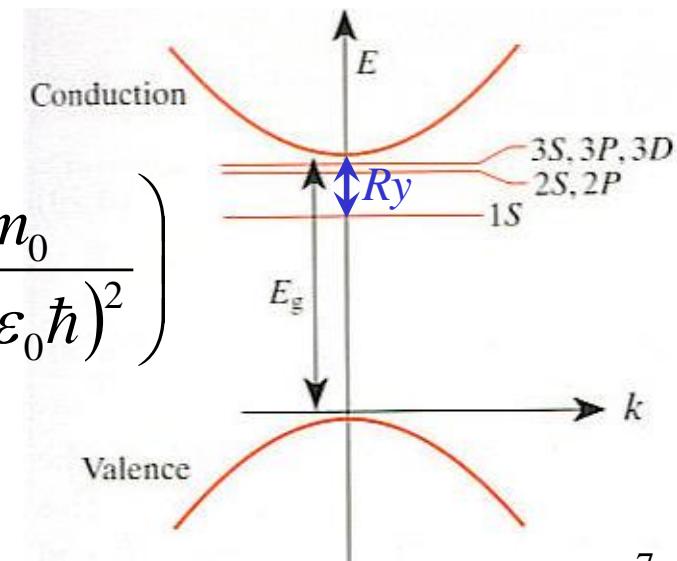
- Struktur der Lösungen des Wasserstoff-Problems aus I.4.2.2:
  - Kontinuums-Anteil ungebundener Eigenlösungen:  
delokalisierte Bloch-Zustände im Leitungsband
  - diskrete, **gebundene Zustände** (charakterisiert durch Haupt-Quantenzahl  $N$ , Drehimpuls  $L$  und Spin  $S$ ):  
**Rydberg-Serie unterhalb der Bandkante bei Energien**

$$E - E_n(0) = -\frac{Ry}{N^2} \quad \text{mit} \quad N = 1, 2, 3, \dots$$

– Rydberg-Energie  $Ry = \frac{m^*}{m_0} \frac{1}{\epsilon_s^2} \left( \frac{e^4 m_0}{2(4\pi \epsilon_0 \hbar)^2} \right)$

– Bohr-Radius  $a_B^* = \frac{\epsilon_s m_0}{m^*} \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_0}$

– GaAs:  $\epsilon_s = 12.4$ ,  $m^*_{e\Gamma} = 0.067 m_0 \Rightarrow Ry = 5.72 \text{ meV}$ ,  $a_B^* = 9.8 \text{ nm}$   
 exp.: Ge<sub>Ga</sub>: 5.84 meV, Se<sub>As</sub>: 5.79 meV; Gitterkonst.  $a = 0.57 \text{ nm}$

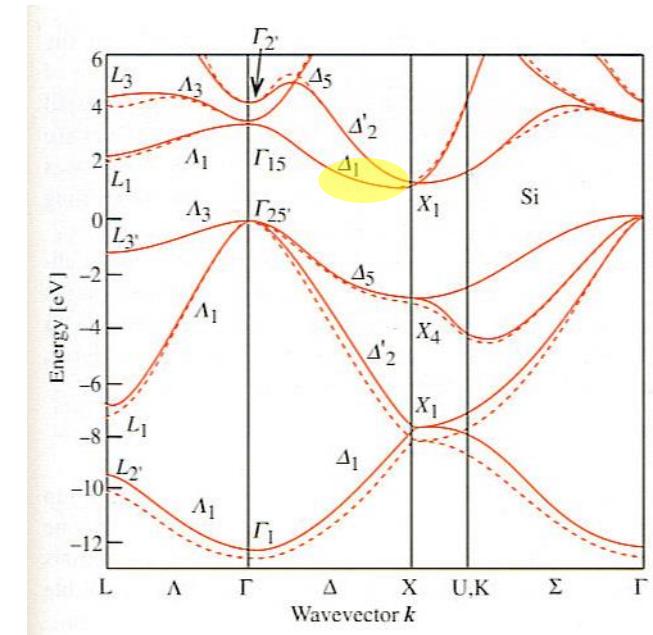


## I.4.2.4: Flache Donatoren + anisotropes Leitungsband

- Beispiel Silizium: 6 symmetrie-entartete Minima (X-Täler) in 6 zur [100]-Richtung äquivalenten Richtungen ( $\Delta$ -Linien), auf 85 % des Weges zur Grenze der Brillouin-Zone
- effektive Masse ist Tensor 2. Stufe:

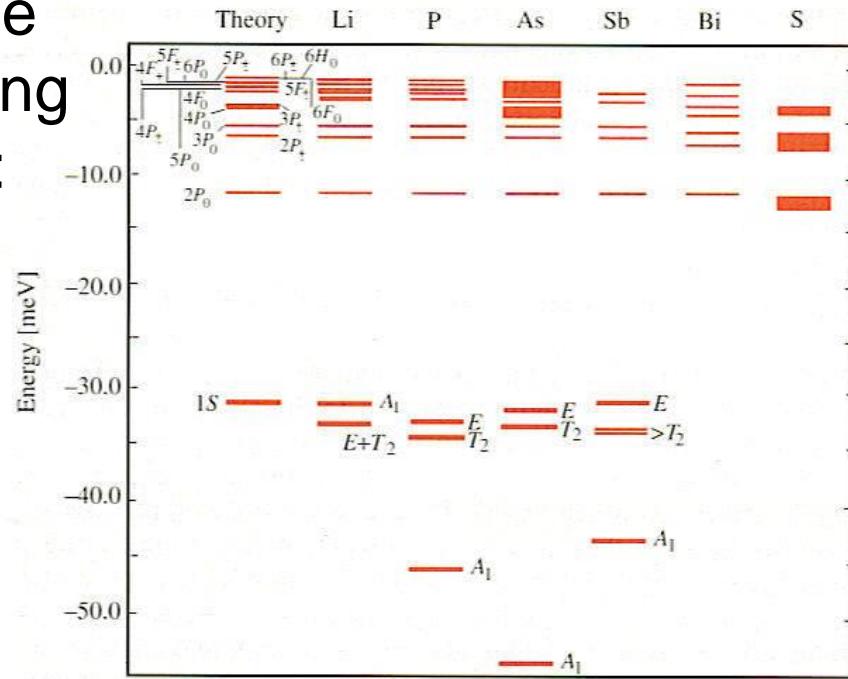
$$m_X^* = \begin{pmatrix} m_l & 0 & 0 \\ 0 & m_t & 0 \\ 0 & 0 & m_t \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad m_l = 0.916 m_0 \quad m_t = 0.190 m_0$$

- Donatorzustände: analog elliptisch deformiertes Wasserstoff-Atom!
- Symmetriebruch: Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl  $N$  und gleichem Bahndrehimpuls  $L$ , aber unterschiedlicher magnetischer Quantenzahl  $m$  sind nicht mehr entartet



- Beispiele für Donator-Zustände im Si, im Vergleich zu Rechnung mit Effektivmassen-Näherung:
- Theorie schlecht bei  $1S$ : Einfluss der Rumpfelektronen!

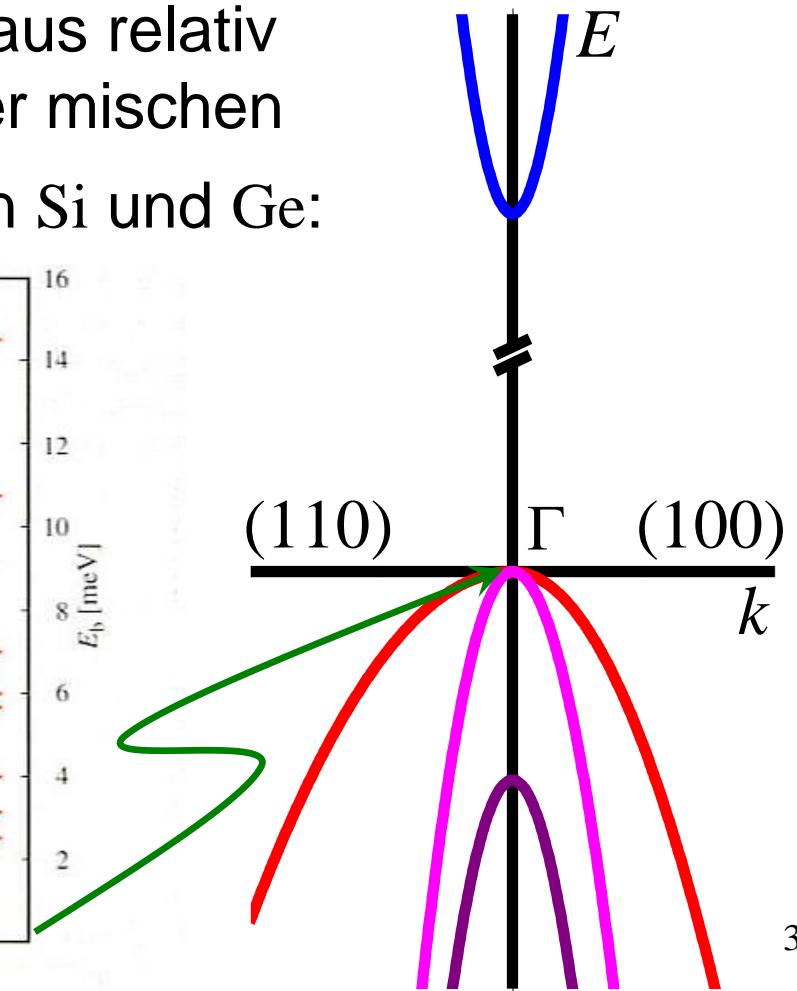
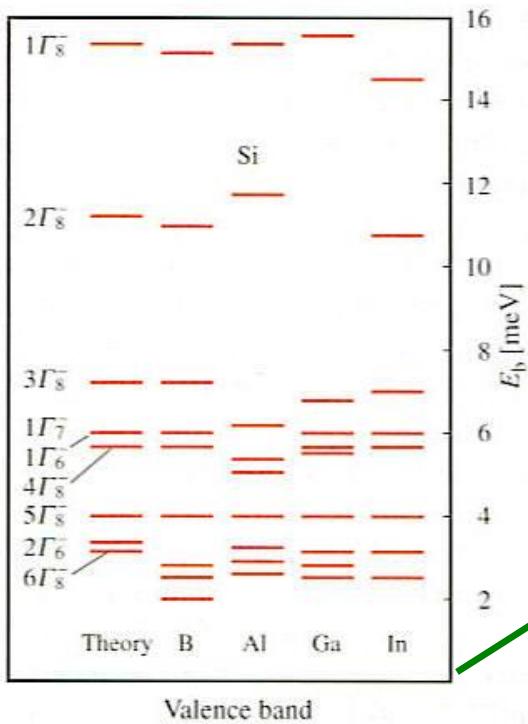
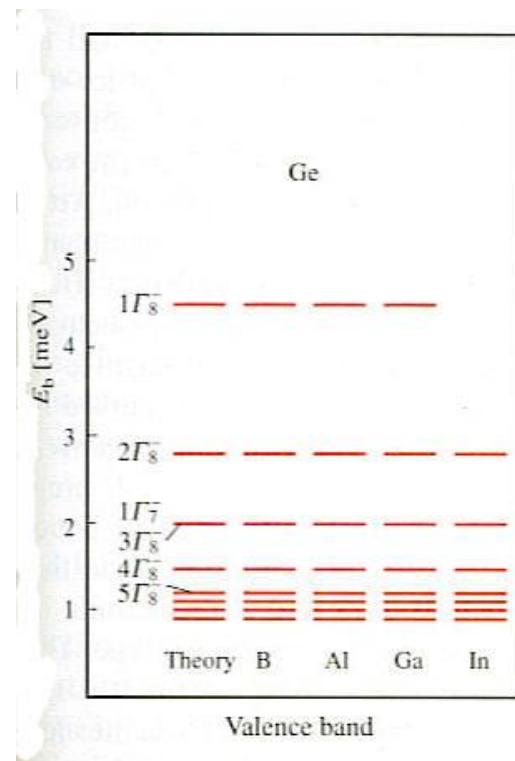
- abnehmende Abschirmung der Kernladung im Rumpf
- starke Abweichungen vom Coulomb-Potenzial



#### I.4.2.5: Flache Akzeptoren

- Donator: Atom mit einem Elektron zu viel in Valenzschale  
=> Aufbau Donator-Zustände aus Bloch-Wellen am Minimum des Leitungsbandes
- **Akzeptor:** Atom mit einem Elektron zu wenig in Valenzschale  
=> Aufbau Akzeptor-Zustände aus Bloch-Wellen am Maximum des Valenz-Bandes

- Komplikation: am Maximum des Valenzbandes sind in allen Zinkblende-Materialien mehrere Bänder miteinander entartet: Schwerloch-, Leichtloch- und Split-Off-Band
- zusätzlich sind diese Bänder teilweise stark anisotrop
- Berechnung der Akzeptor-Niveaus relativ kompliziert, Beiträge der Bänder mischen
- Beispiele für Energiespektren in Si und Ge:



# I.4.3: Thermische Ionisation von Störstellen

- Elektronen: Fermi-Teilchen mit Spin  $\frac{1}{2}$
- im thermischen Gleichgewicht ist Energieverteilung durch Fermi-Dirac-Statistik gegeben:

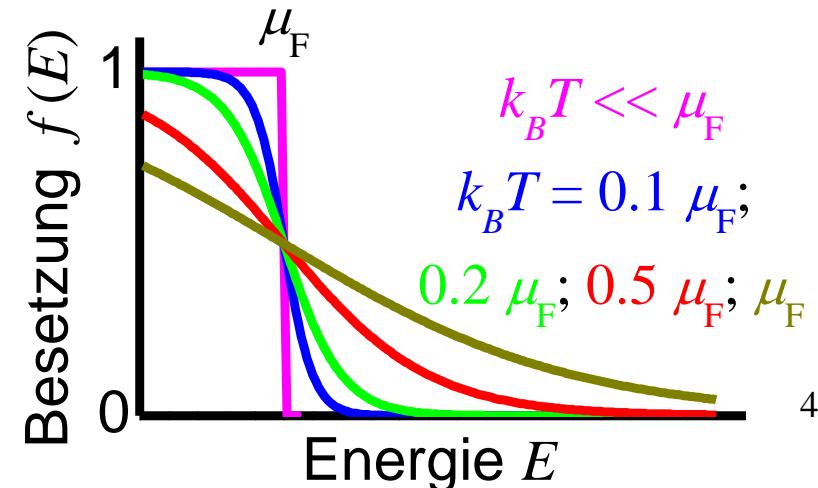
$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu_F)/k_B T] + 1}$$

- Verteilungsfunktion  $f(E)$ : Besetzungswahrscheinlichkeit für Zustand mit Energie  $E$
- Chemisches Potenzial  $\mu_F$  festgelegt durch Randbedingung: Erhaltung der Anzahl  $N$  aller Elektronen im System

$$\int D(E) f(E) dE = N$$

mit der Zustandsdichte  $D(E)$

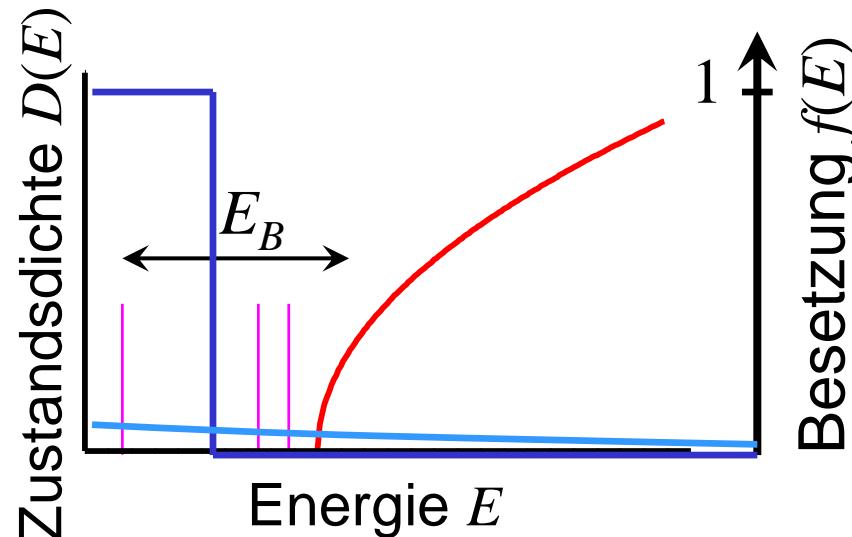
- $f(E) = 1$  für  $E \ll \mu_F$
- $f(E) = 0.5$  bei  $E = \mu_F$
- $f(E) = 0$  für  $E \gg \mu_F$



- Zustandsdichte  $D(E)$  für **parabolisches Band** mit Masse  $m^*$ :

$$D(E) = \frac{1}{\pi^2} k^2 \frac{dk}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$$

- diskretes Spektrum der gebundenen **Donator-Niveaus**
- thermische Verteilung für  $k_B T \ll E_B$ : nur Grundzustand besetzt
- thermische Verteilung für  $k_B T > E_B$ : Fermi-Schwanz dehnt sich bis in den Bereich des kontinuierlichen Spektrums der ungebundenen Bandzustände aus
- auf Grund der viel höheren Zustandsdichte im Bereich des Kontinuums nahezu ausschließlich freie Elektronen im Leitungsband => **elektrische Leitfähigkeit**



## I.4.4: Tiefe Störstellen (engl.: deep centers)

- falls elektronische Struktur des Fremdatoms ähnlich zu den Halbleiterkomponenten => meist **flache Störstelle**
- delokalisiert, Aufbau aus Bloch-Wellen an Band-Extremum => **geringe Bindungsenergien**, energetisch nahe Bandkanten
- falls **Charakter des Fremdatoms deutlich verschieden** von dem der Halbleiter-Komponenten => **tiefe Störstelle**:
  - stark lokalisierte Defektzustände, aufgebaut aus Beiträgen weiter Bereiche im  $k$ -Raum und evtl. mehrerer Bänder
  - **hohe Bindungsenergien**, Zustände tief in Bandlücke
  - oft verbunden mit Verzerrungen des Gitters bzw. Fremdatomen auf Zwischengitter-Plätzen
- **selten technisch nutzbar, oft störend**: keine thermische Aktivierung, Fallen („deep traps“) für Elektronen, nicht-strahlende Rekombination von Elektron-Loch-Paaren
- z.B. Au, Cu in Si („lifetime killer“ für Minoritäts-Ladungsträger)

# I.5 Elektronischer Transport

## I.5.1: Einführung

- bisher: gebundene Elektronen im Valenzband + gebundene Elektronen und Löcher an Störstellen
- thermische Ionisation von Störstellen, Interband-Anregungen mit Licht, etc.:  
**freie Elektronen im Leitungsband**  
**freie Löcher im Valenzband**
- jetzt: **Effekte externer elektrischer Felder** auf freie Ladungsträger
- schwache Felder: Ohmsches Gesetz
- hohe Felder: „hot electron transport“, Effekte jenseits des Ohmschen Gesetzes, ballistischer Transport auf kurzen Zeit und Längenskalen etc... – spezifisch für Halbleiter-Physik und -Technologie!

## I.5.2: Quasi-klassische Beschreibung

- äußeres elektrisches Feld  $\mathbf{F}$ : schwach, statisch, gegeben durch **elektrisches Potenzial  $\phi$**
- wir betrachten nur **freie Elektronen im Leitungsband**
- Zeitentwicklung der Ein-Elektronen-Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{r},t)$ :

$$(H_0 - e\phi)\psi(\mathbf{r},t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

- $H_0$ : Einteilchen-Hamilton-Operator für Kristall
- was interessiert im Transport? Erwartungswert des Operators für semi-klassische **Stromdichte  $\mathbf{j} = ne\mathbf{v}$**
- $n$ : Dichte der Elektronen;  $\mathbf{v}$ : Operator für Geschwindigkeit
- Effektivmassen-Näherung für **Transport in parabolischem, isotropem und nicht-entartetem Band im Zentrum der BZ**:

$$E_c(\mathbf{k}) = E_c(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

- stationäre Verhältnisse: keine mittlere Beschleunigung
  - stationäre Driftgeschwindigkeit  $\mathbf{v}_d = e\mathbf{F}\tau/m^*$
  - Stromdichte  $\mathbf{J} = ne\mathbf{v}_d$   
 $= ne^2\mathbf{F}\tau/m^*$   
 $= \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}$  mit dem Leitfähigkeits-Tensor  $\boldsymbol{\sigma}$
  - im isotropen Band:  $\sigma = ne^2\tau/m^*$
  - Ladungsträger-Beweglichkeit:  $\mu = e\tau/m^*$
- damit gilt allgemein  $\mathbf{v}_d = \mu\mathbf{F}$
- und für Halbleiter mit Ladungsträger-Plasma aus Elektronen und Löchern der Dichte  $n_e$  bzw.  $n_h$ :

$$\sigma = e(n_e\mu_e + n_h\mu_h)$$

- Netto-Effekt des periodischen Potenzials:  
nur Änderung der Masse des Elektrons von  $m_0$  nach  $m^*$
- effektive Wellengleichung für Einhüllenden-Wellenfunktion  $C(\mathbf{r},t)$  eines Wellenpakets, Argumentation analog zum Donator-Problem in I.4.2.2 (zusätzlich: Zeitabhängigkeit!):

$$\left[ E_c(0) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} - e\phi(\mathbf{r}) \right] C(\mathbf{r},t) \approx i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{r},t)$$

- Strom als gemittelte Größe aus quasi-klassischer Bewegungsgleichung für Schwerpunkt des elektronischen Wellenpaketes:

$$m^* \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} + \frac{m^*}{\tau} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = e\mathbf{F}$$

mit der mittleren **Impulsrelaxationszeit**  $\tau$   
(aus Streuung an Phononen, Störstellen etc.)

# I.5.3: Leitfähigkeit und mittlere Streuzeit im nicht-entarteten Elektronengas

- allgemein: Impuls-Relaxationszeit  $\tau$  hängt von Position im  $k$ -Raum bzw. mindestens von Elektronen-Energie  $E$  ab
- Behandlung über Elektronen-Verteilungsfunktion  $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
- Besetzungswahrscheinlichkeit für Zustand mit Wellenvektor  $\mathbf{k}$
- im thermischen Gleichgewicht ohne äußeres Feld  $\mathbf{F}$ : Fermi-Dirac-Verteilung mit Elektronen-Temperatur  $T$

$$f_{\mathbf{k}}^0(E) = \frac{1}{\exp[(E_{\mathbf{k}} - \mu_F)/k_B T] + 1}$$

- Variation der Verteilungsfunktion durch externe Störung (z.B. äußeres Feld): Boltzmann-Transportgleichung

$$\frac{df_{\mathbf{k}}}{dt} = \left( \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right)_{Feld} + \left( \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right)_{Diffusion} + \left( \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right)_{Streuung}$$

- äußeres Feld  $\mathbf{F}$  als kleine Störung: entwickle  $f_{\mathbf{k}}$  aus  $f_{\mathbf{k}}^0$

$$f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}}^0 + g_{\mathbf{k}}(\mathbf{F})$$

- Einfluss des Feldes:

$$\left( \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right)_{Feld} \approx \left( \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \right) \left( \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right) = \left( \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \right) e \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{F}$$

- Relaxationszeit-Näherung:  $\left( \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right)_{Streuung} \approx - \frac{g_{\mathbf{k}}}{\tau_{\mathbf{k}}}$

- stationär und räumlich homogen:  
 $df_{\mathbf{k}}/dt = 0$  und keine Diffusion

$$g_{\mathbf{k}} = \left( \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \right) e \tau_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{F}$$

- Stromdichte  $\mathbf{j} = \int e f_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} d\mathbf{k}$

$$= \int e g_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} = e^2 \int \tau_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \left( \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \right) (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{F}) d\mathbf{k}$$

- falls Elektronen-Temperatur  $k_B T \gg \mu_F$ : nicht-entartetes Elektronengas mit Boltzmann-Energieverteilung

$$f_{\mathbf{k}}^0 \propto \exp[-E_{\mathbf{k}}/(k_B T)]$$

- ersetze Integration im  $k$ -Raum durch Integral über Elektronen-Energien und Zustands-Dichten
- Leitfähigkeit  $\sigma$  für isotropes und parabolisches Band:

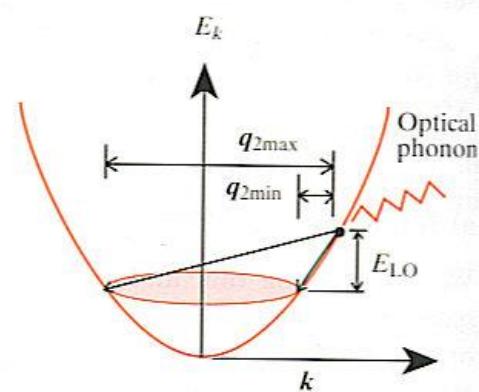
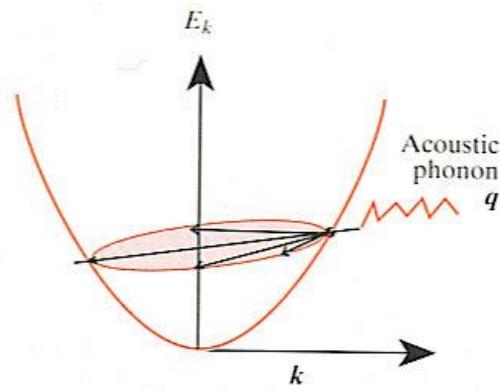
$$\sigma = \left( \frac{e^2}{3\pi^2 m^* k_B T} \right) \left( \frac{2m^*}{\hbar} \right)^{3/2} \int \tau(E) E^{3/2} \exp(-E/k_B T) dE$$

- mit Zustandsdichte  $D(E)$  aus I.4.3:  $\sigma = \frac{1}{m^*} \int D(E) e^2 \langle \tau \rangle dE$
- mittlere Streuzeit bzw. mittlere Impuls-Relaxationszeit:

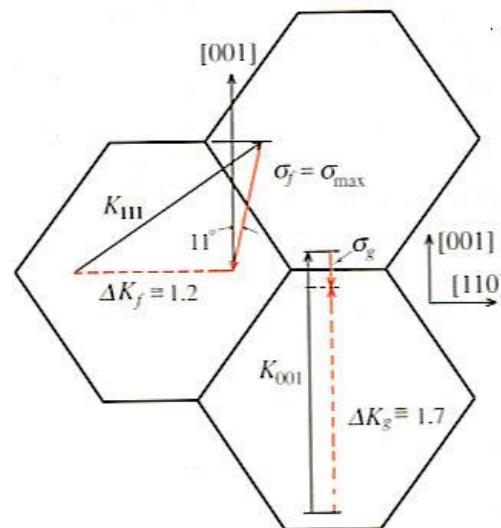
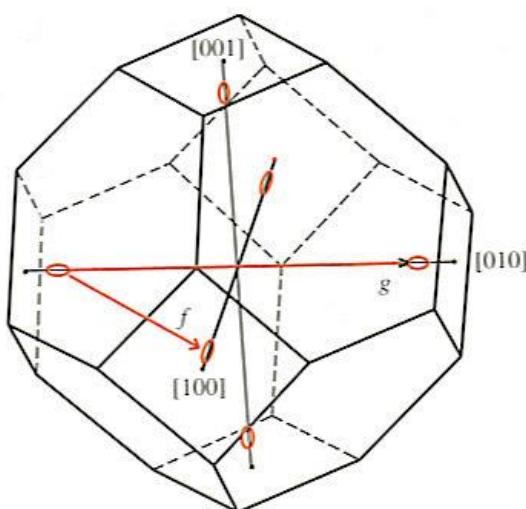
$$\langle \tau \rangle = \left( \frac{2}{3k_B T} \right) \frac{\int \tau(E) E^{3/2} \exp(-E/k_B T) dE}{\int E^{1/2} \exp(-E/k_B T) dE}$$

## I.5.4: Beispiele für Mechanismen und Beiträge zur Impuls-Relaxationszeit $\tau_k$

- Streuung an akustischen und optischen Phononen (s. I.3.3):

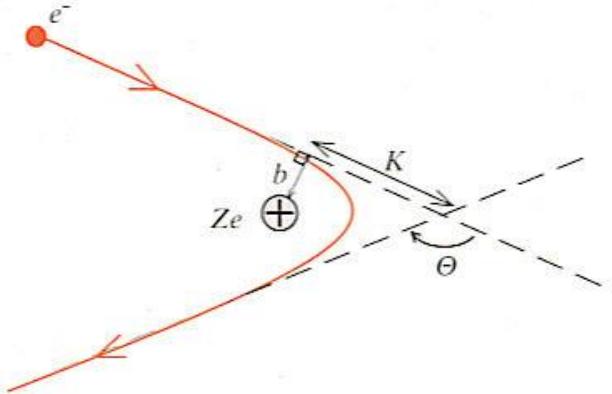


Intra-Valley-Prozesse, z.B. im  $\Gamma$ -Tal des Leitungsbandes direkter Halbleiter, innerhalb des Schwerloch-Bandes, etc.

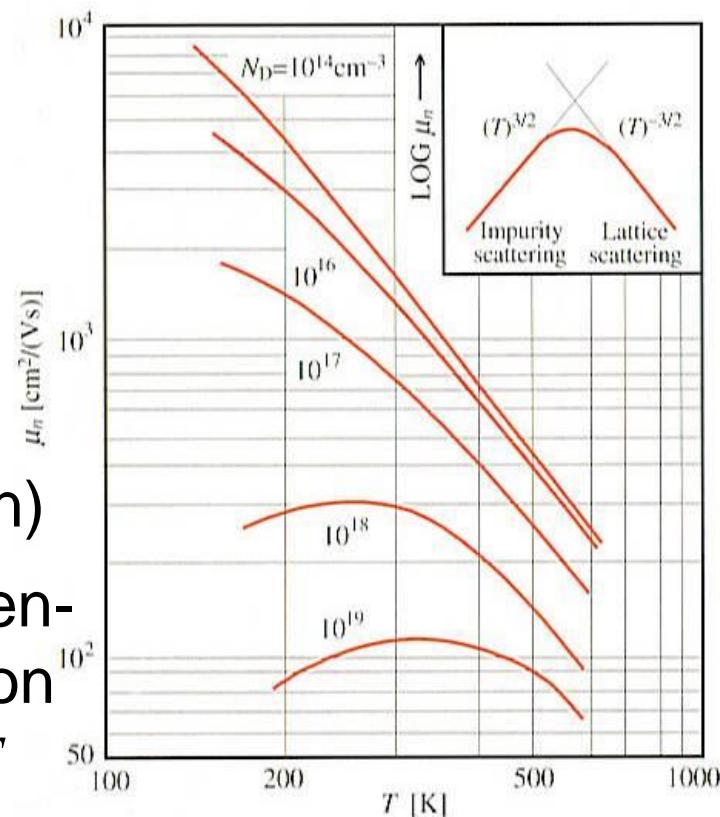


Inter-Valley- und Umklapp-Prozesse, zum Beispiel zwischen den X-Tälern im Leitungsband von Silizium

- Streuung an ionisierten Störstellen:  
Impuls-Änderung des Elektrons bzw.  
Lochs durch Coulomb-Wechselwirkung



- generelles Verhalten der Impuls-Relaxation:
- Phonon-Streureate steigt mit Gittertemperatur,  
da zusätzlich Phonon-Absorption  
und stimulierte Emission
- Streuung an ionisierten Störstellen  
nimmt mit höherer Dotierdichte und  
abnehmender Elektronen-Tempe-  
ratur zu (stärke Ablenkung nieder-  
energetischer bzw. kalter Elektronen)
- Beispiel: Abhängigkeit der Elektronen-  
Beweglichkeit  $\mu_n$  in *n*-Typ Silizium von  
Donatordichte  $N_D$  und Temperatur  $T$



## I.5.5: Hochfeld-Transport und hochenergetische Ladungsträger

- wir lassen die Forderung nach einem schwachen äußeren elektrisches Feld  $\mathbf{F}$  fallen und führen elektrischen Transport einmal ganz anders ein...:
- allgemein gilt  $\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$
- **räumlich und zeitlich konstantes Feld  $\mathbf{E}$ :**  
diesmal repräsentiert durch **Vektorpotenzial  $\mathbf{A} = -c\mathbf{E}t$**
- allgemein: **Schrödinger-Gleichung eines Systems mit externem Vektorpotenzial  $\mathbf{A}$ ,** indem man im Hamilton-Operator des feldfreien Systems den Impuls  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  durch den **kinematischen Impuls  $\mathbf{p} - (q/c)\mathbf{A}$**  ersetzt
- **Erhaltungsgröße im translations-invarianten System mit zusätzlichem externem Vektorpotential  $\mathbf{A}$ :**  
**kanonischer Impuls  $\mathbf{p} + (q/c)\mathbf{A}$  !**

- im **starren** und **streng periodischen Kristallgitter** gilt:  
Wellenvektor  $\mathbf{k}$  ist gute Quantenzahl für Elektron
- $\mathbf{k}$  ist definiert innerhalb der 1. Brillouin-Zone,  
also modulo reziprokerem Gittervektor  $\mathbf{G}$
- perfekt periodisches Einteilchen-Potenzial mit zusätzlichem  
äußerem Vektor-Potenzial  $\mathbf{A}$ :

$$\hbar\mathbf{k} + (q/c)\mathbf{A} = \text{const.}$$

- damit gilt für die **Bewegung des Kristall-Elektrons**  
(Ladung  $-e$ ) im konstanten äußeren Feld  $\mathbf{E}$ :

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} = -\frac{-e}{\hbar c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \frac{-e\mathbf{E}}{\hbar}$$

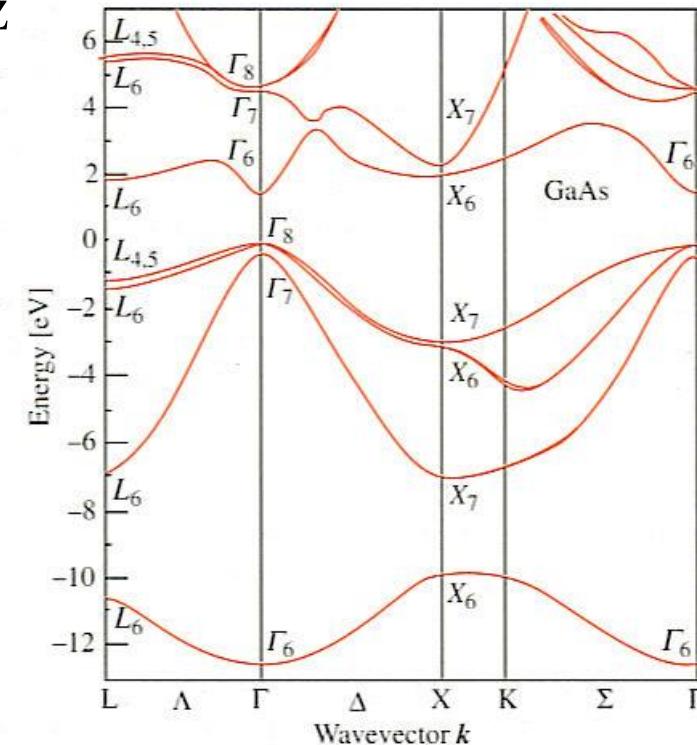
- im  $\mathbf{k}$ -Raum bzw. in der Bandstruktur: 1. Brillouin-Zone wird  
innerhalb Zeitspanne  $\Delta t_{\text{Bloch}}$  einmal  
durchlaufen, dann Bragg-reflektiert!

$$\Delta t_{\text{Bloch}} = \frac{\hbar |\mathbf{G}|}{e |\mathbf{E}|} = \frac{2\pi \hbar}{e Ea}$$

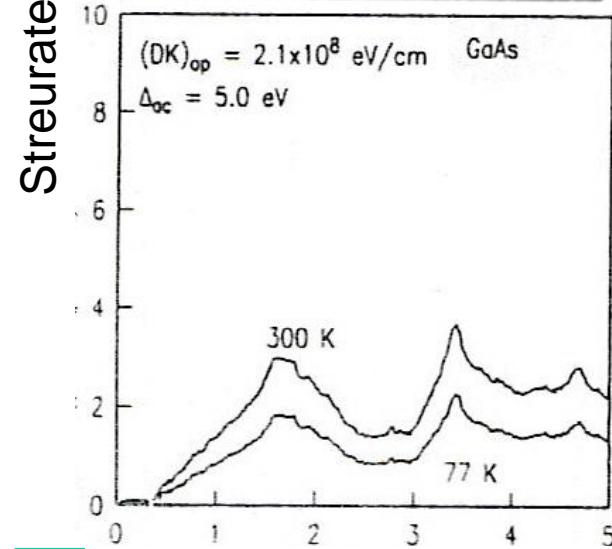
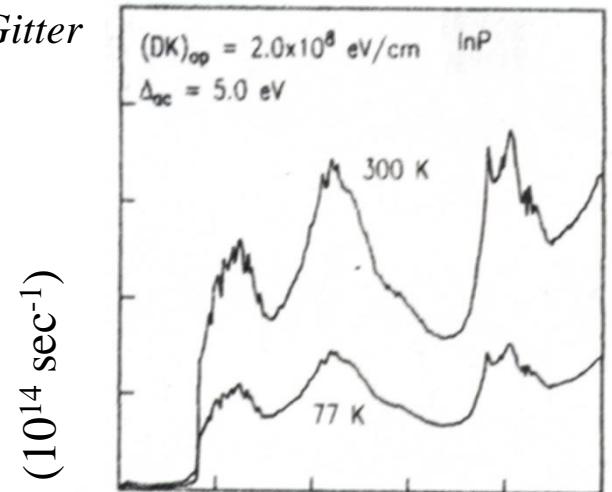
- fundamentales Ergebnis: äußeres Feld  $\mathbf{E}$  führt im perfekt periodischen und starren Kristall-Potenzial zu oszillatorischer Bewegung des Elektrons im  $\mathbf{k}$ -Raum und damit auch im Ortsraum mit zeitlicher Frequenz

$$\nu_{\text{Bloch}} = \frac{eEa}{2\pi\hbar}$$

- „Bloch-Oszillationen“;  $a$ : Netzebenen-Abstand
- (extremes) Beispiel: GaAs ( $a \approx 0.565$  nm) bei  $E = 10$  MV/cm  
 $\Rightarrow \nu_{\text{Bloch}} = 1.36 \times 10^{14} \text{ sec}^{-1} \approx 136 \text{ THz}$   
 $\Rightarrow \Delta t_{\text{Bloch}} = 7.4 \times 10^{-15} \text{ sec} \approx 7.4 \text{ fs}$
- scheinbar paradoyer Befund:  
perfektes Kristallgitter sollte keine stationäre Leitfähigkeit zeigen!
- Elektronen im externen Feld führen lediglich Bloch-Oszillationen aus!
- Was fehlt? Streuprozesse!



- Ladungsträger können in hohen elektrischen Feldern hohe Überschuss-Energien über den Band-Extrema erreichen:
- heiße Ladungsträger, falls  $f_{\mathbf{k}}(E)$  noch durch Ladungsträger-Temperatur  $T_e$  beschreibbar mit  $T_e > T_{Gitter}$
- nicht-thermische, hochenergetische Ladungsträger, falls  $f_{\mathbf{k}}(E)$  stark von Fermi-Dirac-Verteilung abweicht
- extrem starke Elektron-Phonon-Streuung für hochenergetische Ladungsträger wegen hoher Zustandsdichten weit im Band
- Beispiel: Elektron-Phonon-Streuraten im Leitungsband von GaAs und InP
- vergleiche Streuraten mit Bloch-Frequenz aus Extrem-Beispiel!



- stationärer Hochfeld-Transport:  
Abweichungen vom Ohmschen Gesetz

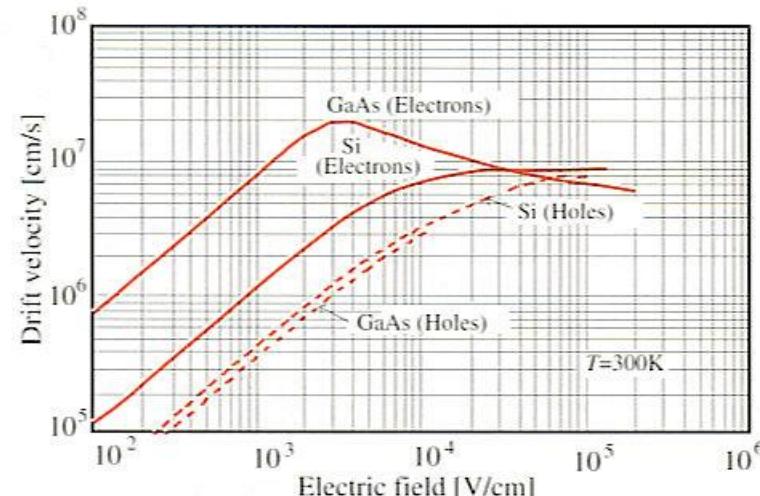
$$\mathbf{v}_d = e\mathbf{F}\tau / m^*$$

- Sättigung der Driftgeschwindigkeit für hohe Felder:  
Beweglichkeit nimmt ab wegen hoher Streuraten für hochenergetische Ladungsträger

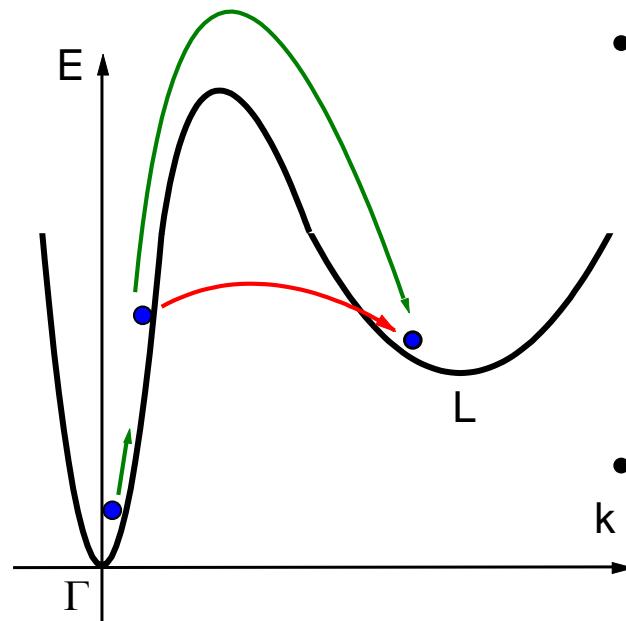
- Löcher in allen Standard-HL,  
Elektronen in Si und Ge

- negativer differentieller Widerstand, falls Einsetzen hoher Streuraten und Erhöhung der effektiven Masse an scharfer Energieschwelle

- Elektronen im Leitungsband direkter Halbleiter (GaAs...)
- hohe Beweglichkeit im  $\Gamma$ -Tal (kleine effektive Masse, geringe Impuls-Relaxation), geringe Beweglichkeit in den L- und X-Tälern
- Grundlage für Gunn-Effekt, siehe II.3

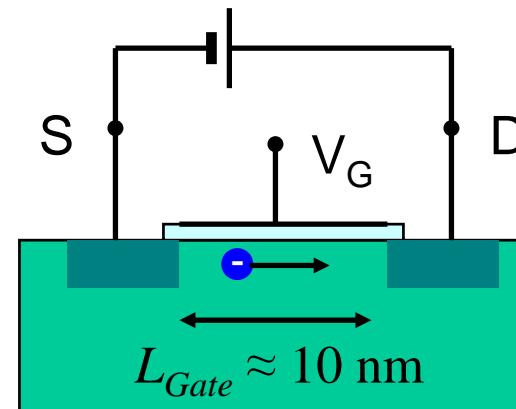


- zeitlich transientes Regime oder räumlich stark inhomogene Strukturen: **ballistischer Transport** und **Geschwindigkeits-Überschuss** (engl.: „velocity overshoot“)



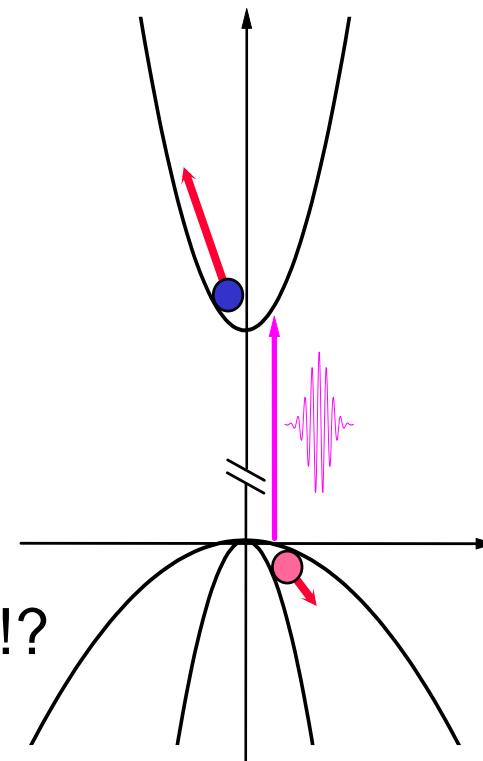
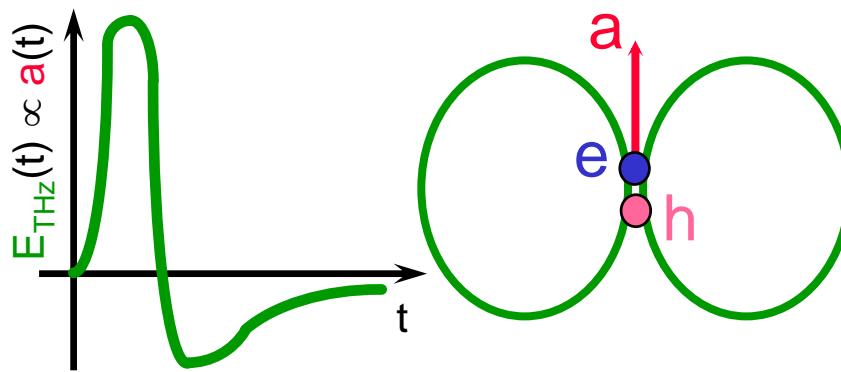
- Fragestellung: Wie bewegen sich Elektronen über **extrem kurze Längenskalen** und bei **hohen elektrischen Feldern** in modernen Halbleiter-Bauelementen?
- ballistische Beschleunigung ohne Streuung, entlang Bandstruktur?

