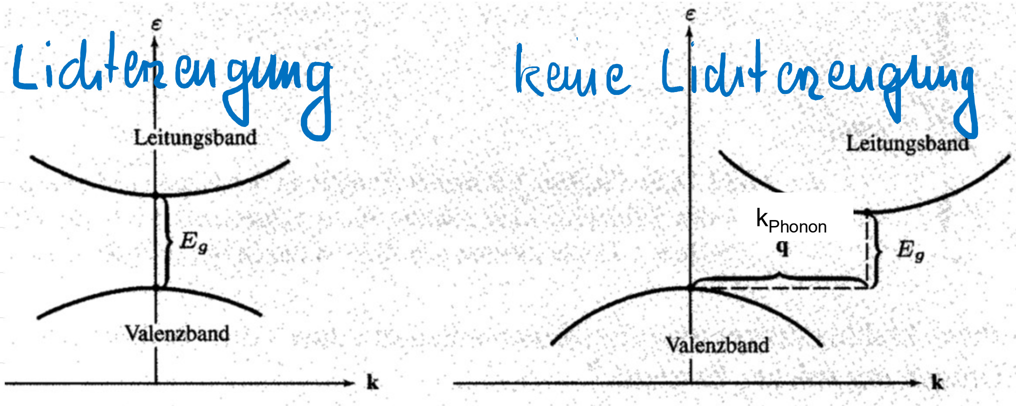
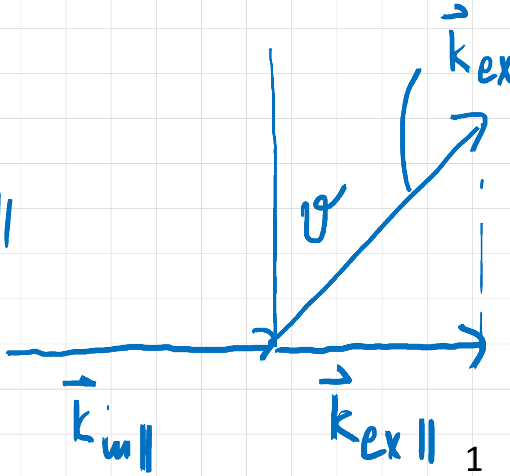
- Halbleiter
  - Ge - indirekte Bandlücke
  - GaAs - direkte Bandlücke

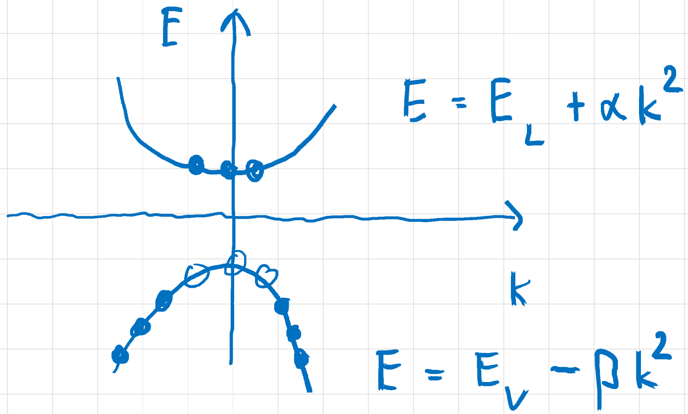


- Gr - spezieller Halbleiter
- Diamant - Isolator transparent, keine Absorption durch Interbandübergänge
- Photoemission $\hbar\omega = \phi + E_{kin} + E_b$
- winkelintegriert -> Zustandsdichte
- winkelaufgelöst -> Bandstruktur $k_{ex} = \sqrt{\frac{E_{kin}\, 2m}{\hbar^2}} \Rightarrow k_{ex\parallel}$

$$\vec{k}_{in\parallel} + k_{Photon} = \vec{k}_{ex\parallel} + \vec{G}$$



9. Halbleiter



Um Ladungstransport in Halbleitern und Halbleiterbauelemente zu verstehen, müssen wir uns zunächst mit der Wirkung äußerer Kräfte auf e^- in Bändern beschäftigen. Dabei treten speziell bei Halbleitern Situationen auf, wo im Valenzband wenige e^- fehlen (Löcher) und wo im Leitungsband nur wenige e^- anwesend sind.

