

# 1 Begriffe

$N_A, N_D$  : Die Dichten der für die Dotierung verwendeten Akzeptoren, bzw. Donatoren

$N_V, N_C$  : die effektiven Zustandsdichten, welche über Approximation der Anzahl der Zustände zB im Leitungsband erhalten werden (siehe Section 4 und 5).  $N_V$  .. Valenzband,  $N_C$  .. conduction Band.

$n_e$  **bzw**  $n_n$  **und**  $n_h$  **bzw**  $n_p$  Ladungsträgerkonzentrationen/Dichte in den jeweiligen Bändern

## 2 Grundlagen

### 2.1 Basic Band Theory

Fangen an mit freiem Elektronengasmodell mit nur einem Elektron in einem Potentialtopf der breite  $L$ , welcher den Kristall darstellen soll. In diesem Fall kann anscheinend die Energie des Elektrons nur vollständig in kinetischer Form vorliegen. Jetzt wird die zeitunabhängige Schrödingergleichung mit Potential gleich 0 und periodischen Randbedingungen gelöst zu:

$$\psi = \left(\frac{1}{L}\right)^{3/2} \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (1)$$

mit  $k_x = \pm n_x \cdot 2\pi/L$  mit der Quantenzahl  $n_x = 0, 1, 2, \dots$  und genauso für die anderen beiden Komponenten von  $\mathbf{k}$ .

Für die Geschwindigkeit des Elektrons erhält man

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{m_e} = \frac{\hbar \cdot \mathbf{k}}{m_e}. \quad (2)$$

Da die total Energy hier identisch mit  $E_{\text{kin}}$  ist, gilt

$$E = \frac{m_e v^2}{2} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (3)$$

Das ist eine Dispersionsrelation, weil  $E$  durch  $\mathbf{k}$  ausgedrückt wird. Diese ganze Herleitung ist dazu da gewesen, um zu zeigen, dass die Energiewerte nur diskret sein können. Dieses Ergebnis ist auch dann noch gültig, wenn man mit den korrekten Potentialen rechnet und mehrere Elektronen betrachtet. Der Zusammenhang zwischen  $E$  und  $\mathbf{k}$  wird dann jedoch deutlich komplexer.

Jetzt wo die Energielevel bekannt sind, kann man zählen, wie viele Energielevel es in einem Energieintervall  $\Delta E$  bei der Energie  $E$  gibt. Das macht man im  $k$ -Raum, im phase space.

Im phase space ist eine Fläche konstanter Ebene eine Sphäre, da alle Punkte, deren  $\mathbf{k}$  die selbe Länge haben auch den selben Energiewert besitzen. Jeder Zustand (jede Lsg. der Schrödingergleichung) mit einem bestimmten  $\mathbf{k}$  nimmt ein Volumen ein (kleine Würfel). Die Anzahl of cubes die in die Sphäre zur Energie  $E$  passen ist die Zahl aller Energiezustände bis zu  $E$ .

Jetzt wollen wir die density of states  $D(E)$  ermitteln.

Ein einzelner Zustand nimmt im  $\mathbf{k}$ -Raum ein Volumen von  $(2\pi)^3/V$  mit  $V = L_x L_y L_z$  und mit dem Faktor 2 für die Spinartung hat man einen Zustand pro diesem Volumen  $\rightarrow Z(\mathbf{k}) = 2 \cdot V/(2\pi)^3$ .

Die Zustandsdichte im Energieraum erhält man mit der Dispersionsrelation von oben und der Beziehung

$$Z(\mathbf{k})d^3k = D(E)dE. \quad (4)$$

*Wo kommt das her?*

Die Herleitung im Marx ist für mich immer durch irgendwelche Approximationen nicht konkret genug. Jedoch kommt dabei das überall stehende Ergebnis mit  $D(E) \sim \sqrt{E}$  raus.

### 3 Fermi-Verteilung

Sie gibt die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Platz bei der Energie  $E$  und Temperatur  $T$  in einem System von Fermionen, das durch die Fermienergie  $E_F$  charakterisiert ist, besetzt ist. Ein System, bei dem die Besetzung der verfügbaren Plätze dieser Verteilung folgt, ist automatisch im thermodynamischen Gleichgewicht, d.h. es hat die kleinstmögliche freie Energie  $G = E - TS$ .

$$f(E; E_F, T) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \quad (5)$$

Die Fermienergie ist die Energie bei der  $f(E_F; E_F, T) = 1/2$  gilt. Für sie gilt, dass sie wenn man  $T$  gegen Null gehen lässt angibt welche Energie der letzte noch besetzt Platz hat. Die Fermienergie ist bzgl  $E_F$  punktsymmetrisch und man kann sie für  $E - E_F > 2k_B T$  durch die Boltzmannnäherung ersetzen:

$$f(E, T) \approx e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}} \quad (6)$$

### 4 Ladungsträgerkonzentration etc.

Die Frage nach der Anzahl an Zuständen im Leitungsband bei geg. Temperatur  $T$  wird wie folgt beantwortet: Die Dichte der Elektronen bei Energie  $E$  ist gleich die Zahl der vorhandenen Plätze (Zustandsdichte  $D(E)$ ) mal die Wahrscheinlichkeit der Besetzung ( $f(E)$ ) und das dann über alle Energien aufsummiert (integriert).

