

Festkörperelektronik

Vorlesung 6

Prof. Nils Weimann

IW / Bauelemente der Höchstfrequenzelektronik (BHE)

22.05.2025



Zusammenfassung letzte Vorlesung

- ▶ Kronig-Penney-Modell
- ▶ effektive Masse
- ▶ Elektronen und Löcher
- ▶ elektronische Bandstruktur im Festkörper
- ▶ **Valenzband** und **Leitungsband** und **Energielücke**

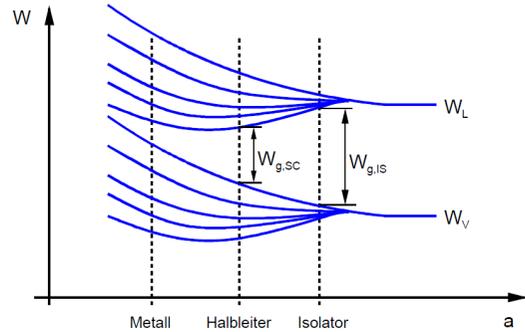
Ziele der 6. Vorlesung

- ▶ elektronische Eigenschaften des Festkörpers
 - ▶ Leitfähigkeit – qualitativ
 - ▶ Stoffklassen Isolator, Halbleiter, Metall
 - ▶ Konzentration von Elektronen und Löchern
 - ▶ Dotierung
 - ▶ Temperaturverlauf der Ladungsträgerkonzentration

Elektronische Eigenschaften des Festkörpers

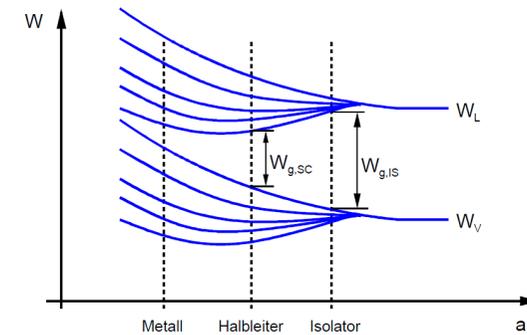
Elektronische Eigenschaften: Leitfähigkeit

- ▶ Aufspaltung von diskreten Niveaus in *Bänder*
- ▶ je näher der Atomabstand a , umso größer die Aufspaltung



- ▶ **Leitungsband, Valenzband und Energielücke**
– Begriffe klar?

Elektronische Eigenschaften: Unterscheidung in Stoffklassen



- ▶ **Metall** überlappende Bänder → keine Energielücke
- ▶ **Halbleiter** Bandlücke $W_{g,SC}$
- ▶ **Isolator** große Bandlücke $W_{g,IS}$

Elektronische Eigenschaften: Isolator

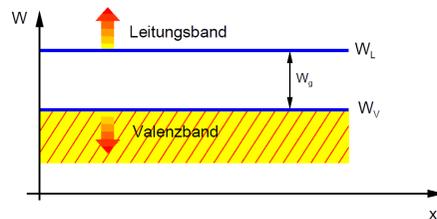


Abbildung: Banddiagramm im Ortsraum $W(x)$

- ▶ Valenzband voll besetzt, Leitungsband leer (bei $T = 0$)
- ▶ keine freien Zustände im Valenzband
- ▶ *im Band* können e^- keine kinetische Energie aufnehmen
- ▶ freie Zustände im Leitungsband 5 eV bis 10 eV entfernt
- ▶ nur sehr wenige e^- können Energielücke überspringen

Elektronische Eigenschaften: Isolator

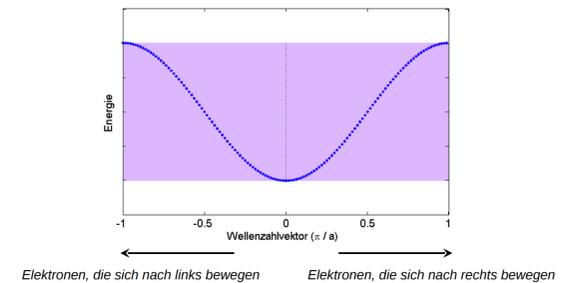
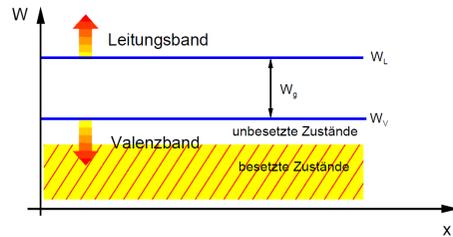