9.1 Bewegungsgleichung und Löcher

- Zur Beschreibung von Transportphänomenen stellen wir uns statt delokalisierter Wellen einzelne Wellenpakete vor, die aus nahe beieinander liegenden Wellenvektoren um $\vec{k}$ aufgebaut sind. Folgende Ableitung zunächst für 1D Festkörper und e^- in einem Band $E(k)$

Dann ist die Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets $v_g = \frac{d\omega}{dk}$

und mit $E = \hbar\omega \Rightarrow v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$ (*)

Ein Feld E_{el} verrichtet in δt die Arbeit δE am e^-:

$$\delta E = -e E_{el} v_g \cdot \delta t$$

$$\delta E = \frac{dE}{dk} \cdot \delta k = \hbar \cdot v_g \cdot \delta k$$

$$\Rightarrow \hbar \cdot v_g \, \delta k = -e E_{el} \cdot v_g \cdot \delta t$$

$$\hbar \cdot \delta k = \underbrace{-e E_{el}}_{F} \cdot \delta t$$

$$\hbar \cdot \dot{k} = F$$

Im Kristall : äußere Kraft $\hbar \dot{\vec{k}} = \vec{F}$

Freier Raum : " " $(m \cdot \dot{\vec{v}}) = \vec{F}$

e^- im Kristall erfährt Kräfte von außen und vom periodischen Potential!

Allgemein $\vec{F} = \hbar \dot{\vec{k}} = -e\left[\vec{E}_{el} + \left(\underbrace{\frac{1}{\hbar} \cdot \nabla_k E(\vec{k})}_{\vec{v}_{gr}} \times \vec{B}\right)\right]$

Bewegung von e^- im reinen $\vec{B}$-Feld auf Linien konstanter Energie und $\perp$ zu $\vec{B}$-Feld.

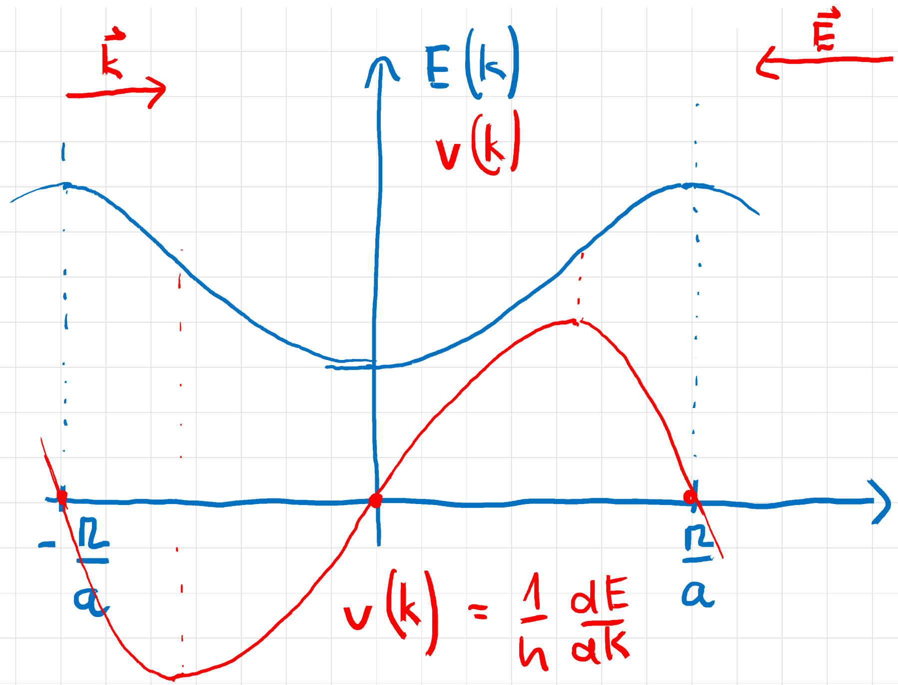
Exkurs: Bloch-Oszillationen

Betrachte Band mit wenigen e^- und ohne Stöße.

Mit $\hbar\dot{\vec{k}} = -e\vec{E}_{el} \Rightarrow \vec{k}(t) = \vec{k}(0) - \frac{e}{\hbar}\vec{E}_{el}\,t$

Der Wellenvektor wächst unbeschränkt!

$\vec{v} = \vec{v}\left(\vec{k}(t)\right) = \vec{v}\left(\vec{k}(0) - \frac{e}{\hbar}\vec{E}_{el}\,t\right)$



ist periodisch mit wachsendem $\vec{k}$. Das e^- verlässt 1. BZ rechts und wandert links wieder hinein.

Mit einem statischen $\vec{E}$-Feld erzeugt man erstaunlicherweise Wechselstrom!