- Schema Nanometer-Feldeffekttransistor:
- Messungen mit einer Zeitauflösung von  $10^{-14}$  sec  
= 10 fs erforderlich!



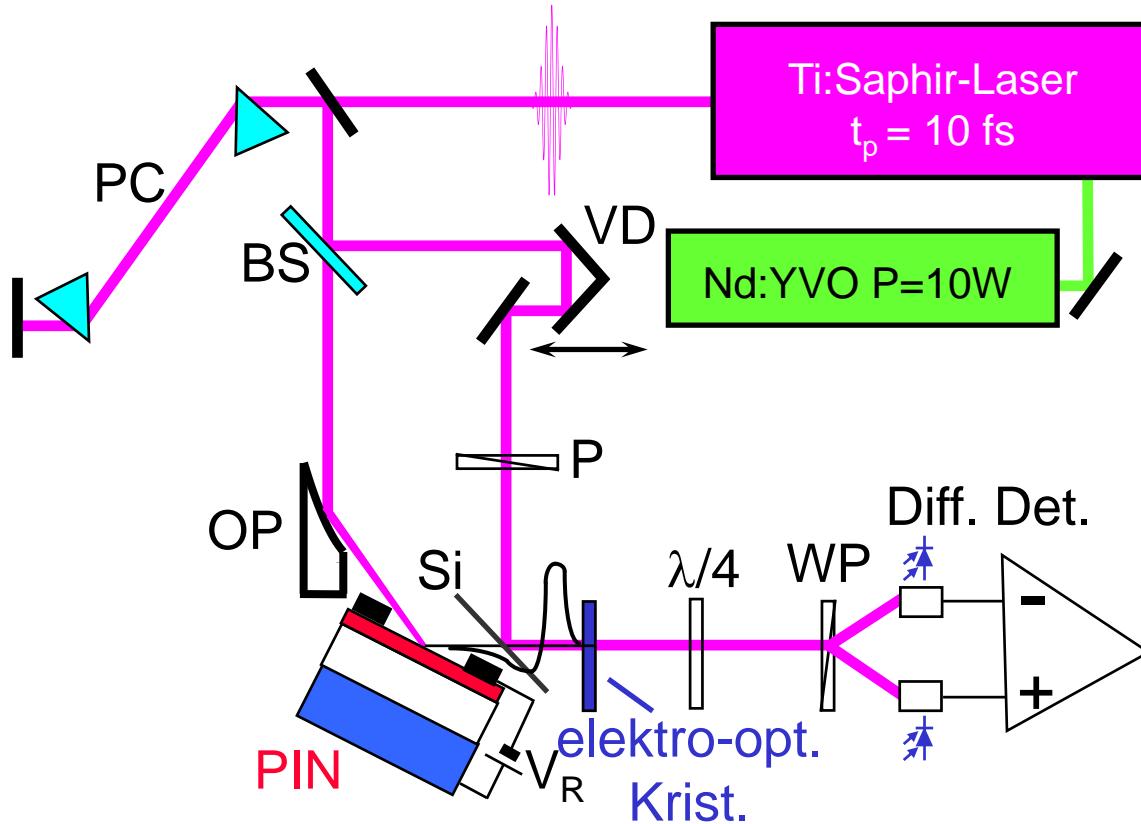
# Grundlegende Idee:

- Generiere freie **Ladungsträger e** in Hochfeld-Bauelement durch Interband-Übergang mit **ultrakurzem Lichtimpuls**
- **Feldamplitude  $E_{\text{THz}}$**  der ausgesandten Bremsstrahlung ist proportional zur momentanen **Beschleunigung a**



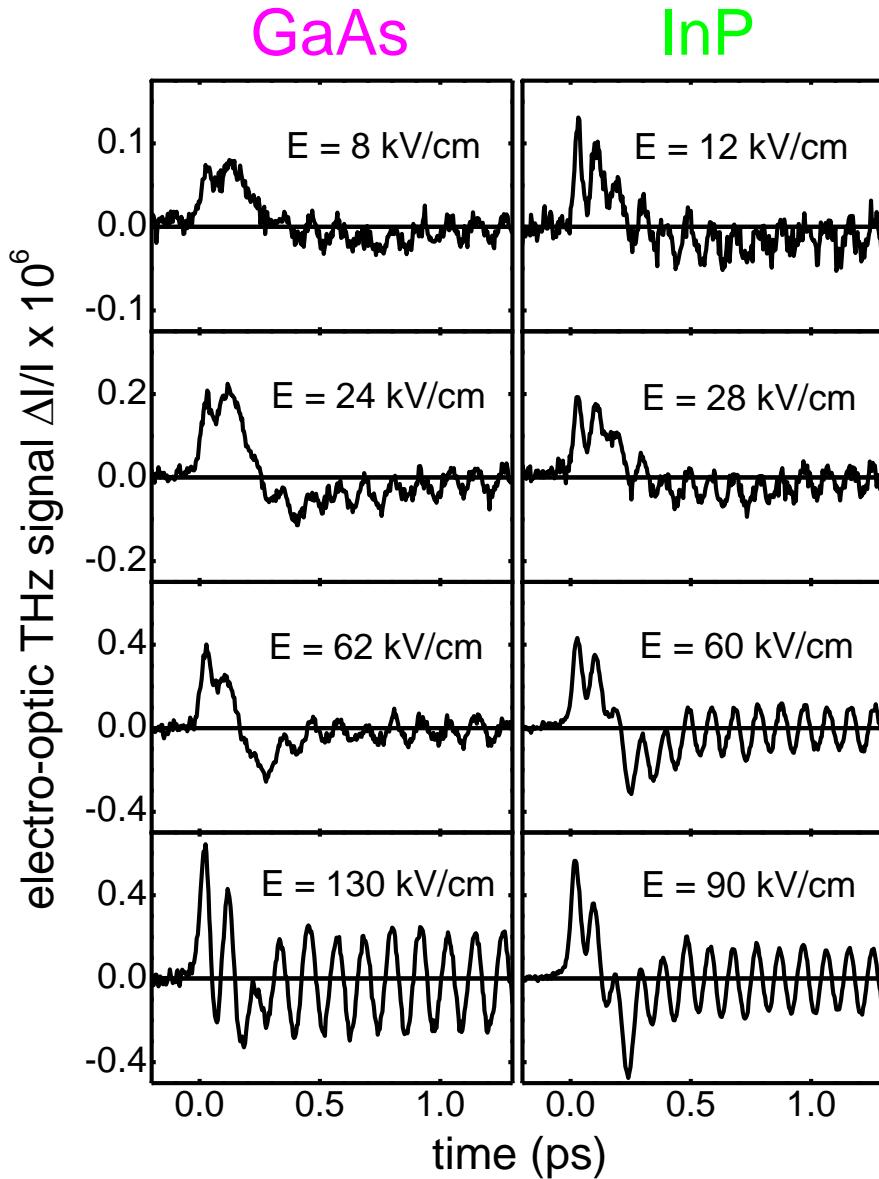
- Messe  $E_{\text{THz}}$  mit 10 fs Auflösung!?

# Ultrabreitbandiges THz-Experiment



pin-Dioden: GaAs, InP,  $i = 100 - 500 \text{ nm}$

elektro-optische Kristalle: ZnTe, GaP  $<110>$ ,  $d \approx 10 \mu\text{m}$

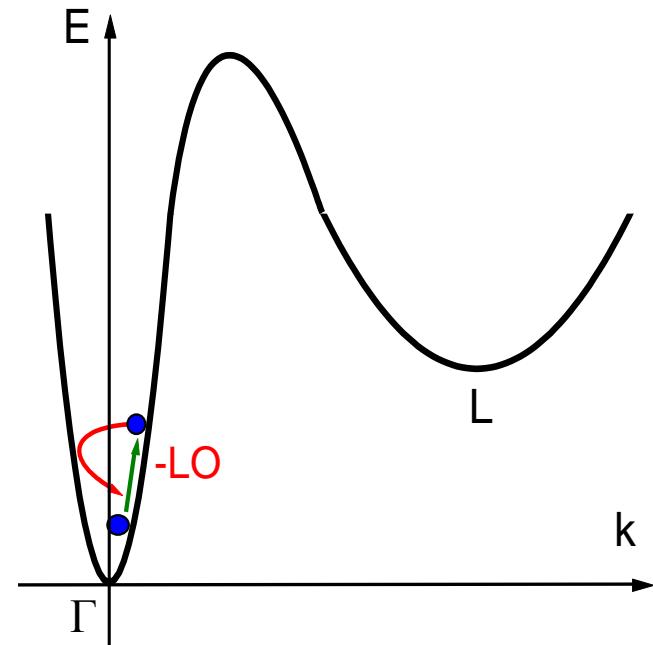
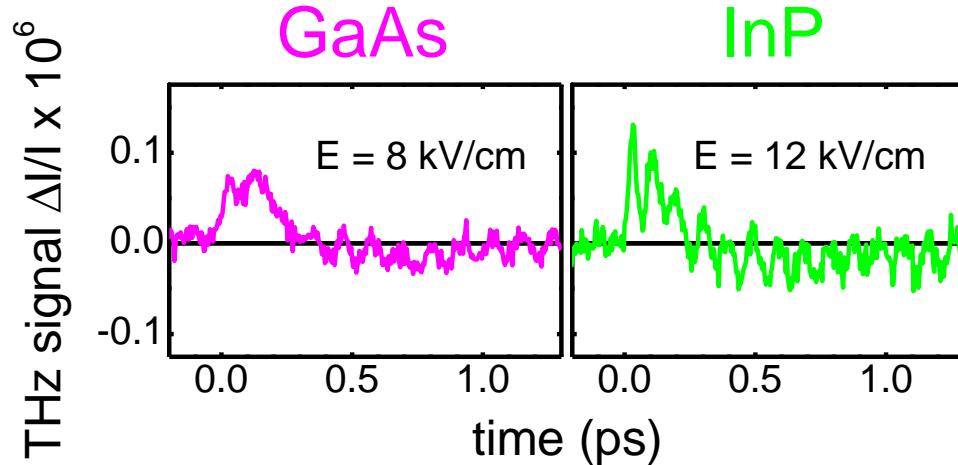


## Zeitaufgelöste THz-Emission aus **GaAs** und **InP** pin-Dioden

- Anregungsdichte:  $N = 5 \times 10^{14} \text{ Elektron-Loch-Paare pro cm}^3$
- Gittertemperatur:  $T_L = 300 \text{ K}$
- Elektro-optischer Detektor: ZnTe  $<110>$ ,  $d = 8 \mu\text{m}$

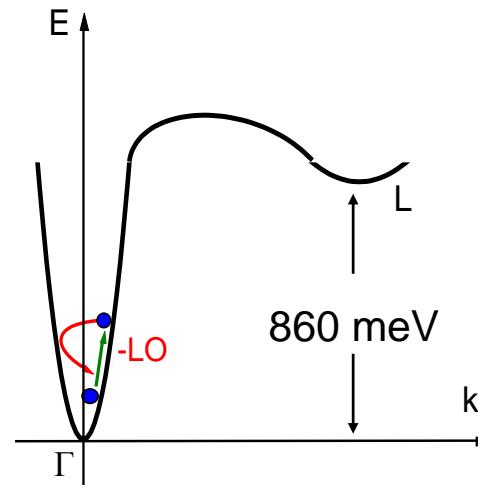
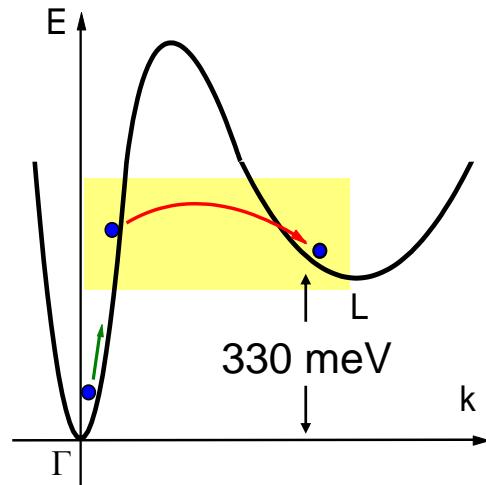
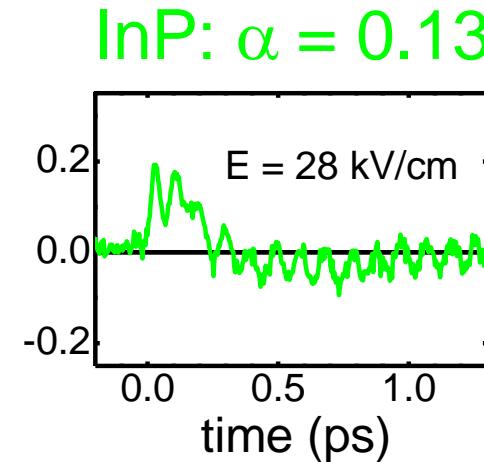
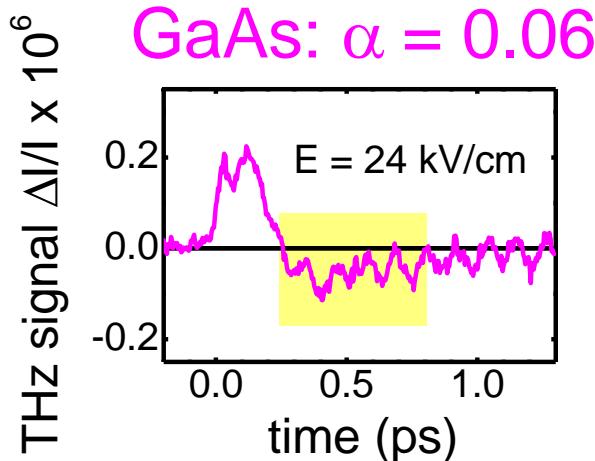
AL, S. Hunsche, J. Shah, M.C. Nuss,  
and W.H. Knox,  
Phys. Rev. Lett. **82**, 5140 (1999),  
Phys. Rev. **B61**, 16647 (2000)

# $E = 10 \text{ kV/cm}$ : Transport innerhalb $\Gamma$ -Tal



- polar-optische Streuung an LO-Phonen im  $\Gamma$ -Tal: geringe Impuls-Relaxation wegen  $1/q$ -Abhangigkeit der Frohlich-Kopplung (I.3.3)
- nicht-stationarer Einschaltvorgang dauert etwa eine Elektron-Phonon-Streuzzeit
- danach hohe stationare Beweglichkeit:  $m_\Gamma \ll m_0$

# $E = 25 \text{ kV/cm}$ : „polar runaway“ beginnt in GaAs



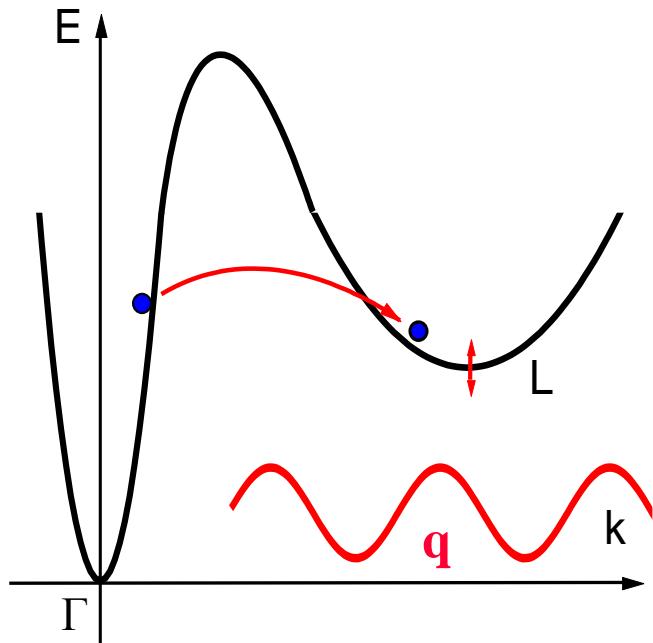
- Ladungsträger nehmen pro Zeiteinheit mehr Energie aus dem Feld auf, als durch LO-Streuung ans Gitter abgegeben wird

# Seitental-Transfer über Deformations-Potential

- lokale Kopplung **Elektronenenergie** - **Gitterverzerrung** (siehe I.3.3): Emission und Absorption von Phononen

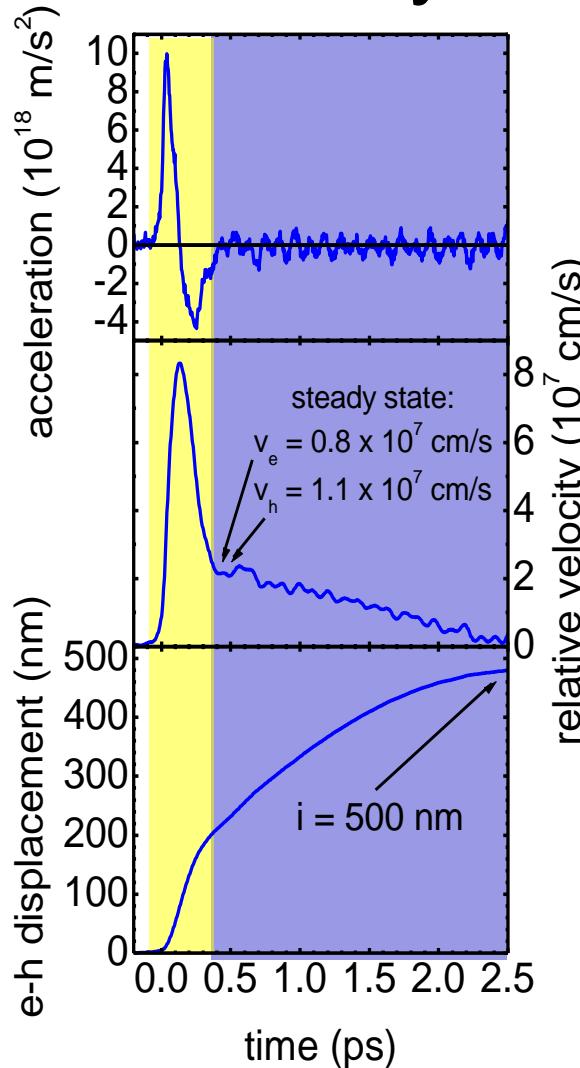
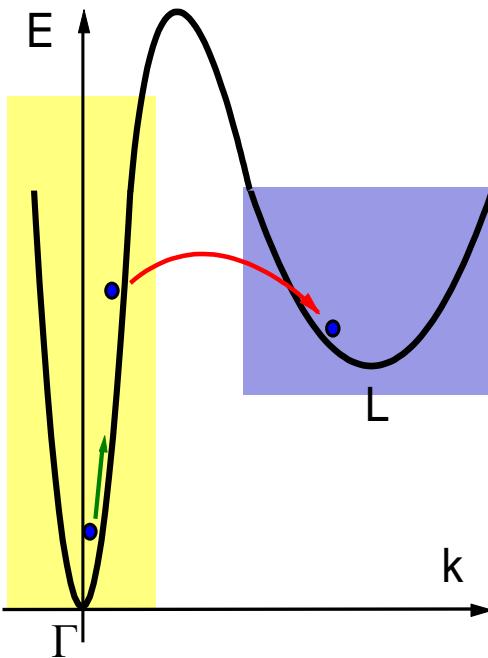
$$H_{dp} = \mathbf{D}'_0 \bullet \mathbf{u} = \text{const.} \quad (\text{optische Phononen})$$

$$H_{dp} = \sum_{ij} \Xi_{ij} \mathbf{S}_{ij} \propto \mathbf{q} \quad (\text{akustische Phononen})$$



- starke Impulsrelaxation
- große effektive Masse in den Seitentälern
- geringe stationäre Driftgeschwindigkeit nach transientem „velocity overshoot“

# 90 kV/cm: starker „velocity overshoot“ in InP



- $a_{\max} = 10^{18} \text{ g}$
- $v_{\max} = 10 \times v_{\text{stationär}}$
- $d_{\text{ballistisch}} \approx 200 \text{ nm}$

- Fazit: Transport in Hochgeschwindigkeits-Bauelementen ist stark nicht-thermisch, weist ultraschnelle Dynamik auf und folgt nicht dem Ohmschen Gesetz

## I.5.6: Magneto-Transport und Hall-Effekt

- elektrischer Strom im Halbleiter unter kombiniertem Einfluss von elektrischem Feld  $\mathbf{F}$  und Magnetfeld  $\mathbf{B}$
- semiklassischer Ansatz auf Basis der effektiven Masse

### I.5.6.1: Der Tensor der Magneto-Leitfähigkeit

- Annahme: unendlich ausgedehnter, kubischer und nicht-magnetischer Kristall
- Magnetfeld  $\mathbf{B}$  entlang der  $z$ -Achse
- Bewegung des Elektrons im kombinierten  $\mathbf{F}$ - und  $\mathbf{B}$ -Feld: semiklassische **Lorentz-Gleichung**

$$m^* \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} + \frac{m^*}{\tau} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = (-e) [\mathbf{F} + (\mathbf{v} \times \mathbf{B} / c)]$$

- Annahme: effektive Masse  $m^*$  und Impuls-Relaxationszeit  $\tau$  seien konstant und isotrop

- Drift-Geschwindigkeit  $\mathbf{v}_d$  unter stationären Bedingungen:

$$\frac{m^*}{\tau} \mathbf{v}_d = (-e) [\mathbf{F} + (\mathbf{v}_d \times \mathbf{B} / c)]$$

- Komponenten entlang  $x$ ,  $y$  und  $z$ -Achse:

$$\frac{m^*}{\tau} v_{d,x} = (-e) [F_x + (v_{d,y} \times B_z / c)]$$

$$j_x = \sigma_0 F_x - \omega_c \tau j_y$$

$$\frac{m^*}{\tau} v_{d,y} = (-e) [F_y - (v_{d,x} \times B_z / c)]$$

$$j_y = \sigma_0 F_y + \omega_c \tau j_x$$

$$\frac{m^*}{\tau} v_{d,z} = -e F_z$$

$$j_z = \sigma_0 F_z$$

- Gleichungen für Stromdichten über  $\mathbf{j} = n(-e)\mathbf{v}_d$
- Leitfähigkeit ohne Magnetfeld:  $\sigma_0 = ne^2 \tau / m^*$
- klassische **Zyklotron-Frequenz**  $\omega_c = eB_z/(m^*c)$

- Lösung: verallgemeinertes Ohmsches Gesetz

$$j_x = \frac{1}{1 + (\omega_c \tau)^2} \sigma_0 (F_x - \omega_c \tau F_y)$$

$$j_y = \frac{1}{1 + (\omega_c \tau)^2} \sigma_0 (F_y + \omega_c \tau F_x) \quad \text{oder kurz} \quad \mathbf{j} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{B}) \mathbf{F}$$

$$j_z = \sigma_0 F_z$$

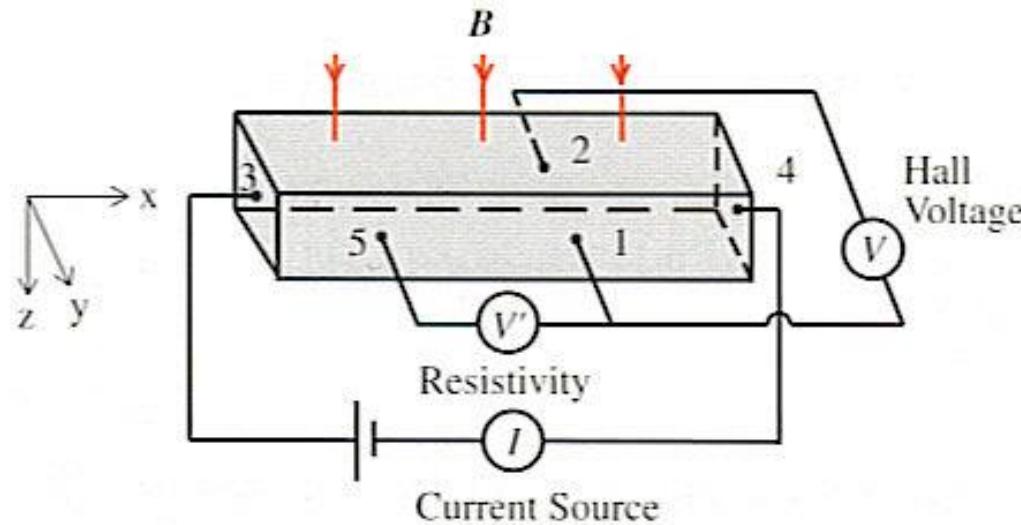
- Tensor der **Magneto-Leitfähigkeit** für Elektronen:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{B}) = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c \tau)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c \tau & 0 \\ \omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + (\omega_c \tau)^2 \end{pmatrix}$$

- Magneto-Widerstand  $\propto B^2$  für Leitfähigkeit  $\perp$  Magnetfeld
- Ströme  $\perp$  elektrisches Feld  $\propto B \rightarrow$  Hall-Effekt

## I.5.6.2: Der Hall-Effekt

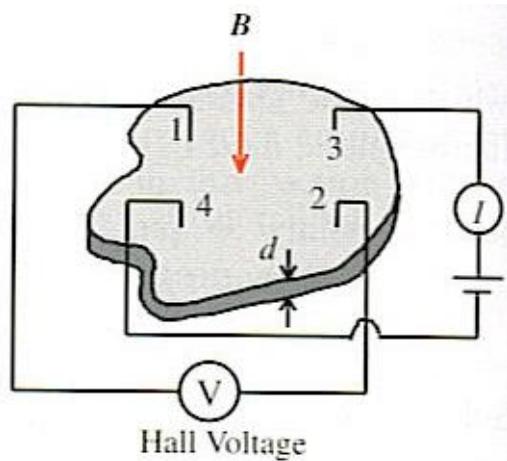
- Geometrie: rechteckiger Halbleiter-Barren (engl.: „bar“)
- elektrisches Feld  $\mathbf{F}$  parallel zur  $x$ -Achse (lange Seite):



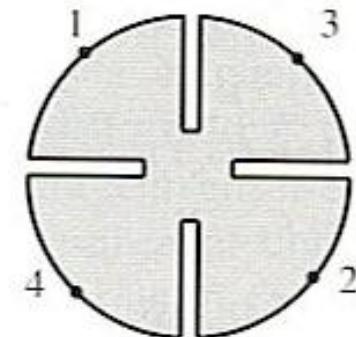
- geschlossener Stromkreis in  $x$ -Richtung
- Spannungsmessung in  $y$ -Richtung: **Hall-Effekt**
- stationär:  $j_y = 0$  und damit Hall-Spannung

$$F_y = -\frac{\omega_c \tau j_x}{\sigma_0}$$

- gemessene Größe: Hall-Spannung  $F_y$
- extern kontrollierte Parameter:  $j_x$  und  $B_z$
- Definition **Hall-Koeffizient**:  $R_H = \frac{F_y}{j_x B_z} = -\frac{\omega_c \tau}{\sigma_0 B_z} = -\frac{1}{nec}$
- $R_H$  ist negativ für Elektronen und positiv für Löcher
- Hall-Effekt wichtige Technik zur Messung des Vorzeichens der **Ladung** und der **Konzentration** freier Ladungsträger
- oft Probe als dünne epitaktische Schicht auf isolierendem Substrat: van-der-Pauw-Geometrie, spezielle Auswertung



oder besser



### I.5.6.3: Hall-Effekt und Energieverteilung der Elektronen

- Verteilungsfunktion der Elektronen  $f(E)$
- allgemein gemittelte Größen für Elektronen-Eigenschaften:

$$\langle a \rangle = \int a(E) f(E) dE$$

- damit:  $\langle j_x \rangle = \alpha F_x - \gamma B_z F_y$   
 $\langle j_y \rangle = \alpha F_y + \gamma B_z F_x$   
 $\langle j_z \rangle = \langle \sigma_0 \rangle F_z$

wobei  $\alpha = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} \right\rangle$   
und  $\gamma = \frac{ne^3}{m^{*2} c} \left\langle \frac{\tau^2}{1 + (\omega_c \tau)^2} \right\rangle$

- im Limit schwacher Magnetfelder gilt  $(\omega_c \tau)^2 \ll 1$  und damit

$$\alpha \approx \frac{ne^2}{m^*} \langle \tau \rangle \quad \text{und} \quad \gamma \approx \frac{ne^3}{m^{*2} c} \langle \tau^2 \rangle$$

- Hall-Koeffizient für eine Verteilung von Elektronen:

$$R_H = \frac{F_y}{j_x B_z} = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{(-nec) \langle \tau \rangle^2} = -\frac{r_H}{nec}$$

- **Hall-Faktor**  $r_H = \langle \tau^2 \rangle / \langle \tau \rangle^2$ : in der Größenordnung 1, hängt ab von den involvierten Streumechanismen
- **Hall-Beweglichkeit**:  $\mu_H = R_H \sigma_0$
- die in I.5.2 definierte Beweglichkeit  $\mu$  hängt mit  $\mu_H$  über folgende Beziehung zusammen:  

$$\mu_H = r_H \mu$$
- Zusammenfassung: Standard-Methode zur Bestimmung der **Leitfähigkeits-Eigenschaften von Halbleitern nahe der Band-Minima** über Transport-Messungen in Kombination elektrischer und magnetischer Felder → Hall-Effekt

# I.6 Optische Eigenschaften

- bisher: elektronisches System des Halbleiters in Wechselwirkung mit statischem äußerem Feld bzw. mit zeitabhängigen Feldern, deren Frequenzkomponenten weit unter den Eigenfrequenzen der Elementar-Anregungen des Systems liegen
- jetzt: Wechselwirkung zwischen Halbleiter und extrem **hochfrequenten elektromagnetischen Feldern** (Licht): (nahezu) resonant zu den **Elementaranregungen**
- wichtig für die Untersuchung von Elektronenstruktur, Phononen, etc. und deren Dynamik
- weitgreifende Anwendungen: Opto-Elektronik, Photonik
- wir beschränken uns auf Effekte der **linearen Optik**, trotz wichtiger nichtlinearer Eigenschaften der HL!

# I.6.1: Makroskopische Elektrodynamik

- Feld  $\mathbf{E}$  als sinus-förmige elektromagnetische **ebene Welle** mit Wellenvektor  $\mathbf{q}$  und Kreisfrequenz  $\omega$ :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

- Vektorfeld der **makroskopischen Polarisation  $\mathbf{P}$** : Dichte der induzierten elektrischen Dipole im Medium

$$P_i(\mathbf{r}', t') = \int \chi_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') E_j(\mathbf{r}, t) dr dt$$

- mit dem Tensor der **elektrischen Suszeptibilität** des Materials  $\chi_{ij}$
- im homogenen Medium unter stationären Bedingungen:

$$P_i(\mathbf{r}', t') = \int \chi_{ij}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, |t - t'|) E_j(\mathbf{r}, t) dr dt$$

- Fourier-Transformation:  $P_i(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) E_j(\mathbf{q}, \omega)$

- Tensor der **dielektrischen Funktion**  $\varepsilon_{ij}$ :

$$D_i(\mathbf{q}, \omega) = \varepsilon_{ij}(\mathbf{q}, \omega) E_j(\mathbf{q}, \omega)$$

mit

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = 1 + 4\pi \chi_{ij}(\mathbf{q}, \omega)$$

- Zusammenhang mit physikalisch **messbaren Größen**:

– komplexer Brechungsindex  $\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)}$

– Extinktions-Koeffizient  $\kappa(\omega)$

– Absorptions-Koeffizient  $\alpha(\omega) = \frac{4\pi \kappa(\omega)}{\lambda_0}$

mit der Vakuum-Wellenlänge  $\lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega}$

- Messung der linearen Absorption im Material:  
Lambert-Beersches Gesetz

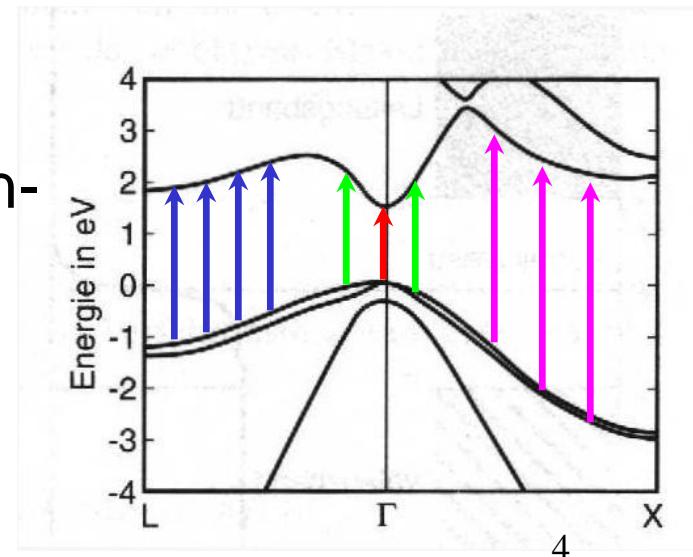
$$I(\mathbf{r}_2) = I(\mathbf{r}_1) \exp(-\alpha(\omega) |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)$$

## I.6.2: Beiträge elektronischer Anregungen

- Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern mit **Photonenenergien in der Größenordnung der Bandlücken-Energie**
- Anregung von Elektronen aus den Valenz- in die Leitungsbänder = **Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren**

### I.6.2.1: Mikroskopisches Bild der Interband-Beiträge zur dielektrischen Funktion

- allgemein gilt **qualitativ**:
  - Impuls  $\mathbf{q}$  des Photons klein geben – über reziprokerem Gittervektor  $\mathbf{G}$   
=> direkte Übergänge nahezu senkrecht im  $k$ -Raum
  - keine Absorption für  $E_{phot} < E_g$



- wir gehen aus vom **Einteilchen-Hamilton-Operator**  $H_0$  des ungestörten Kristalls:

$$H_0 = p^2 / 2m + V(\mathbf{r})$$

- elektromagnetische Felder über Vektor-Potenzial  $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$  und skalares Potenzial  $\Phi(\mathbf{r},t)$
- **Coulomb-Eichung:**

$$\Phi = 0 \quad \text{und} \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad \left( \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)$$

- **Hamilton-Operator  $H$  für Halbleiter + externes Lichtfeld:**  
ersetze Impuls-Operator  $\mathbf{p}$  durch  $\mathbf{p} + (e\mathbf{A}(\mathbf{r},t)/c)$ , analog I.5.5

$$H = (\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c)^2 / 2m + V(\mathbf{r})$$

- Näherung für schwaches klassisches Feld:

$$\frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{2mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e}{2mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \frac{e^2 A^2}{2mc^2} \approx \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$$

- Näherung für gesamten Hamilton-Operator:

$$H = H_0 + \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$$

- Stör-Operator für Wechselwirkung Elektron-Strahlungsfeld:

$$H_{eR} = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$$

- führt zu Übergängen zwischen elektronischen Eigenzuständen unter dem Einfluss der Lichtwelle, analog I.3.3
- Übergangsraten: berechnen über zeitabhängige Störungsrechnung bzw. Fermis Goldene Regel
- Lichtwelle:  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\frac{cE}{2\omega} \left\{ \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] + c.c. \right\}$
- Elektronen: Bloch-Zustände für Leitungs- und Valenzband

$$|c\rangle = u_{c,\mathbf{k}_c}(\mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{k}_c \cdot \mathbf{r})] \quad \text{und} \quad |v\rangle = u_{v,\mathbf{k}_v}(\mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{r})]$$

- **elektrische Dipol-Näherung**: Wellenlänge  $\lambda$  viel größer als Elementarzelle des Gitters => Photon-Impuls  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  vernachlässigbar klein
- **Impuls-Erhaltung** im translations-invarianten System:  $\mathbf{k}_v = \mathbf{k}_c$  => „direkte“ Dipol-Übergänge, vertikal in der Bandstruktur
- **Übergangs-Rate  $R$**  für Photon-Absorption pro Einheits-Volumen und Zeiteinheit nach **Fermis Goldener Regel**:

$$R = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}_c, \mathbf{k}_v} \left| \langle c | H_{cR} | v \rangle \right|^2 \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega)$$

- Annahme: **Dipol-Matrixelement**  $P_{cv}$  sei nur schwach abhängig vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$ :

$$\left| \langle c | H_{cR} | v \rangle \right|^2 \cong \left( \frac{e}{mc} \right)^2 |\mathbf{A}|^2 |P_{cv}|^2$$

- damit:

$$R = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{e}{m\omega} \right)^2 \left| \frac{E(\omega)}{2} \right|^2 \sum_{\mathbf{k}} |P_{cv}|^2 \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega)$$

- wie kommen wir auf die **dielektrische Funktion?**
- Energie-Verlust einer elektromagnetischen Welle:

$$R\hbar\omega = -\frac{dI}{dt} = \frac{c}{n}\alpha I = \frac{\varepsilon_i\omega I}{n^2}$$

- Beziehung zum elektrischen Feld:

$$I = \frac{n^2}{8\pi} |E(\omega)|^2$$

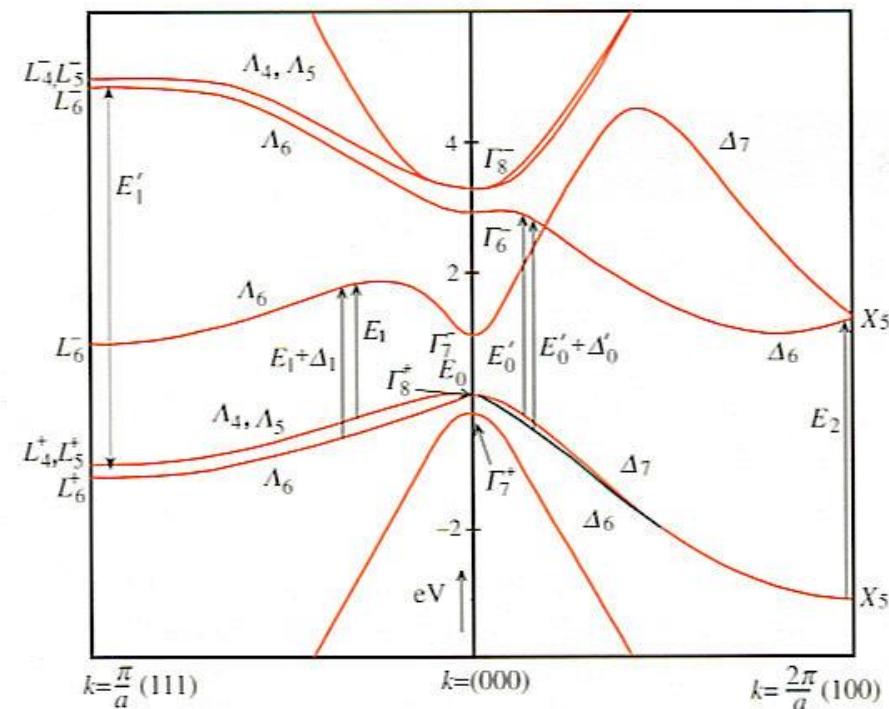
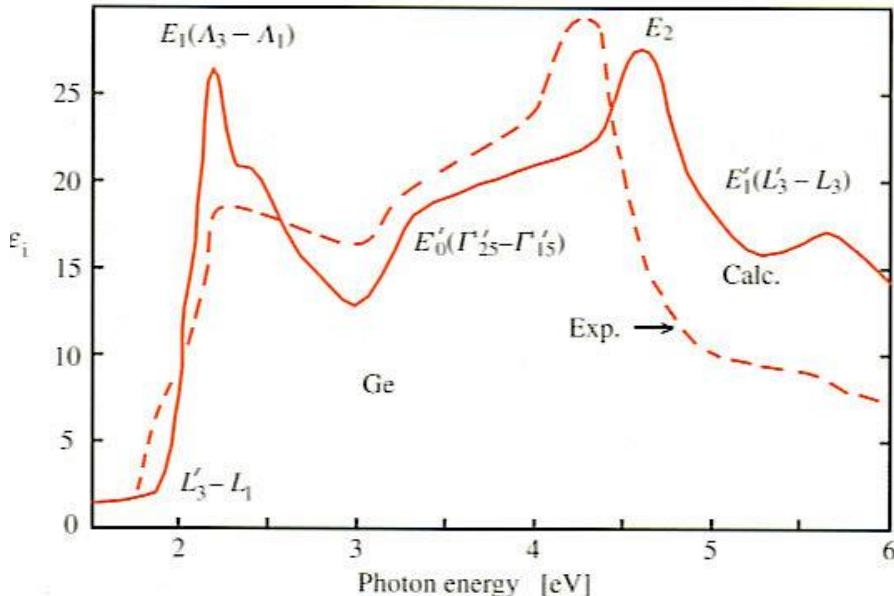
- damit:  $\varepsilon_i(\omega) = \left( \frac{2\pi e}{m\omega} \right)^2 \sum_{\mathbf{k}} |P_{cv}|^2 \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega)$
- Realteil über Kramers-Kronig-Relationen (Fkt.-Theorie!):

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \left[ \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{2}{m\hbar\omega_{cv}} \right) \frac{|P_{cv}|^2}{\omega_{cv}^2 - \omega^2} \right]$$

- Ergebnis für  $\varepsilon(\omega)$  formal äquivalent zum erweiterten Lorentz-Modell mit Satz von klassischen harmonischen Oszillatoren unterschiedlicher Frequenz  $\omega_i$  der Dichte  $N_i$ :

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \left[ \sum_i \frac{N_i}{\omega_i^2 - \omega^2} \right]$$

- quantenm. Korrektur:  $N_i \rightarrow$  **Oszillatorstärke**  $f_{cv} = \frac{2|P_{cv}|^2}{m\hbar\omega_{cv}}$
- Beispiel Ge: Vergleich  $\varepsilon_i(\omega)$  im VIS/UV und Bandstruktur