Abbildung: Banddiagramm im Impulsraum $W(k)$

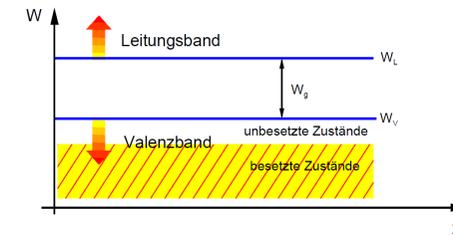
- ▶ keine freien Zustände
- ▶ gleichviele Elektronen bewegen sich nach links und nach rechts mit betragsmäßig gleichen Geschwindigkeiten
- ▶ kein Stromfluß möglich

Elektronische Eigenschaften: Halbleiter



- ▶ bei $T > 0$ können viele e^- ins Leitungsband thermisch angeregt werden, weil Energielücke kleiner (1 eV bis 3 eV)
- ▶ dadurch freie Zustände im Valenzband
- ▶ besetzte Zustände im Leitungsband
- ▶ **im Band** können e^- und h^+ kinetische Energie aufnehmen
- ▶ $\sigma_{HL} \gg \sigma_{IS}$ aber $\sigma_{HL} \ll \sigma_M$
- ▶ Leitfähigkeit durch **Dotierung** einstellbar

Elektronische Eigenschaften: Metalle



- ▶ besetzte und freie Zustände nicht durch Energielücke getrennt → Gegensatz zu Halbleiter und Isolator
- ▶ in monovalenten Metallen ist das Valenzband ca. zur Hälfte gefüllt
- ▶ die Hälfte der Plätze ist frei, d.h. alle e^- können am Stromtransport teilnehmen → hohe Leitfähigkeit σ

Elektronische Eigenschaften: Metalle

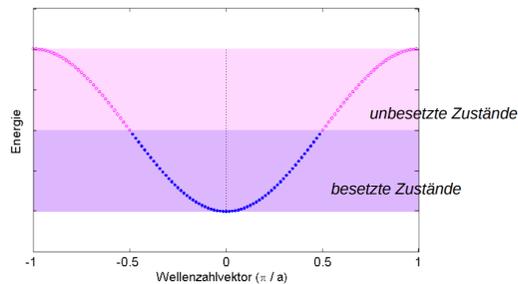


Abbildung: Banddiagramm im Impulsraum $W(k)$

- ▶ ein Atomzustand, ein Elektron pro Atom, z.B. Lithium
- ▶ nur Zustände bis zur Hälfte des Bandes sind besetzt
- ▶ ohne Feld: gleichviele Elektronen bewegen sich nach links und nach rechts mit betragsmäßig gleichen Geschwindigkeiten

Elektronische Eigenschaften: Metalle

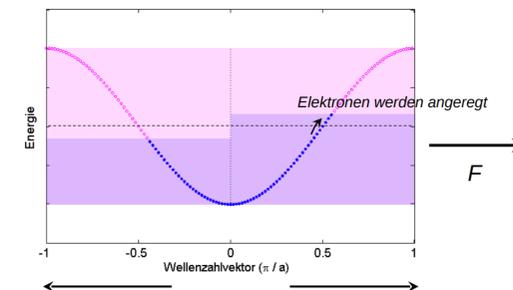
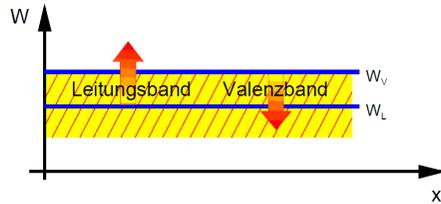