Realisiert nur für sehr reine Halbleiter mit sehr kleiner 1. BZ, weil e^- ansonsten durch Stöße am Verlassen der 1. BZ verhindert werden.

Wir behandeln jetzt die Eigenschaften von <u>Löchern</u> also von fehlenden e^- in einem Band.

Lochbild : gut geeignet für fast volles Band

e^- - Bild : " " für wenige e^- im Band oder teilgefüllten Band

Beide Bilder gleichwertig, aber Bilder für ein Band nie mischen

Für Löcher (engl.: hole) gilt:

$$\boxed{e_h = -e_e \; ; \; \vec{k}_h = -\vec{k}_e \; ; \; E_h = -E_e \; ; \; \vec{v}_h = \vec{v}_e \; ; \; m_h = -m_e}$$

<u>Ladung</u> Hat das entfernte e^- die Ladung $-e$, so ist die Ladung des Loches $+e$, denn die Gesamtladung des Bandes ist nach Entfernen des e^- um $+e$ größer

Wellenvektor $\vec{k}$: Rege e^- von VB in LB an

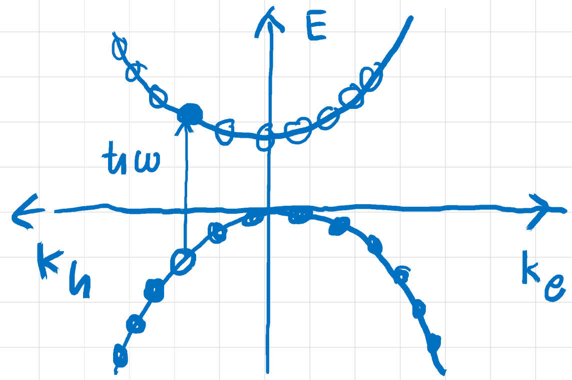
Valenzband, Leitungsband

Impulserhaltung bei Interbandübergang

$\vec{k}_{vor} = \sum_{1.BZ} \vec{k} = 0$, da Pärchen $\vec{k}$ und $-\vec{k}$

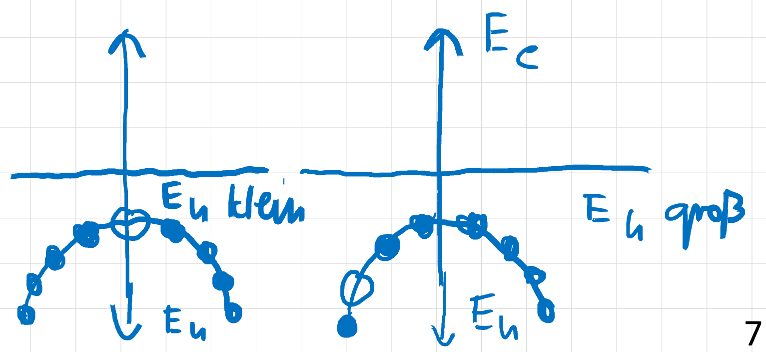
Inversionssymmetrie

$\vec{k}_{nach} = \vec{k}_e + \vec{k}_h = 0 \Rightarrow \vec{k}_e = -\vec{k}_h$



Energie $E_h = -E_e$

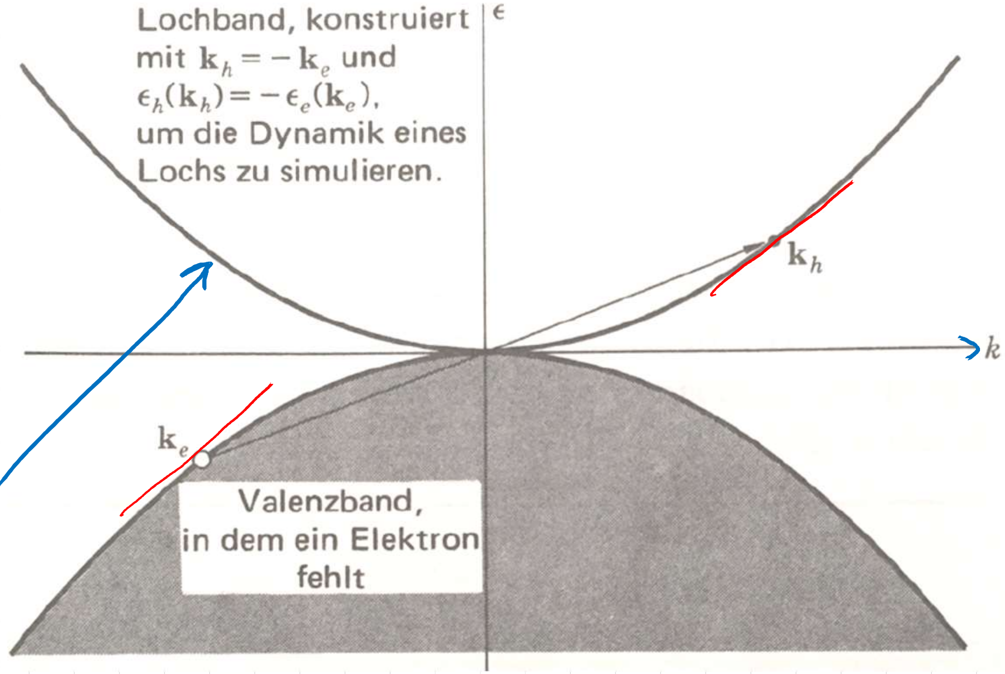
Je höher ein Loch im Band, desto geringer ist Gesamtenergie, bei e^- umgekehrt.