## I.6.2.2: Optische Eigenschaften nahe der fundamentalen Absorptionskante

- Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern bei **Photonenenergien nahe der fundamentalen Bandlücken-Energie:**  $h\nu \approx E_g$
- besonders wichtiger Bereich im Spektrum der dielektrischen Funktion eines Halbleiters: effiziente **Emission von Licht durch Rekombination von Elektron-Loch-Paaren?**
- **schnelle Intra-Band-Relaxation** von Elektronen und Löchern über Streuung, z. B. an Phononen
- Effiziente **Inter-Band-Rekombination von Elektron-Loch-Paaren über Emission von Photonen** nur im Bereich der fundamentalen Bandlücke: langlebige Zustände
- große **praktische Bedeutung** der Optik nahe Bandkante
  - Technologie: Leuchtdioden und Halbleiter-Laser
  - Physik: exzitonische Zustände und Quanteneffekte

## I.6.2.2.1: Einteilchen-Bild der fundamentalen Absorptionskante im direkten Halbleiter

- direkte Bandlücke mit **parabolischem Leitungs- und Valenzband**:

$$E_{cv} = E_g + (\hbar^2 / 2\mu)k^2$$

mit reduzierter Elektron-Loch-Masse  $\mu$ :  $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v}$

- kombinierte Zustandsdichte** Valenz- und Leitungsband:

$$D_j = \begin{cases} \frac{\sqrt{2\mu^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_{cv} - E_g} & \text{für } E_{cv} > E_g \\ 0 & \text{für } E_{cv} < E_g \end{cases}$$

- mit I.6.2.1 Ergebnis für **dielektrische Funktion**:

$$\varepsilon_i(\omega) = \left( \frac{2\pi e}{m\omega} \right)^2 \sum_{\mathbf{k}} |P_{cv}|^2 \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega) =$$

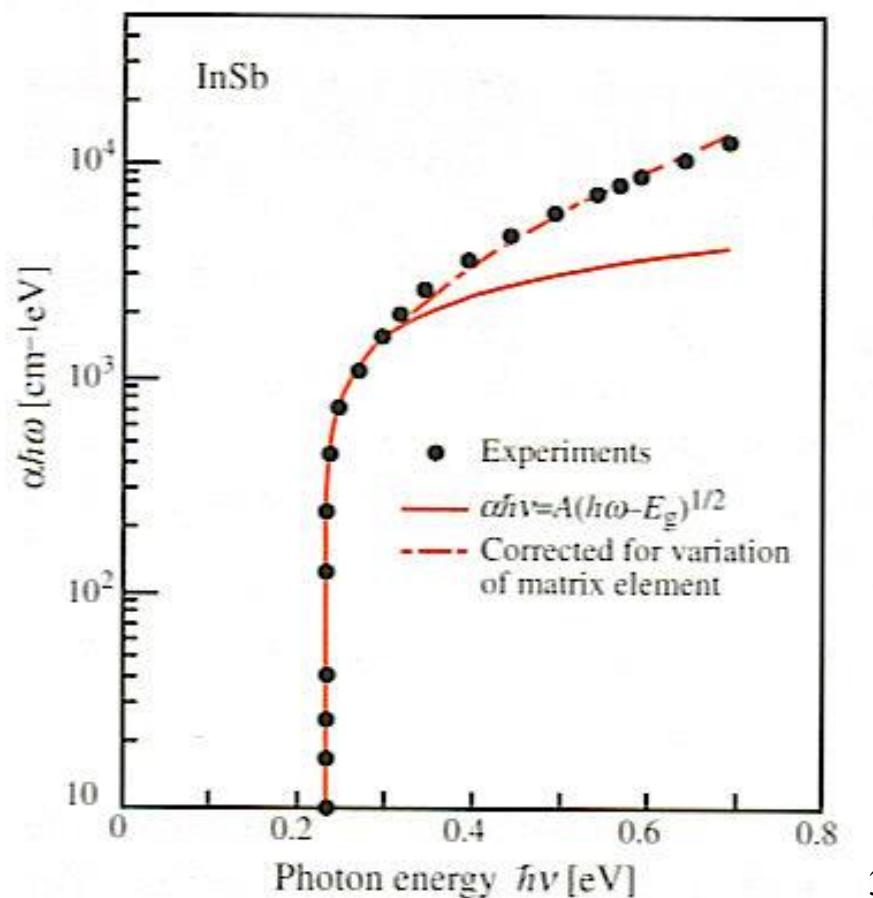
- dielektrische Funktion:

$$\varepsilon_i(\omega) = \left( \frac{2\pi e}{m\omega} \right)^2 \int |P_{cv}|^2 D_j(E_{cv}) dE_{cv} = \begin{cases} A\sqrt{x-1} & \text{für } x > 1 \\ 0 & \text{für } x < 1 \end{cases}$$

mit  $A = \frac{2e^2(2\mu)^{3/2}}{m^2\omega^2\hbar^3} |P_{cv}|^2 \sqrt{E_g}$

und  $x = \frac{\hbar\omega}{E_g}$

- Beispiel:  $\alpha(\omega)$  an der Absorptionskante von InSb
- typische **Absorptionslängen** nahe Bandkante:  $\alpha^{-1}(\omega) \approx 100 \text{ nm bis } 1 \mu\text{m}$



## I.6.2.2.2: Zweiteilchen-Effekte an der fundamentalen Absorptionskante – Exzitonen

- bisher: Absorptions-Vorgang für Photon erklärt im Rahmen der Einteilchen-Bandstruktur bzw. –Schrödinger-Gleichung
- aber: **Photon generiert zwei Quasiteilichen**, Elektron im Leitungsband + Loch im Valenzband
- Korrektur zum Einteilchen-Bild: **Coulomb-Anziehung** zwischen Elektron und Loch
- Zweiteilchen-Eigenzustände für elektronisches System: analog zum H-Atom bzw. Positronium
- **Renormierung durch Festkörper-Matrix** (analog I.4.2):
  - Coulomb-Wechselwirkung abgeschirmt durch Valenzelektronen => statische Dielektrizitäts-Konstante  $\epsilon_s$
  - effektive Gesamtmasse  $M = m_v + m_c \approx m_v$
  - effektive reduzierte Masse  $\mu \approx m_c$

- Eigenenergien der **Exzitonen**:  $E_{K,n} = E_g + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - \frac{R^*}{n^2}$

mit dem Schwerpunkts-Wellenvektor  $K$

und der Exzitonen-**Bindungsenergie**

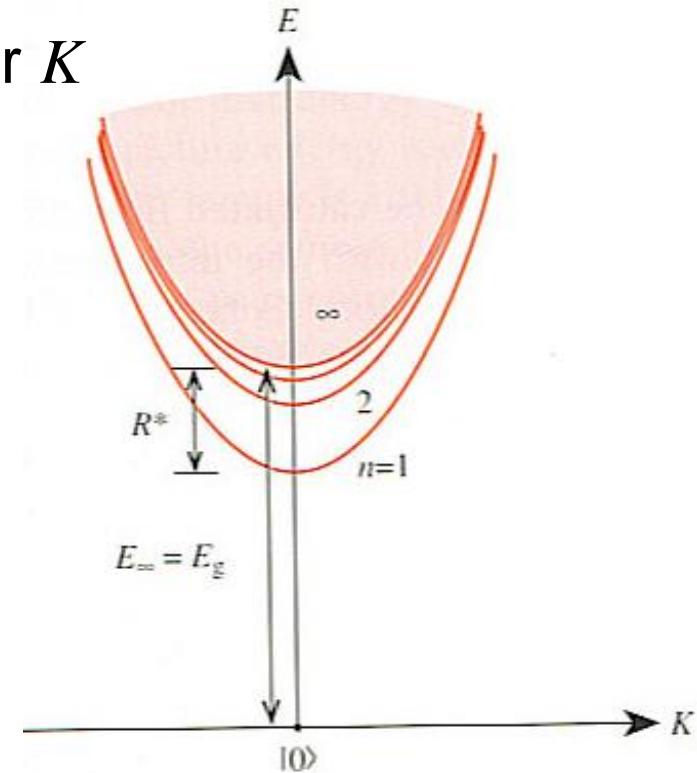
$$R^* = R_H \left( \frac{\mu}{m_0 \varepsilon_s^2} \right) \quad (R_H = 13.6 \text{ eV})$$

- Beispiele für Bindungsenergien  $R^*$ :

– ZnO:  $\varepsilon_s = 7.8$ ,  $m_c = 0.24 m_0$ ,  
 $R^* = 61 \text{ meV}$

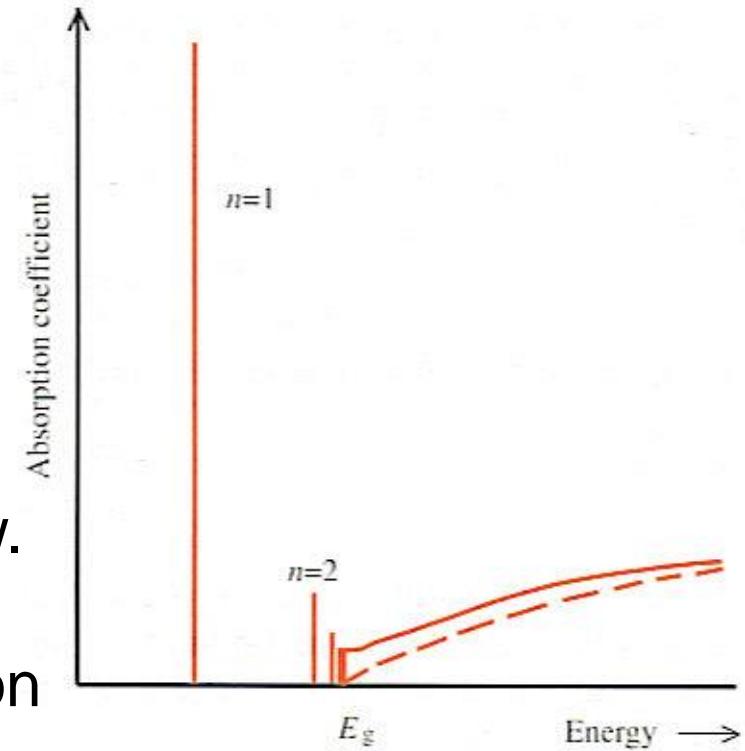
– GaAs:  $\varepsilon_s = 12.4$ ,  $m_c = 0.067 m_0$ ,  $R^* = 5 \text{ meV}$

– InSb:  $\varepsilon_s = 16.8$ ,  $m_c = 0.014 m_0$ ,  $R^* = 0.7 \text{ meV} (?)$



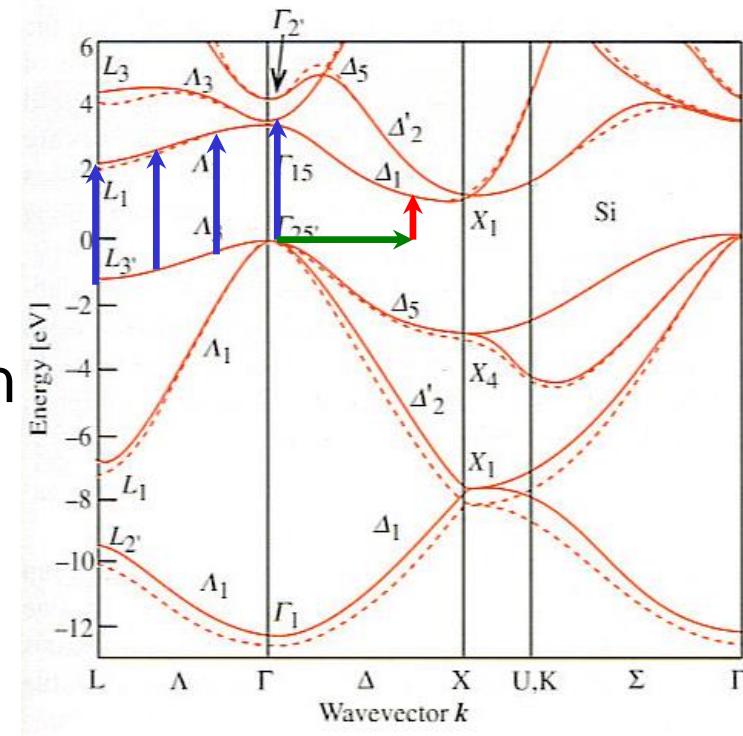
- exzitonische Effekte spielen vor allem in direkten Halbleitern mit großer Bandlücke eine Rolle ( $m_c$  relativ groß und  $\varepsilon_s$  klein!)

- Bandkanten-Absorptionsspektrum mit exzitonischen Beiträgen (schematisch):
- exzitonische Resonanzen reagieren sehr empfindlich auf
  - Erhöhung Gittertemperatur bzw. Anlegen elektrisches Feld: Verbreiterung durch Dissoziation
  - Erhöhung der Ladungsträger-Dichte: Coulomb-Abschirmung der Elektron-Loch-Wechselwirkung
- daher: stark nichtlinearer Charakter der exzitonischen Absorption
- zusätzlich: starke Kopplung zwischen Exziton und Lichtfeld führt zu avoided crossing mit der Dispersionsrelation des Photons => „Exziton-Polaritonen“ als neue Quasiteilchen

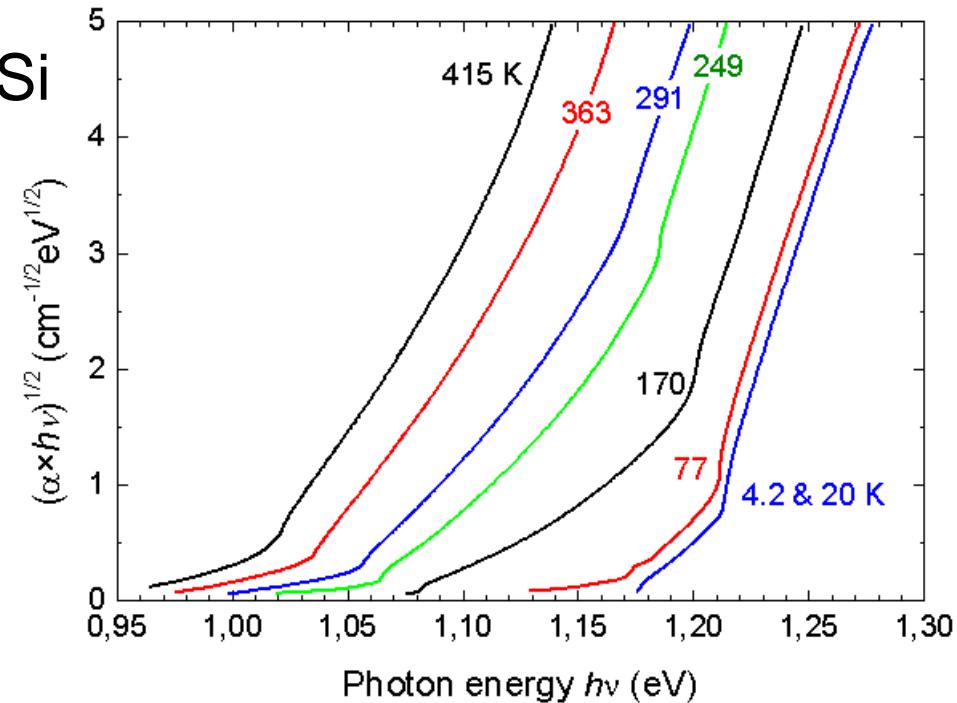


### I.6.2.2.3: Absorptionskante im indirekten Halbleiter

- Beispiel: **Bandstruktur von Si**
- direkte Anregung von Elektronen nur ab Photon-Energie  $E_{phot} \approx 3\text{eV}$
- indirekte Anregung von Elektronen durch **Phonon-assistierte Übergänge**
- **Photon** liefert Energie, **Phonon** liefert Quasi-Impuls
- tiefe Temperaturen  $k_B T_L \ll \hbar \omega_{phon}$ : Phononen unbesetzt => Photon erzeugt Phonon + Elektron-Loch-Paar, Absorptionskante bei  $E_g + \hbar \omega_{phon}$
- erhöhte Temperaturen  $k_B T_L \geq \hbar \omega_{phon}$ : Phononen thermisch besetzt => Photon und Phonon werden absorbiert Absorptionskante bei  $E_g - \hbar \omega_{phon}$



- Absorptionsspektrum von Si im Bereich der fundamentalen Absorptionskante:
- Phonon-assistierte Übergänge schwach: zeitabhängige Störungstheorie 2. Ordnung
- Absorptionslängen  $\alpha^{-1}$  im Bereich mm bis cm (vergleiche direkte Übergänge:  $\mu\text{m}$ )
- Lebensdauern  $\tau$  für strahlende Rekombination von Elektron-Loch-Paaren:  $\mu\text{s}$  bis zu  $\text{ms}$  (vergleiche direkt: ns)
- daher: effizientere nichtstrahlende Rekombination über Multi-Phonon-Prozesse unter Einfluss von Störstellen etc.
- keine Licht-emittierenden Bauelemente wie LEDs, Halbleiter-Laser aus Si und Ge!



# I.6.3: Gitterabsorption und Phonon-Polaritonen

- Wechselwirkung elektromagnetischer Felder mit **optischen Phononen** (infraroter Spektralbereich!)
- Dipol-Kopplung nur, falls **Elementarzelle ionische Ladungen** enthält, also in polaren Materialien (GaAs, InP, CdTe etc.)
- in rein kovalenten Halbleitern (Diamant C, Si, Ge): nur Prozesse höherer Ordnung, hohe Transparenz im IR

## I.6.3.1: Lorentz-Modell des Gitter-Oszillators

- Strahlungsfeld in Form von **ebener Welle**:  
$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$$
- Ionengitter bzw. optisches Phonon: **Ensemble harmonischer Oszillatoren mit identischer Ladung, Masse, Rückstellkraft**
  - reduzierte Masse  $M$  + relative Ladung  $Q$  des Ionenpaars
  - Resonanzfrequenz  $\omega_T$

- Antwort auf elektromagnetische Welle: relative Auslenkung der Gitterionen um Vektor  $\mathbf{u}$
- Bewegungsgleichung für ungedämpften Lorentz-Oszillator:

$$M \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = -M\omega_T^2 \mathbf{u} + Q\mathbf{E}$$

- Lösung für stationäres Regime:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad \text{mit} \quad \mathbf{u}_0 = \frac{Q\mathbf{E}_0}{M(\omega_T^2 - \omega^2)}$$

- makroskopische Polarisation  $\mathbf{P}$ :

$$\mathbf{P} = NQ\mathbf{u} \quad \text{mit der Oszillator- bzw. Dipol-Dichte } N$$

- dielektrischer Verschiebungsvektor  $\mathbf{D}$ :

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} = \epsilon \mathbf{E}$$

- damit dielektrische Funktion:  $\epsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi NQ^2}{M(\omega_T^2 - \omega^2)}$

- bisher: Lorentz-Oszillatoren im freien Raum (Vakuum)
- aber: Abschirmung durch Valenz-Elektronen mit Eigenfrequenz  $E_g / \hbar \gg \omega_T$
- daher: im Frequenzbereich der Gitterschwingungen in guter Näherung **konstanter (da instantaner) Beitrag  $\varepsilon_\infty$  des elektronischen Systems** („hochfrequenter Grenzwert“) zur dielektrischen Funktion  $\varepsilon(\omega)$ :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{4\pi NQ^2}{M(\omega_T^2 - \omega^2)}$$

- Annahme: keine unkompenzierten Ladungen im System  
 $\Rightarrow \nabla \mathbf{D} = 0 = \nabla(\varepsilon \mathbf{E})$     bzw.     $\varepsilon (\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0) = 0$
- erfüllbar unter zwei Bedingungen:

$$\varepsilon = 0 \quad \text{oder} \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0 = 0$$

- transversales Feld:  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0 = 0$
- elektrisches Feld  $\mathbf{E}$  senkrecht zur Ausbreitungsrichtung  $\mathbf{k}$
- dielektrische Funktion divergiert für  $\omega \rightarrow \omega_T$ :  
**transversale Resonanzfrequenz**
- longitudinales Feld:  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0 \neq 0$
- nur möglich für  $\varepsilon(\omega) = 0$
- longitudinale Resonanzfrequenz:  $\omega_L^2 = \omega_T^2 + \frac{4\pi NQ^2}{M\varepsilon_\infty}$
- Masse  $M$ , Ladung  $Q$  und Dichte  $N$  schwer zu messen
- $\omega_T$ ,  $\varepsilon_\infty$  und niederfrequenter Grenzwert  $\varepsilon_s$  leicht zugänglich:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 - (\omega^2 / \omega_T^2)}$$

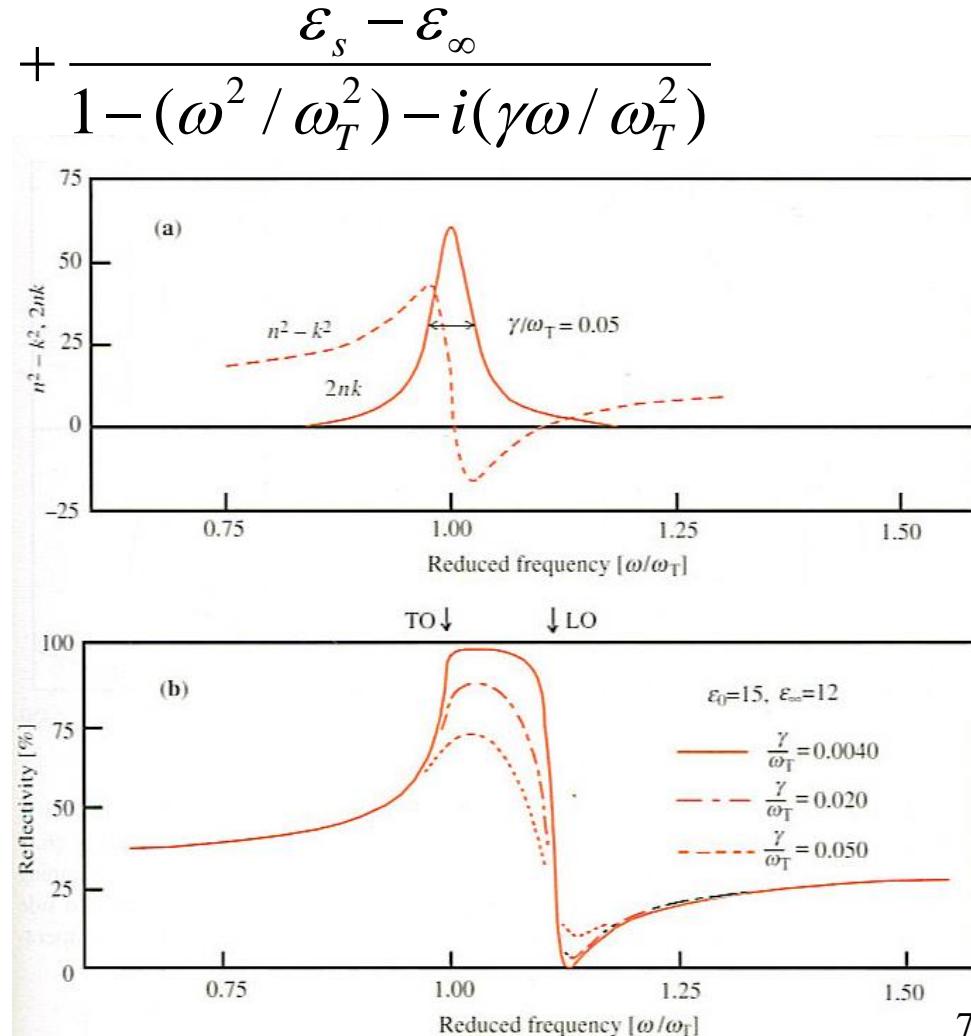
- Lyddane-Sachs-Teller (LST)-Relation:  $\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_\infty} = \frac{\omega_L^2}{\omega_T^2}$

## I.6.3.2: Gitter-Absorption und –Reflexion polarer Halbleiter: Reststrahlenbande

- für realistische Beschreibung: exponentielle **Dämpfung**  $\gamma$   
(Dephasierung TO-Phonon durch anharmonischen Zerfall)

$$\varepsilon(\omega) = n^2 - k^2 + i 2nk = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 - (\omega^2 / \omega_T^2) - i(\gamma\omega / \omega_T^2)}$$

- typischer Verlauf Real- und Imaginärteil von  $\varepsilon(\omega)$ :
  - Maximum  $\text{Im}(\varepsilon)$  bei  $\omega_T$**
  - Nulldurchgang  $\text{Re}(\varepsilon)$ :  $\omega_L$**
- spektrale **Reflektivität  $R(\omega)$**  einer Kristalloberfläche:  
**hoch für  $\omega_T < \omega < \omega_L$**
- für  $\gamma = 0$ :  $R(\omega) \equiv 1$   
im Intervall  $\omega_T < \omega < \omega_L$



- über LST-Relation:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} \left[ 1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \right]$$

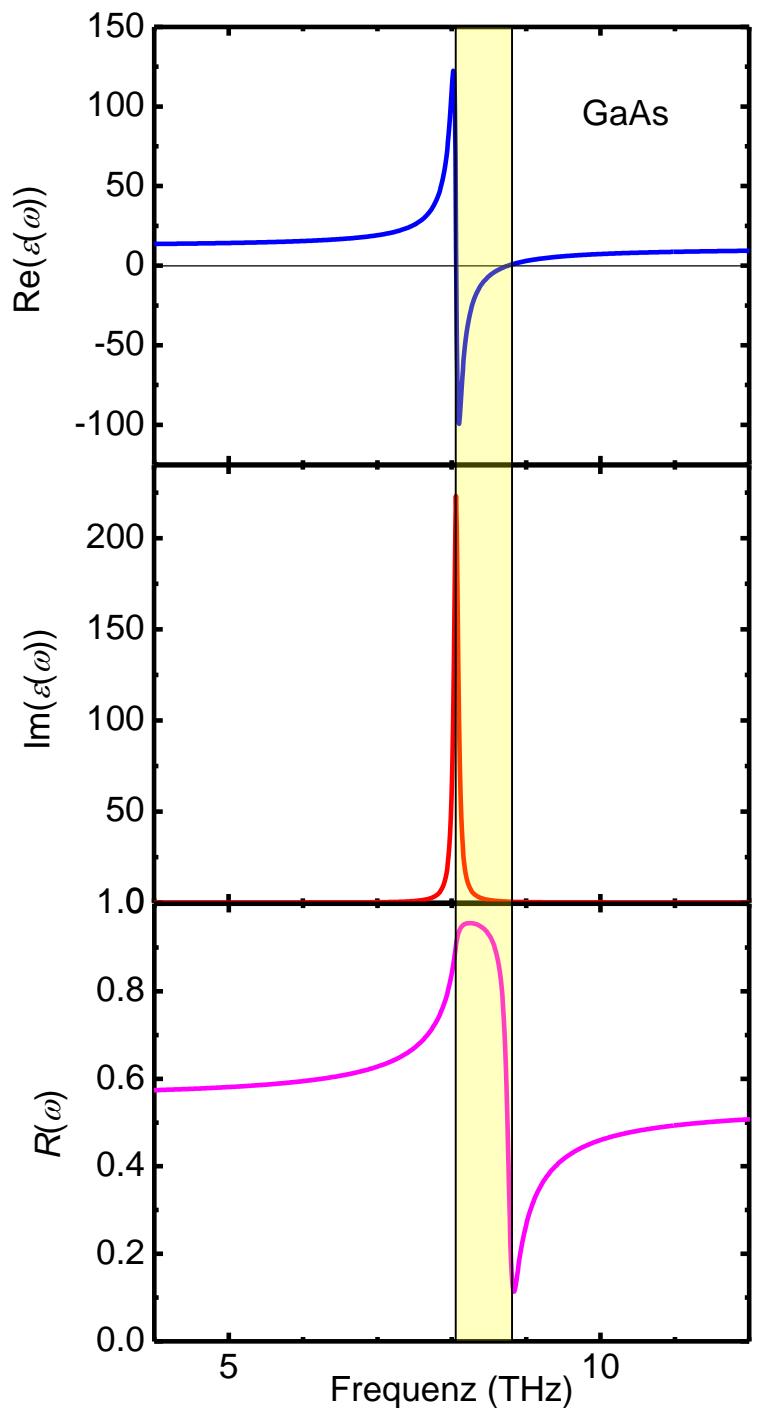
- quantitatives Beispiel GaAs:

$$\varepsilon_{\infty} = 11.0, \gamma = 7.2 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}, \\ \omega_T = 8.06 \text{ THz}, \omega_L = 8.76 \text{ THz}$$

- spektrale Reflektivität  $R(\omega)$ :

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)} + 1} \right|$$

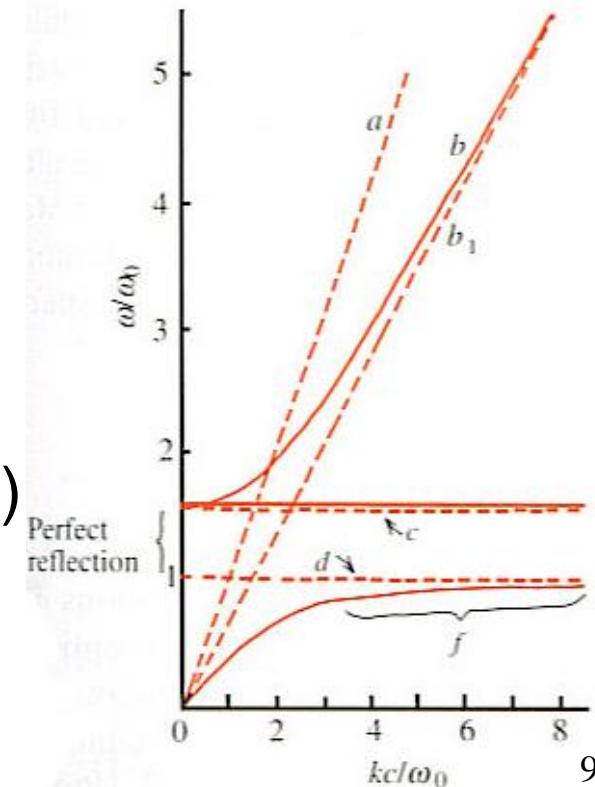
- nahezu perfekte Reflexion zwischen  $\omega_L$  und  $\omega_T$   
 → "Reststrahlenbande"



### I.6.3.3: Phonon-Polaritonen

- in der bisherigen Diskussion: **Strahlung (Re-Emission) durch oszillierende makroskopische Polarisation  $\mathbf{P}$  vernachlässigt**
- Resultat: Modell isolierter Resonatoren ohne Maxwell liefert zwei **Resonanzen  $\omega_T$  und  $\omega_L$  bei  $\mathbf{k} = 0$** , keine Propagation
- aber: nackte **longitudinale und transversale Resonanzen sind bei  $\mathbf{k} = 0$  nicht unterscheidbar**, sollten also energetisch **entartet** sein
- Abhilfe: **Berücksichtigung der Retardierung** über die Maxwell-Gleichungen
- allgemein gilt:  $k^2 = (n^2 \omega^2 / c^2) = (\omega^2 / c^2) \epsilon(\omega)$
- damit **Phonon-Polariton-Dispersion** (Kopplung Phonon-Photon, zwei Zweige)

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left( \epsilon_{\infty} + \frac{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}}{1 - (\omega^2 / \omega_T^2) - i(\gamma\omega / \omega_T^2)} \right)$$



## I.6.4: Absorption extrinsischer Ladungsträger

- hochreiner Halbleiterkristall: Wechselwirkung von Licht mit Elektronen nur über Interband-Übergänge
- zusätzliche Prozesse, falls im Halbleiter **freie Ladungsträger** vorhanden, z.B. durch Dotierung oder optische Anregung
- extrinsische Absorptionen finden sich im Halbleiter typisch im **infraroten Spektralbereich**
- zwei wichtige Beispiele, kurz eingeführt...:

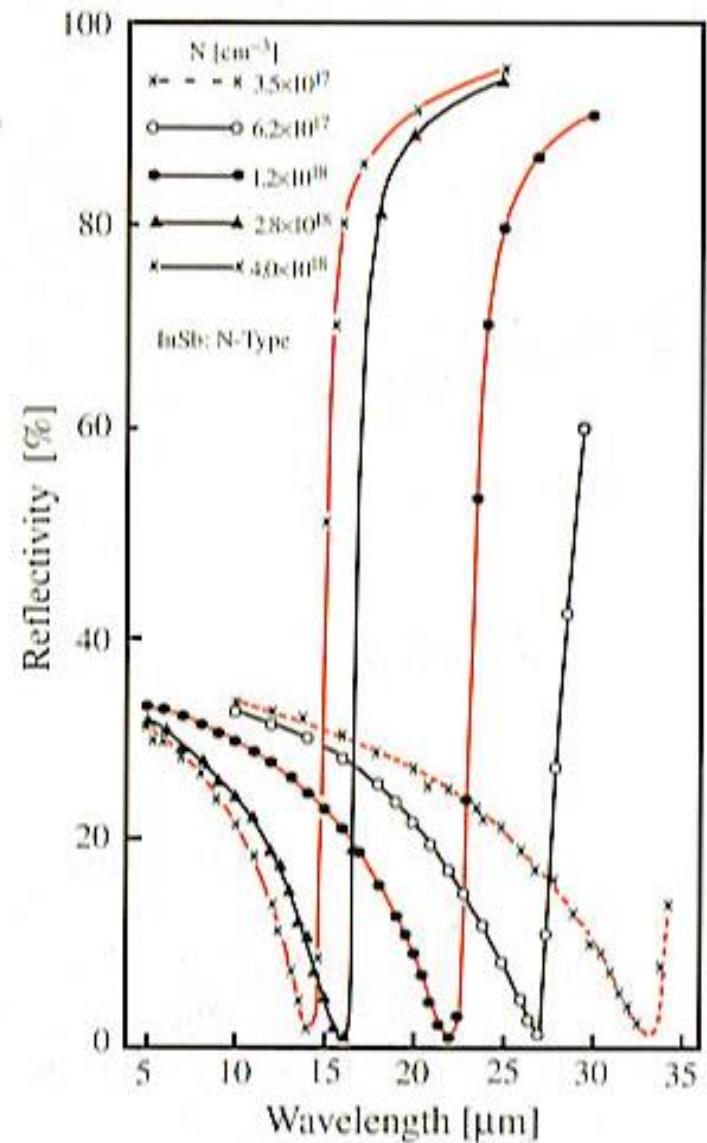
### I.6.4.1: Drude-Absorption des Ladungsträger-Plasmas

- Wechselwirkung von freien Elektronen bzw. Plasmen mit Strahlungsfeld (siehe z. B. Metalle): **Drude-Modell**
- ableitbar aus Lorentz-Modell: **keine Rückstellkraft für transversale Auslenkung** eines Plasmas aus freien Ladungsträgern =>  $\omega_T = 0$

- dielektrische Funktion der Drude-Absorption:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma_p} \right)$$

- renormiert durch dielektrische Abschirmung  $\epsilon_{\infty}$
- **Plasma-Frequenz:**  $\omega_p^2 = \frac{4\pi N_c e^2}{m^* \epsilon_{\infty}}$
- Ladungsträger-Dichte  $N_c$
- (reduzierte) effektive Masse  $m^*$
- Plasmon-Dämpfung  $\gamma_p$
- hohe Reflexion („metallisch“)  
für  $\omega < \omega_p$ : **Plasma-Kante**
- Beispiel: Spektren der Reflexion  $\mathcal{R}$  von n-InSb für versch.  $N_e$



## I.6.4.2: Interband-Absorption extrinsischer Träger

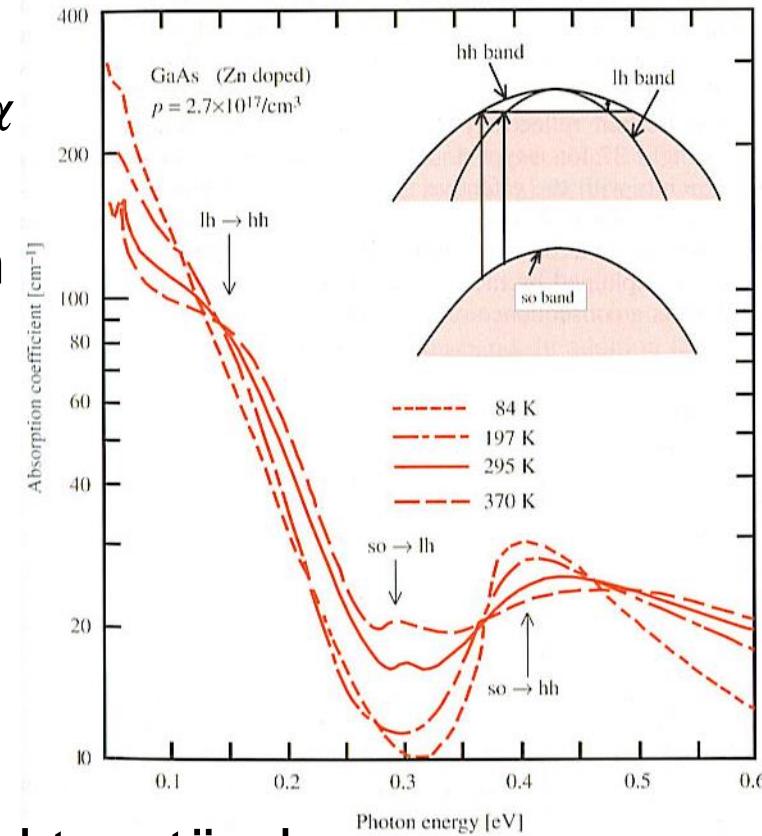
- entartete Struktur der Valenzbänder bei  $\mathbf{k} = 0$  ermöglicht elektronische IR-Übergänge im p-dotierten Halbleiter:  
**Inter-Valenzband-Absorption**

- Beispiel: Absorptions-Koeffizient  $\alpha$  von GaAs mit  $p = 2.7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  für unterschiedliche Temperaturen

- analog z.B. auch Inter-Leitungsband-Absorption in n-Si etc...

- weitere Beispiele für extrinsische Absorptionsprozesse:

- Ionisation neutraler Störstellen  
→ THz-Spektroskopie von Defektzuständen
- Phonon-Plasmon gekoppelte Moden für  $\omega_p \approx \omega_T$  bzw.  $\omega_L$
- Intersubband-Übergänge (siehe I.7) und vieles mehr...