Also wie viele Zustände gibt es mal die Wahrscheinlichkeit diese auch zu besetzen? Mit Boltzmann Näherung und Abschätzung durch  $N_{\text{eff}}$  wird die Dichte der Elektronen im Leitungsband dann noch abgeschätzt:

$$n_e = \int_{E_L}^{\infty} D(E) f(E; E_F, T) dE \quad (7)$$

$$\approx N_{\text{eff}}^C e^{-\frac{E_L - E_F}{k_B T}} \quad (8)$$

Die untere Gleichung definiert  $N_{\text{eff}}$ .

Jetzt wollen wir die Dichte der Löcher berechnen. Die Dichte der Löcher zur Energie  $E$  ist gleich der Zahl der vorhandenen Plätze ( $D(E)$ ) mal die Wahrscheinlichkeit der Nichtbesetzung ( $1 - f(E)$ ):

$$n_h = \int_{-\infty}^{E_V} D(E) [1 - f(E; E_F, T)] dE \quad (9)$$

$$\approx N_{\text{eff}}^V e^{-\frac{E_F - E_V}{k_B T}} \quad (10)$$

#### 4.1 Massenwirkungsgesetz

Für den perfekten (intrinsischen) Halbleiterkristall stammen alle Elektronen im Leitungsband aus dem Valenzband:

$$n_e = n_h =: n_i \quad (11)$$

Das Massenwirkungsgesetz lässt sich wie folgt über 7 und 9 berechnen). Durch Gleichsetzen von  $n_e$  und  $n_h$  im intrinsischen Fall erhält man:

$$n_i = N_{\text{eff}} e^{-\frac{E_L - E_V}{2k_B T}} = N_{\text{eff}} e^{-\frac{E_G}{2k_B T}} \quad (12)$$

(Dabei geht mit ein, dass in diesem Fall wohl die effektiven Zustandsdichten gleich sind, weil sonst könnte man die nicht wegekürzen um den einfachen Ausdruck  $E_F = \frac{E_L + E_V}{2}$  für die Fermienergie zu erhalten den man dann einsetzen kann.) Wenn man jetzt  $n_e$  und  $n_h$  miteinander multipliziert erhält man:

$$n_e \cdot n_h = N_{\text{eff}}^2 e^{2 \frac{-E_L + E_F - E_F + E_V}{2k_B T}} = n_1^2 \quad (13)$$

Da aber für die letzte Rechnung gar nicht vorgegeben war, dass es sich um einen intrinsischen HL handelt, gilt allgemein das Massenwirkungsgesetz:

$$n_e \cdot n_h = n_i^2 \quad (14)$$

Die Energielücke und die intrinsische Ladungsträgerdichte stellen im Grunde den selben Materialparameter dar:

$$n_i = N_{\text{eff}} e^{-\frac{E_L - E_F}{k_B T}} \quad (15)$$

## 5 effektive Zustandsdichte

Sie ist diejenige Zustandsdichte (Zahl der Zustände pro Volumen), die von Elektronen im Leitungsband, bzw. Löchern im Valenzband besetzt werden können und bei der statt der Masse des Elektrons die effektive Masse für das jeweilige Band eingesetzt werden muss. Für das Leitungsband zB:

$$N_C = 2 \cdot \left( \frac{2\pi m^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot M_C \quad (16)$$

wobei  $M_C$  die Anzahl der Energieminima des Bandes entspricht. Die effektive Zustandsdichte wird benötigt, um die Zahl der Ladungsträger im Leitungsband zu berechnen (ich glaube siehe 4).

## 6 Ladungsträgerkonzentration

Ist die Anzahl der zum elektrischen Strom beitragenden Ladungsträger pro Volumen (also eine Art Dichte).

## 7 Dotierung

Wenn man ein Phosphoratom in einen Siliziumkristall einbringt bleibt nach der Bindung mit vier Nachbarsiliziumatomen ein Elektron übrig, welches nur leicht an das Phosphoratom gebunden ist. Eine kleine Energie (ca. 50 mV) reichen aus, um es zu lösen und damit ins Leitungsband zu heben. Die solche Dotierung, welche Elektronen hinzufügt nennt man n-Dotierung.

Wenn man ein Boratom (Akzeptor) einbringt, bleibt nach der Bindung ein Loch, welches mit wenig Energie von einem Elektron im nahegelegenen Valenzband besetzt werden kann, was dann dafür sorgt, dass sich nun ein Loch im Valenzband befindet.

Dotierung beeinflusst die Lage der Fermienergie.

Für die Dichte

## 8 Erklärungen

### 8.1 Bias

*Bisher habe ich das so verstanden, dass das einfach die Spannung ist, die zwischen Source und Gate angelegt ist.*

In einem Paper über NBTI (Statistical Model for MOSFET Bias Temperature Instability Component Due to Charge Trapping von G. Wirth) steht, dass bei konst. Bias nur states (traps) nahe des Fermilevels eine starke Aktivität aufweisen, also ihren Zustand zwischen besetzt und leer wechseln. Das kann man als steady state condition interpretieren -> occupation probability of a trap is time independent -> Anzahl an Traps die als besetzt erwartet werden ist konstant. Falls der bias point sich abrupt ändert, ändert sich auch die Besetzungswahrscheinlichkeit abrupt. *Intuitiv kann ich das nicht einordnen.*

## 8.2 threshold voltage

Das ist die minimale Gate-Source Spannung, die angelegt sein muss, damit eine leitende Brücke zwischen source und drain entsteht.