Für ein Band ist

$$E_e(\vec{k}_e) = E_e(-\vec{k}_e) = E_e(\vec{k}_h) = -E_h(\vec{k}_h)$$

symmetrisches Band



Geschwindigkeit

Aus der Konstruktion des Lochbandes sieht man, dass

$$\nabla_k E_h(\vec{k}_h) = \nabla E_e(\vec{k}_e) \iff$$

$$\vec{v}_h = \vec{v}_e$$

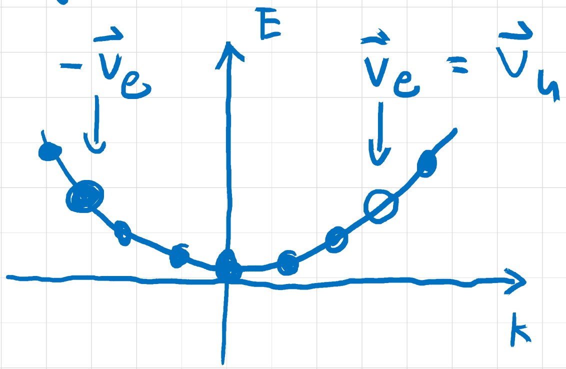
Bewegungsgleichung

$$\hbar \dot{\vec{k}}_h = e\left[\vec{E}_{el} + \left(\vec{v}_h \times \vec{B}\right)\right]$$

$$\underset{-\dot{\vec{k}}_e}{\uparrow} \qquad \underset{-e}{\uparrow} \qquad \underset{\vec{v}_e}{\shortparallel}$$

Dies ist die Bewegungsgleichung für ein positiv geladenes Teilchen!

Positive Ladung konsistent mit Strom:



Strom $\vec{j}$ wird durch ungepaartes e^- mit $-\vec{v}_e$ bestimmt

$$\vec{j} \sim (-e)(-\vec{v}_e) = e\, v_h$$

effektive Masse (zunächst nur Elektronen)

Ziel: Gesetz analog zu 2. Newton $\vec{F} = m\vec{a}$ für Kristallelektronen

$$\vec{F} = m\vec{a} = \hbar\dot{\vec{k}} \qquad F = \hbar\dot{k}$$

Es ist $a = \dot{v} = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\left(\frac{dE}{dk}\right) = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2E}{dk}\underbrace{\frac{dk}{dt}}_{\dot{k}} = \frac{1}{\hbar^2}\cdot\frac{d^2E}{dk^2}\cdot F$

Also $F = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}}\cdot a$ und $\boxed{m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}}}$ $\boxed{\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}}$