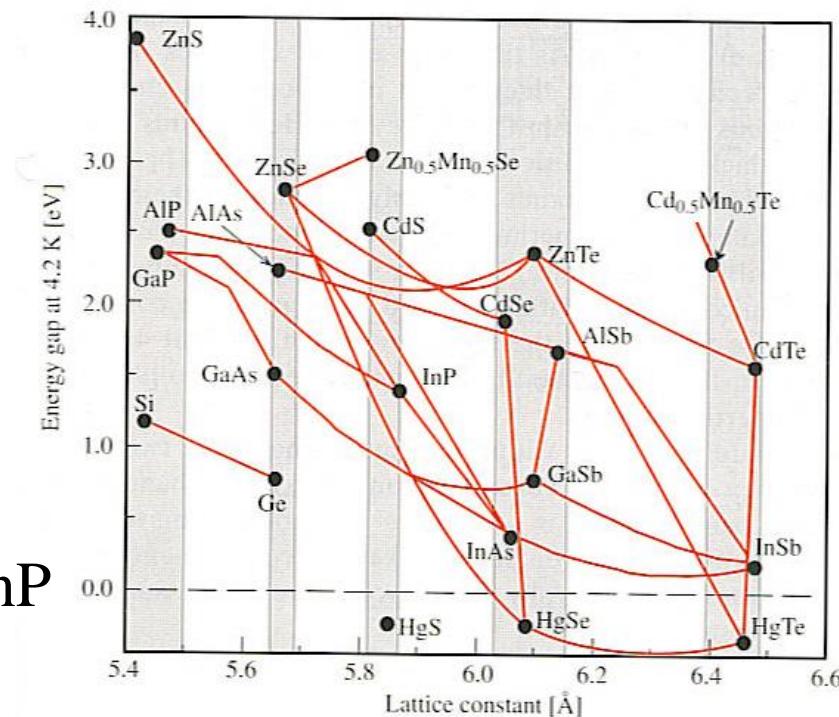
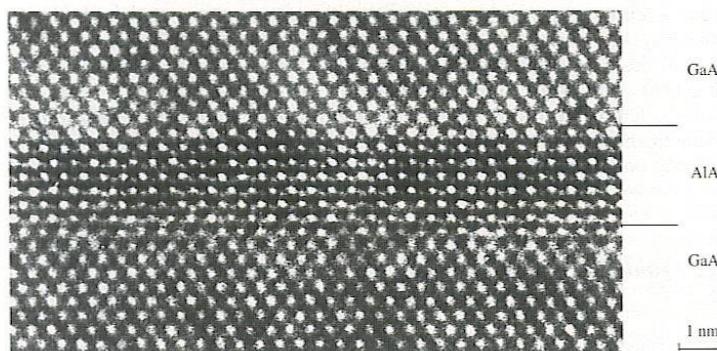


# I.7 Räumliche Quantisierung

- bisher: Halbleiterkristall unendlich ausgedehnt  
=> dreidimensionale Bloch-Wellen als elektronische Eigenzustände
- jetzt: elektronische Zustände in **räumlich eingeengter Geometrie** (Längenskala  $\approx$  Materie-Wellenlänge  $\lambda_e$ )
- Realisierung durch **Halbleiter-Nanostrukturen**
- viele neue Möglichkeiten für Forschung und Technologie:
  - Modifikation des elektronischen Energiespektrums + „Bandgap-Engineering“ über Mischkristalle
  - weniger Streuung, höhere Beweglichkeit
  - neue Transportphänomene (Tunneln, Quanten-Hall...)
  - attraktive optische Eigenschaften

# I.7.1: Halbleiter-Heterostrukturen

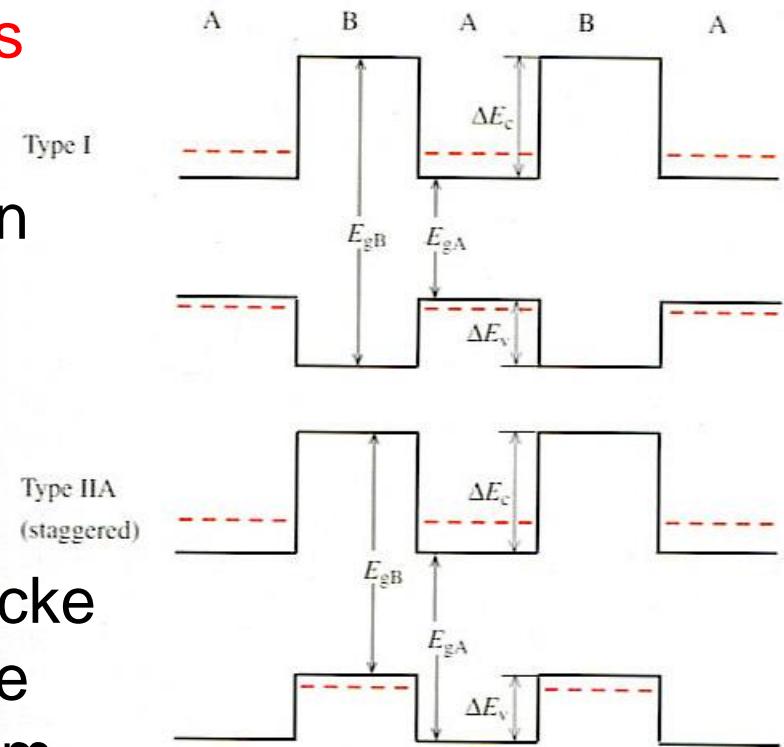
- Halbleiter-**Epitaxie**: Aufwachsen verschiedener Halbleiter-Materialien in Schichtfolgen mit atomarer Präzision
- Voraussetzung: möglichst **geringe Abweichungen der Gitterkonstante**
- Gitteranpassung durch ternäre und quaternäre Mischungen
- technologisch wichtige Materialsysteme:
  - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs}$
  - $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As} / \text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As} / \text{InP}$



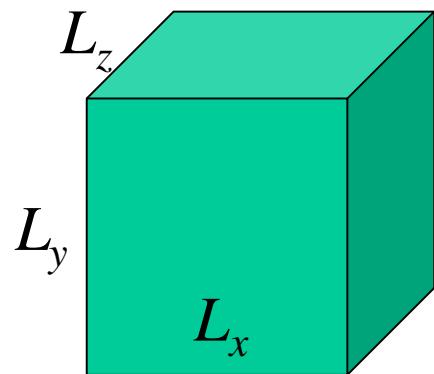
- Beispiel: hoch aufgelöste Abbildung einer GaAs/AlAs-Heterostruktur mittels TEM

## I.7.2: Elektronische Zustände in niedrig-dimensionalen Halbleiter-Nanostrukturen

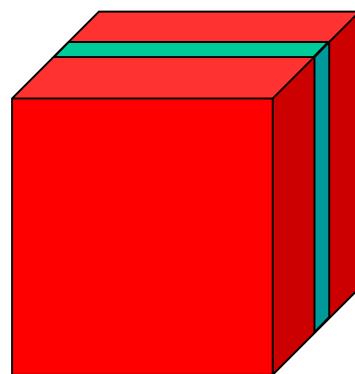
- 2 Möglichkeiten für **Band-Offsets** in Halbleiter-Heterostrukturen:
- Bandlücken-Energien der beiden Materialien:  $E_{gA}$  und  $E_{gB}$
- Valenz- und Leitungsband-Offsets:  $\Delta E_v$  und  $\Delta E_c$
- Feststellung: bereits ab einer Dicke von wenigen Monolagen sind die **elektronischen Zustände** in einem Modell basierend auf effektiver Masse und Einhüllenden-Wellenfunktionen quantitativ beschreibbar
- effektive **Potenzialöpfe** für Elektronen bzw. Löcher mit gebundenen Zuständen => räumliche Quantisierung



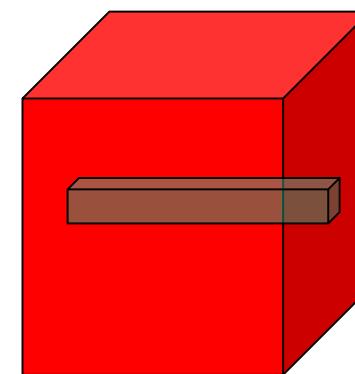
- Stufen der künstlich herabgesetzten Dimensionalität von Potenzialtöpfen in Heterostrukturen:
  - freie Bewegung in 3 Raumrichtungen:  
3-dimensional, Volumenkristall (engl. „bulk material“)
  - freie Bewegung in 2 Richtungen, 1 Richtung quantisiert:  
2-dimensional, Quantenfilm (engl. „quantum well“)
  - freie Bewegung in 1 Richtung, 2 Richtungen quantisiert:  
1-dimensional, Quantendraht (engl. „quantum wire“)
  - alle 3 Raumrichtungen quantisiert:  
0-dimensional, Quantenpunkt (engl. „quantum dot“)



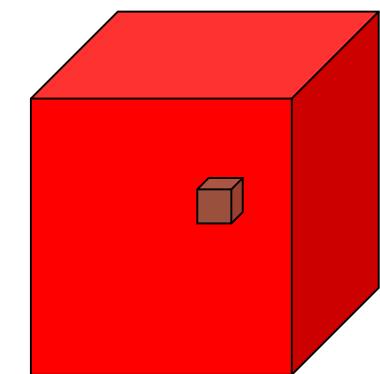
$$L_x, L_y, L_z \gg \lambda_e$$



$$L_z \approx \lambda_e$$

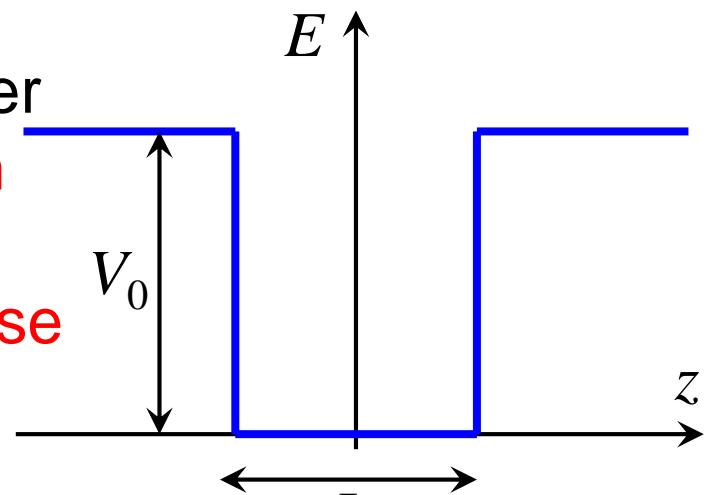


$$L_y, L_z \approx \lambda_e$$



$$L_x, L_y, L_z \approx \lambda_e$$

- Beispiel: quantitative Berechnung der Elektronen-Zustände in Quantenfilm der Dicke  $L$  mit Band-Offset  $V_0$  und parabolisch-isotroper effektiver Masse in Topf  $m_A^*$  und Barriere  $m_B^*$



- effektive Masse für Elektron:  $m^*(z) = m_A^*$  für  $|z| < L/2$   
 $m^*(z) = m_B^*$  für  $|z| > L/2$
- effektives Potenzial für Elektron:  $V(z)$
- effektive Schrödinger-Gleichung für Einhüllenden- bzw. Envelopen-Wellenfunktion  $C(\mathbf{R})$ :

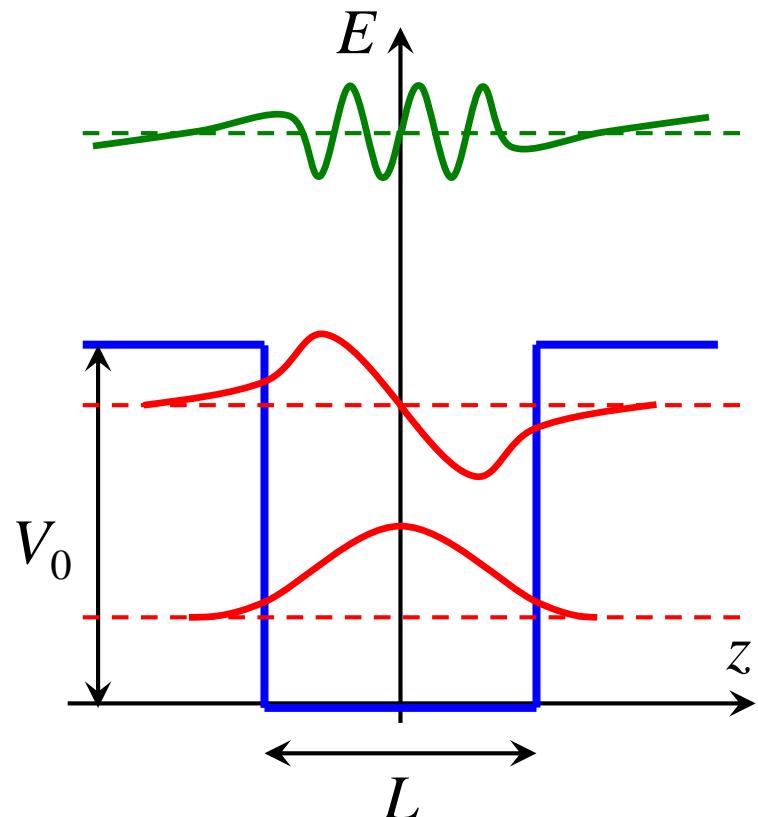
$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} + V(z) \right] C(\mathbf{R}) = E C(\mathbf{R})$$

- Separations-Ansatz:  $C(x, y, z) \propto \exp[i(k_x x + k_y y)] \cdot \psi(z)$
- freie Bewegung (ebene Welle!)  $\perp$  Quantisierungsrichtung  $z$

- damit: Schrödinger-Gleichung für Anteil der Eigenfunktion  $\psi(z)$  in Quantisierungsrichtung:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_x^2 + k_y^2 \right) + V(z) \right] \psi(z) = E \psi(z)$$

- analog zum Problem „Teilchen in eindimensionalem Kastenpotenzial“!
- 2 Arten von Lösungen für  $\psi(z)$ :
  - $E < V_0$ : gebundene Zustände in  $z$ -Richtung, stehende Welle für  $|z| < L/2$ , evaneszent für  $|z| > L/2$
  - $E > V_0$ : ungebundene (Kontinuums-)Zustände auch in  $z$ -Richtung

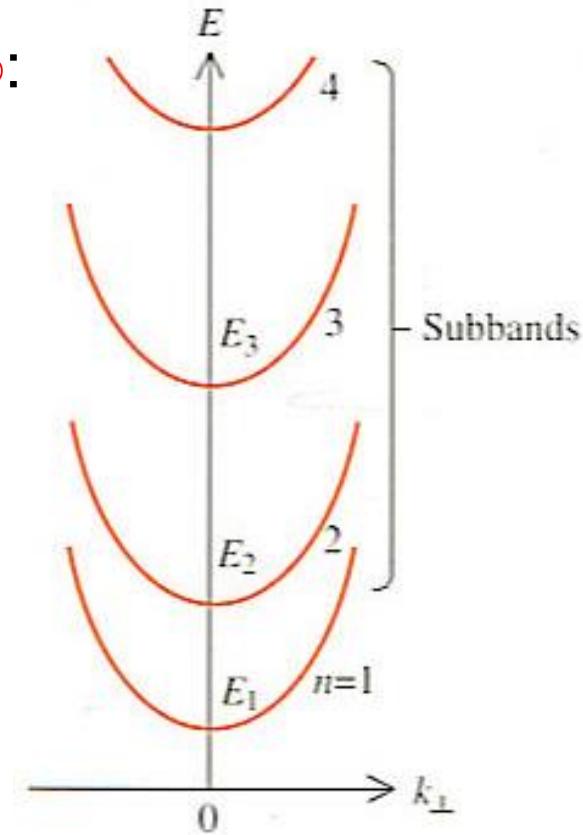
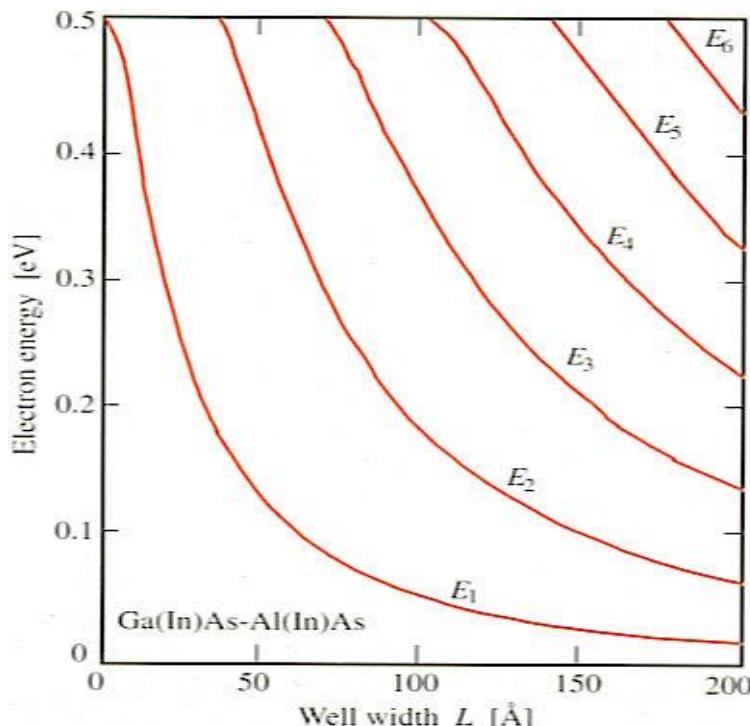


- Energiespektrum für Spezialfall  $V_0 \rightarrow \infty$ :

$$E_n(k_x, k_y) = \left( \frac{\hbar^2}{2m_A^*} \right) \left[ \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2 + k_x^2 + k_y^2 \right]$$

mit Subband-Quantenzahl  $n = 1, 2, 3, \dots$

- Ergebnis: **parabolische Subbänder**  
mit Energie-Minimum  $E_n(0,0)$  bei  $k_{\perp} = 0$



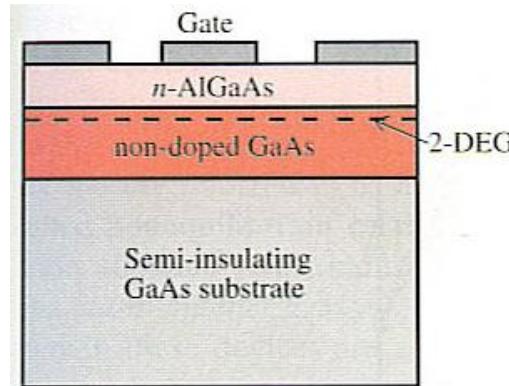
- Beispiel: **realistisch berechnete Quantisierungs-Energien  $E_n(0,0)$**  für  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ -Quantenfilm mit  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ -Barrieren gitterangepasst gewachsen auf InP-Substrat (Band-Offset im  $\Gamma$ -Tal Leitungsband  $V_0 = 0.5$  eV)<sup>10</sup>

# I.7.3: Transport in niedrigdimensionalen Halbleiter-Strukturen: Ausgewählte Aspekte

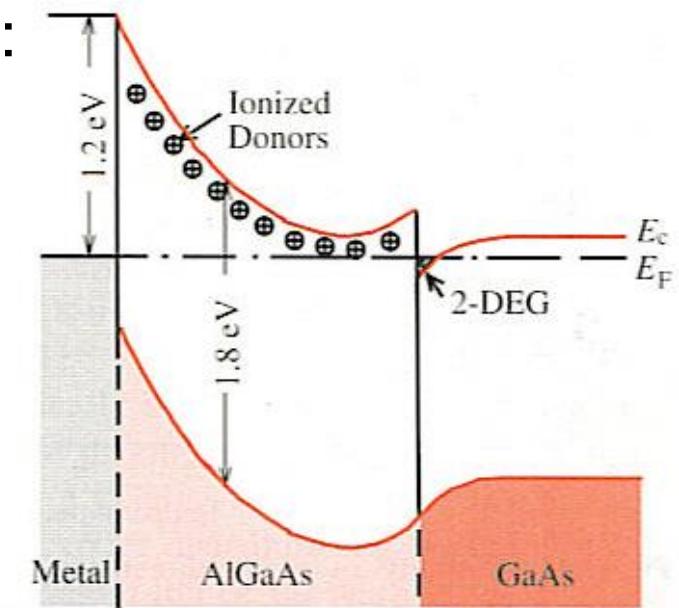
## I.7.3.1: Modulationsdotierung und 2-DEG

- hoch dotierter Volumen-Halbleiter: Coulomb-Streuung an ionisierten Störstellen limitiert Beweglichkeit (I.5.4)
- Abhilfe: Stromtransport durch niedrigdimensionalen Bereich (z.B. 2d-Quantenfilm) mit **flachen Störstellen in Barrieren: Modulationsdotierung** => 2-dim. Elektronengas (2-DEG)

- Schnitt modulations-dotierter Hetero-Übergang:

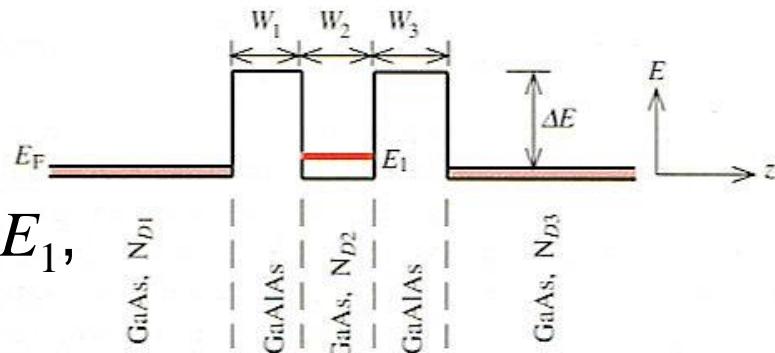


- Band-Diagramm: Bandverbiegung durch geladene Bereiche selbst-konsistent über Poisson- und Schrödinger-Gl. (Hartree-Fock...)

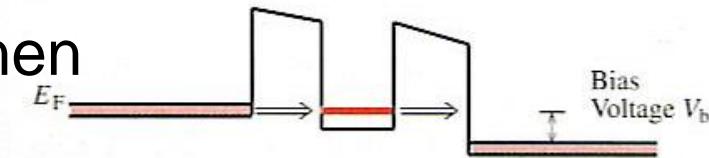


### I.7.3.2: Resonantes Tunneln

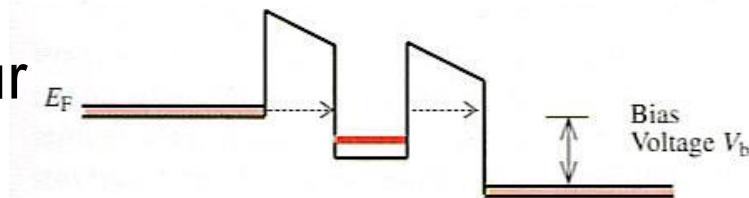
- leicht dotierter Quantenfilm mit einem gebundenen Subband  $E_1$ , zwei dünne Barrieren (undotiert), zwei hochdotierte Kontakte:



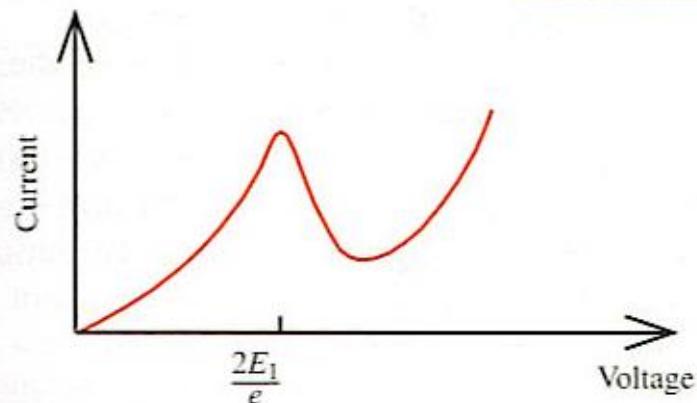
- resonantes Tunneln von Elektronen für Vorspannung  $V_b = 2E_1/e$



- Rückgang des Tunnelstromes für Vorspannung  $V_b > 2E_1/e$



- Strom-Spannungs-Kennlinie resonante Tunneldiode:



- negativer differenzieller Widerstand, wie bei Gunn-Effekt (I.5.5), nur schneller
- Anwendungen resonantes Tunneln:
  - Mikrowellen-Bauelemente (II.3)
  - Quanten-Kaskadenlaser (II.4)

### I.7.3.3: Quanten-Hall-Effekt

- Magneto-Transport und Hall-Effekt im Volumenmaterial: I.5.6
- jetzt: **quantenmechanisches Regime** mit  $\omega_c \tau \gg 1$
- Hamilton-Operator für **3-dim. Bewegung** im Magnetfeld:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left( \mathbf{p} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2$$

- Landau-Eichung für homogenes **B**-Feld in  $z$ -Richtung:  
 $\mathbf{A} = (0, \mathbf{B}x, 0)$
- Schrödinger-Gleichung:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left( \frac{\partial}{\partial y} + \frac{ieB}{\hbar c} x \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2m^* E}{\hbar^2} \right] \Psi(x, y, z) = 0$$

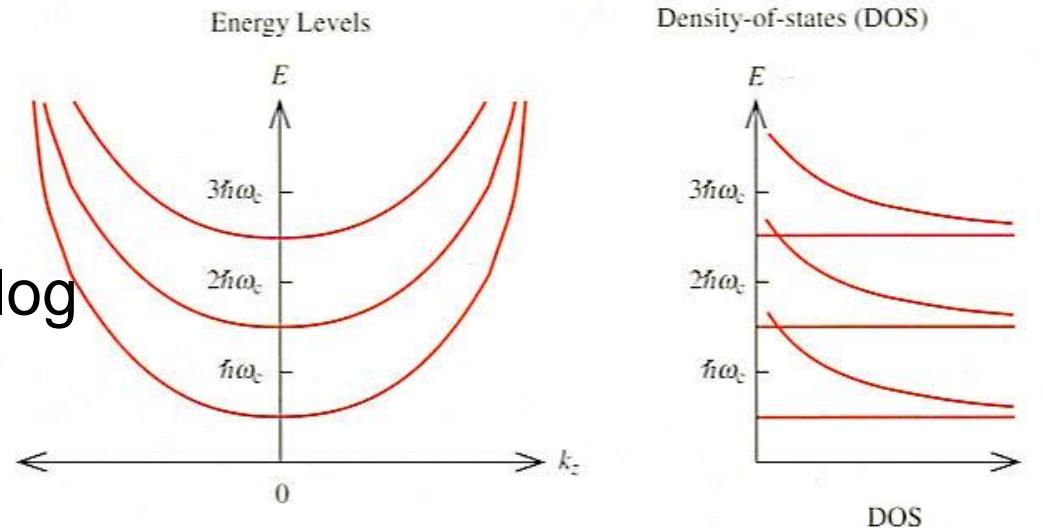
- freie Bewegung (ebene Welle) in  $z$ -Richtung:  $E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$

- $x$ - $y$ -Ebene: harmonischer Oszillator mit Energie-Eigenwerten

$$E' = \left(n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c \quad \text{mit } n = 1, 2, 3, \dots$$

und Zyklotron-Frequenz  $\omega_c = eB/(m^*c)$

- Landau-Niveaus im Volumen-Material:

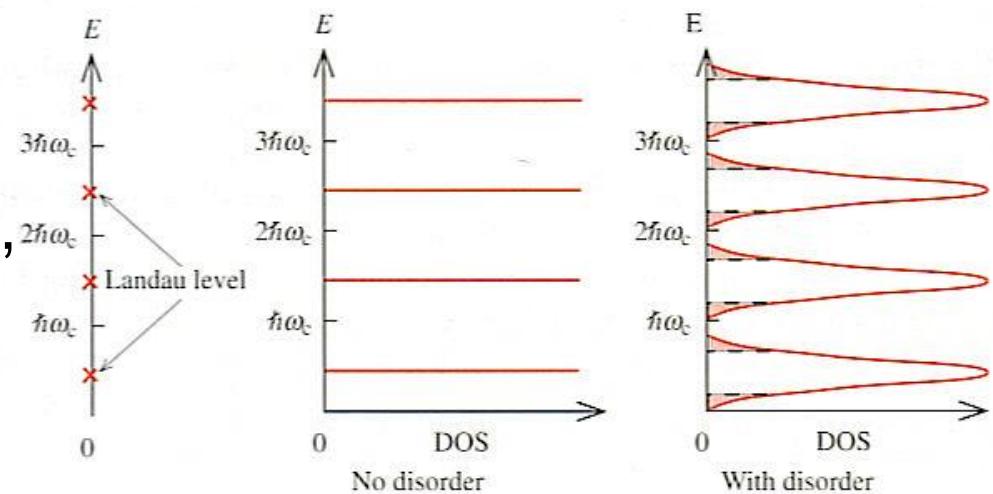


- Zustandsdichte analog zum Quantendraht (quasi 1-dim.)

- Landau-Niveaus im Quantenfilm  $\perp \mathbf{B}$ :

- vollständig quantisiert, kein Kontinuum

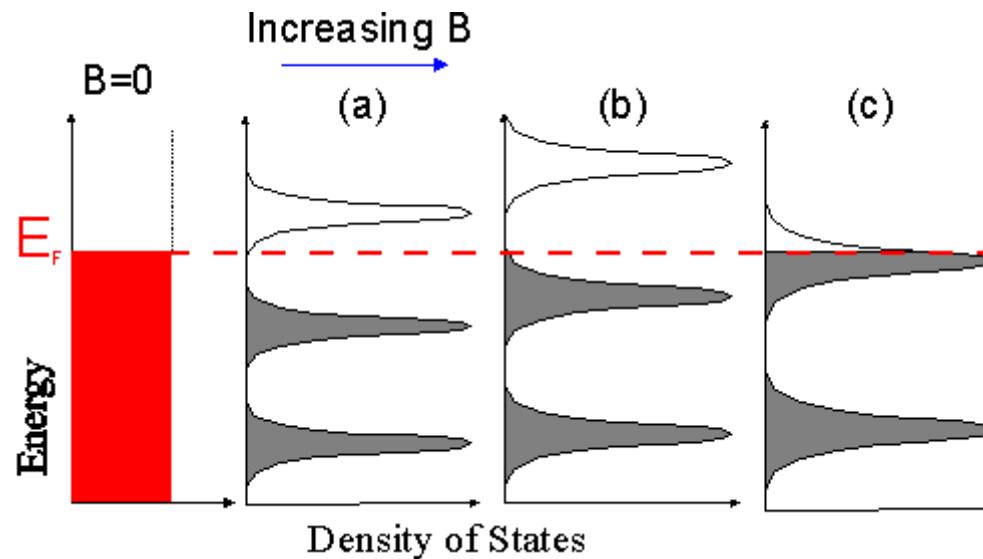
- Energielücken



- Anzahl  $\zeta$  der entarteten Zustände in jedem Landau-Niveau für 2-dim. Quantenfilm der Fläche  $A$  (ohne Herleitung):

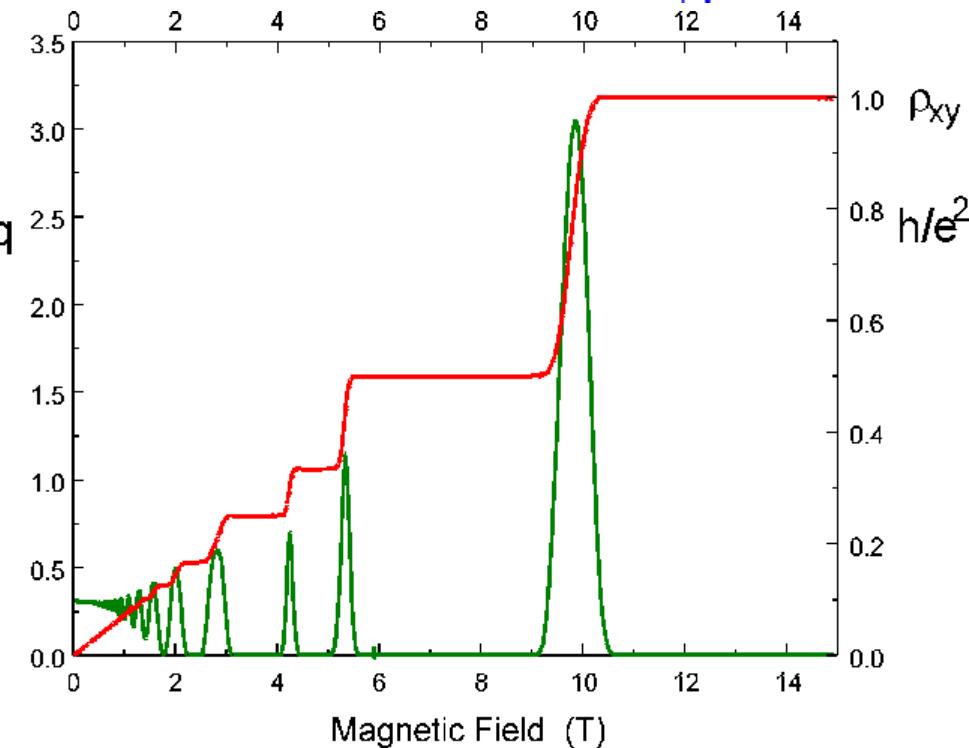
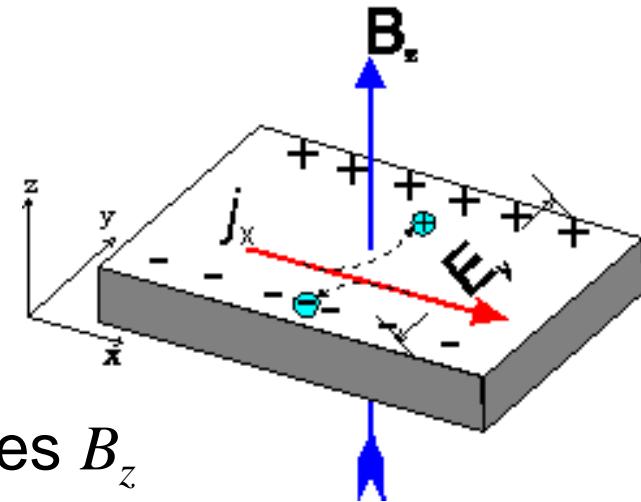
$$\zeta = \frac{1}{2\pi\hbar} m^* \omega_c A$$

- Besetzung der Landau-Niveaus für konstante Fermi-Energie  $E_F$  unter Variation des Magnetfeldes  $B$ :

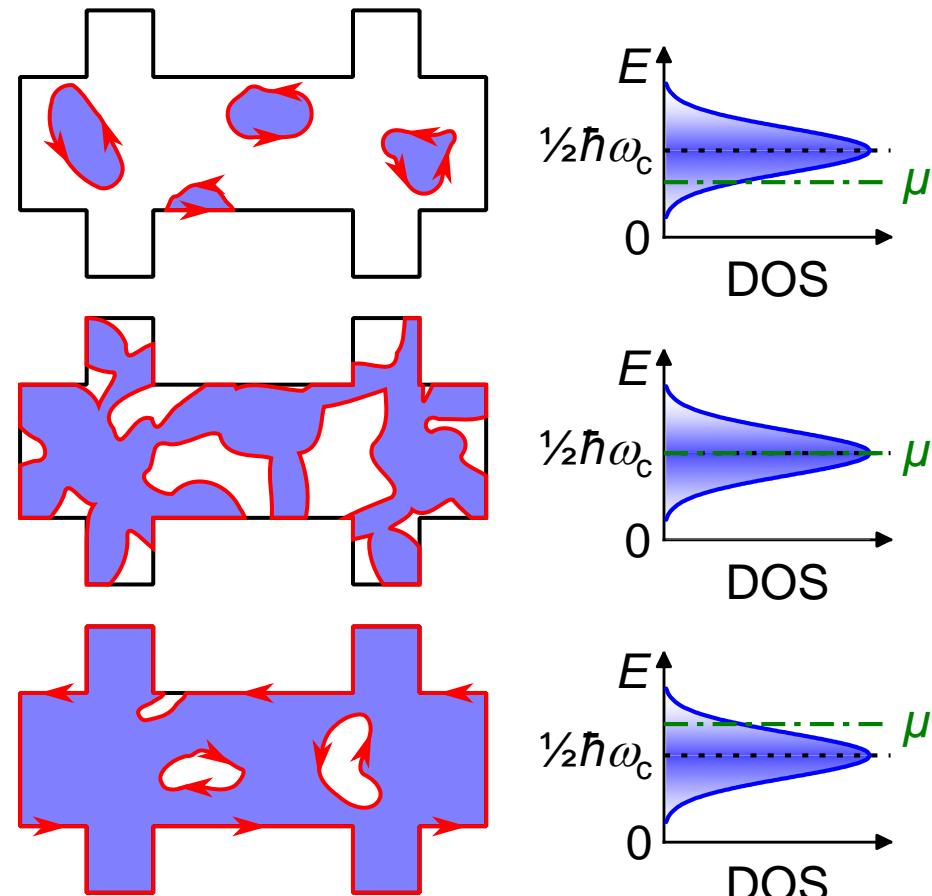


- Füllfaktor  $\nu$ : Fermi-Niveau liegt zwischen  $n = \nu$  und  $\nu+1$
- kleinster magnetischer Fluss, den Elektronenbahn einschließen kann: **Flussquantum**  $\Phi_0 = hc/e$

- das Experiment (von Klitzing, Pepper, Dorda, 1980): **Magneto-Transport an 2-dim. Elektronengas in  $x$ - $y$ -Ebene**
- konstanter Strom in  $x$ -Richtung
- Variation des homogenen Magnetfeldes  $B_z$
- **Messung der Magneto-Widerstände**  $\rho_{xx}$  und  $\rho_{xy}$
- Kreuzung von  $E_F$  und Landau-Niveaus: Maxima, Stufen und Plateaus
- Quantelung von  $\rho_{xy} = U_y/I_x$  in Einheiten von  $h/e^2$  mit  $\nu = 1, 2, 3, \dots$
- nur **fundamentale Naturkonstanten**, Realisierung extrem exakter Widerstands-Normale, Genauigkeit:  $10^{-8}$



- Grund für Auftreten von Plateaus in  $\rho_{xy}$  bei  $h/e^2$ : Landau-Niveaus durch **Unordnung** verbreitert
- Zustände an unteren energetischen Rändern der Landau-Niveaus: **isierte Bereiche** → **kein Beitrag**
- **Perkolations-Übergang** mit steigendem  $\mu$ : Transport über **eindimensionale Randkanäle** → **Leitwert-Quantisierung** mit  $\sigma_{xy} = e^2/h$ ,
- Füllfaktor  $\nu$ : Anzahl der **besetzten Landau-Niveaus** = Anzahl der **offenen Randkanäle** für Quantentransport!
- merke: Quanten-Hall-Effekt erfordert kohärenten Transport mit  $\omega_c \gg 1/\tau \rightarrow$  hohes Magnetfeld, tiefe Temperatur



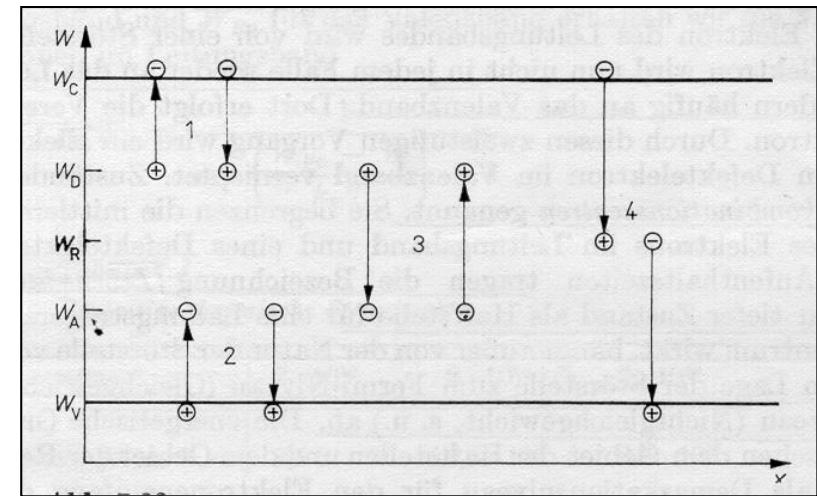
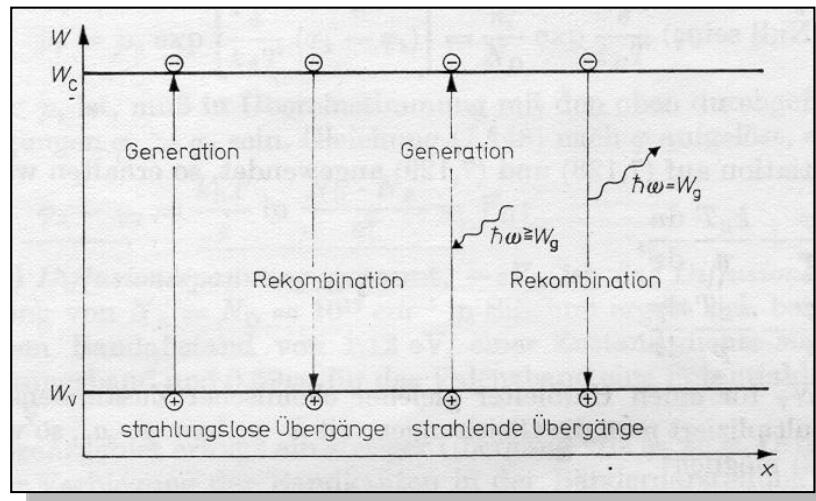
- **ganzzahliger (engl.: „integer“) Quanten-Hall-Effekt:**  
gefunden in 2-DEG unter Gate eines MOS-FET aus p-Si
- Erklärung muss **Unordnung** in der Potenziallandschaft unter der Gate-Elektrode mit einbeziehen
- Elektron-Elektron-Wechselwirkung unwichtig
- Proben mit wesentlich höherer Elektronen-Beweglichkeit:  
2-DEG in GaAs/AlGaAs-Quantenfilmen (n-dotiert)
- Experiment von Störmer, Tsui und Gossard (1982):  
Entdeckung zusätzlicher Quanten-Hall-Plateaus bei gebrochenzahligen Füllfaktoren!?
- **gebrochenzahliger (engl.: „fractional“) Quanten-Hall-Effekt**
- Quasiteilchen mit gebrochenzahliger (1/3- etc.) Ladung  
„composite fermions“: skyrmions, topological insulators etc.)
- Vielteilchen-Effekte durch Coulomb-Wechselwirkung,  
Elektronen-Spin... => Theorie von Laughlin (1983)

# I.8 Nichtgleichgewicht

- thermisches Gleichgewicht: Besetzungszahlen  $n_{ph}$  und Verteilungsfunktionen  $f_e, f_h$  der Elementaranregungen des Halbleiters werden beschrieben durch
  - Bose-Einstein-Verteilung (Phonenen)
  - Fermi-Dirac-Verteilung (Elektronen, Löcher)
- exakt festgelegt durch Temperatur  $T$  und chemisches Potential („Fermi-Energie“)  $\mu$  bzw.  $E_F$
- jetzt: Phänomene **abseits des thermischen Gleichgewichts**
  - Generation und Rekombination von Ladungsträgern
  - Drift- und Diffusionsströme
- grundlegende Gleichungen für die Operation von (quasi-klassischen) Halbleiter-Bauelementen

# I.8.1: Generation und Rekombination

- Unterscheidung I: strahlend und nichtstrahlend
  - strahlend: Absorption bzw. Emission von Photonen
  - strahlungslos: Multi-Phonon-Prozesse, Auger-Prozesse etc.



- Unterscheidung II: intrinsisch und extrinsisch
  - intrinsisch: Prozess existiert im hochreinen Halbleiterkristall
  - extrinsisch: Prozess benötigt Beitrag von Störstellen, Fehlstellen, Oberflächen (Störstellen-Einfang, „Trapping“, Oberflächen-Rekombination etc.)

- intrinsischer Halbleiter im thermischen Gleichgewicht:  
Konzentrationen für Elektronen und Löcher identisch

$$n_0 = p_0 = n_i$$

- **intrinsische Trägerdichte**  $n_i$  ist Funktion von
  - Temperatur
  - Bandlückenabstand
  - Zustandsdichten in Valenz- und Leitungsband
- für dotierte Halbleiter gilt im thermischen Gleichgewicht

$$p \cdot n = n_i^2 \quad (\text{Massen-Wirkungsgesetz})$$

- Beispiel n-dotierter Bereich:  $p_{n0} \cdot n_{n0} = n_i^2$ 
  - $p_{n0}$  : Dichte der **Minoritäts-Ladungsträger** (Löcher)
  - $n_{n0}$  : Dichte der **Majoritäts-Ladungsträger** (Elektronen)
- Rollentausch Elektronen und Löcher im p-dotierten Material

- Nichtgleichgewicht: endliche **Ladungsträger-Lebensdauer** für Überschuss-Ladungsträger
- im thermischen Gleichgewicht ist die Generationsrate  $G_{th}$  gleich der Rekombinationsrate  $R_{th}$
- allgemein gilt für bimolekularen Rekombinationsprozess:

$$R = \beta p n$$

und damit  $G_{th} = R_{th} = \beta n_{n0} p_{n0}$

- jetzt: **Nichtgleichgewicht durch externe Generation bzw. Injektion von Elektronen und/oder Löchern mit Rate  $G_L$**
- $G = G_L + G_{th}$       und       $R = \beta n_n p_n = \beta(n_{n0} + \Delta n)(p_{n0} + \Delta p)$
- Annahme: **Ladungs-Neutralität** (z. B. optische Generation)

$$\Delta n = \Delta p$$



- damit:  $\frac{dp_n}{dt} = G - R = G_L + G_{th} - R$
- im stationären Fall ist  $\frac{dp_n}{dt} = 0$
- Relaxationsrate  $U \equiv R - G_{th} = G_L$   

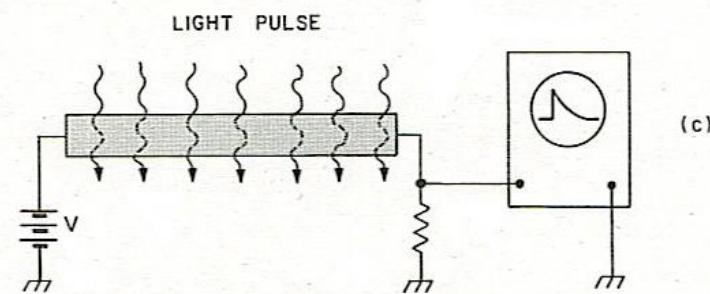
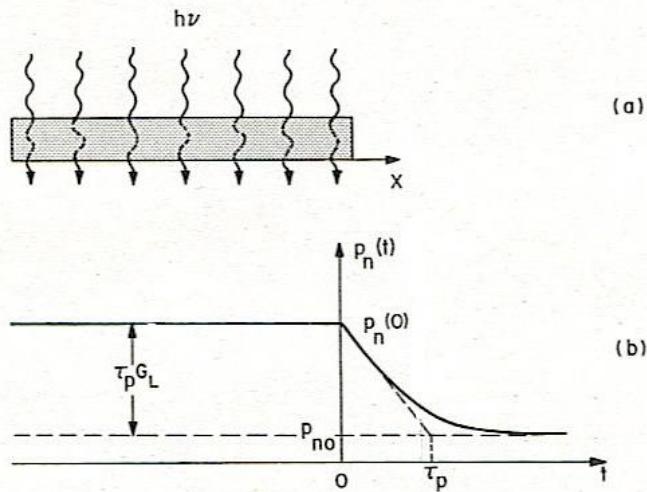
$$U = \beta(n_{n0} + p_{n0} + \Delta p) \Delta p$$
- Annahme: schwache Injektion:  $\Delta p, p_{n0} \ll n_{n0}$
- daraus folgt:  $U \cong \beta n_{n0} \Delta p = \frac{p_n - p_{n0}}{\frac{1}{\beta n_{n0}}} = \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p}$

mit der Minoritäts-Ladungsträger-Lebensdauer

$$\tau_p \equiv \frac{1}{\beta n_{n0}}$$



- Beispiel: plötzliches Ausschalten einer Lichtquelle



stationäres Limit:

$$G_L = U = \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p}$$

$$p_n = p_{n0} + \tau_p G_L$$

Lösung:  $p_n(t) = p_{n0} + \tau_p G_L e^{-t/\tau_p}$

Randbedingungen:

$$p_n(t=0) = p_{n0} + \tau_p G_L$$

$$p_n(t \rightarrow \infty) = p_{n0}$$

- Anwendung: Messung der Ladungsträger-Lebensdauer
- direktere Möglichkeit: gepulste Anregung...