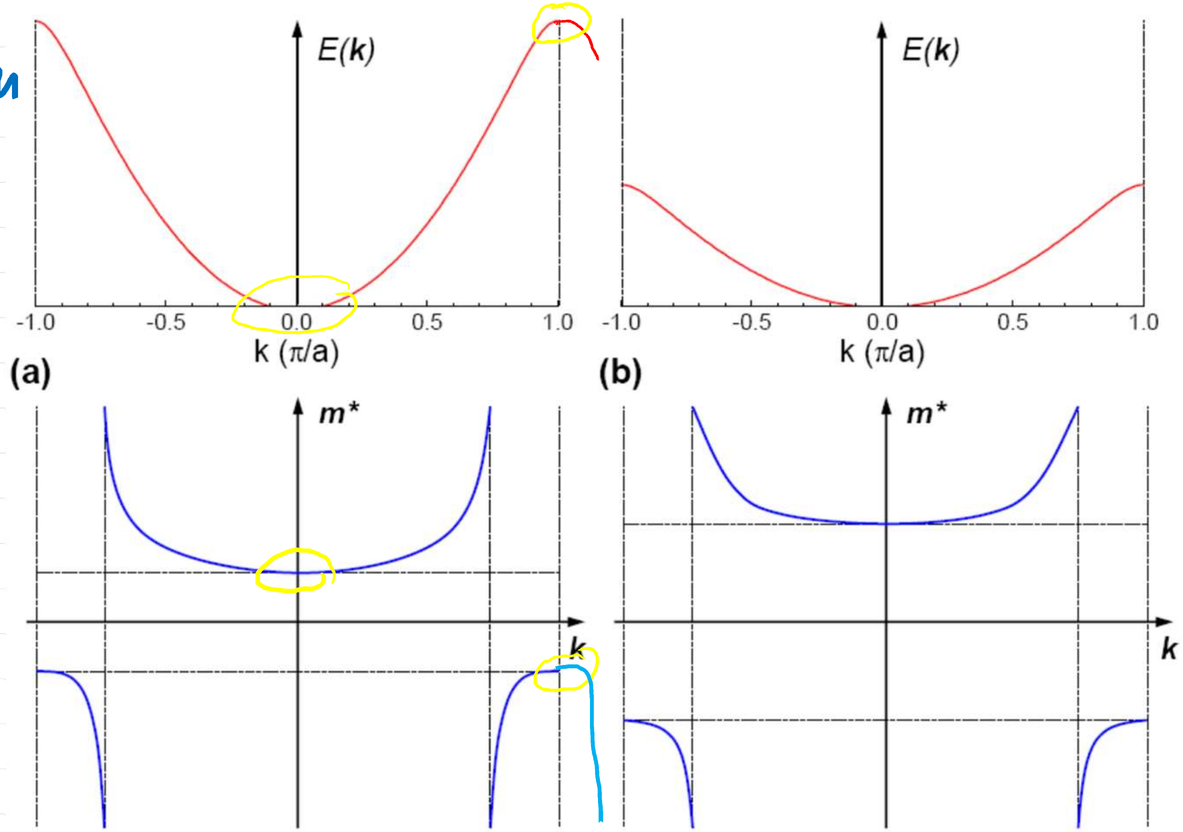
Im isotropen 3D-Fall ist m^* ein Skalar (so im Folgenden angenommen) aber i. A. ein Tensor

$$\frac{1}{m^*} = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k_i k_j}\right)$$

Am Minimum eines hochsymmetrischen parabelförmigen Bandes verhalten sich die e^- wie freie e^- mit einer modifizierten effektiven Masse m^*. Denn mit

$$E(\vec{k}) = E_L + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad \text{wird}$$

$$\dot{\vec{v}} = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\vec{k})\right) = \frac{\hbar \dot{\vec{k}}}{m^*} = \frac{\vec{F}}{m^*}$$



Also $\dot{\vec{k}} \parallel \dot{\vec{v}}$. Am Maximum eines hochsymmetrischen parabelförmigen nach oben offenen Bandes ist dagegen

$$E(\vec{k}) = E_0 - c k^2 \quad \text{mit } c > 0.$$

Dann ist $-c = \frac{\hbar^2}{2m^*} = m^*$ negativ

Dann ist $\dot{\vec{v}}$ und $\dot{\vec{k}}$ antiparallel.

Die Bewegungsgleichung lautet

$$\hbar \dot{\vec{k}}_e = m_e^* \vec{a} = -e\left[\vec{E}_{el} + \left(\vec{v}_e \times \vec{B}\right)\right]$$

$\uparrow$ neg

Definiere $m_h = -m_e$ und ersetze $\vec{k}_e = -\vec{k}_h$ $\vec{v}_e = \vec{v}_h$

$$\hbar \dot{\vec{k}}_h = m_h^* \cdot \vec{a} = e\left[\vec{E}_{el} + \left(\vec{v}_h \times \vec{B}\right)\right]$$

so bekommen wir eine intuitivere Bewegungsgleichung für positive Löcher, mit positiver Masse, wo $\dot{\vec{k}}$ und $\dot{\vec{v}}$ parallel.

Zusammengefasst: Fehlende e^- an der Leitungsbandoberkante werden üblicherweise als Löcher behandelt: positive Ladungsträger die unter dem Einfluss des elektrischen Feldes zum Minuspol, also in Richtung von $\vec{E}$ beschleunigt werden. Sie haben eine positive Masse und $\dot{\vec{v}}$ und $\dot{\vec{k}}$ sind parallel.

Bemerkung: e^- in Festkörpern haben immer dieselbe Masse in kg. Das Konzept der effektiven Masse berücksichtigt die Potentialkräfte des periodischen Potentials, die in der Bewegungsgleichung nicht auftauchen.

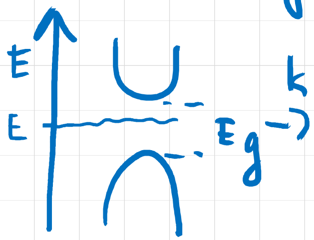
Bemerkung: Das Lochkonzept erklärt positive Hallkoeffizienten: Wird in einem Metall der Transport durch ein weitgehend volles lochartiges Band bestimmt, so hat man positive Lochladungsträger.

9.2 Intrinsische Halbleiter

Probe	Sb	Donatorkonzentration (cm^{-3})
1		5.3×10^{14}
2		9.3×10^{14}
5		1.6×10^{15}
7		2.3×10^{15}
8		3.0×10^{15}
10		5.2×10^{15}
12		8.5×10^{15}
15		1.3×10^{16}
17		2.4×10^{16}
18		3.5×10^{16}
20		4.5×10^{16}
21		5.5×10^{16}
22		6.4×10^{16}
23		7.4×10^{16}
24		8.4×10^{16}
25		1.2×10^{17}
26		1.3×10^{17}
27		2.7×10^{17}
29		9.7×10^{17}

Der spezifische Widerstand $\rho = \frac{m^*}{ne^2\tau}$ wird bei Metallen fast ausschließlich über die Stoßzeit τ bestimmt, bei Halbleitern weitgehend durch die Ladungsträgerkonzentration