## I.8.2: Drift- und Diffusions-Ströme

- **Drift**stromdichte in externem elektrischen Feld  $E$  (siehe I.5.2):

$$J_{Drift} = J_{n,Drift} + J_{p,Drift} = (-en\mu_n + ep\mu_p) \cdot E = \sigma \cdot E$$

- **Diffusion**: bei räumlicher Variation der Ladungsträgerdichte bewegen sich diese aus Bereichen mit hoher Konzentration in die Regionen mit geringerer Konzentration, entlang Konzentrations-Gradient => Diffusionsstrom  $J_{Diffusion}$
- Herleitung Diffusionsstrom für Elektronen (eindimensional):
- betrachte Anzahl der Elektronen, die Ebene bei  $x = 0$  pro Zeit- und Flächeneinheit durchfliegen
- Elektronen führen zufällige thermische Bewegungen aus mit thermischer Geschwindigkeit  $v_{th}$ , Impuls-Relaxationszeit  $\tau_c$  und mittlerer freier Weglänge  $l$

$$l = v_{th} \cdot \tau_c$$

- Flussrate  $F = -\nu_{th} l \frac{dn}{dx} \equiv -D_n \frac{dn}{dx}$   
mit der **Diffusionskonstante der Elektronen**  $D_n$
- Diffusionsstromdichte für Elektronen und Löcher:

$$J_{Diffusion} = -eF_n + eF_p = e \cdot \left( D_n \cdot \frac{dn}{dx} - D_p \cdot \frac{dp}{dx} \right)$$

- es gilt  $\frac{1}{2} m_n v_{th}^2 = \frac{1}{2} k_B T$

- mit  $D = \nu_{th} l = v_{th}^2 \tau_c$  und  $\mu = \frac{e \tau_c}{m_n}$

folgt die **Einstein-Relation**

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \left[ \frac{k_B T}{e} \right]$$

- Stromdichte-Gleichungen für Drift und Diffusion:

$$J_p = e\mu_p p E - e D_p \frac{dp}{dx}$$

$$J_n = e\mu_n n E + e D_n \frac{dn}{dx}$$

$$J_{total} = J_n + J_p$$

- lokales elektrisches Feld  $E$  in Halbleiter-Struktur wird bestimmt über die Poisson-Gleichung:

$$\nabla E = \frac{\rho_s}{\epsilon_s} = \frac{e}{\epsilon_s} \left( p - n + N_D^+ - N_A^- \right)$$

## I.8.3: Die Kontinuitätsgleichung

- Einfluss von Drift, Diffusion, Generation und Rekombination auf die **lokale Dichte  $n$  und  $p$  der Ladungsträger**
- eindimensionale Form für Elektronen und Löcher:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial J_n}{\partial x} + (G_n - R_n)$$

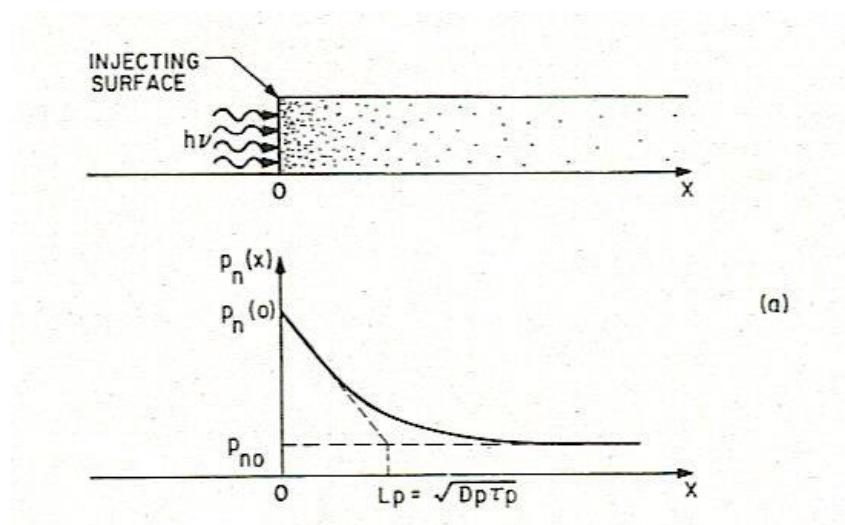
$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial J_p}{\partial x} + (G_p - R_p)$$

- mit den Rekombinations- und Stromdichte-Gleichungen aus I.8.1 und I.8.2 ergibt sich für Minoritäts-Ladungsträger:

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = n_p \mu_n \frac{\partial E}{\partial x} + \mu_n E \frac{\partial n_p}{\partial x} + D_n \frac{\partial^2 n_p}{\partial x^2} + G_n - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n}$$

$$\frac{\partial p_n}{\partial t} = -p_n \mu_p \frac{\partial E}{\partial x} - \mu_p E \frac{\partial p_n}{\partial x} + D_p \frac{\partial^2 p_n}{\partial x^2} + G_p - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p}$$

- **Beispiel 1:** stationäre Injektion von einer Seite



- Randbedingungen:  $p_n(x=0)=p_n(0)=\text{const.}$   
 $p_n(x \rightarrow \infty)=p_{n0}$
- Lösung:  $p_n(x)=p_{n0} + [p_n(0)-p_{n0}]e^{-x/L_p}$   
 $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$  **Diffusionslänge**

- **Beispiel 2:** Haynes-Shockley-Experiment von 1951

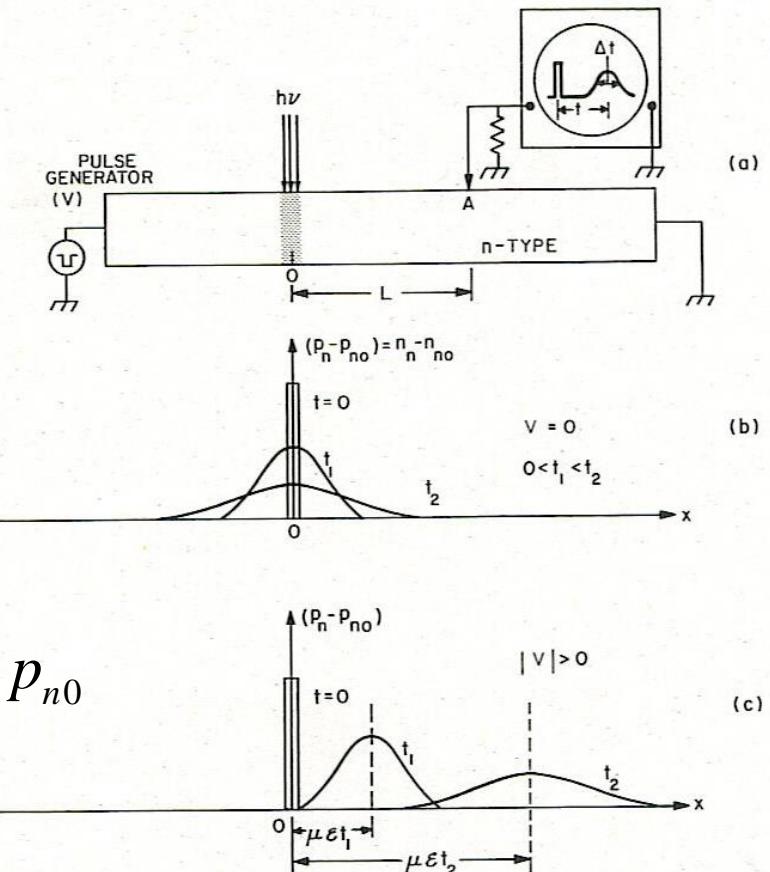
- Diffusion ( $E = 0$ ) und Drift ( $E \neq 0$ ) von Minoritäts-Ladungsträgern

- lokale Anregung von Elektron-Loch-Paaren durch Lichtimpuls bei  $x = 0$  und  $t = 0$

- Lösung für  $E = 0$ :

$$p_n(x,t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi D_p t}} \exp \left[ -\frac{x^2}{4D_p t} - \frac{t}{\tau_p} \right] + p_{n0}$$

- Lösung für  $E \neq 0$ :  
ersetze  $x$  durch  $x - \mu_p E t$



# Teil II: Halbleiter-Bauelemente

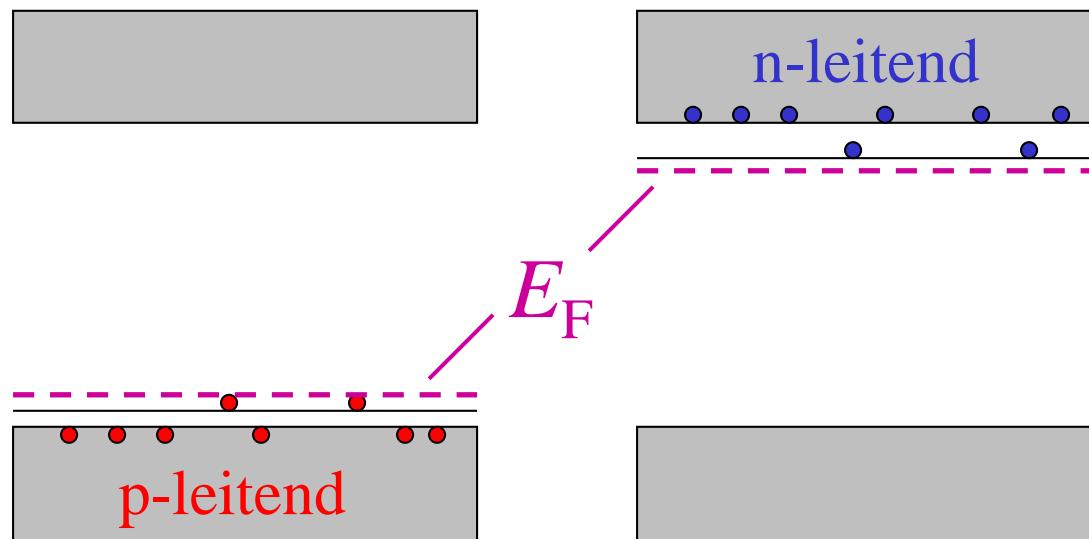
- Literatur:
  - S. M. Sze „Physics of Semiconductor Devices“, Verlag J. Wiley & Sons
  - K. Seeger „Semiconductor Physics“, Springer-Verlag

# II.1 Bipolare Bauelemente

## II.1.1: p-n-Diode

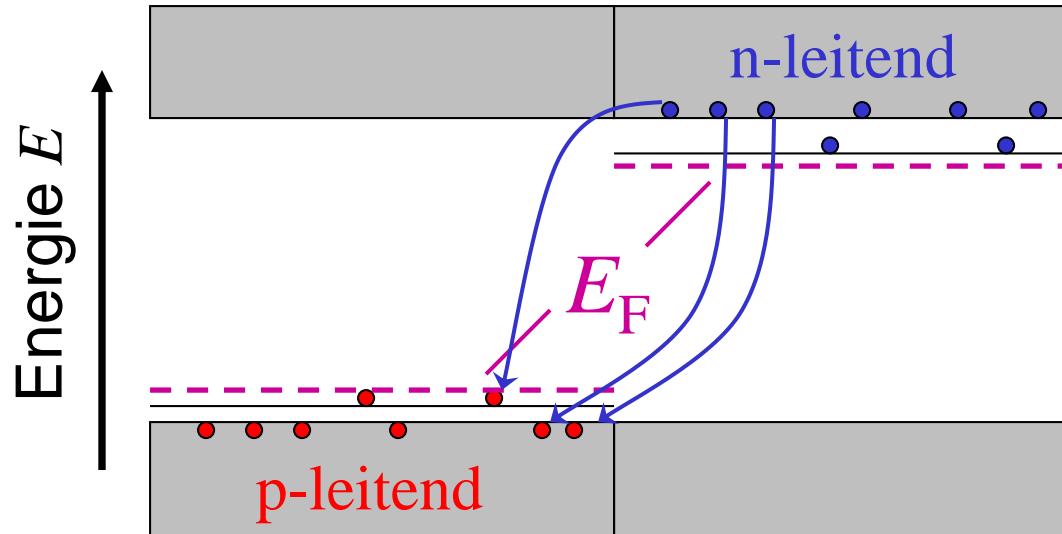
### II.1.1.1: p-n-Übergang: Qualitative Einführung

- Was passiert, wenn ein **p**- und ein **n**-leitender bzw. dotierter Bereich in einer Struktur aneinander grenzen?



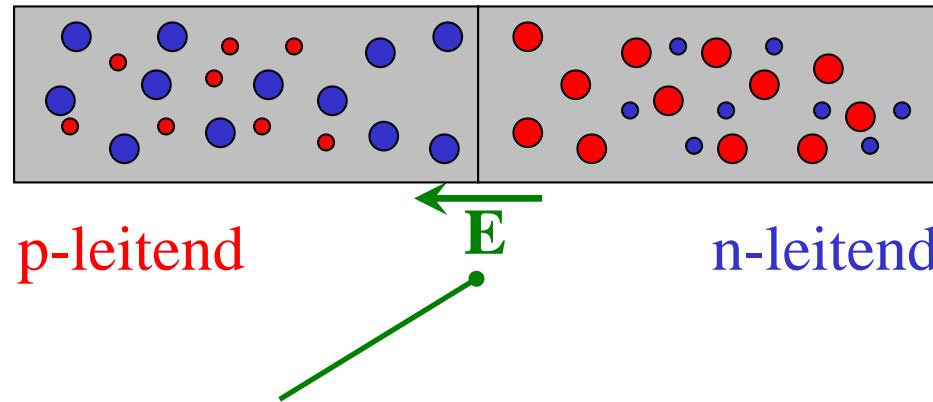
- Fermi-Niveau im **p**-Halbleiter nahe Valenzband-Oberkante und im **n**-Halbleiter nahe Leitungsband-Unterkante

- Wir bringen nun den **p**- und den **n**-leitenden Bereich in elektrischen Kontakt miteinander (Gedankenexperiment!):



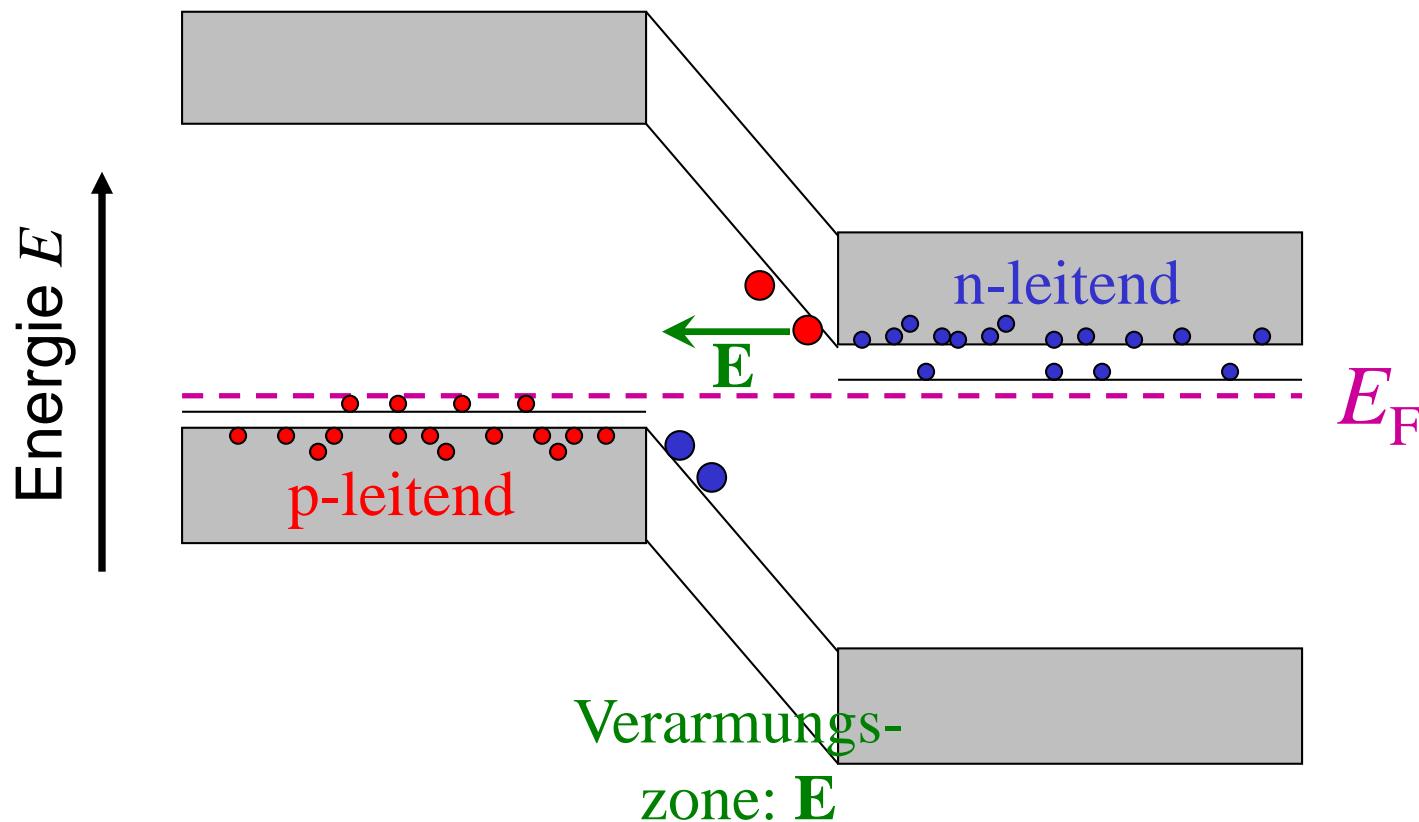
- Fermi-Niveaus sind unterschiedlich:  
thermisches **Nichtgleichgewicht!**
- Elektronen aus dem **n**-Bereich diffundieren in den **p**-dotierten Bereich und rekombinieren mit den dort vorhandenen Löchern => energetisch günstigerer Zustand

- räumliches Bild: Elektronen wandern vom n- in den p-Bereich, hinterlassen **positiv geladene Ionenrümpfe der Donatoratome** und laden die **Akzeptoratome negativ** auf:



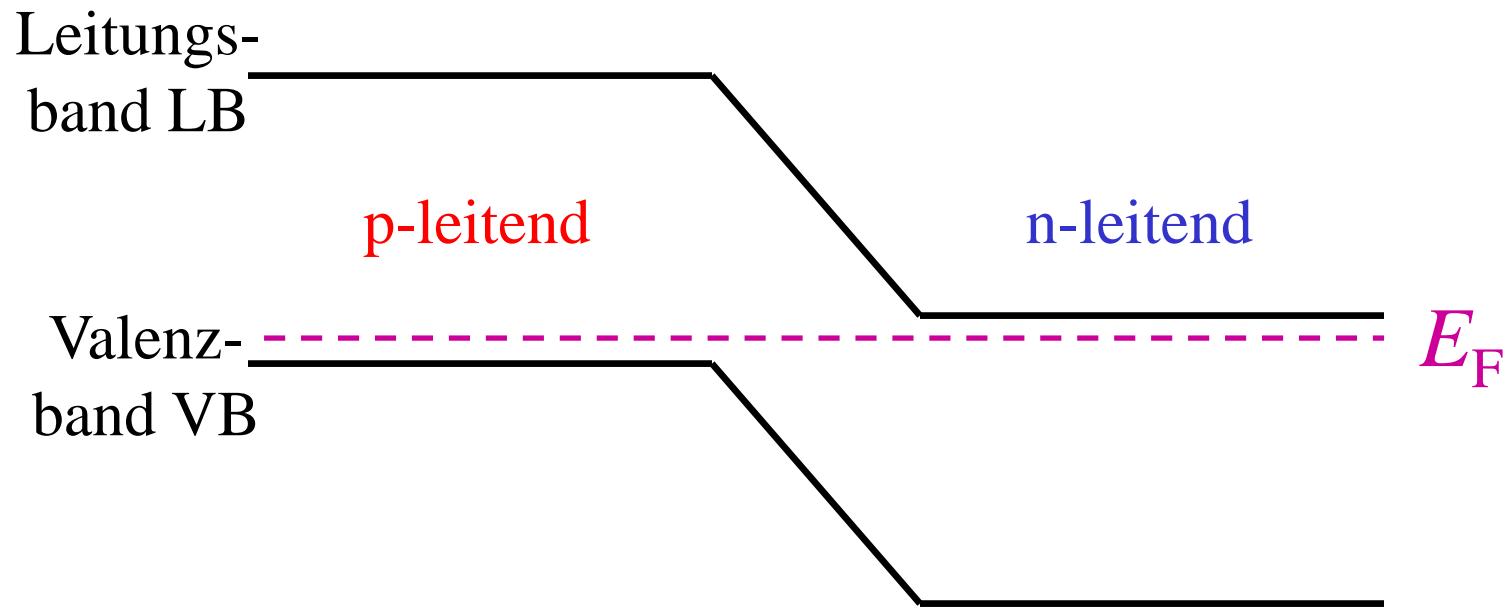
- Bildung einer **Raumladungszone**, in der nur **ionisierte Störstellen** vorhanden sind
- in der Raumladungszone: keine freien Ladungsträger (**„Verarmungszone“**)
- ionisierte Störstellen: **elektrisches Feld E**
- Coulomb-Kraft  $qE$  verhindert weitere Diffusion von Trägern

- elektrisches Feld **E** ist gleichbedeutend mit effektiver Potentialdifferenz zwischen **n**- und **p**-dotiertem Bereich:



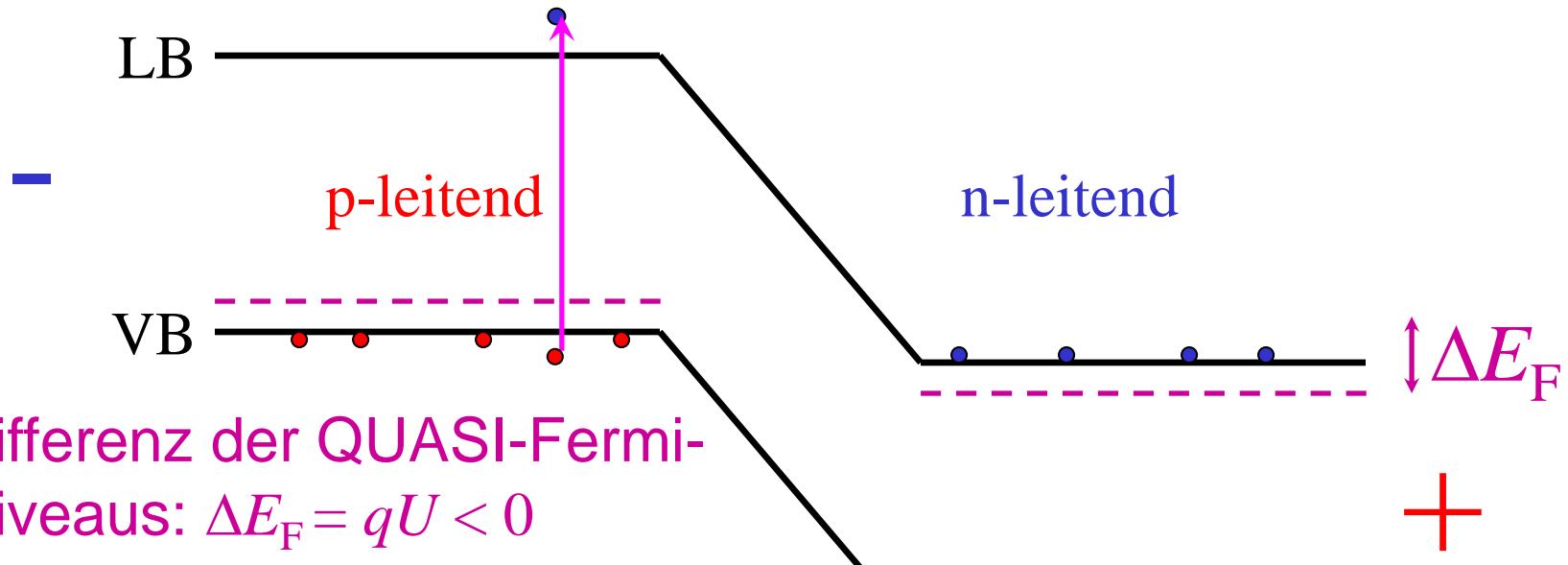
- Fermi-Niveaus sind ausgeglichen: thermisches **Gleichgewicht**
- Verarmungszone: typische Breite etwa 5 nm bis  $\mu\text{m}$
- Potential-Differenz: etwa  $E_{\text{gap}}$

- p-n-Übergang: Reaktion auf äußere Spannung  $U$
- zunächst ohne Vorspannung,  $U = 0$ :



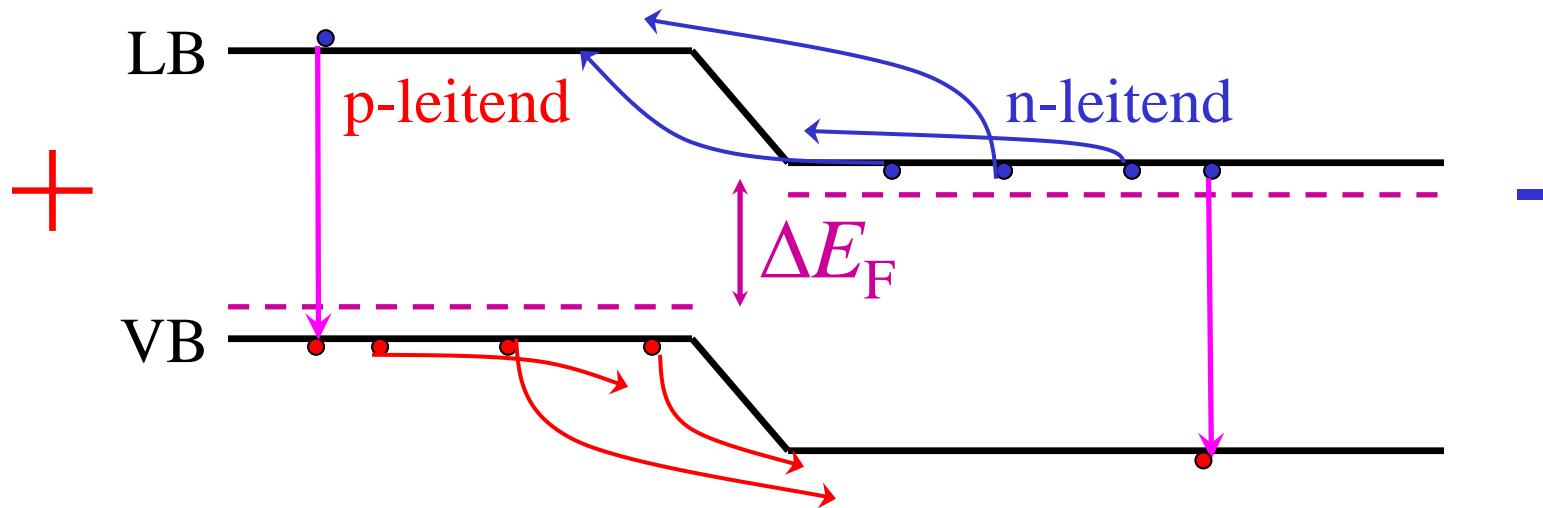
- Fermi-Energie über gesamte Struktur **konstant**
- Struktur befindet sich im **thermischen Gleichgewicht**: es fließt kein (Netto-)Strom  $I$

- jetzt  $U < 0$ : Raumladungszone dehnt sich aus
- Barrieren für Elektronen und Löcher nehmen zu



- Differenz der QUASI-Fermi-Niveaus:  $\Delta E_F = qU < 0$
- **thermisch** über Bandlücke  $E_g$  generierte Träger diffundieren
- → geringer Interband-Generationsstrom  $J^{gen}$ , unabhängig von  $U$  für Diffusionslänge  $L \gg$  Breite Raumladungszone  $W$
- Sperr-Richtung des p-n-Überganges bzw. der Diode!

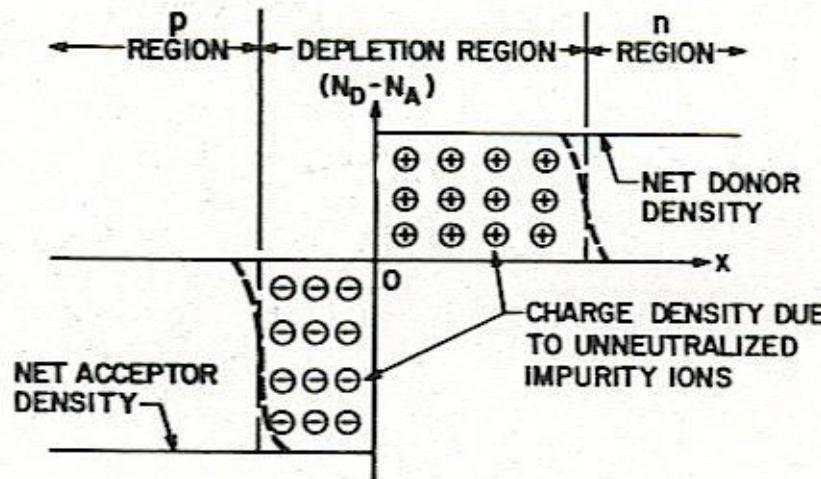
- jetzt  $U > 0$ : Ausdehnung der Raumladungszone schrumpft
- Barrieren für Elektronen und Löcher nehmen ab



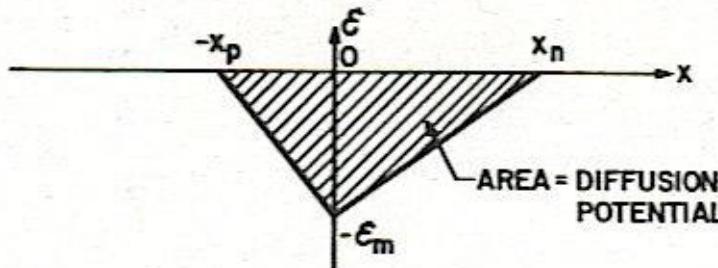
- Potenzialdifferenz der QUASI-Fermi-Niveaus:  $\Delta E_F = qU > 0$
- bei endlichen Temperaturen  $T$ : Elektronen und Löcher können Barriere thermisch überwinden!
- zusätzlicher Intraband-Rekombinationsstrom  $J^{rec} \propto e^{qU/kT}$
- **Rekombination** Minoritätsträger abseits  $W \rightarrow$  Majoritätsstrom
- **Durchlass-Richtung** der Diode!

## II.1.1.2: Quantitative Beschreibung des p-n-Übergangs

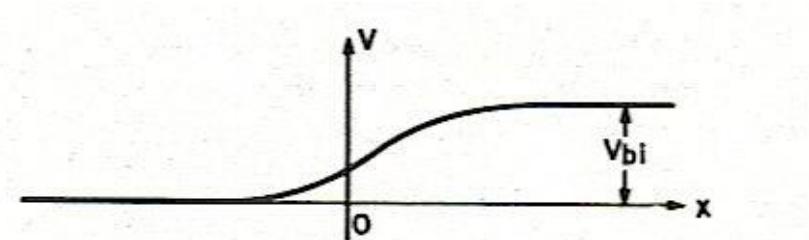
- Annahme: **abrupter p-n-Übergang**, Dotierdichten  $N_A$  und  $N_D$
- räumliche Verteilung der **Raumladungen** ohne Vorspannung:



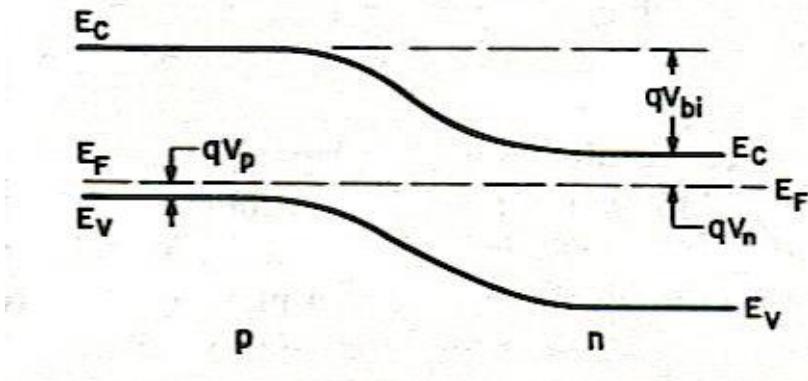
- elektrisches Feld in Raumladungszone (Breite  $W = x_n + x_p$ ):



- Verlauf des **elektrostatischen Potenzials**  $V$  ohne Vorspannung, mit dem **eingebauten Potenzial**  $V_{bi}$ :



- Energiediagramm der **Leitungs- und Valenzband-Extrema**:



- im **thermischen Gleichgewicht** gilt:  $\frac{\partial E_F}{\partial x} = 0$
- eingebautes Potenzial  $qV_{bi} = E_g - (qV_n + qV_p)$

- Poisson-Gleichung für abrupten Übergang:

$$-\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \approx \frac{q}{\varepsilon_s} N_D \quad \text{für } 0 < x < x_n$$

$$-\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \approx \frac{q}{\varepsilon_s} N_A \quad \text{für } -x_p < x < 0$$

- Breite  $W$  der Raumladungszone durch Integration:

$$W \approx \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{q} \frac{N_A + N_D}{N_A N_D} V_{bi}}$$

## II.1.1.3: Ideale Strom-Spannungs-Kennlinie

- **Definition** der **Quasi-Ferminiveaus** für Elektronen  $\phi_n$  und für Löcher  $\phi_p$  über die Ladungsträger-Dichten  $n$  und  $p$ , die intrinsische Trägerdichte  $n_i$  und das intrinsische Fermi-Niveau  $\psi$  (parallel zu den Bandkanten in der Bandlücke):

$$n \equiv n_i \exp\left[\frac{q(\psi - \phi_n)}{kT}\right] \quad p \equiv n_i \exp\left[\frac{q(\phi_p - \psi)}{kT}\right]$$

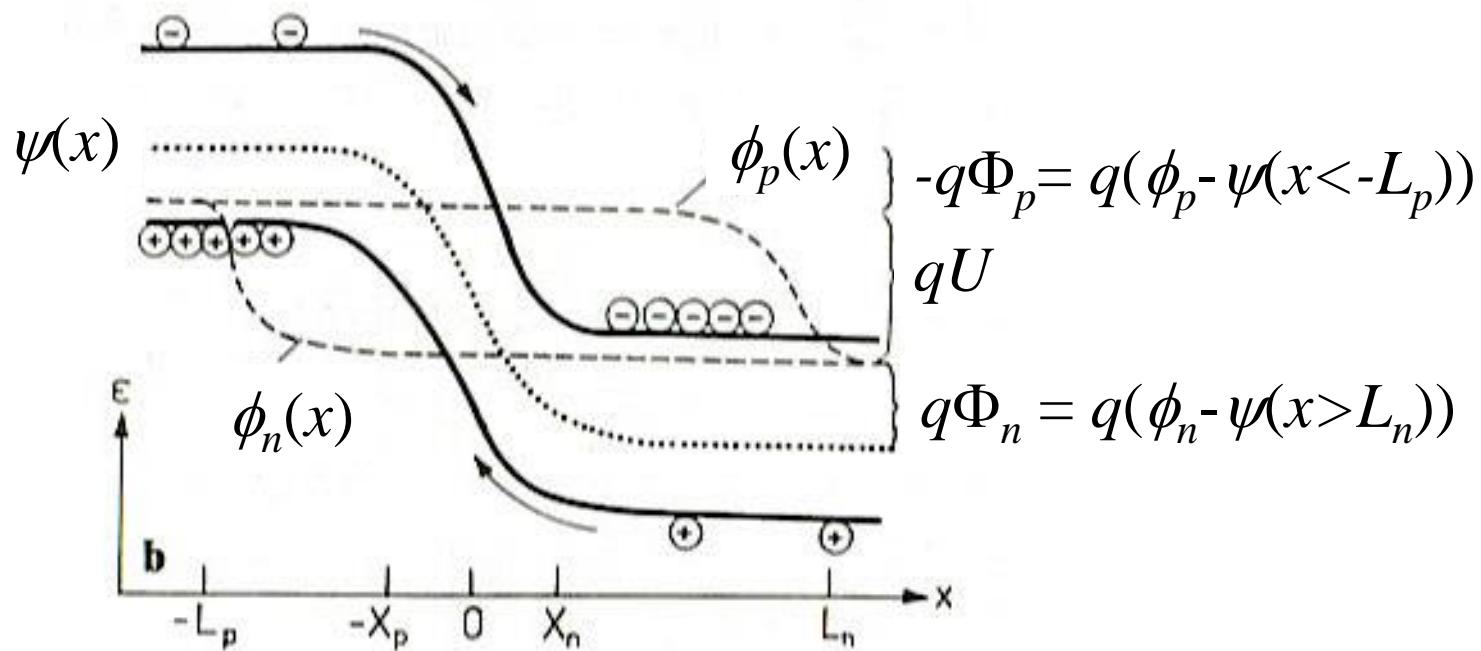
- damit **Stromdichten** der Elektronen  $\mathbf{J}_n$  und Löcher  $\mathbf{J}_p$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_n &= -q\mu_n \left( n\mathbf{E} + \frac{kT}{q} \nabla n \right) = \\ &= -q\mu_n \left( n(-\nabla \psi) + \frac{kT}{q} \left( \frac{qn}{kT} \right) (\nabla \psi - \nabla \phi_n) \right) = -q\mu_n n \nabla \phi_n \end{aligned}$$

$$\mathbf{J}_p = -q\mu_p p \nabla \phi_p$$



- Beispiel: Quasi-Fermi-Niveaus  $\phi_n$  und  $\phi_p$ , sowie intrinsisches Fermi-Niveau  $\psi$  für rückwärts gepolten p-n-Übergang



- elektrostatische Potenzialdifferenz über Verarmungszone:
$$U + V_{bi} = U + \Phi_p - \Phi_n$$
- verallgemeinertes Massen-Wirkungsgesetz (für NGGW):

$$pn = n_i^2 \exp\left[ \frac{q(\phi_p - \phi_n)}{kT} \right]$$



- daraus Randbedingung: (Minoritäts-)Löcherdichte  $p_n(x = x_n)$  an der **Begrenzungsschicht der Verarmungszone** auf n-Seite

$$p_n(x_n) = p_{n0} \exp\left[\frac{qU}{kT}\right] \quad \text{mit } p_{n0}: \text{Löcherdichte in der n-Zone im Gleichgewicht}$$

- Kontinuitätsgleichung** unter der Voraussetzung geringer Injektion ( $p_n \ll n_n \approx n_{n0}$ ):

$$-\frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} - \mu_p E \frac{\partial p_n}{\partial x} + D_p \frac{\partial^2 p_n}{\partial x^2} = 0 \quad \tau_p: \text{Rekombinations-Lebensdauer der Minoritäts-Löcher}$$

- neutrale Zonen:** kein elektrisches Feld  $E$

$$\frac{\partial^2 p_n}{\partial x^2} - \frac{p_n - p_{n0}}{D_p \tau_p} = 0$$

- Lösung:  $p_n - p_{n0} = p_{n0} \left( e^{qU/kT} - 1 \right) e^{-(x-x_n)/L_p}$

mit der **Debye-Länge** der Minoritäts-Löcher  $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$

- für  $L_{p,n} \gg W$ : keine Rekombination über Verarmungszone!



- Lochstromdichte  $J_p$  bei  $x = x_n$  (Elektronenstrom analog):

$$J_p = -q D_p \frac{\partial p_n}{\partial x} \Big|_{x=x_n} = \frac{q D_p p_{n0}}{L_p} \left( e^{\frac{qU}{kT}} - 1 \right)$$

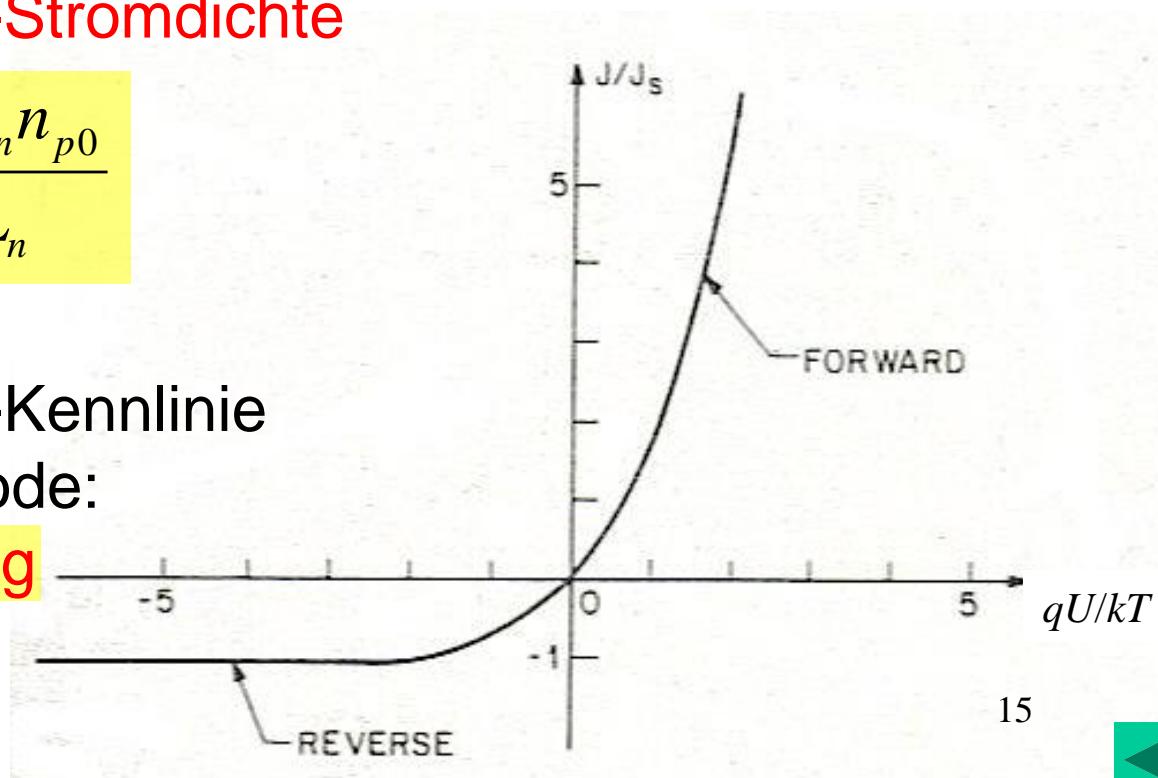
- Gesamtstromdichte

$$J = J_p + J_n = J_s \left( e^{\frac{qU}{kT}} - 1 \right)$$

- mit der Sättigungs-Stromdichte

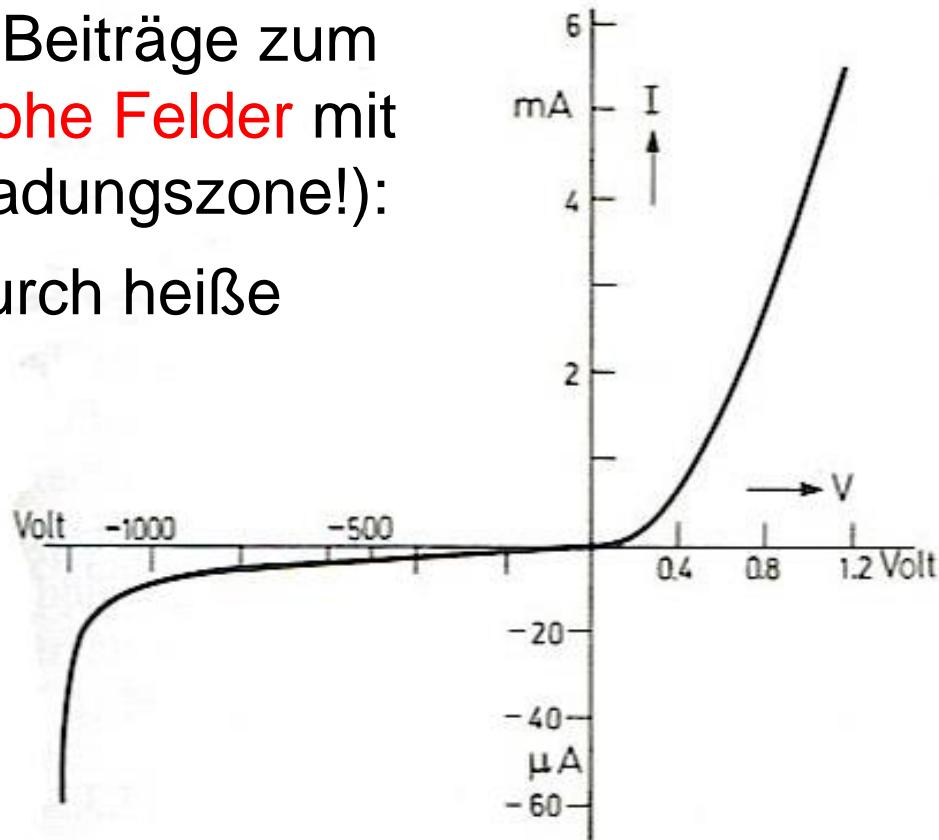
$$J_s = \frac{q D_p p_{n0}}{L_p} + \frac{q D_n n_{p0}}{L_n}$$

- Strom-Spannungs-Kennlinie der idealen p-n-Diode:  
**Shockley-Gleichung**



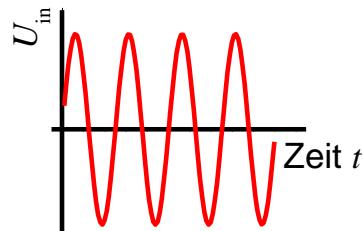
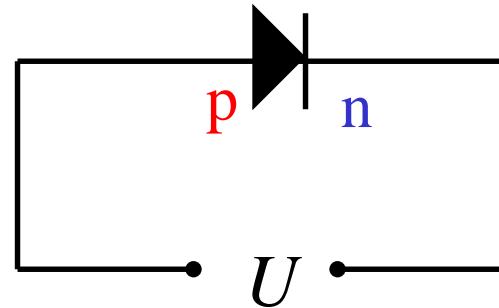
## II.1.1.4: Abweichungen vom idealen Shockley-Gesetz