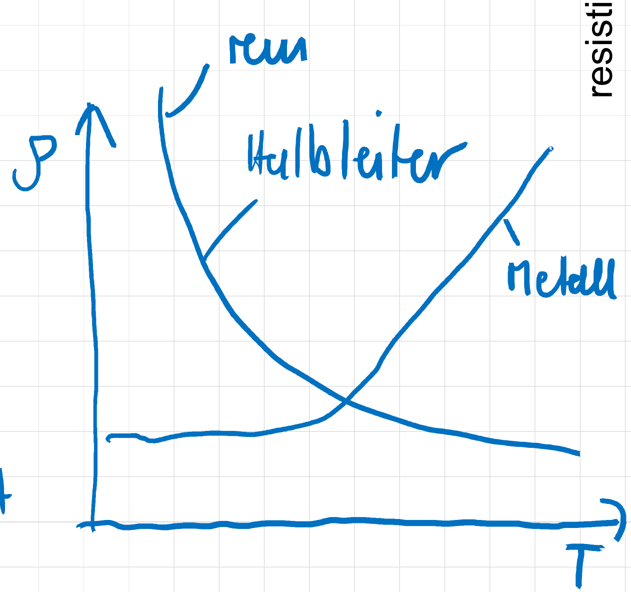
$$n \sim e^{-E_g/2k_BT}$$

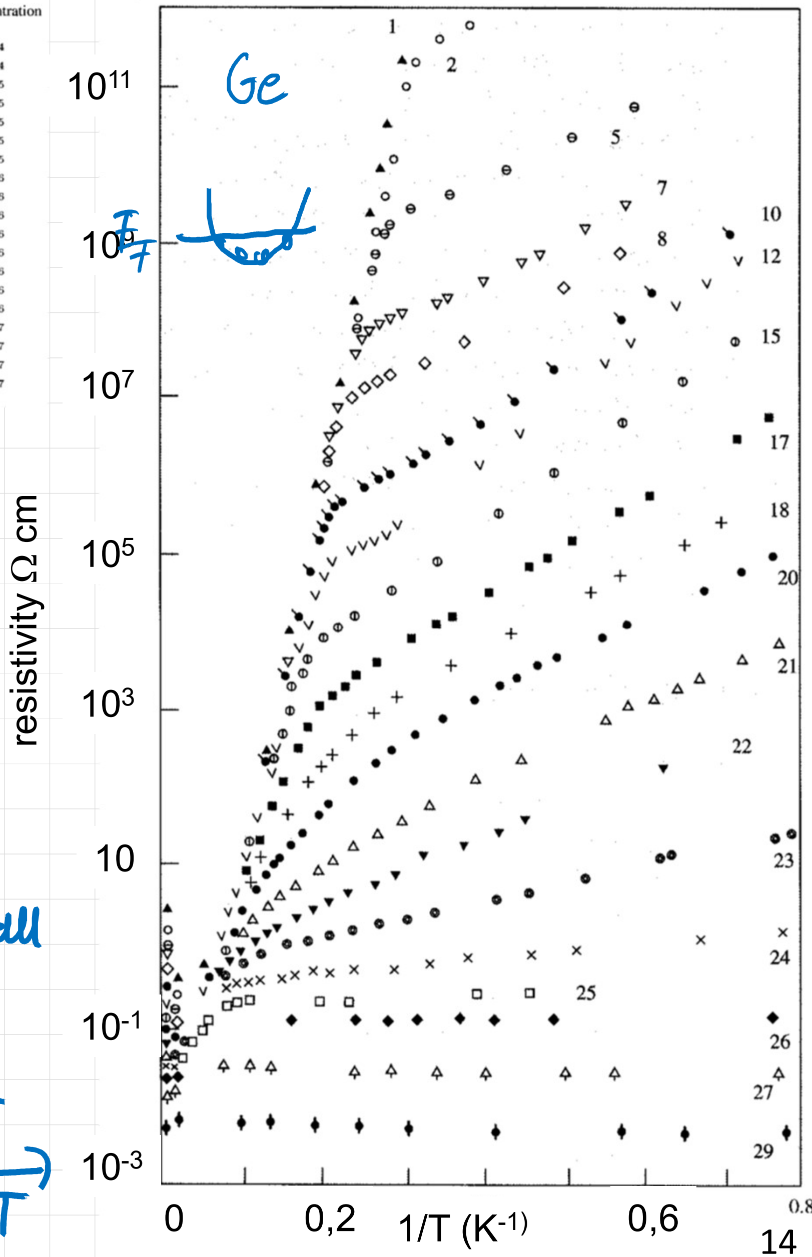


(Beweis später).

Deswegen nimmt die Ladungsträgerkonzentration dramatisch mit T zu.

Durch Verunreinigungen, mit





$E_{ionisierung} < E_g$ wird die Leitfähigkeit dramatisch beeinflusst. Sb Donatoren in Ge verändern die Leitfähigkeit um einen Faktor 10^{12}, wenn sich ihre Konzentration um 10^3 ändert.

Wir definieren:

<u>intrinsischer Halbleiter</u>: Leitfähigkeit kann durch thermische Anregung vom VB ins LB erklärt werden

<u>extrinsischer Halbleiter</u>: Leitfähigkeit wird durch Transfer von e^- (Löchern) der Verunreinigungen ins LB (VB) bestimmt

Elektronendichte im LB
$$n_L = \frac{1}{V} \int_{E_L}^{\infty} D_L(E) \cdot f(E,T) \cdot dE$$

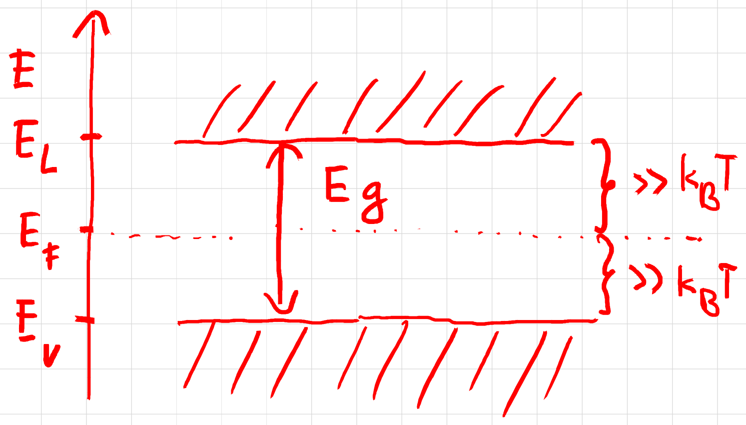
Löcherdichte im VB
$$p_V = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{E_V} D_V(E) \cdot [1 - f(E,T)] \, dE$$

$D_L(E) \hat{=}$ Zustandsdichte im Leitungsband

$D_V(E) \hat{=}$ Zustandsdichte im Valenzband

$$f(E,T) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_BT}+1} \approx e^{-(E-\mu)/k_BT}$$