- gemessene Strom-Spannungs-Kennlinie in pn-Diode aus Ge:
- bisher nicht berücksichtigte Beiträge zum Strom in der Diode (leicht **hohe Felder** mit  $E > 100 \text{ kV/cm}$  in der Raumladungszone!):
  - **Lawinen-Multiplikation** durch heiße Ladungsträger und
  - **Tunneln** von Elektronen über die Bandlücke
- **Durchbruch** in Rückwärtsrichtung (engl. „junction breakdown“)
- **Generation** von Elektron-Loch-Paaren durch Bestrahlung mit Licht: **Photodetektoren** und Solarzellen (II.4.3 und II.4.4)
- **Rekombination** an Oberflächen und Störstellen

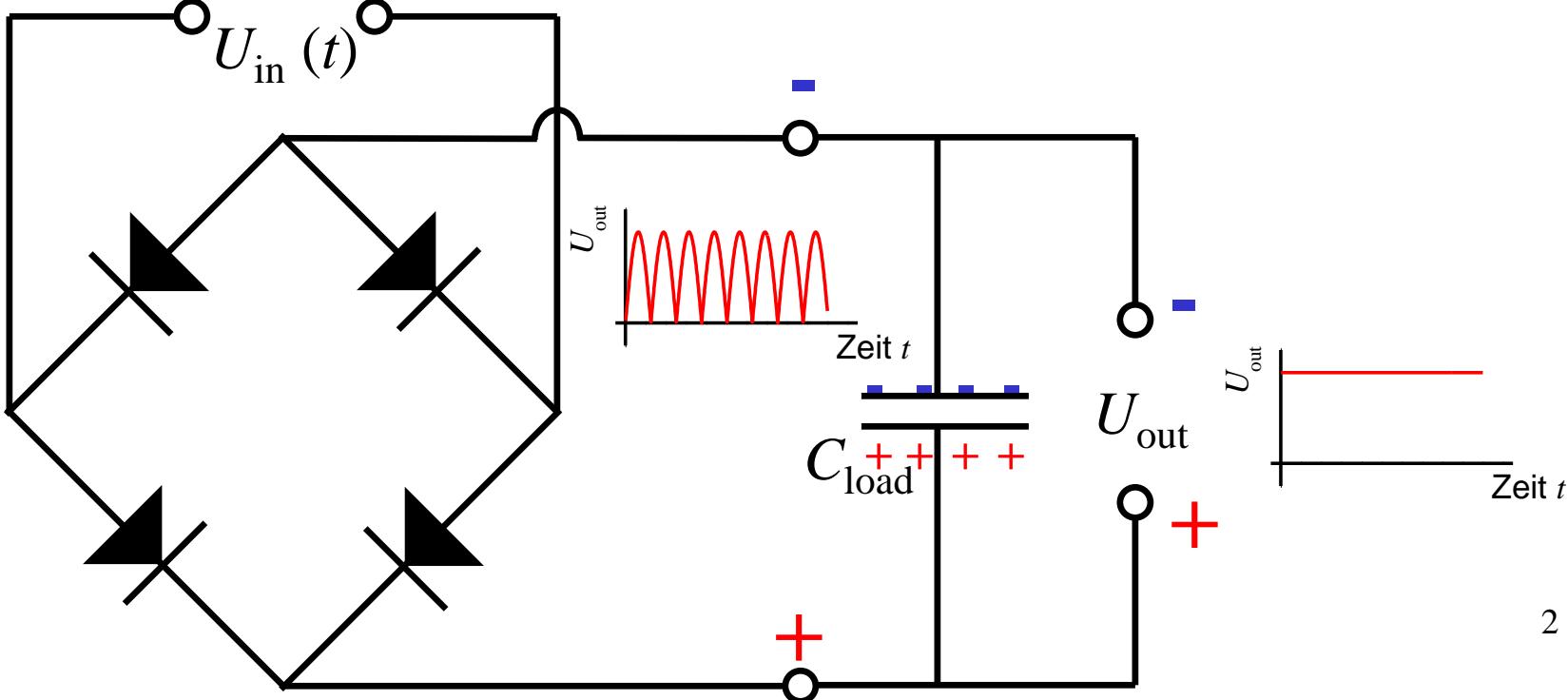


## II.1.1.5: Schaltzeichen und Anwendungen

- Schaltsymbol der p-n-Diode:



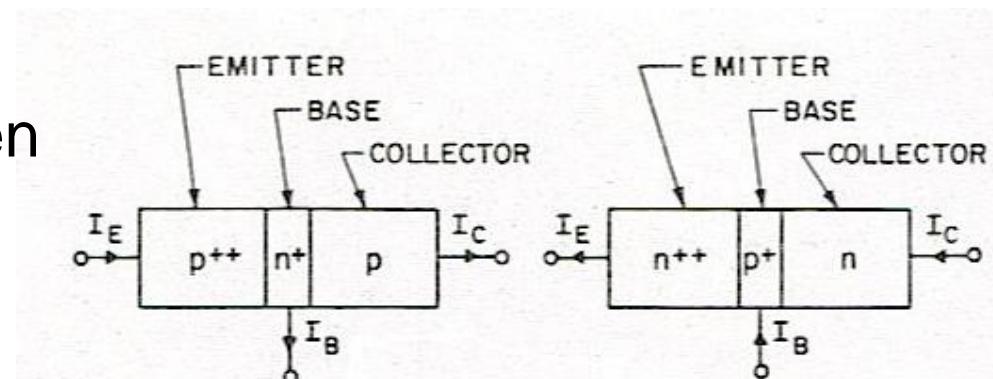
- Anwendungen: **Gleichrichter**, Spannungs- und Strom-Begrenzer etc...
- Beispiel: Schaltung Brückengleichrichter



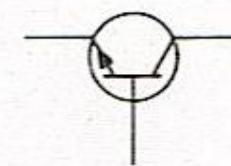
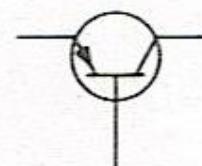
## II.1.2: Der Bipolar-Transistor

- Bell Laboratories, USA, 1947: Ge-Bipolar-Transistor (nach langjährigen Vorarbeiten in Experiment und Theorie)
- **aktives Schalter-Bauelement**, extrem miniaturisierbar, daher:
- Grundlage für Revolution der modernen Festkörper-Elektronik
- Nobelpreis für J. Bardeen, W. Brattain und W. Shockley

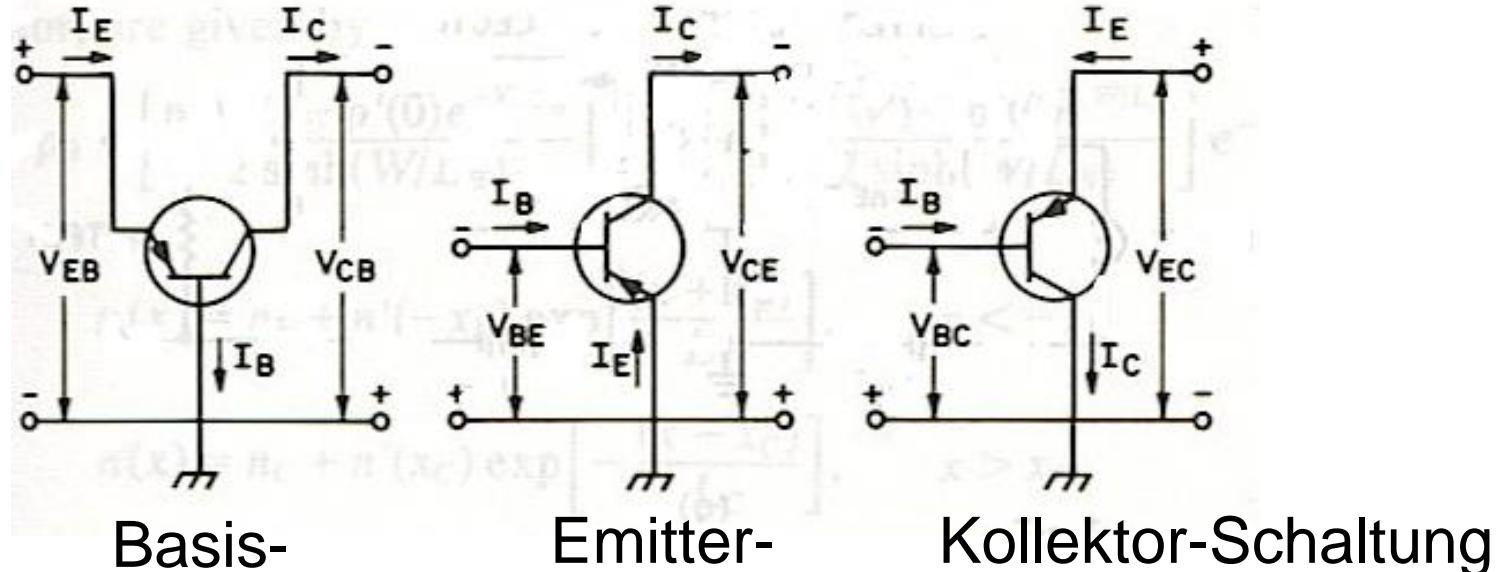
- Struktur und Schaltzeichen pnp- und npn-Bipolar-Transistor:



- **Dreipol-Bauelement** (engl.: „three terminal device“)  
mit drei Kontakten:  
Emitter, Basis und Kollektor

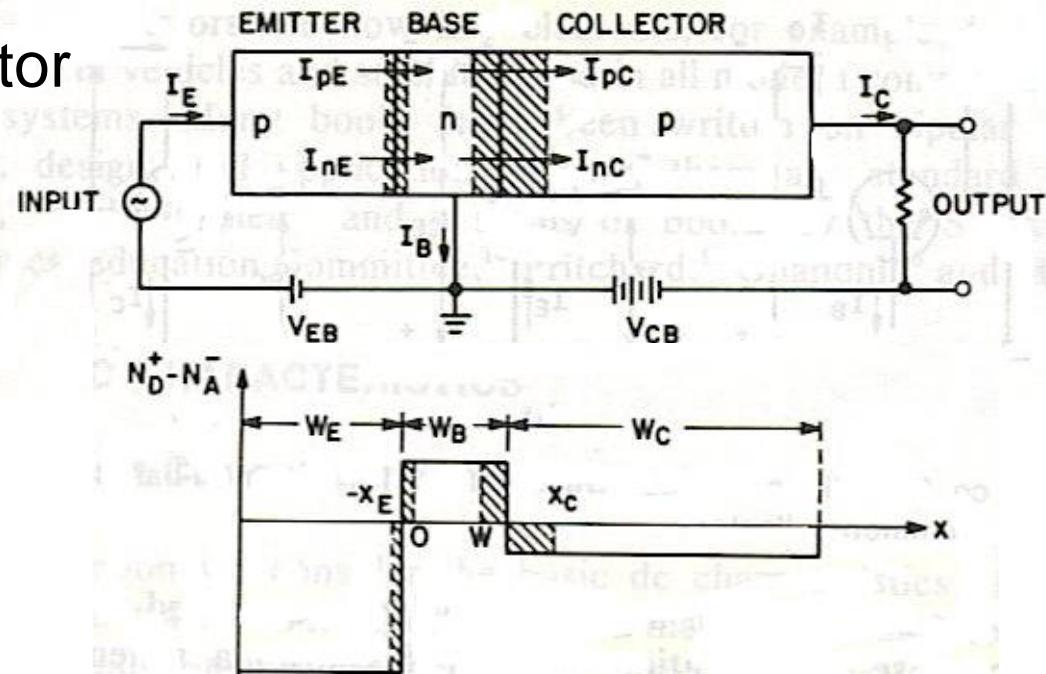


- 3 Möglichkeiten für **Verstärker-Schaltungen**  
(ab jetzt: pnp-Transistor als Beispiel, npn analog!):

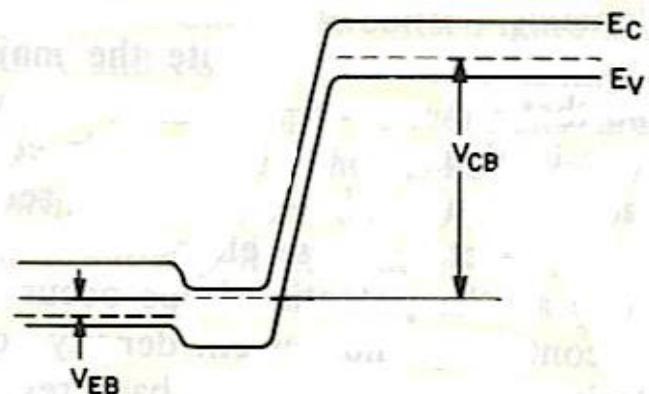


- **stationäres Verhalten:** ableiten über Theorie des p-n-Übergangs aus II.1.1
- Annahme: keine Oberflächen-Rekombination an Randflächen, keine Generation, schwache Injektion
- damit: Strom-Spannungs-Charakteristiken der Emitter- und Kollektor-Übergänge gehorchen **idealer Dioden-Gleichung**

- Beispiel: pnp-Transistor als **Verstärker** in **Basis-Schaltung**:



- Dotier-Profil und Verarmungszonen:
- Band-Diagramm mit Quasi-Ferminiveaus und Vorspannungen:
- Stromdichte- und Kontinuitäts-Gleichungen für neutrale Basis-Region:



$$-\frac{p - p_B}{\tau_B} + D_B \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = 0$$

$$J_p = -qD_B \frac{\partial p}{\partial x} \quad J_n = qD_B \frac{\partial p}{\partial x} + J_{tot}$$



- Bedingungen an den Rändern der Verarmungszone (E-B) für Überschuss-Ladungsträgerkonzentrationen  $p'$  und  $n'$ :

$$p'(0) \equiv p(0) - p_B = p_B \left[ \exp\left(\frac{qV_{EB}}{kT}\right) - 1 \right]$$

$$n'(-x_E) \equiv n(-x_E) - n_E = n_E \left[ \exp\left(\frac{qV_{EB}}{kT}\right) - 1 \right]$$

- analoge Gleichungen für Basis-Kollektor-Übergang
- Lösung für Verteilung der Minoritäts-Ladungsträger (Löcher in der Basis, Elektronen in Kollektor und Emitter):

$$p(x) = p_B + \left[ \frac{p'(W) - p'(0)e^{-W/L_B}}{2 \sinh(W/L_B)} \right] e^{x/L_B} - \left[ \frac{p'(W) - p'(0)e^{W/L_B}}{2 \sinh(W/L_B)} \right] e^{-x/L_B}$$

$$n(x) = n_{Ebzw.C} + n'(-x_E) \text{ bzw. } x_C \exp \left[ \frac{x + x_E \text{ bzw. } x_C - x}{L_E \text{ bzw. } L_C} \right]$$



- Physik: Bipolar-Transistor funktioniert mittels **Diffusion von Minoritäts-Ladungsträgern über die Basislänge  $W$** , gesteuert durch äußere Spannungen  $V_{EB}$  und  $V_{CB}$ !
- Voraussetzung:  $W < L_B$  (**Diffusionslänge** der Minoritäts-Ladungsträger in der Basis  $L_B = \sqrt{\tau_B D_B}$  )
- für  $W \gg L_B$ : zwei unabhängige p-n-Übergänge, Transistor-Funktion verschwindet!
- **totaler Emitterstrom** in Transistor mit Querschnittsfläche  $A$ :

$$I_E = AJ_p(x=0) + AJ_n(x=-x_E)$$

$$= A \left( -qD_B \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{x=0} \right) + A \left( -qD_E \frac{\partial n}{\partial x} \Big|_{x=-x_E} \right)$$

$$= Aq \frac{D_B p_B}{L_B} \coth \left( \frac{W}{L_B} \right) \left[ \left( e^{qV_{EB}/kT} - 1 \right) - \frac{1}{\cosh(W/L_B)} \left( e^{qV_{CB}/kT} - 1 \right) \right] -$$

$$- Aq \frac{D_E n_E}{L_E} \left( e^{qV_{EB}/kT} - 1 \right)$$



- analog **totaler Kollektorstrom**:

$$I_C = AJ_p(x=W) + AJ_n(x=x_C) = A \left( -qD_B \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{x=W} \right) + A \left( -qD_C \frac{\partial n}{\partial x} \Big|_{x=x_C} \right)$$

$$= Aq \frac{D_B p_B}{L_B} \frac{1}{\sinh(W/L_B)} \left[ \left( e^{qV_{EB}/kT} - 1 \right) - \cosh(\frac{W}{L_B}) \left( e^{qV_{CB}/kT} - 1 \right) \right] -$$

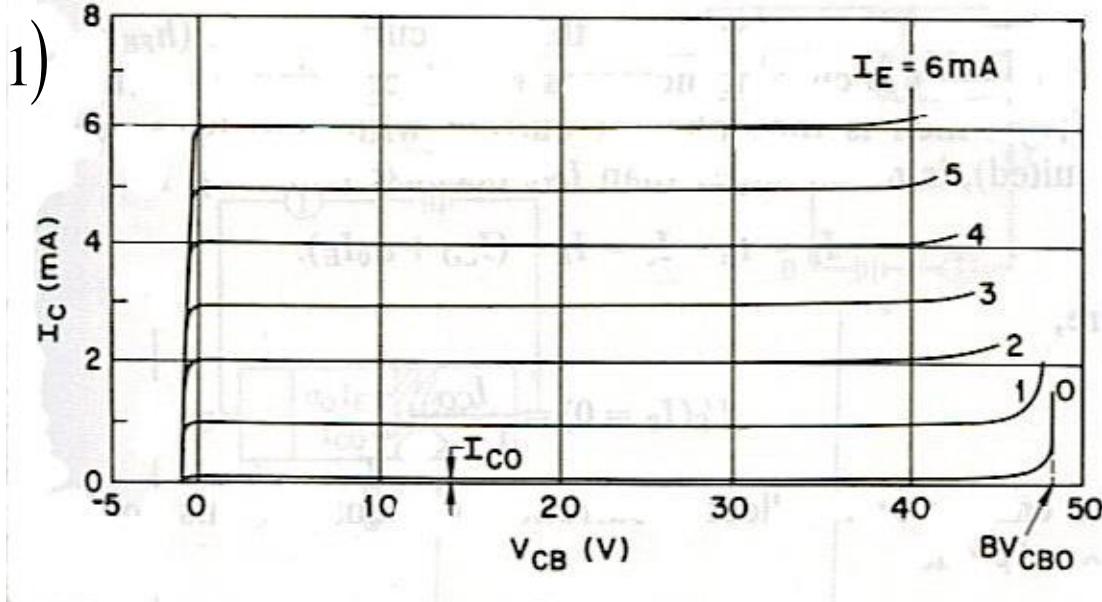
$$- Aq \frac{D_C n_C}{L_C} \left( e^{qV_{CB}/kT} - 1 \right)$$



- **totaler Basisstrom**:

$$I_B = I_E - I_C$$

- **I-V-Charakteristik**  
für pnp-Transistor in  
Basis-Schaltung:



- **Stromverstärkung** in Basis-Schaltung:  $\alpha_0 = \frac{\partial I_C}{\partial I_E} \approx 1$

8

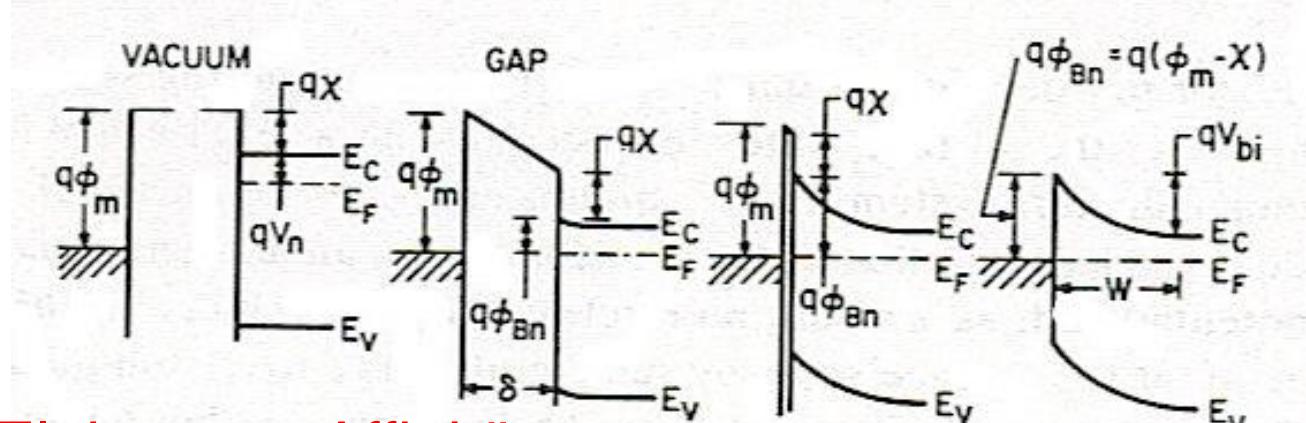
- **Stromverstärkung Emitter-Schaltung**:  $\beta_0 = \frac{\partial I_C}{\partial I_B} = \frac{\alpha_0}{1-\alpha_0} \gg 1$

# II.2 Unipolare Bauelemente

## II.2.1: Metall-Halbleiter-Kontakt und Schottky-Diode

### II.2.1.1: Energiebänder und Verarmungszone

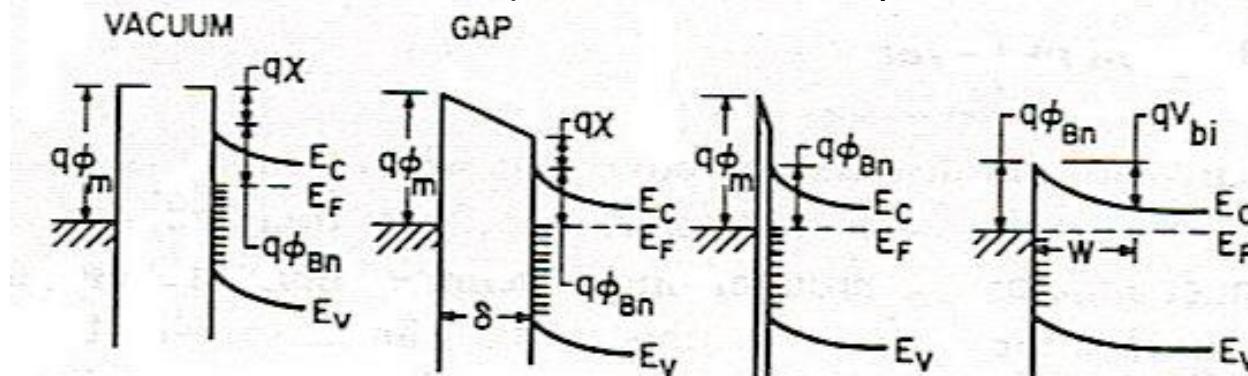
- bringe Metall in Kontakt mit n-Typ-Halbleiter (idealer Fall):



- $q\chi$ : Elektronen-Affinität
- Austrittsarbeit: Energiedifferenz zwischen Vakuum- und Fermi-Niveau (im Metall:  $q\phi_m$ , im n-Halbleiter:  $q\chi + qV_n$ )
- Kontakt im thermischen GGW:  $E_F$  gleichen sich an



- n-Typ-Kontakt: negative Ladung im Metall (extrem hohe Elektronendichte => Ausdehnung vernachlässigbar)
- positive **Raumladungszone** der Weite  $W$  im Halbleiter, je nach Dotierdichte der ionisierten Donatorrümpfe
- Höhe der **Schottky-Barriere** auf Metallseite:  $q\phi_{Bn0} = q\phi_m - q\chi$
- **eingebautes Potenzial** auf Halbleiter-Seite:  $qV_{bi} = q\phi_{Bn0} - qV_n$
- oft: **hohe Dichte von Oberflächen-Zuständen in der Bandlücke** führt zu **Fixierung des Fermi-Niveaus an der Oberfläche des Halbleiters** (z. B. in GaAs): „Fermi level pinning“



- dann: **Barrierenhöhe unabhängig von Austrittsarbeit** im Metall, dominiert durch Eigenschaften der Halbleiter-Oberfläche

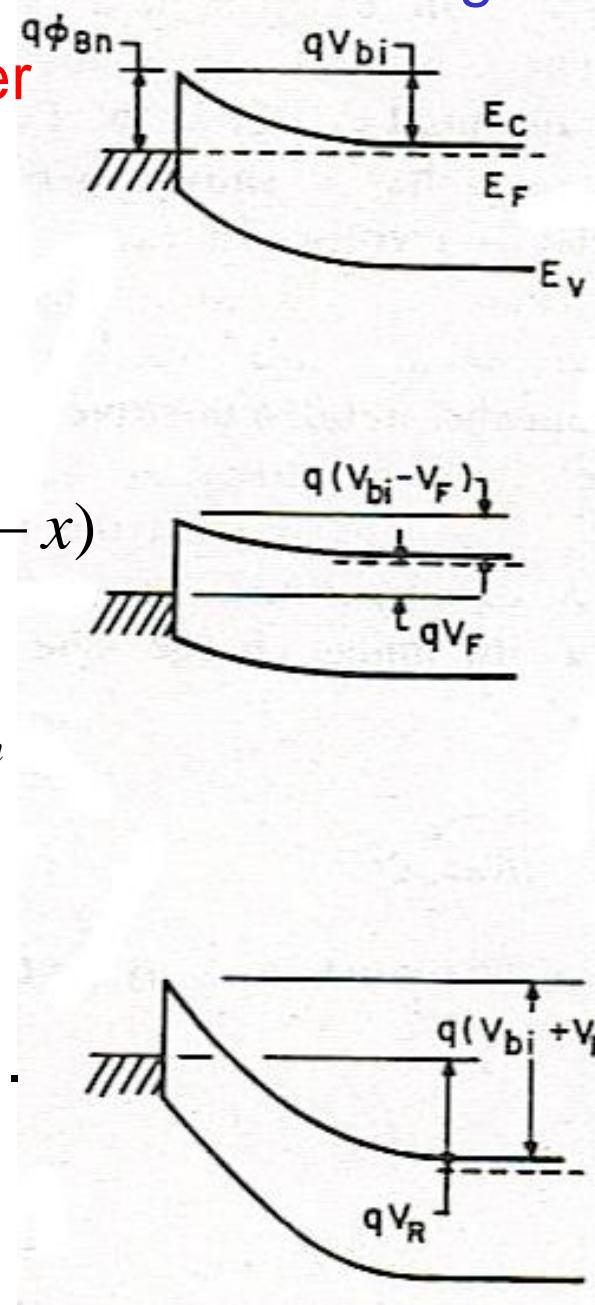


- Eigenschaften der Verarmungszone: Poisson-Gleichung
- Behandlung analog einseitiger, abrupter p<sup>+</sup>n-Übergang:  $\rho \approx qN_D$  für  $0 < x < W$

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_s}{qN_D} \left( V_{bi} - V - \frac{kT}{q} \right)}$$

- elektrisches Feld  $\mathcal{E}(x)$ :  $|\mathcal{E}(x)| = \frac{qN_D}{\epsilon_0\epsilon_s} (W - x)$
- Potenzial  $V(x) = \frac{qN_D}{\epsilon_s\epsilon_0} \left( Wx - \frac{1}{2}x^2 \right) - \phi_{Bn}$
- Raumladung pro Fläche:  $Q_{sc} = qN_D W$
- Kapazität  $C$ : Messung von Dotierprofil...

$$C = \frac{|\partial Q_{sc}|}{\partial V} = \sqrt{\frac{q\epsilon_s\epsilon_0 N_D}{2(V_{bi} - V - kT/q)}} = \frac{\epsilon_s\epsilon_0}{W}$$



## II.2.1.2: Bildladungen und Schottky-Effekt

- zunächst: Grenzfläche Metall-Vakuum
- minimal notwendige Energie um Elektron vom Fermi-Niveau ins Vakuum anzuregen: **Austrittsarbeit**  $q\phi_m$  (typisch 2 bis 6 eV)
- Elektron im Vakuum** bei  $x$ : **positive Bildladung** im Metall bei  $-x$
- anziehende **Kraft  $F$  auf Elektron** durch Bildladung:

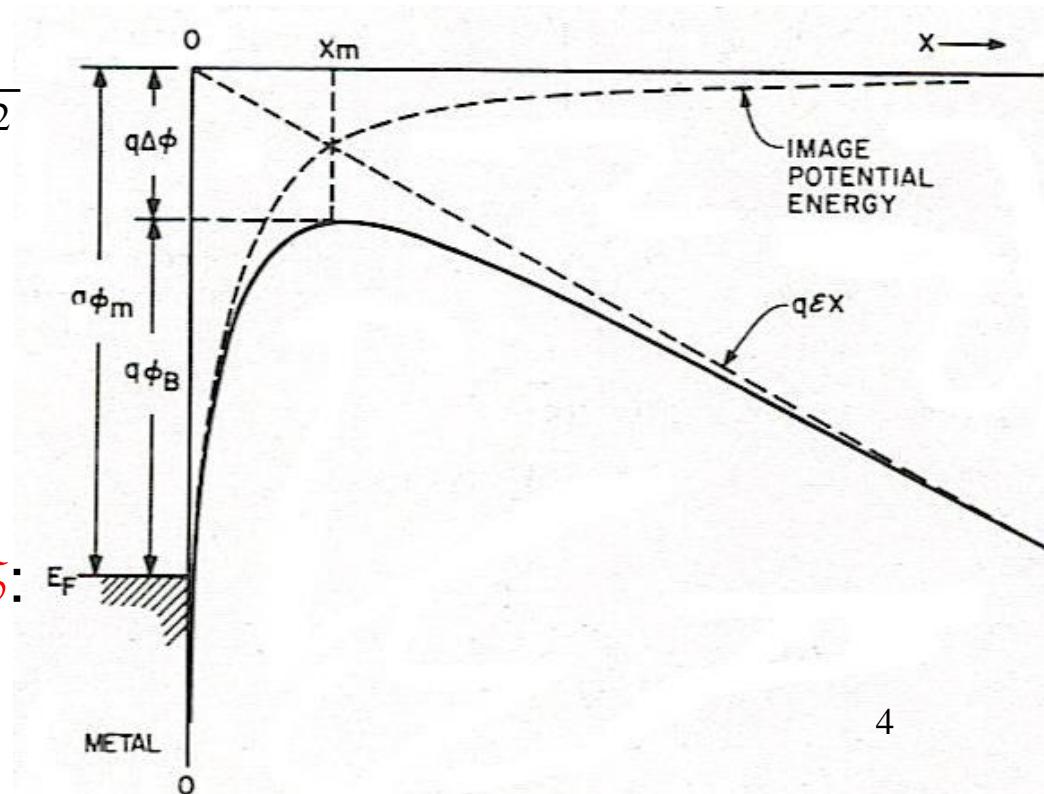
$$F = \frac{-q^2}{4\pi \epsilon_0 (2x)^2} = \frac{-q^2}{16\pi \epsilon_0 x^2}$$

- potenzielle Energie  $E(x)$ :**

$$E(x) = \int_{-\infty}^x F dx = \frac{q^2}{16\pi \epsilon_0 x}$$

- mit äußerem **elektr. Feld  $\epsilon$** :

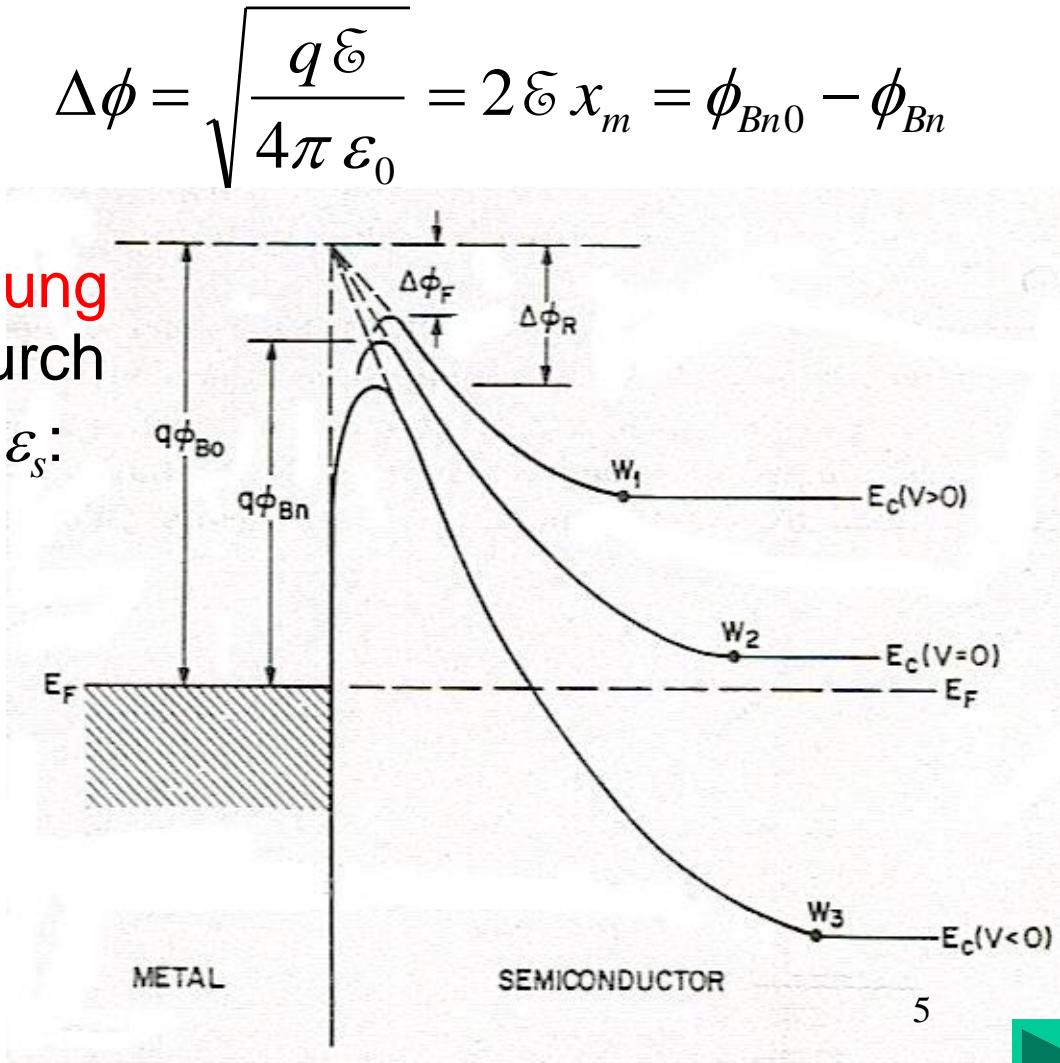
$$PE(x) = \frac{q^2}{16\pi \epsilon_0 x} + q\epsilon x$$



- Ort des Maximums der Schottky-Barriere:  $x_m = \sqrt{\frac{q}{16\pi \epsilon_0 \epsilon}} \varepsilon$
- Verringerung der Schottky-Barriere (engl. „barrier lowering“):

- Übergang zum Metall-Halbleiter-Kontakt:  
dielektrische Abschirmung von  $\epsilon$  berücksichtigt durch dielektrische Funktion  $\epsilon_s$ :

$$\Delta\phi = \sqrt{\frac{q\epsilon}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s}}$$



- Schottky-Effekt unter verschiedenen Vorspannungs-Bedingungen:



## II.2.1.3: Stromtransport über Schottky-Barriere

- Prozess 1 „thermo-ionische Emission“: Überwindung der Potenzial-Barriere durch thermische Anregung der Elektronen
- Annahmen: Verteilungsfunktionen nahe am thermischen Gleichgewicht mit  $kT \ll \text{Barriehöhe } q\phi_{Bn}$
- Strom vom Halbleiter ins Metall: 
$$J_{s \rightarrow m} = \int_{E_F + q\phi_{Bn}}^{\infty} qv_x dn$$
- $E_F + q\phi_{Bn}$ : minimal zur Überwindung nötige thermische Energie
- Elektronendichte pro Energie-Intervall:  $dn = N(E)f(E)dE =$   
$$= \frac{4\pi(2m^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E - E_c} \exp[-(E - E_c + qV_n)/kT]dE$$

mit der Zustandsdichte im Leitungsband  $N(E)$ ,  
der Elektronen-Verteilung  $f(E)$  (nur Boltzmann-Ausläufer!),  
der effektiven Masse im Leitungsband  $m^*$ ,  
der Energieposition des Leitungsband-Minimums  $E_c$  und  
der relativen Lage des Fermi-Niveaus  $qV_n = E_c - E_F$



- **kinetische Energie** der Elektronen im Leitungsband:

$$E - E_C = \frac{1}{2} m^* v^2$$

- Einsetzen von Ableitung und Wurzel in  $dn$  ergibt:

$$dn = 2 \left( \frac{m^*}{h} \right)^3 \exp\left(-\frac{qV_n}{kT}\right) \exp\left(-\frac{m^* v^2}{2kT}\right) (4\pi v^2 dv)$$

- Aufteilung der Elektronen-Geschwindigkeit in Komponenten:

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \quad \text{und} \quad 4\pi v^2 dv = dv_x dv_y dv_z$$

- damit ohne Ableitung:  $J_{s \rightarrow m} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right) \exp\left(\frac{qV}{kT}\right)$

mit der Barrierenhöhe  $\phi_{Bn} = V_n - V_{bi}$  und

der **effektiven Richardson-Konstante**  $A^* = \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3}$



- Fermi-Niveau und damit Elektronenverteilung im Metall sind unabhängig von Vorspannung  $V$
- in dieser Richtung Strom wie im Gleichgewicht mit  $V=0$ :

$$J_{m \rightarrow s} \approx -A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right) \quad \text{Achtung: Barrierenhöhe variiert leicht mit } V!$$

- totale Stromdichte  $J_n$  als Summe von  $J_{m \rightarrow s}$  und  $J_{s \rightarrow m}$ :

$$J_n \approx J_{ST} \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right]$$

mit der Sättigungs-Stromdichte  $J_{ST} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right)$

- analog zur Transportgleichung für p-n-Übergang, aber
  - Ausdruck für Sättigungs-Stromdichte unterschiedlich
  - Schottky-Diode funktioniert mit Majoritäts-Trägern, p-n-Diode dagegen mit Minoritäts-Ladungsträgern



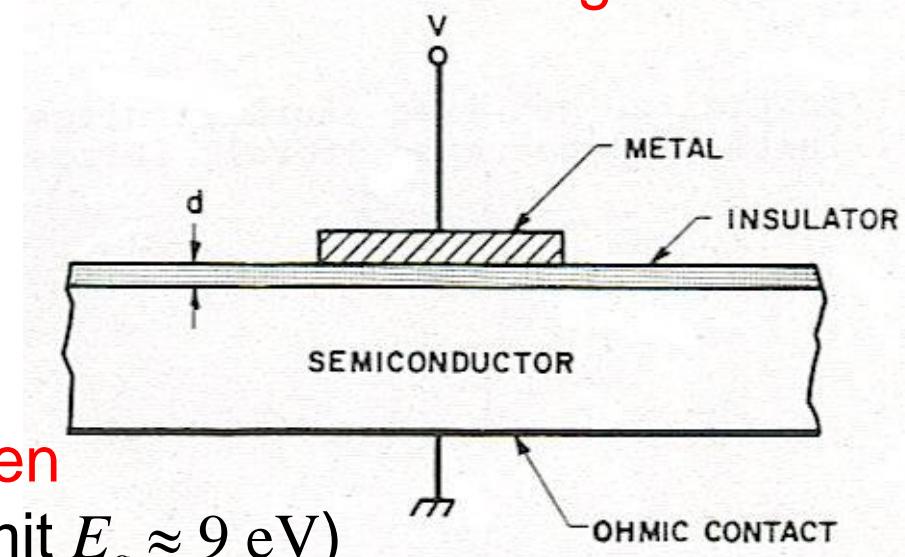
- Prozess 2: quantenmechanisches Tunneln über die Schottky-Barriere
- relevant vor allem für **tiefe Temperaturen** oder für **extrem dünne Barriere**
- dünne Barrieren ergeben sich insbesondere **bei hoher Dotierdichte**  $N_D$  bzw.  $N_A$  des Halbleiters ( $n^{++}$  oder  $p^{++}$ )
- derartige Schottky-Kontakte werden ausgenutzt, um Halbleiter-Bauelemente metallisch zu kontaktieren  
=> sog. „**Ohmsche Kontakte**“, die den Serienwiderstand des Bauelements nicht negativ beeinflussen
- beachte: falls  $q\phi_m < q\chi + qV_n \rightarrow$  negative Barrierenhöhe!  
→ immer Ohmsches Verhalten, aber: Materialien verfügbar?
- es existieren noch **weitere Transportkanäle** in der Schottky-Barriere, die vor allem in Vorwärtsrichtung Beiträge zum gesamten Strom liefern wie z. B. die **Injektion von Minoritäts-Ladungsträgern**



## II.2.2: Metall-Isolator-Halbleiter-Kontakt

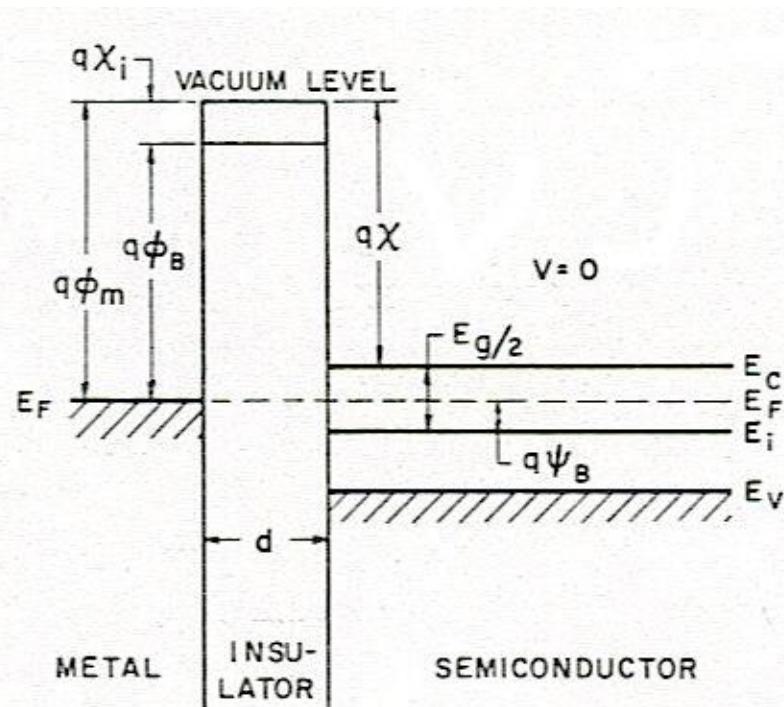
### II.2.2.1: MIS- und MOS-Struktur

- **MIS-Strukturen** (engl. „**metal-insulator-semiconductor**“): große Bedeutung sowohl für grundlegende Forschung zu den **Oberflächen-Eigenschaften von Halbleitern**, als auch und vor allem in der **Halbleiter-Technologie**
- insbesondere **MOS-Struktur** (engl. „**metal-oxide-silicon**“) einer der entscheidenden **Materialvorteile des Silizium**: dünne **amorphe Oxidschichten** ( $\text{SiO}_2$  „Quartzglas“, Isolator mit  $E_g \approx 9 \text{ eV}$ ) großtechnisch und in hoher Qualität herstellbar („nativ“  $\approx 3 \text{ nm}$ , thermisch oxidiert unter  $\text{H}_2\text{O}$ -Dampf bis  $1 \mu\text{m}$ )

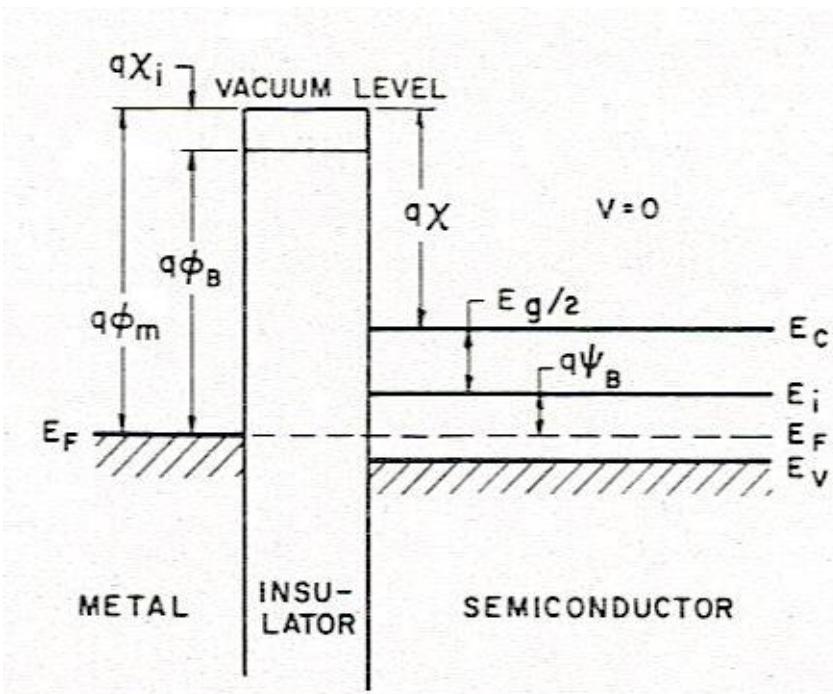


## II.2.2.2: Banddiagramm der idealen MIS-Struktur

- n-Typ-Halbleiter:



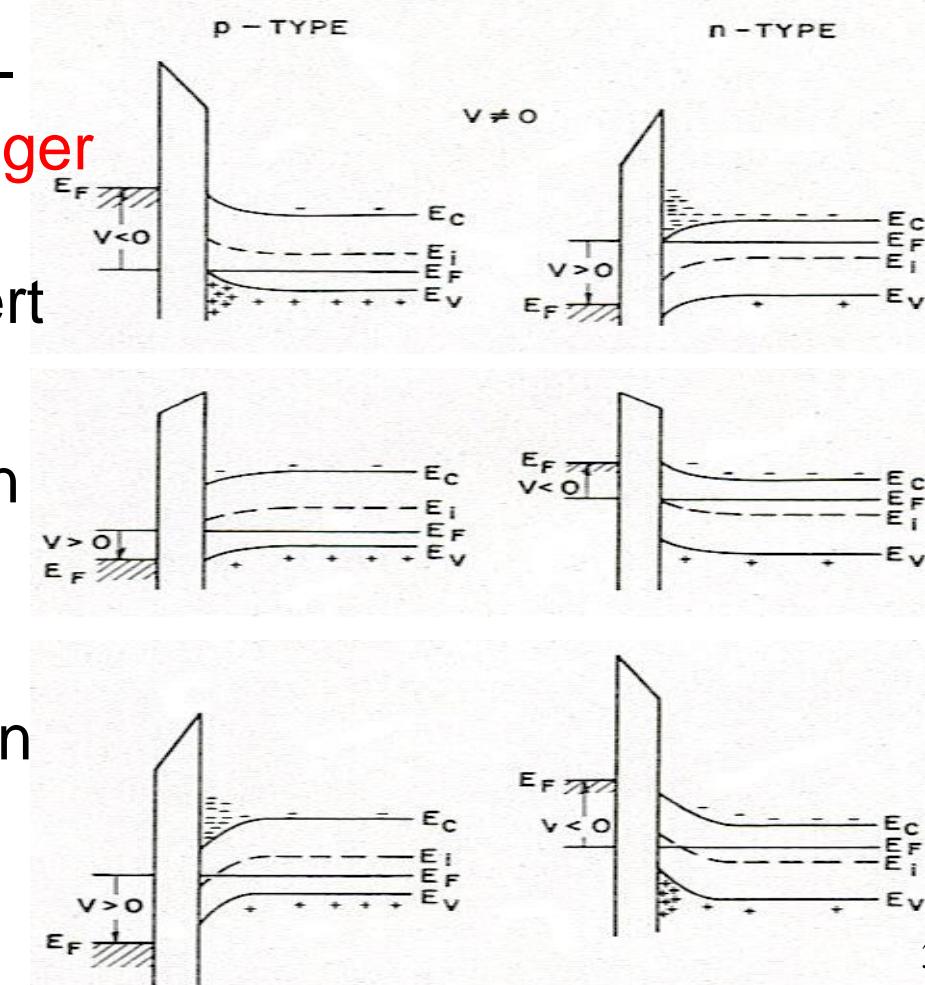
- p-Typ-Halbleiter:



- Metall: Austrittsarbeit  $q\phi_m$ , Barriere zum LB Isolator  $q\phi_B$
- Isolator: Elektronen-Affinität  $q\chi_i$
- Halbleiter: Elektronen-Affinität  $q\chi$ , Abweichung  $q\psi_B$  zwischen Fermi-Niveau  $E_F$  und intrinsischen Fermi-Niveau  $E_i$

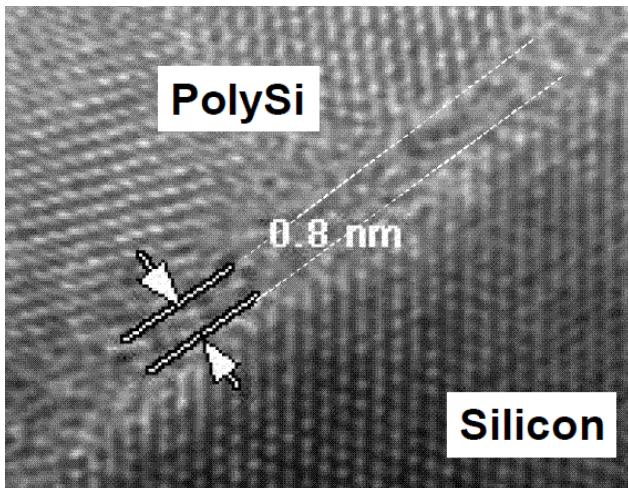
## II.2.2.3: MIS-Struktur unter Vorspannung $V$

- perfekter Isolator: **kein Stromfluss** über Barriere
- **thermisches Gleichgewicht** in Metall und Halbleiter mit  $V = \Delta E_F$
- **3 grundlegende Regimes** bzgl. **Raumladung im Halbleiter**:
- **Akkumulation** (engl. „*accumulation*“) **Majoritäts-Ladungsträger** werden an der Grenzschicht Halbleiter-Isolator angereichert
- **Verarmung** (engl. „*depletion*“) **keine freien Ladungsträger** an der Grenzschicht HL-Isolator
- **Inversion** (engl. „*inversion*“) **Minoritäts-Ladungsträger** an der Grenzschicht HL-Isolator! **Wechsel des Leitfähigkeits-typs** durch Vorspannung  $V$



## II.2.2.4: Eigenschaften des $\text{SiO}_2$ als Gate-Oxid

- extrem hoher spezifischer Widerstand  $\rho = 10^{14}$  bis  $10^{16} \Omega\text{cm}$
- extrem hohe Durchbruch-Feldstärke  $E_{breakdown} > 10^7 \text{ V/cm}$
- durch einfache thermische Oxidation kontrolliert, großflächig und preisgünstig bis in den Monolagen-Bereich herstellbar

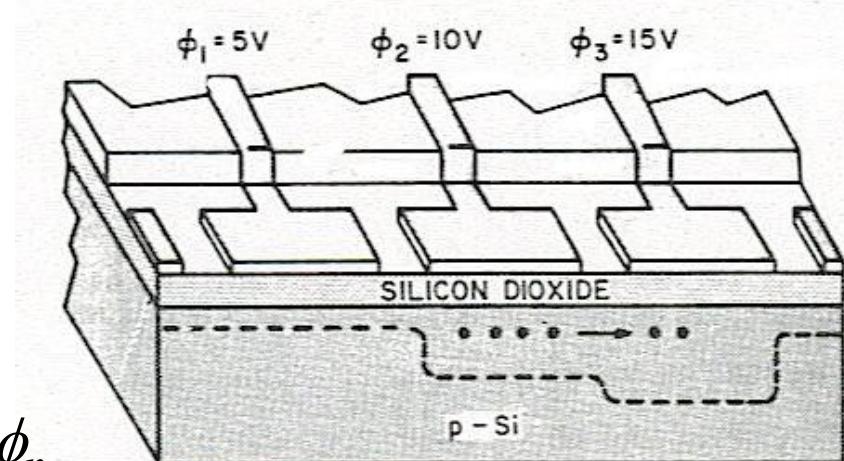
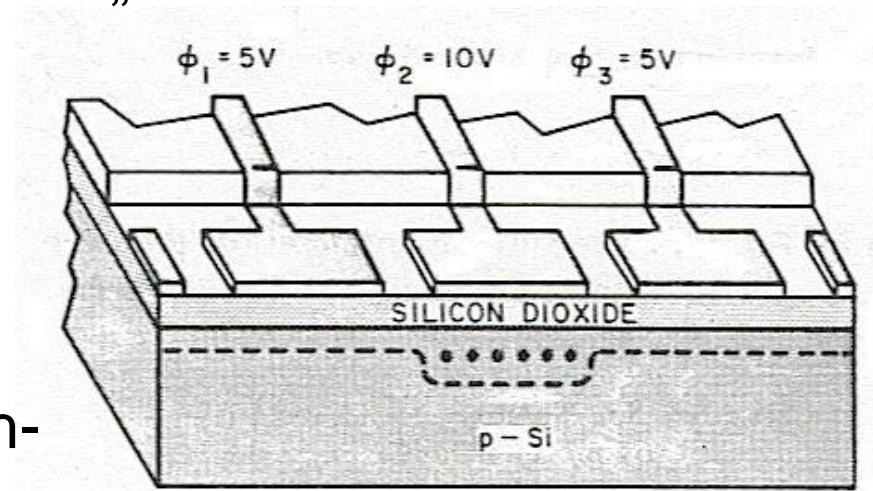


- extremes Beispiel für Leckstrom:  
0.8 nm (!) Gate-Oxid unter Inversion mit  $V = 0.85 \text{ V}$ :  
 $I_L = 1 \mu\text{A}/\mu\text{m}^2$  (!)

- technologisches Problem: hochenergetische Elektronen, die bei hohen elektrischen Feldern im Halbleiter generiert und in das Leitungsband des Oxides injiziert werden können:  
=> „trapping“ im amorphen Isolator => elektrische Aufladung Gate-Oxid => Durchbruch => endliche Device-Lebensdauer

## II.2.2.5: Charge Coupled Device (CCD)

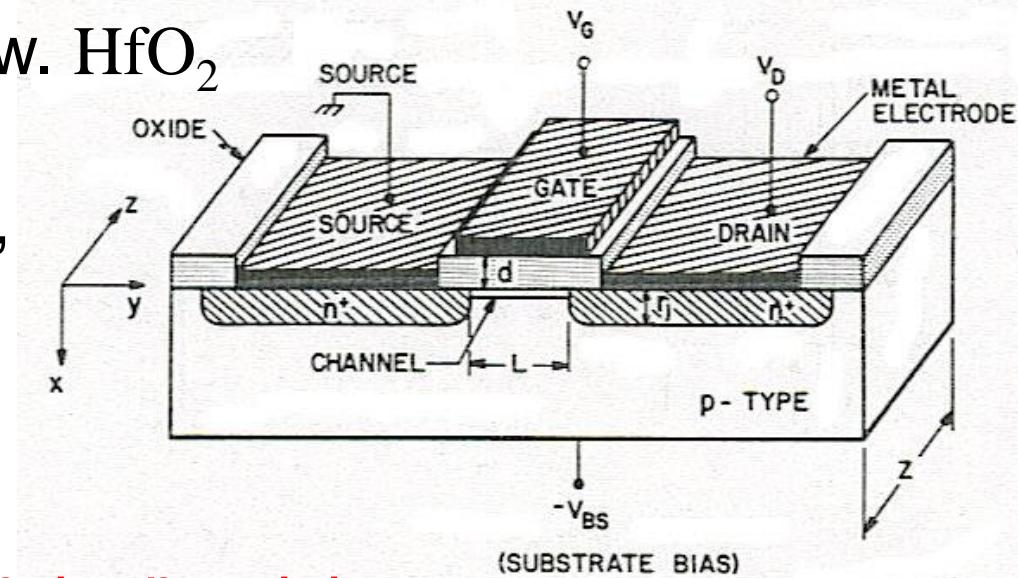
- $\text{SiO}_2$  als nahezu perfekter Isolator: Anwendung MOS-Struktur als elektrisch be- und entladbarer **Ladungsspeicher**
- Beispiel **Charge Coupled Device „CCD“**: MOS-Struktur im Depletion-Regime
- Physik-Nobelpreis 2009 für W. S. Boyle und G. E. Smith
- **Beladen** zum Beispiel durch Generation von Elektron-Loch-Paaren über **Absorption von Photonen**: „CCD-Kamera“
- **Auslesen** des Bildes pixelweise über **Durchschieben der Elektronen bis zum Randkontakt** durch zeitliche Abfolge der Gate-Potenziale  $\phi_n$



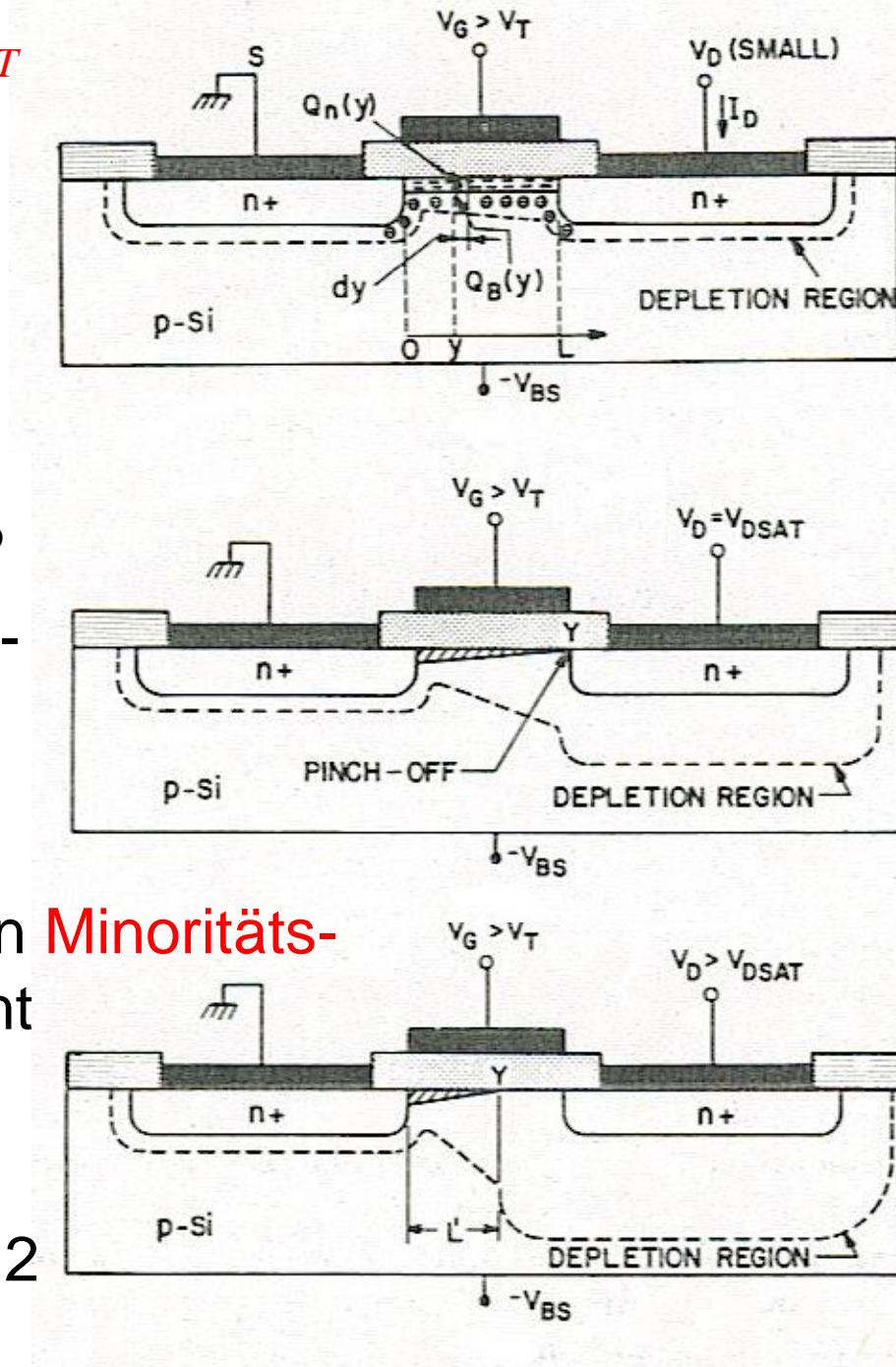
## II.2.3: Feldeffekt-Transistoren

### II.2.3.1: MOS-Feldeffekt-Transistor – MOSFET

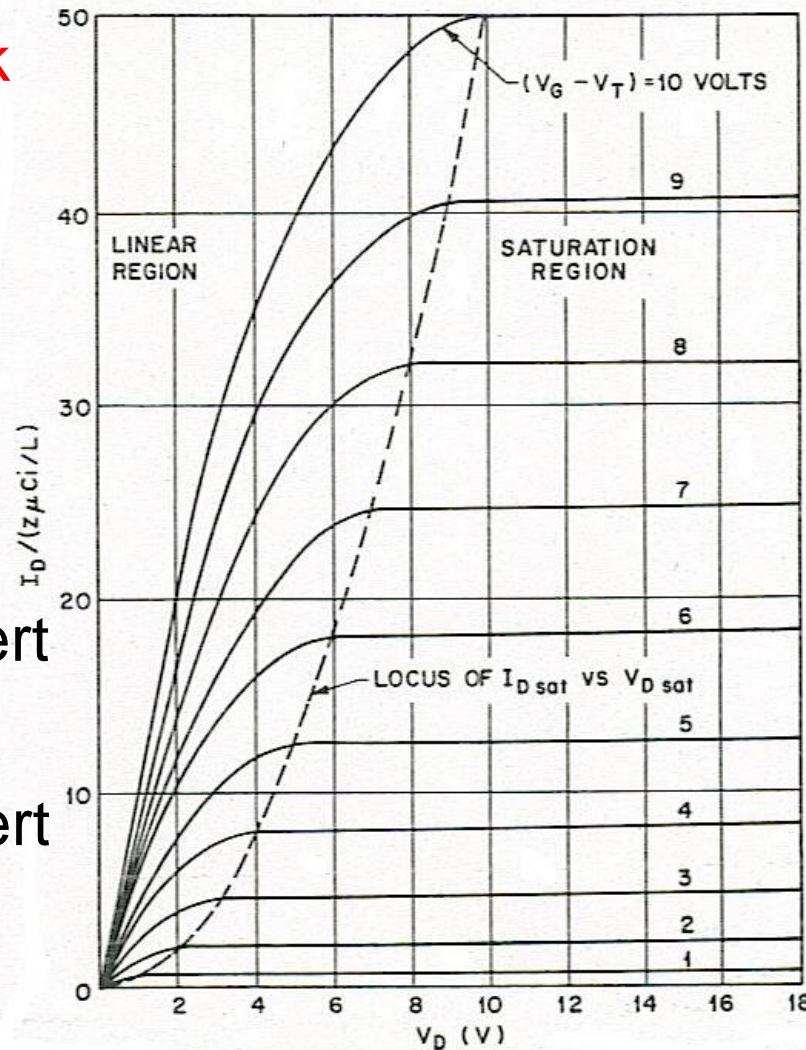
- hochintegrierte Schaltkreise (engl. „integrated circuit“, IC): möglichst viele Bauelemente auf einem Halbleiter-Chip!
- zentrale Funktionseinheit (Schalter): Transistor
- Standard-Technologie: **MOS-Feldeffekt-Transistor** auf Basis von Si und  $\text{SiO}_2$  bzw.  $\text{HfO}_2$
- **3 Kontakte und Spannungen:** Source (Masse), Gate  $V_G$  und Drain  $V_D$
- **2 p-n-Übergänge**
- $V_D$  typisch so, dass **p-n-Übergang am Drain in Rückwärtsrichtung**
- kein Strom im **Gate-Channel** für  $V_G = 0$



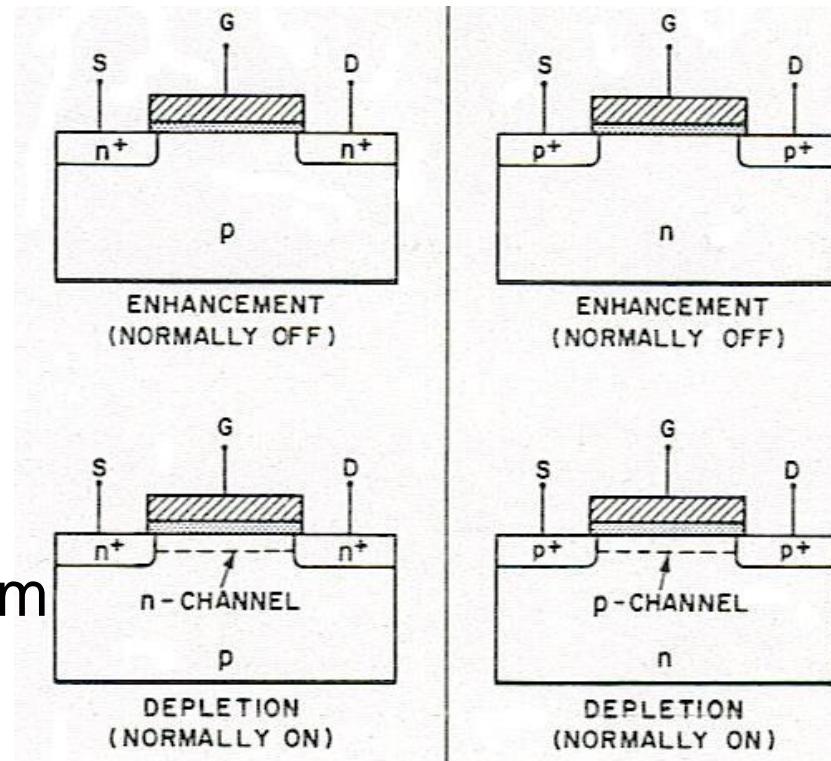
- für Gate-Spannung  $V_G > V_T$  (**Schwellenspannung**, engl. „threshold“):
- **Inversion** im Channel unterhalb Gate, s. II.2.2.3
- Drain-Strom  $I_D$  **linear** proportional zu kleinem  $V_D$
- ab  $V_D = V_{DSAT}$ : Verarmungszone am Drain schnürt Channel ab, „**pinch-off**“
- für  $V_D > V_{DSAT}$ : Diffusion von **Minoritäts-Ladungsträgern** durch nicht invertierten Bereich, analog Bipolar-Transistor
- Strom-Plateau wie bei II.1.2 mit  $I_D = \text{const.}$ : „**saturation**“



- idealisierte  $I_D$ - $V_D$ -Charakteristik MOSFET für verschiedene Gate-Spannungen  $V_G$
- derzeitiger Technologie-Standard bei hoch integrierten digitalen Schaltkreisen: CMOS (engl. „complementary MOS“), n- und p-Typ MOSFETs integriert
- **Grenzfrequenz** für Transistorverstärkung: physikalisch limitiert durch minimale **Transitzeit der Elektronen** unter dem Gate
- derzeit über optische Lithografie (s. II.2.2.4, UV-Belichtung mit Excimer-Laser) herstellbare **Gate-Längen**: etwa 10 nm
- Grenzfrequenz des einzelnen Si-MOSFET: über 100 GHz
- GHz-Taktrate einer CPU durch Kontakte aus Cu (anstatt Al)



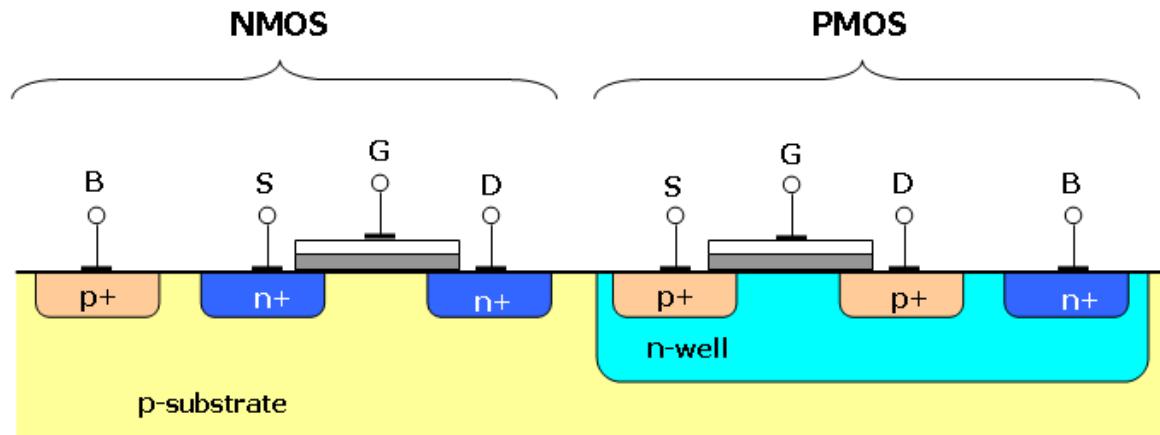
- grundlegende Typen von MOSFETs:
- „normally off“-Transistoren in Standard-Konfiguration mit Channel-Bildung über Inversion
- „normally on“-Transistoren mit dünnem, umgekehrt dotiertem Channel unter Gate, der durch Gate-Spannung  $V_G$  verarmt wird
- Schaltzeichen, Ausgangs- und Transfer-Charakteristiken der vier Basistypen
- damit: Aufbau von logischen Schaltkreisen durch Integration von etwa  $10^9$  Transistoren



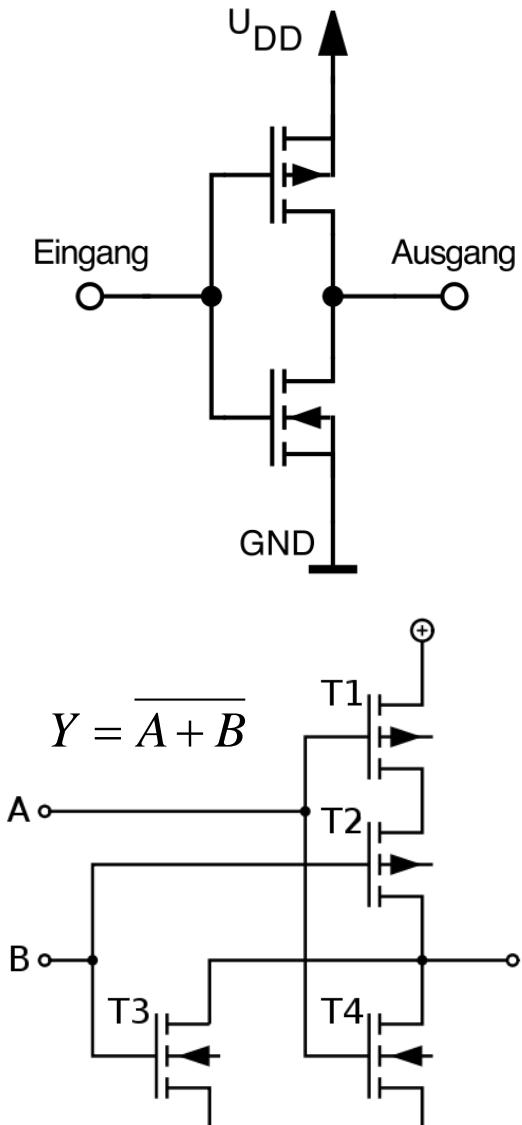
TYPE	ELECTRICAL SYMBOL	OUTPUT CHARACTERISTIC	TRANSFER CHARACTERISTIC
N - CHANNEL ENHANCEMENT (NORMALLY OFF)			
N - CHANNEL DEPLETION (NORMALLY ON)			
P - CHANNEL ENHANCEMENT (NORMALLY OFF)			
P - CHANNEL DEPLETION (NORMALLY ON)			

## II.2.3.2: Complementary MOS (CMOS)

- derzeitiger Technologie-Standard bei hoch integrierten digitalen Schaltkreisen
- n- und p-Typ MOSFETs integriert
- Basis-Element ist CMOS-Inverter
- Vorteil: kein statischer Energieverbrauch



• Beispiel:	A:	0	0	1	1
NOR-	B:	0	1	0	1
Gatter	Y:	1	0	0	0



## II.2.3.3: Höchstfrequenz-Transistoren

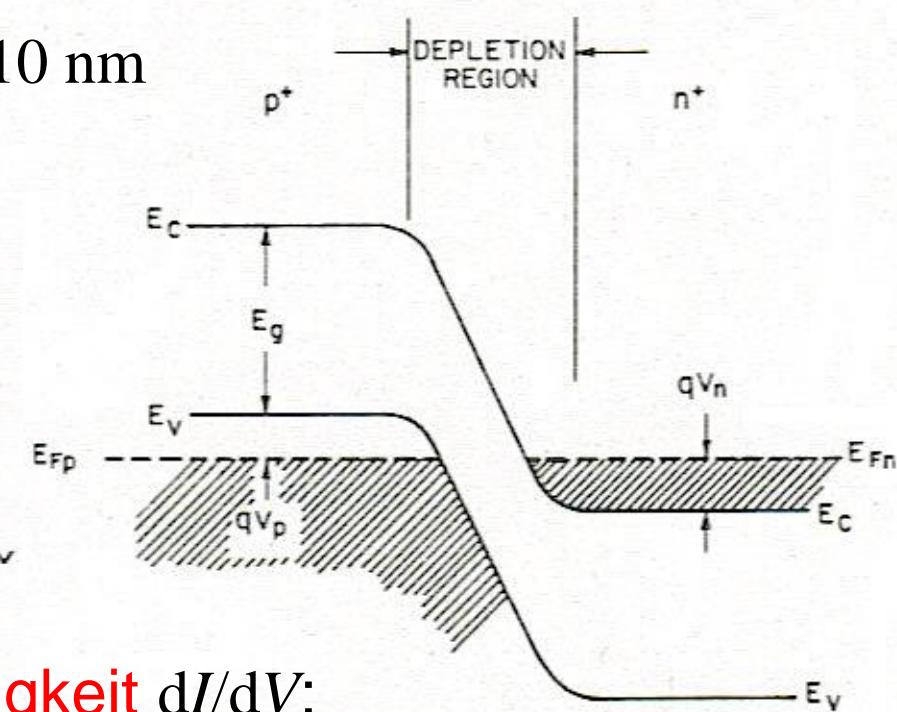
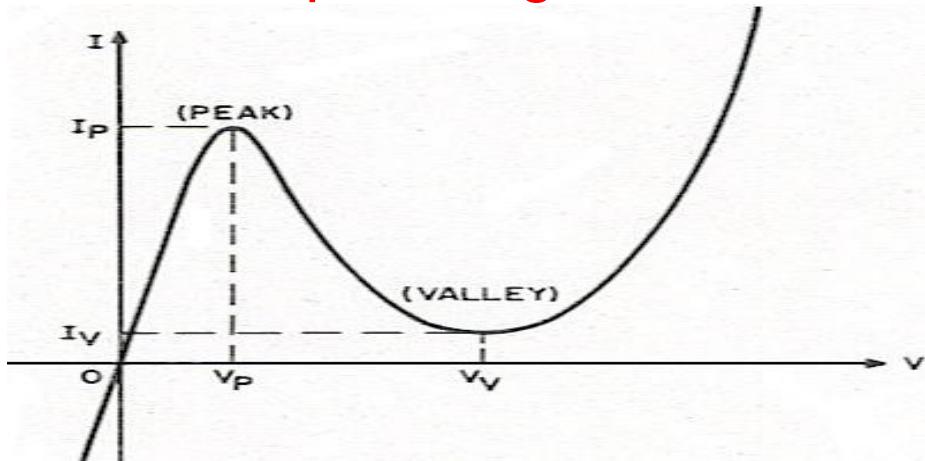
- weitere **Optimierungs-Potenziale der Silizium-Technologie**
- ultimative Miniaturisierung in Richtung < 10 nm Strukturgröße
- höhere Elektronen-Beweglichkeiten durch Channel aus SiGe...
- ultimative Grenzfrequenzen irgendwo bei **sub-THz...**
- **High Electron Mobility Transistor „HEMT“ auf Basis von III-V-Verbindungen**, meist  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  ( $E_g = 0.75 \text{ eV}$ ):
- Epitaxie (MBE, MOCVD) gitterangepasst auf InP-Substrat
- Barrieren-Material (kein Oxid!):  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$  ( $E_g = 1.52 \text{ eV}$ )
- extrem **schneller Elektronen-Transport**, quasi-ballistisch:
  - geringe effektive Masse ( $m_\Gamma = 0.041 m_0$ ; Si:  $m_X > 0.2 m_0$ )
  - langsame Impuls-Relaxation ( $\tau_\Gamma \approx 200 \text{ fs}$ ; Si:  $\tau_X < 50 \text{ fs}$ )
  - 2d-Quantenfilm mit Modulations-Dotierung als Channel
- Gate-Längen derzeit 50 nm → Grenzfrequenzen > 600 GHz

# II.3 Spezielle Mikrowellen-Bauelemente

- **Mikrowellen**: elektromagnetische Wellen im Frequenzbereich von etwa 1 GHz bis 1 THz (Wellenlängen von etwa 300 mm bis 300 µm)
- **Mikrowellen-Bauelemente**: Leistungserzeugung im Mikrowellen-Frequenzbereich für verschiedene Anwendungen wie z.B. Radar, Sensorik, Astronomie etc.
- wir besprechen nur **zwei „klassische“ Beispiele** für Mikrowellen-Bauelemente:
  - Tunneldiode (sehr hohe Frequenzen, geringe Leistungen)
  - Gunn-Oszillator (hohe Leistungen, Frequenz limitiert)
- **Vielzahl moderner Konzepte** basierend z. B. auf resonantem Tunneln oder Bloch-Oszillationen in Halbleiter-Übergittern: oft erst bei tiefen Temperaturen => aktuelle Forschung

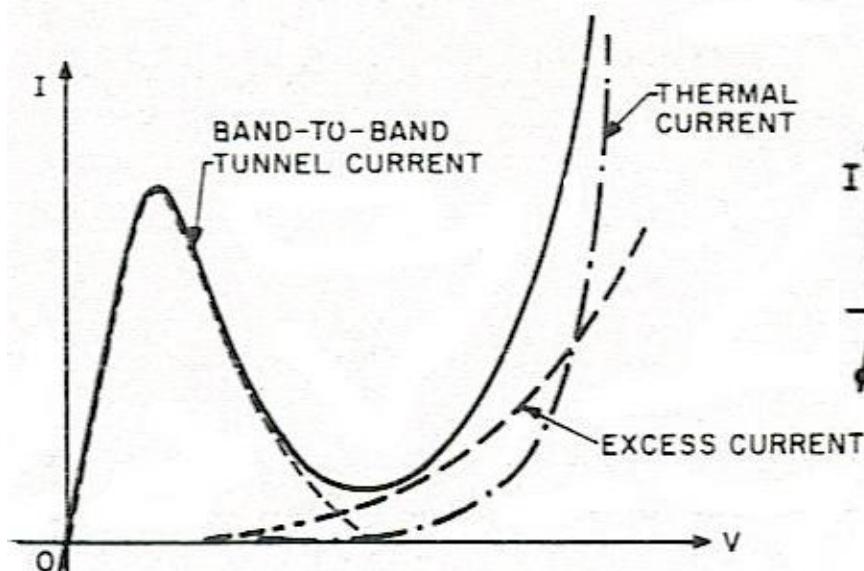
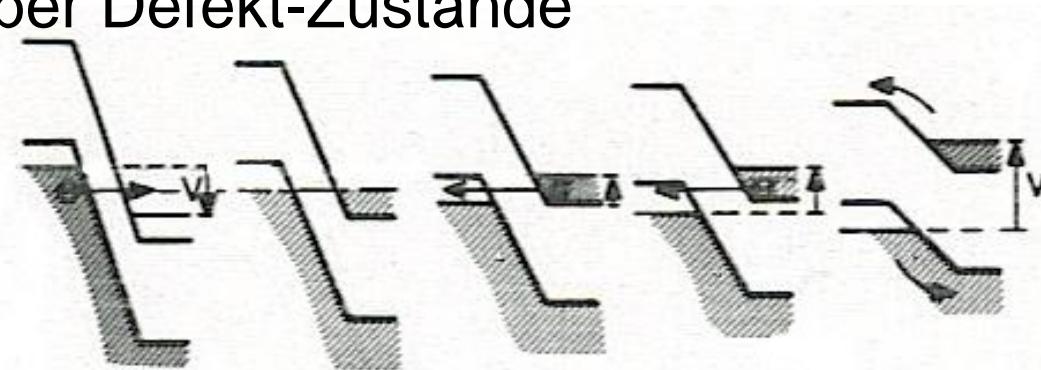
## II.3.1: (Interband-)Tunneldiode

- p-n-Übergang mit extrem hohen Dotierdichten  $N_A$  und  $N_D$ : entarteter Halbleiter (engl. „degenerate semiconductor“)
- Fermi-Niveau liegt im Valenz- bzw. Leitungsband
- Banddiagramm im thermischen Gleichgewicht:
- Entartungsgrad  $qV_p$  und  $qV_n$ : typisch mehrere  $kT$
- Verarmungszone: Weite  $W < 10 \text{ nm}$
- Strom-Spannungs-Kennlinie:

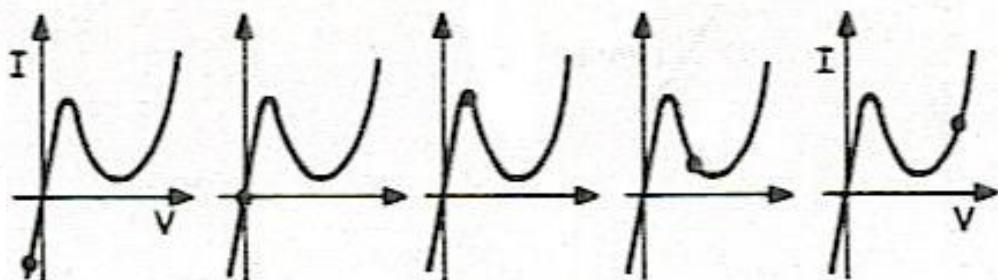


- negative differenzielle Leitfähigkeit  $dI/dV$ : Ausgleich ohmsche Verluste in LC-Schwingkreis!