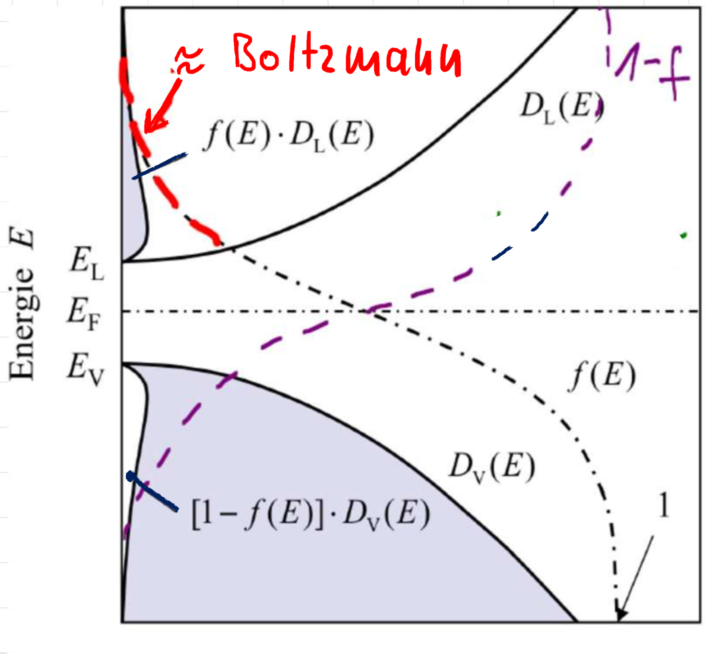
wenn $E_L - \mu \gg k_BT$



$$1-f(E,T) \approx 1 - \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_BT}+1} = \frac{e^{(E-\mu)/k_BT}}{e^{(E-\mu)/k_BT}+1}$$

$$= \frac{1}{1+e^{(\mu-E)/k_BT}} \approx e^{-(\mu-E)/k_BT}$$

wenn $\mu - E \gg k_BT$



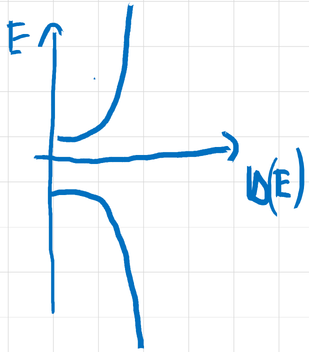
(a) Zustandsdichte $D(E)$, Fermi-Funktion $f(E)$

$f(E,T)$ und $1-f(E,T)$ lassen sich also als Boltzmann-Verteilungen approximieren.

$$D_L(E) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m_L^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E-E_L} \quad \text{für } E > E_L$$

$$D_V(E) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m_V^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E_V-E} \quad \text{für } E_V > E$$

Aus Taylorentwicklung um Bandkanten gilt nur nahe VB u. LB



Einsetzen und ein bißchen rechnen ergibt:

$$n_L = N_L \, e^{-(E_L-\mu)/k_BT} \qquad N_L = 2\cdot\left(\frac{m_{L,e}^* \cdot k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$p_V = P_V \cdot e^{-(\mu-E_V)/k_BT} \qquad P_V = 2\cdot\left(\frac{m_{V,h}^* \cdot k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$-(E_L-\mu) + (-(\mu-E_V)) = -E_L + \mu - \mu + E_V = -(E_L - E_V) = -E_g$$

$$n_L \cdot p_V = N_L \cdot P_V \, e^{-E_g/k_BT}$$

Massenwirkungsgesetz

denn

1.) Kenntnis einer Konzentration $\Rightarrow$ Kenntnis der anderen Konzentration

2.) Gilt auch bei Dotierung solange $E_L - \mu$ und $\mu - E_V \gg k_B T$

3.) Steigt n_L (z.B. durch Dotierung) so sinkt p_V und umgekehrt

Im intrinsischen Fall ist $n_L = p_V = n_i$ $\Rightarrow$ $\boxed{n_i(T) = (N_L \cdot P_V)^{\frac{1}{2}}\, e^{-E_g/2k_BT}}$

Der exponentielle Anstieg der Ladungsträgerkonzentration mit T erklärt das Leitfähigkeitsexperiment in der Vorlesung.

Bemerkung: Die Konzentrationen von e^- oder Löchern sind i.A. so klein, dass das Pauli-Prinzip keine Rolle mehr spielt. Die Fermifunktion kann in den Bändern durch eine Boltzmannverteilung approximiert werden.