- drei Komponenten bzw. Prozesse im Stromtransport:
- Interband-Tunneln, thermische Injektion und parasitäres Überschuss-Tunneln über Defekt-Zustände
- qualitative Diskussion des Verlaufs der Strom-Spannungs-Kennlinie:



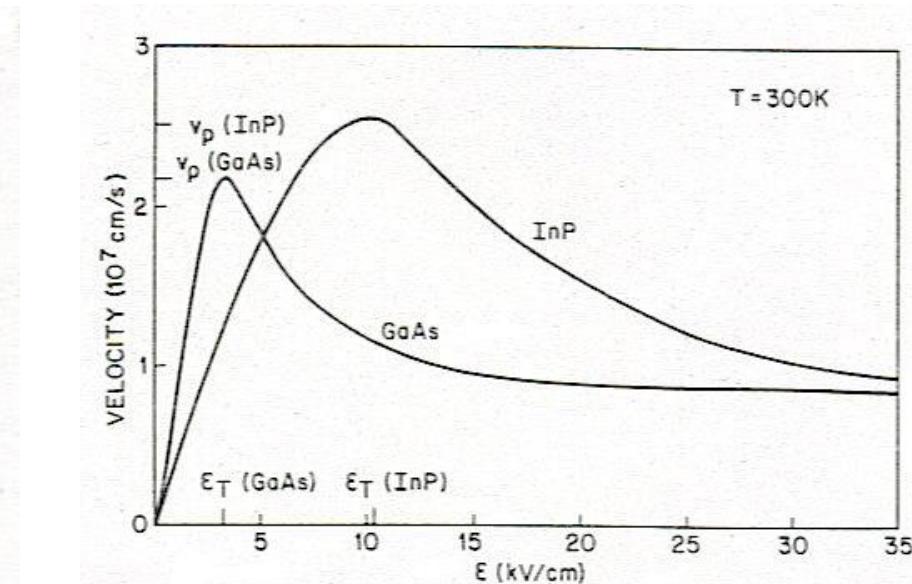
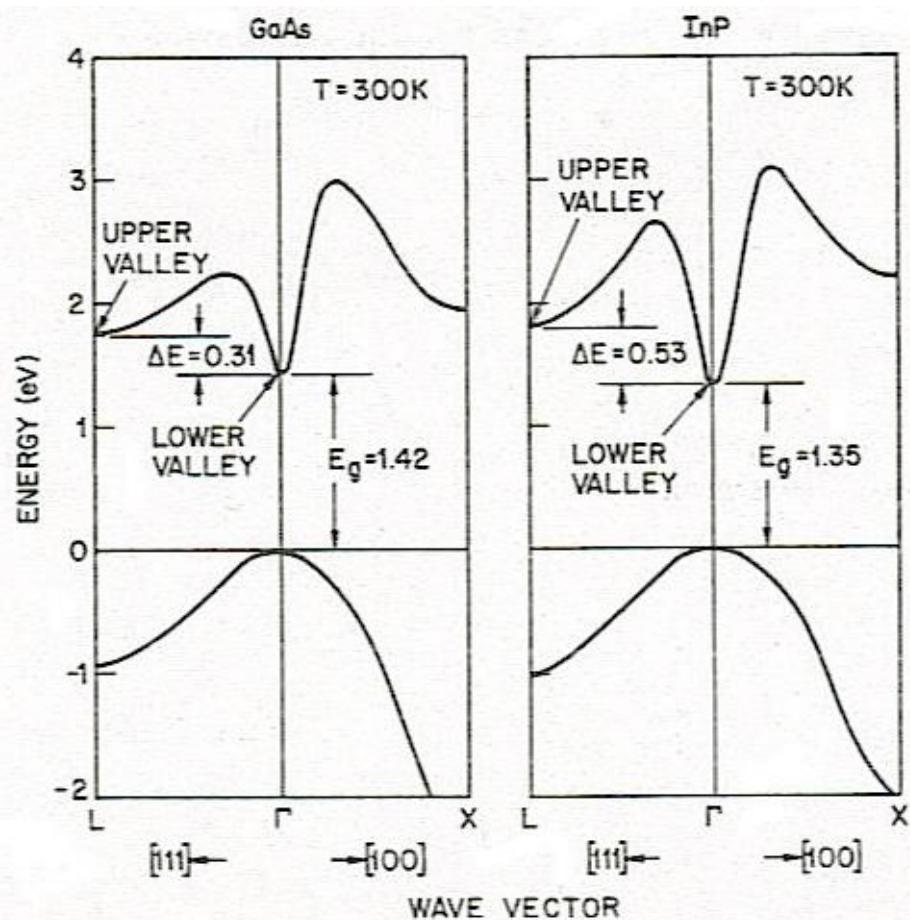
- Gesamtstrom und Beiträge über Spannung



- Interband-Tunneln ist instantan, also im Prinzip beliebig schnell
- extrem hohe Frequenzen erreichbar, Leistung begrenzt

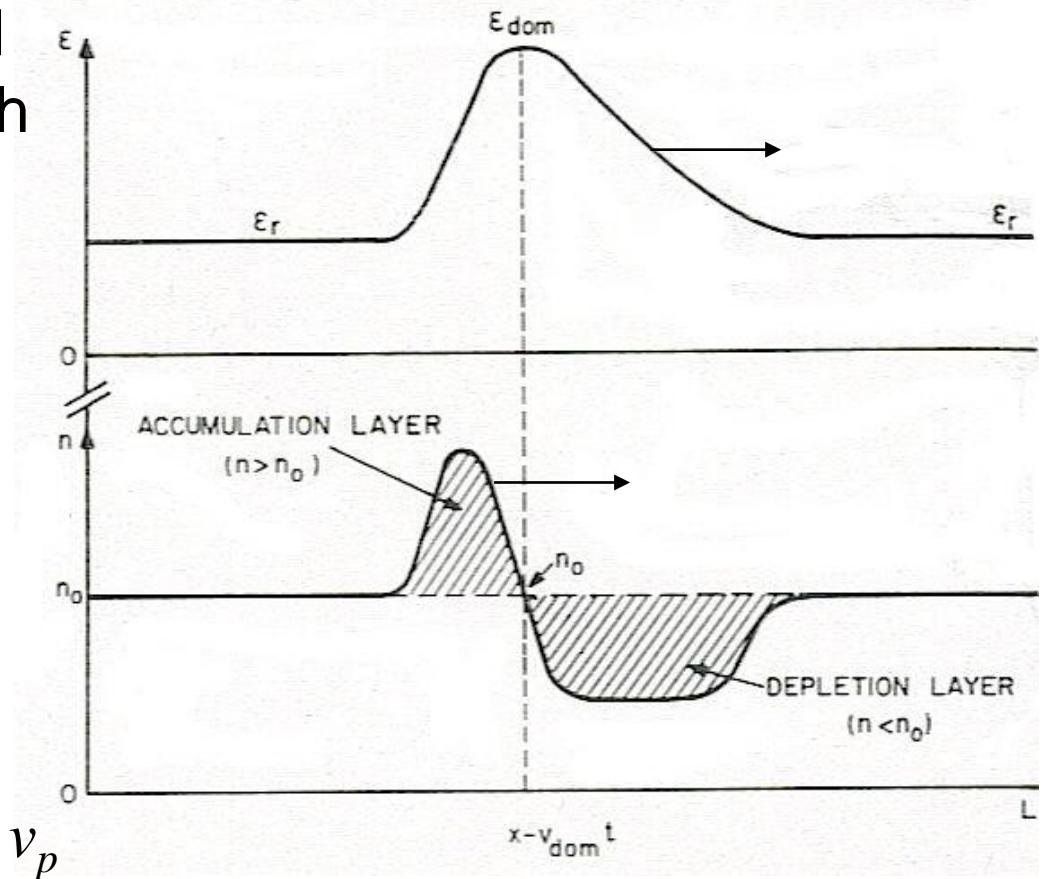
## II.3.2: Gunn-Oszillator

- Gunn-Effekt aus I.5.5: Hochfeld-Transfer von Elektronen aus dem  $\Gamma$ -Minimum in die Seitentäler im III-V-Halbleiter
- Struktur Leitungsbänder von GaAs und InP:
- stationäre Driftgeschw. über elektrischem Feld:

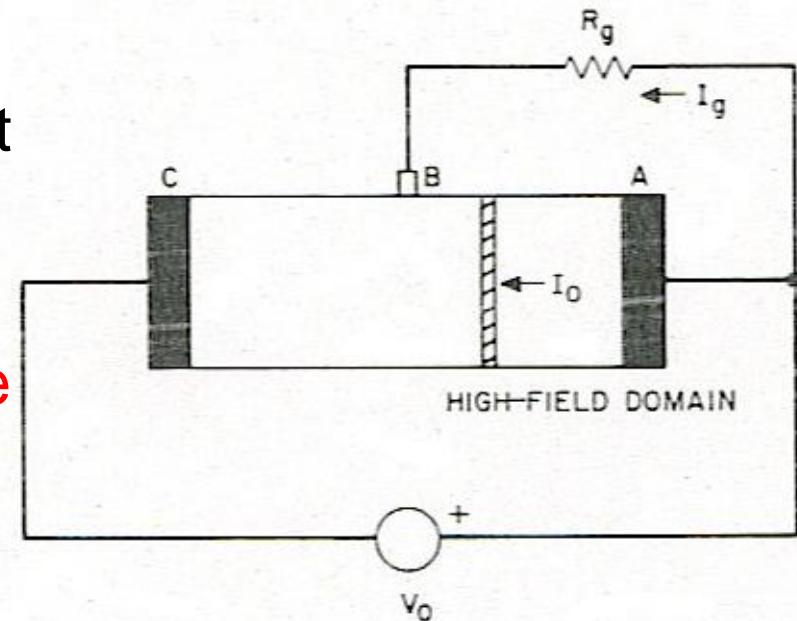


- Schwellenfeld  $\epsilon_T$  maximaler Driftgeschwindigkeit je nach Elektron-Phonon-Streuung im  $\Gamma$ -Tal und  $\Delta E^4$

- wir betrachten Bauelement aus n-dotiertem GaAs oder InP
- Gleichgewichts-Elektronen-Dichte  $n_0$
- äußeres elektrisches Feld  $\mathcal{E}_r > \mathcal{E}_T$
- Annahme: statistische Fluktuation des Feldes mit  $\mathcal{E}_{\text{dom}} > \mathcal{E}_r$
- negative differenzielle Leitfähigkeit: Elektronen stauen sich zu Akkumulations- und Verarmungs-Zone nach bzw. vor der Feldfluktuation
- exponentielles Anwachsen der FeldDomäne durch Feldverstärkung der Dipol-Schicht
- Propagations-Geschwindigkeit  $v_{\text{dom}} \approx v_p$



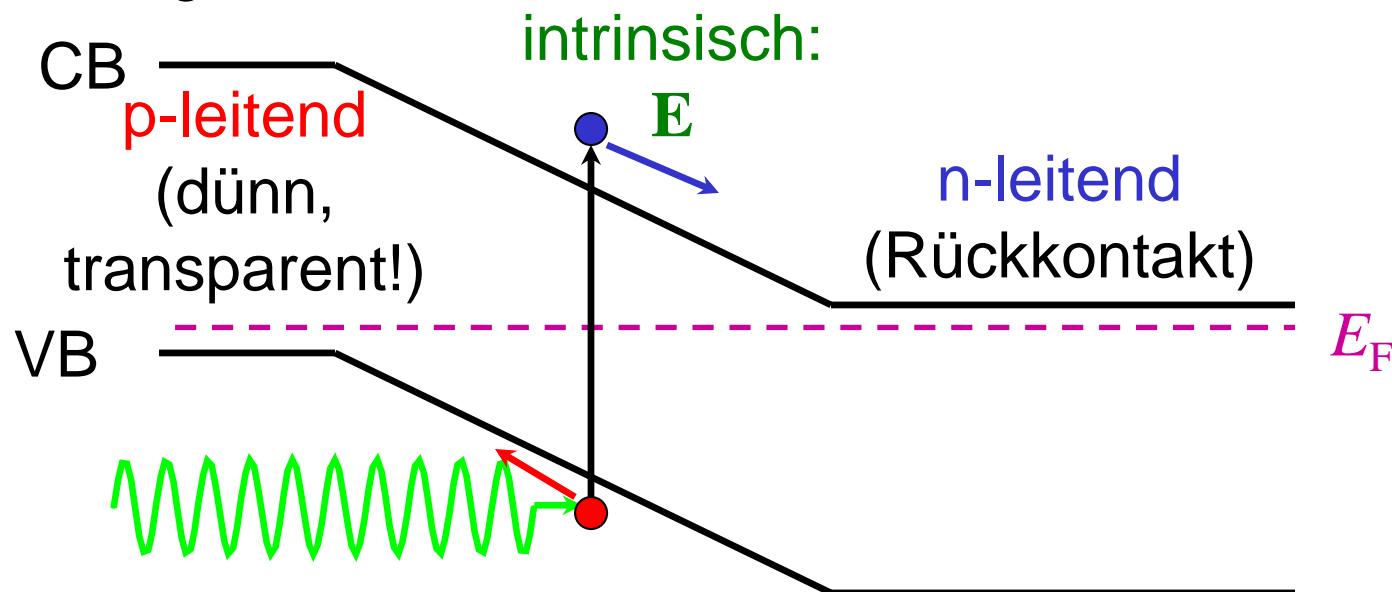
- Schaltung **Gunn-Oszillator**:
- **Rückkopplung** des beim Austritt aus der Kathode C generierten Feld-Impulses in die Anode A
- Start einer **neuen Feld-Domäne**
- selbst erhaltende **Oszillationen** mit Frequenz  $f \approx v_{dom} / L$
- material-inhärente **Limitationen der Frequenzen** in der Gunn-Oszillation:
  - Seitental-Transferzeit  $\tau_{\Gamma-L}$  bzw.  $\tau_{\Gamma-X}$ : typisch unter 50 fs  
=> unkritisch, würde Frequenzen bis > 10 THz erlauben
  - **Rückstreu-Zeit**  $\tau_{L-\Gamma}$ : im GaAs etwa 2.5 ps  
(langsam, geringe Dichte der Endzustände im  $\Gamma$ -Tal!)  
=> Frequenzen begrenzt auf unter  $(2\tau_{L-\Gamma})^{-1} \approx 200$  GHz
- robustes Bauelement aus Bulk-Material => **leistungsstark**
- Problem: Statistik und Hochfeld-Transport => **Rauschen**



# II.4 Photonische Bauelemente

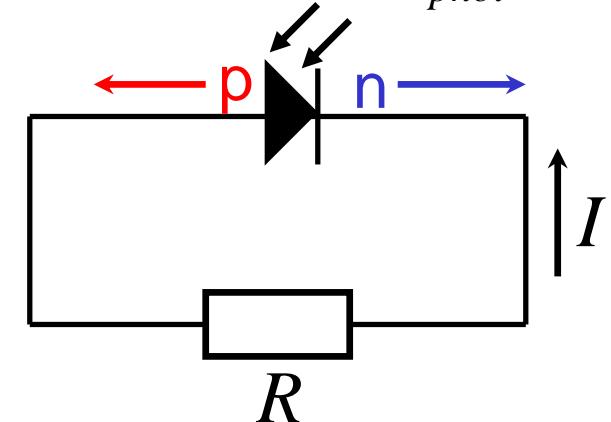
## II.4.1: Photodiode und Solarzelle

- p-i-n-Diode: **intrinsische Zone** zwischen **p** und **n**
- zusätzliche Verbreiterung der Raumladungszone
- Band-Diagramm und Funktionsweise:



- **Photon** mit  $h\nu > E_g$  erzeugt **Elektron-Loch-Paar**
- **Ladungstrennung** im eingebauten Feld **E**

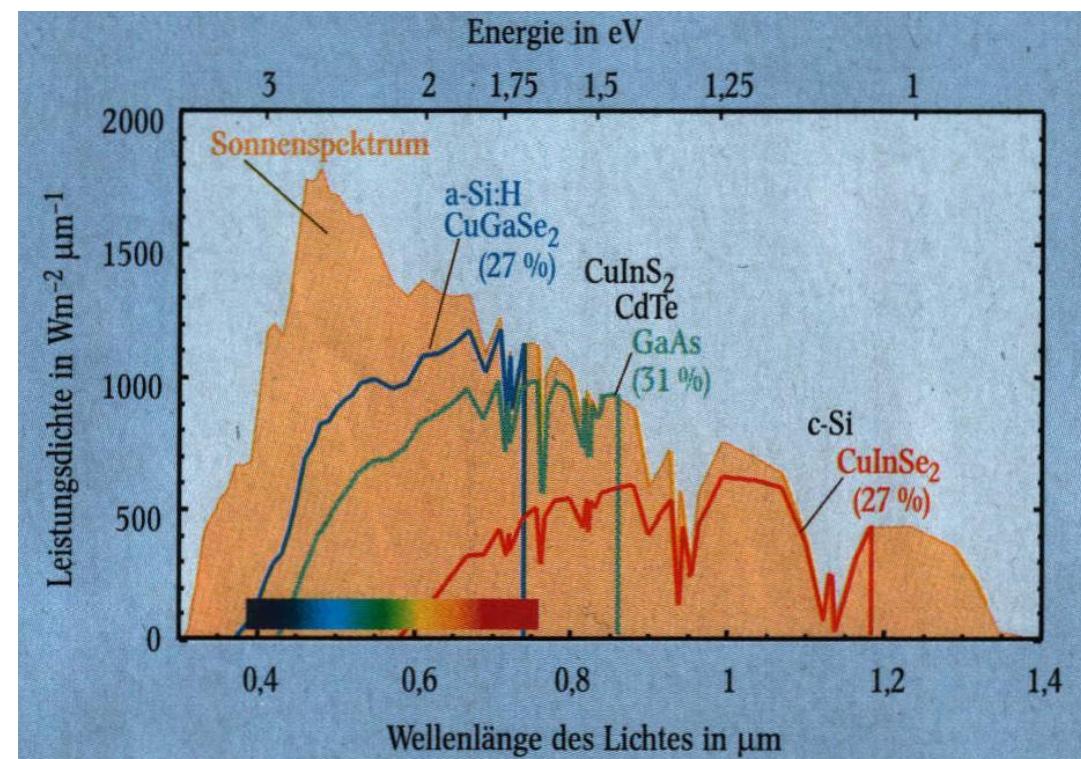
- Aufsammeln der photogenerierten Ladungsträger:  
Löcher im **p**- und Elektronen im **n**-Kontakt
- **Photostrom** proportional Strahlungsleistung:  $I = \rho eP / E_{phot}$
- $\rho$ : Quanten-Wirkungsgrad der Diode
- max. Spannungsabfall an  $R$ :  $U \approx E_g/e$
- optimale Dicke der i-Zone:  
Absorptionslänge  $\alpha^1$
- spektrale Empfindlichkeits-Bandbreite:
  - untere Grenze: Photonen mit Energie  $E_{phot} = h\nu > E_g$
  - obere Grenze: zu energiereiche Strahlung wird bereits im oberen Kontakt absorbiert
- wichtige **Materialsysteme** für Photodetektoren und Arrays:
  - Si: sichtbares Licht mit  $h\nu > 1.2$  eV ( $\lambda \approx 1 \mu\text{m}$  bis 400 nm)
  - InGaAs: nahes Infrarot mit  $h\nu > 0.65$  eV ( $1.7 \mu\text{m}$  bis 800 nm)
  - $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ : mittleres Infrarot (etwa 20 bis 2  $\mu\text{m}$ , Kühlung!)
  - GaN, SiC: UV, „solar blind“ mit  $h\nu > 3$  eV ( $\lambda < 400$  nm)



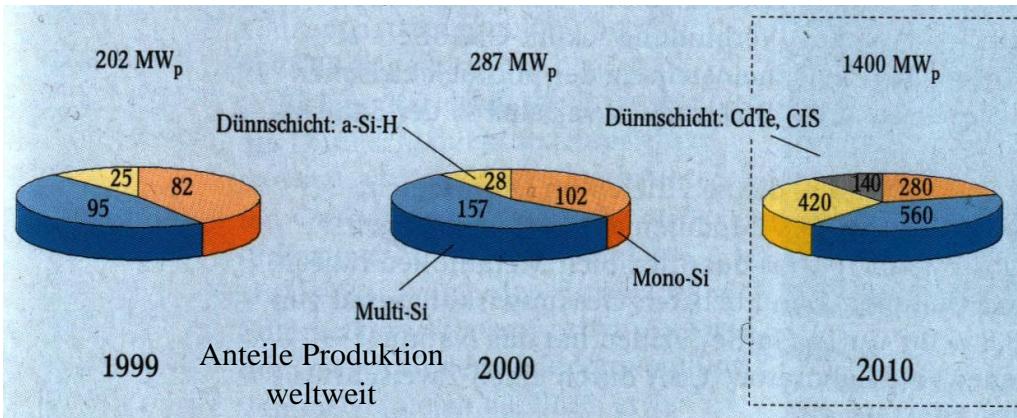
- Anwendungen für Licht-Strom-(Photon-Elektron-)Konverter:

- Detektion von Licht: „**Photodiode**“ (z. B. Empfänger für optische Telekommunikation; kleinflächig => schnelle Grenzfrequenzen, hohe Daten-Übertragungsraten; Oberfläche  $A$  typisch  $< \text{mm}^2$ )
- Energieerzeugung, **Photovoltaik**: „**Solarzelle**“ (große Oberfläche  $A$  typisch  $\text{m}^2$ )

- **Sonne**: Schwarzkörper-Spektrum mit  $T \approx 5400 \text{ K}$  gefiltert in Atmosphäre
- maximale Intensität  $I = 2 \text{ kW/m}^2$ : „**Solarkonstante**“
- spektrale Empfindlichkeit von Solarzellen aus verschiedenen Halbleiter-Materialien



- Sonnenenergie, die in einer halben Stunde auf die Erde fällt: Weltenergiebedarf für ein Jahr!
- Deutschland: durchschnittlich  $3 \text{ kWh/m}^2$  pro Tag
- Preis derzeit unter Herstellungskosten durch Aufbau großer Überkapazitäten in China [www.ise.fraunhofer.de](http://www.ise.fraunhofer.de)
- technisch schwerwiegenderes Problem: lokale **Speicherung!** (allerdings: Wirkungsgrad Pumpwasserspeicher > 80%)

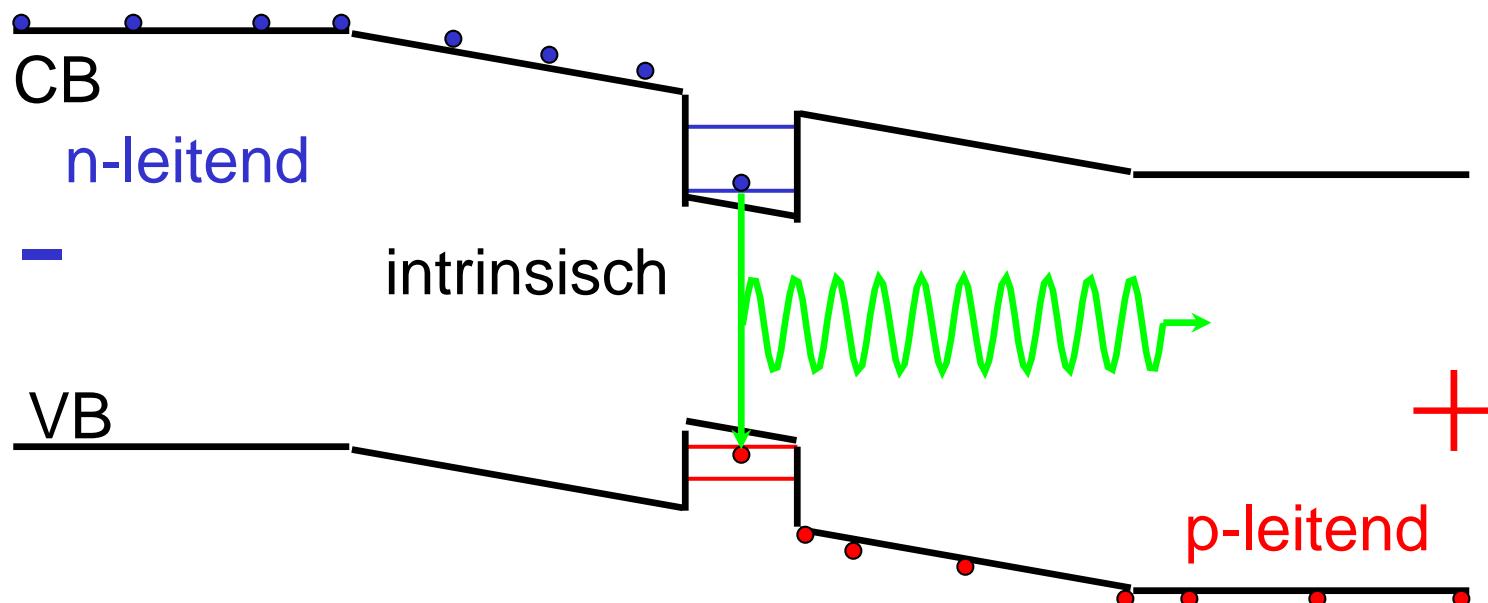


aus Physikalische Blätter,  
November 2001!  
(mono- und multi-)kristalline  
Silizium-Photovoltaik:  
2016 Marktanteil > 90%

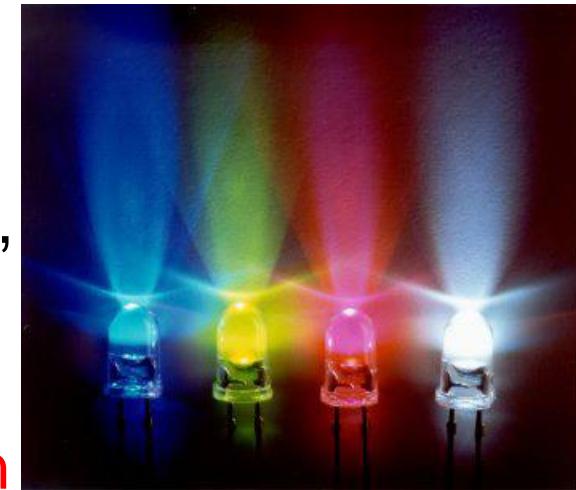
- Si (mono- oder poly-kristallin): billig, große Flächen herstellbar
  - empfindlich für Photonenenergie  $h\nu > E_g = 1.2 \text{ eV}$
  - energetischer **Wirkungsgrad** (2017, Labor): 26,3 %
- a-Si:H (amorph): potenziell noch billiger,  $E_g \approx 1.8 \text{ eV}$

## II.4.2: Leuchtdiode LED

- LED (engl. „light emitting diode“): p-i-n-Diode, in Vorwärtsrichtung gepolt
- Emission („Lumineszenz“) von Photonen durch strahlende Rekombination elektrisch injizierter Elektron-Loch-Paare
- aber: effiziente Rekombination nur bei hoher Konzentration von Elektronen und Löchern im gleichen Raumbereich
- technische Lösung: Quantenfilm als Potenzialtopf (siehe I.7)



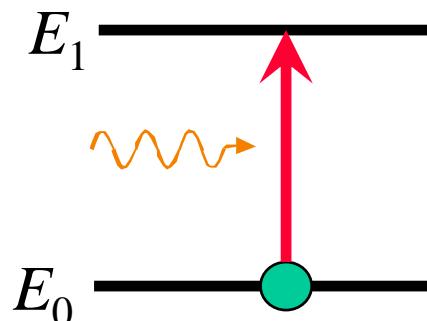
- wichtige **Materialsysteme** für LEDs:
  - GaAs/AlGaAs (NIR/rot): 870 – 650 nm; 1.43 – 1.9 eV
  - GaInP/AlGaInP (gelb/orange/rot): 650 – 540 nm; 1.9 – 2.3 eV
  - InGaN/AlGaN (UV/blau): 460 – 360 nm; 2.7 – 3.4 eV
- erst seit kurzem: effiziente Emitter auf Basis **InGaN** im grün-blauen Bereich bis 550 nm (Problem: metallische In-Cluster)
- bisher: Farbstoffe, die UV-Licht aus GaN-LED absorbieren und im VIS re-emittieren
- **Anwendungen** LEDs: Displays (Organika!), Energie-effiziente Beleuchtung, etc.
- beachte: Licht-emittierende Bauelemente fast ausschließlich aus **direkten Halbleitern** hergestellt (effiziente strahlende Rekombination an den Bandkanten durch stark Dipol-erlaubte Übergänge, siehe I.6.2)
- Emission von **inkohärentem Licht** mit einer **Bandbreite von typisch mehreren 10 meV** (vergleiche Laser II.4.3)



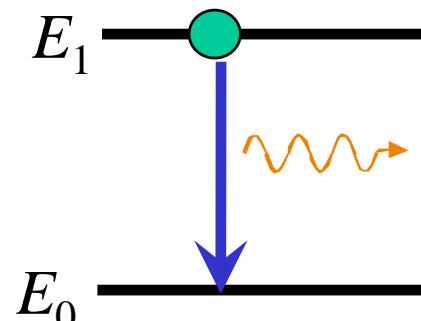
## II.4.3: Halbleiter-Diodenlaser

### II.4.3.1: Physikalische Grundlagen des Lasers

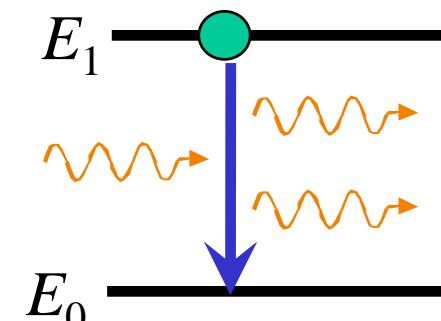
- LASER: „light amplification by stimulated emission of radiation“ + Rückkopplung des Strahlungsfeldes
- elektro-magnetisches **Feld ist quantisiert** in kleinste Energie-pakete (Photonen) mit Quantenenergie  $E_{phot} = h\nu$
- 3 Möglichkeiten der **Wechselwirkung mit Materiesystem** (z. B. Atom, Molekül, Festkörper) mit Energie-Niveaus  $E_1 - E_0 = h\nu$ :



Absorption



spontane  
Emission



stimulierte  
Emission

- grundlegender Voraussetzung für **Lichtverstärkung** durch **stimulierte Emission: Besetzungs-Inversion** im Lasermedium
- **Absorption**  $\alpha(\omega)$  des direkten Interband-Überganges für **endliche Besetzungszahlen**  $f_c(\mathbf{k})$  der Elektronenzustände im Leitungsband und  $f_v(\mathbf{k})$  der Löcher im Valenzband:

$$\alpha(\omega) = \alpha_0(\omega) [1 - f_c(\mathbf{k}) - f_v(\mathbf{k})]$$

mit der Absorptionskonstante im Grundzustand  $\alpha_0(\omega)$

und der Photonen-Energie  $\hbar\omega = E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k})$

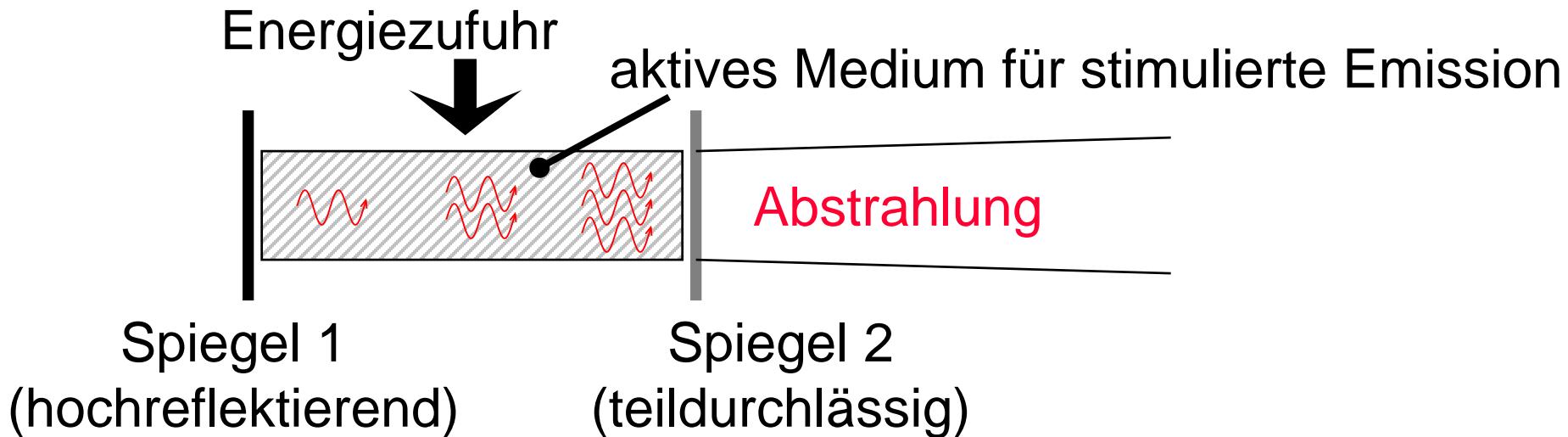
- falls  $f_c(\mathbf{k}) + f_v(\mathbf{k}) > 1$  wird  $\alpha(\omega) < 0$ : **Verstärkung** (engl. „gain“)

The diagram consists of four panels showing energy levels (CB: Conduction Band, VB: Valence Band) represented by horizontal rectangles. In each panel, a blue shaded region indicates occupied states, while the rest of the band is white.

- Absorption:** The VB is filled (blue). A red arrow labeled  $\hbar\omega$  points from the VB up towards the CB.
- Transparenz:** The VB is partially filled (blue). A red arrow labeled  $\hbar\omega$  points from the VB up towards the CB, but it is crossed out with a large red X.
- Transparenz:** The VB is mostly empty (blue), with only a thin layer at the bottom filled. A red arrow labeled  $\hbar\omega$  points from the VB up towards the CB, but it is crossed out with a large red X.
- Verstärkung:** The VB is mostly empty (blue), with only a thin layer at the bottom filled. A red arrow labeled  $\hbar\omega$  points from the CB down towards the VB.

4

- 3 grundlegende Komponenten des Lasers:  
**aktives Medium, Resonator, Pumpquelle**

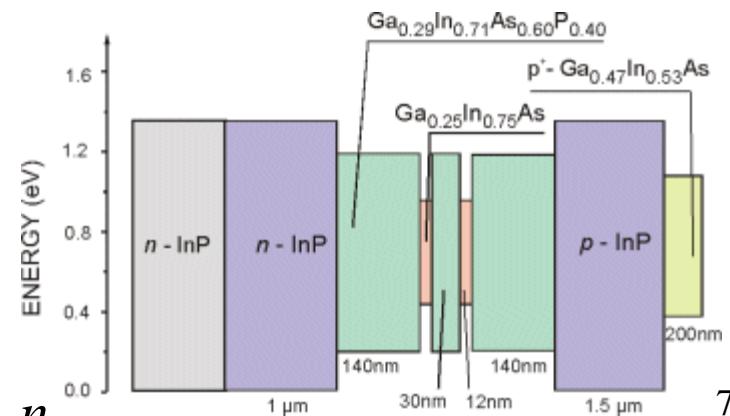
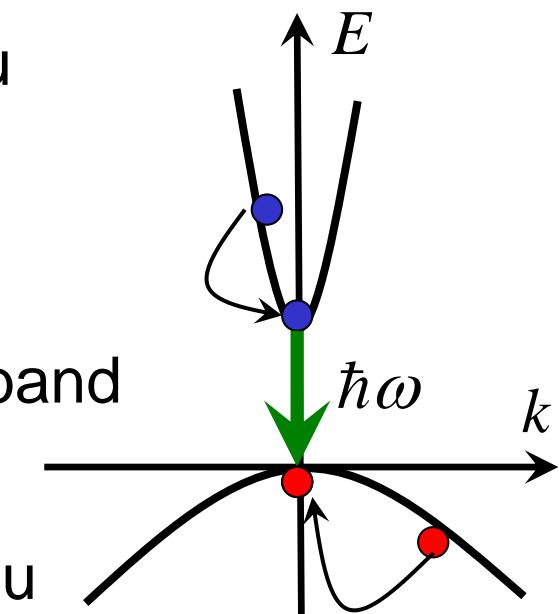


- typische **Eigenschaften** der Laserstrahlung:
  - stark gerichtet, „räumlich kohärent“
  - scharf fokussierbar auf Fläche  $A \approx \lambda^2$  → hohe Intensität
  - geringe Frequenzbandbreite, „monochromatisch“
  - lange Wellenzüge ohne Phasensprünge,  
„zeitlich kohärent“

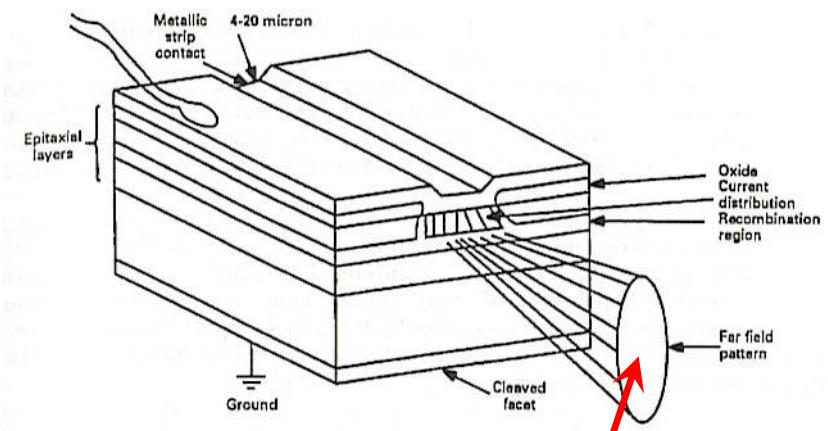
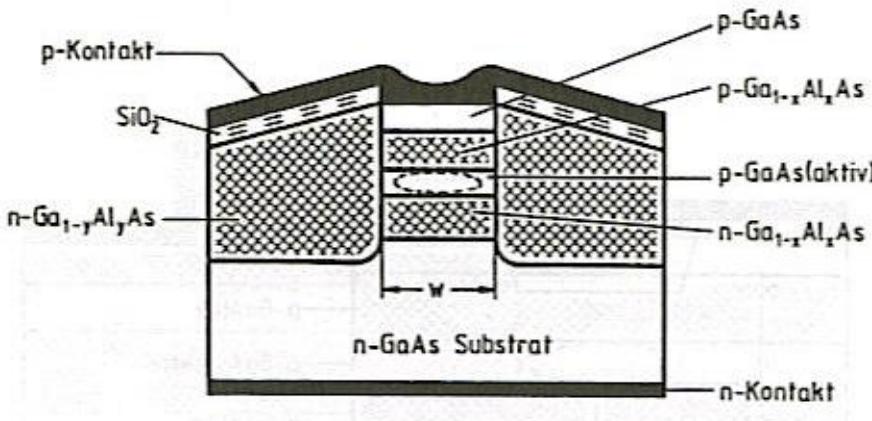
## II.4.3.2: Interband-Diodenlaser

- Lasermedium: **Halbleiter mit direkter Bandlücke**  
(typisch 2d-Quantenfilm, modern 0d-Quantenpunkte)
- Pumpmechanismus: elektrische **Injektion von Elektron-Loch-Paaren** in vorwärts gepolter p-i-n-Struktur
- spezielle Eigenschaften + resultierende Anwendungen:
  - extrem kompakt (sub-mm) → Leseköpfe für CDs etc.
  - sehr effizient, hohe Leistungen → Pumplichtquellen
  - schnell modulierbar → Glasfaser-Telekommunikation
- weiter Wellenlängenbereich durch verschiedene **Materialsysteme**, zum Beispiel:
  - GaAs/AlGaAs: 650 nm bis 850 nm (billig, Laserpointer etc.)
  - InGaAs/InP: 980, 1300 und 1550 nm (Telekom-relevant)
  - InGaN/AlGaN: 400 nm (kurze Wellenlänge, Datenspeicher...)

- e-h-Besetzung → Bandkanten-Renormierung → direkter Halbleiter ist **4-Niveau-System**: effiziente Inversion
- schnelle Besetzung oberes Laserniveau durch **Relaxation hochenergetischer Elektronen ans Leitungsband-Minimum** (Zeitskala typisch 100 fs)
- elektrischer **Dipol-Übergang ins Valenzband** (strahlende Lebensdauer etwa 1 ns)
- schnelle Entleerung unteres Laserniveau durch **Relaxation von hochenergetischen Löchern ans Valenzband-Maximum** (Zeitskala typisch 100 fs)
- **Doppel-Heterostruktur** (Beispiel):
  - Quanten-Confinement für Elektronen in InGaAs-Quantenfilm
  - Wellenleiter für optische Mode durch InP-Claddings mit niedrigem  $n$

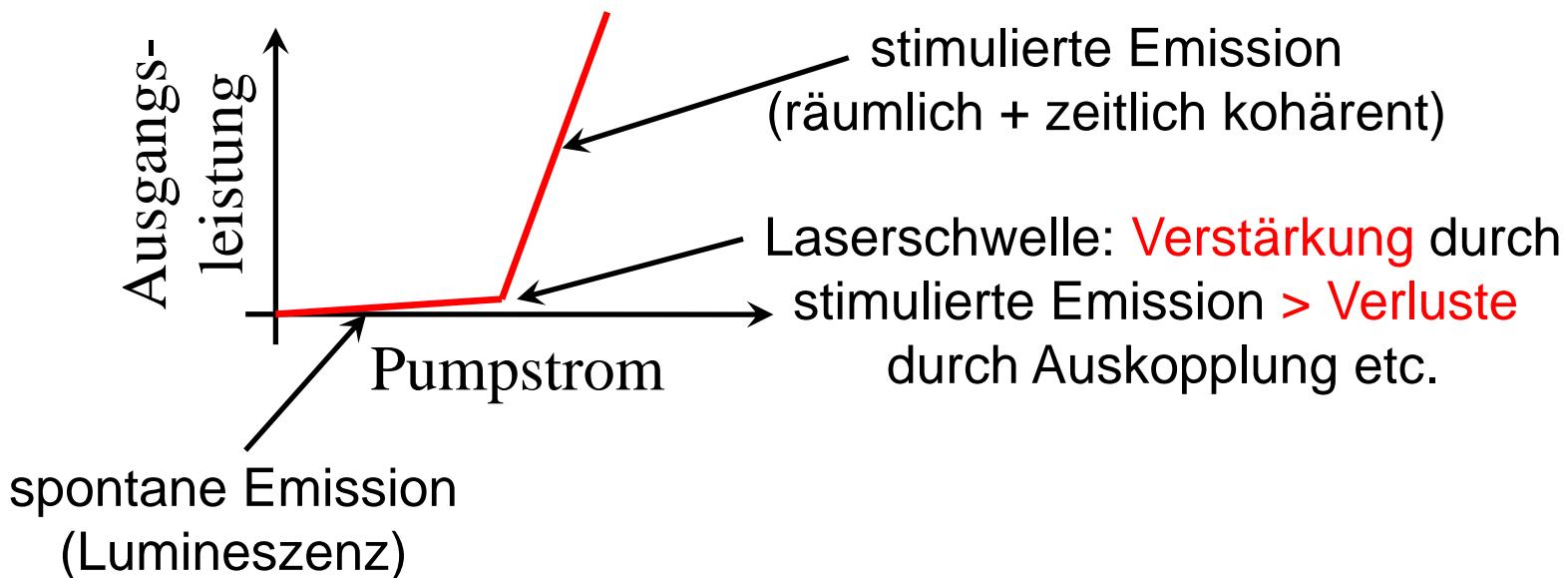


- **Aufbau Laserdiode:** LED unter Inversion mit Rückkopplung!
  - Spiegel: Reflexion an Halbleiter-Oberflächen (Spaltflächen)
  - Halbleiter besitzen hohen Brechungsindex! z. B. GaAs:  $n = 3.6$
  - Reflektivität GaAs-Oberfläche:  $r = (n - 1)^2/(n + 1)^2 = 0.32$
  - Halbleiterlaser weisen hohe Verstärkung auf => schlechte Rückkopplung bzw. Resonatorgüte ausreichend, um Laserschwelle zu erreichen
  - technische Ausführung typischer Kantenemitter:



- Querschnitt Wellenleiter: typisch  $1 \mu\text{m} \times 10 - 100 \mu\text{m}$
- daher: Beugungseffekte + **stark elliptisches Fernfeld**

- Strom-Leistungs-Kennlinie Halbleiterlaser:

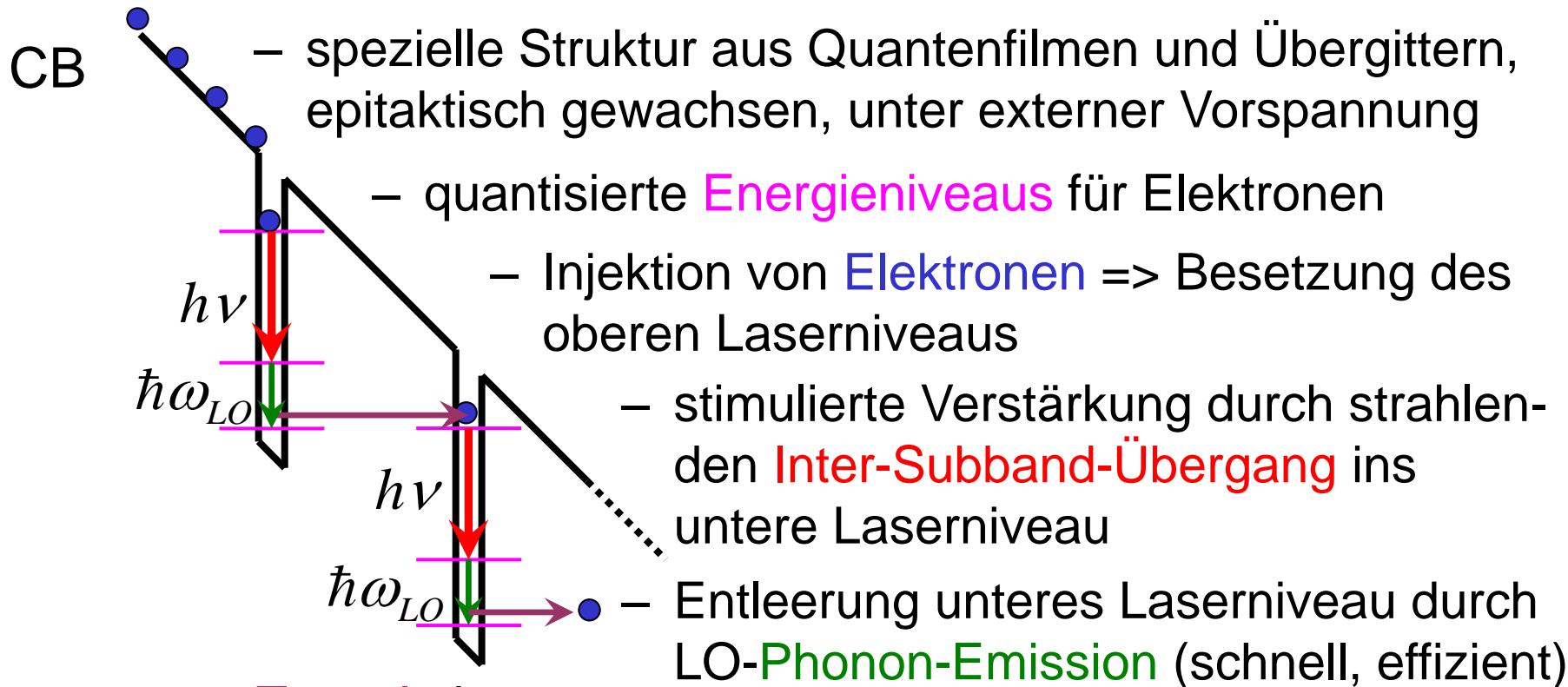


- typische Schwellenstromdichten: 10 bis 1000 A/cm<sup>2</sup>, je nach Materialsystem (GaAs/AlGaAs, InGaN/AlGaN), Typ (Kanten- bzw. Oberflächenemitter, Quantenkaskaden...) und äußeren Bedingungen (Temperatur)
- kurze Resonatorlängen (etwa 1 mm) => großer Frequenzabstand der longitudinalen Moden (etwa 100 GHz)
- kleines Resonator- und Pumpvolumen => extrem schnell über Pumpstrom modulierbar (bis über 10 GHz)

## II.4.3.3: Quanten-Kaskadenlaser QCL

- Vorschlag: R. F. Kazarinov und R. A. Suris (1971)  
erste Realisierung: F. Capasso et al. (Bell Labs, 1994)
- Lasermedium: speziell entwickelte und komplexe **Halbleiter-Heterostrukturen** mit effizienten **Inter-Subband-Übergängen**
- QCL ist **monopolares Bauelement**, Wellenlänge durch Design Heterostruktur vorgegeben und unabhängig von  $E_g$ !
- **Materialsysteme** für bereits funktionierende QCLs:
  - InGaAs/InP:  $\lambda = 4 - 17 \text{ } \mu\text{m}$ ,  $E_{phot} = 300 - 70 \text{ meV}$  (MIR)
  - GaAs/AlGaAs: MIR; FIR 1 – 4 THz:  $\lambda \approx 100 \text{ } \mu\text{m}$ ,  $E_{phot} \approx 10 \text{ meV}$
- viel versprechende Materialsysteme für zukünftige QCLs:
  - SiGe: intra-Valenzband, kaum Phonon-Absorption
  - InGaN/AlGaN: große Band-Offsets → QCLs im Sichtbaren?

- **Grundidee QCL:** Mehrfach-Nutzung, Recycling von Elektronen



- **funktionsfähige Struktur:**

- 10 bis 100 Perioden wiederholt

- Meisterleistung Epitaxie + „bandgap engineering“