Abbildung: Banddiagramm im Impulsraum $W(k)$

- ▶ mit äußerem Feld F werden die e^- angeregt
- ▶ es bewegen sich mehr e^- nach rechts als nach links
- ▶ Stromfluss

Elektronische Eigenschaften: Metalle

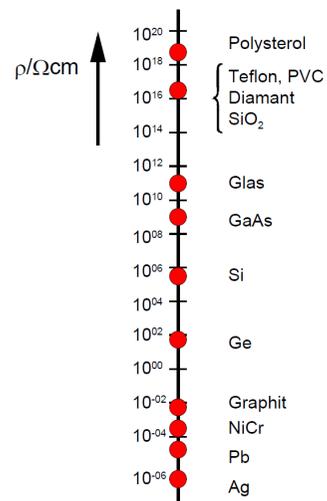


- ▶ weiterer Typ von Metallen: überlappende Bänder
- ▶ Elektronen können ohne Energiezugabe vom Valenzband ins Leitungsband wechseln
- ▶ auch dies führt zu großem Anteil an freien Plätzen im VB und besetzten Plätzen im LB
- ▶ entscheidend ist auch hier, dass in den Bändern viele freie Zustände zur Umlagerung der Elektronen und Löcher zur Verfügung stehen

Elektronische Eigenschaften: Festkörper

- ▶ Isolatoren und Halbleiter haben eine Bandlücke, die Leitungsband und Valenzband trennt
 - ▶ breite Bandlücke im Isolator, kleinere Bandlücke im Halbleiter
 - ▶ Zahl der Elektronen (e^-) im LB und Zahl der freien Plätze (Löcher, h^+) im Valenzband bestimmt die Leitfähigkeit
 - ▶ Anzahl von e^- im LB und h^+ im VB klein verglichen mit Gesamtzahl der Zustände → geringe Leitfähigkeit σ
- ▶ bei den Metallen tragen fast alle Valenzelektronen zur Leitfähigkeit bei
 - ▶ ca. gleich viele freie und besetzte Plätze im Valenzband
 - ▶ kann durch Überlappung von VB und LB erreicht werden
 - ▶ oder durch halb gefülltes VB (einwertiges oder monovalentes Metall)

Elektronische Eigenschaften: Leitfähigkeit



- ▶ logarithmischer Maßstab
- ▶ 25 Größenordnungen
- ▶ Halbleiter durch Dotierung über weiten Bereich einstellbar
- ▶ Temperaturabhängigkeit
→ Besetzungswahrscheinlichkeit

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ quantitative Beschreibung: Anzahl Elektronen dn im Energieintervall dW um Energiewert W

$$dn(W) = g(W) \cdot f(W) \cdot dW$$

- ▶ Konzentration $dn(W)$ in Einheiten cm^{-3}
- ▶ Zustandsdichte $g(W)$ in Einheiten $\text{eV}^{-1}\text{cm}^{-3}$
- ▶ Verteilungsfunktion $f(W)$, dimensionslos, $0 \leq f(W) \leq 1$
- ▶ Energieintervall dW in Einheiten eV

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ Gesamtzahl der Elektronen im Band bis zur Energie W durch Integration

$$dn(W) = g(W) \cdot f(W) \cdot dW$$

$$n = \int_{\text{Band}} dn(W) = \int_{\text{Band}} g(W) \cdot f(W) \cdot dW$$

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ Zustandsdichte $g(W)$ gibt an, wieviele Zustände um W verfügbar sind
- ▶ Berechnung von $g(W)$ an der Bandkante:
 - ▶ Elektronen an der Unterkante des Leitungsbands
 - ▶ Löcher an der Oberkante des Valenzbands → Strom
- ▶ Annäherung des Bandverlaufs durch Parabel $W \sim k^2$ mit effektiver Masse m^*
- ▶ Ausdruck für kinetische Energie im LB

$$\begin{aligned} W_{\text{kin}} &= W(k) - W_{\text{Bandkante}} = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \end{aligned}$$

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ Zustandsdichte $g(W)$ auf der Energieskala W ?
- ▶ $W \sim k^2$ gibt uns Zusammenhang mit Wellenzahl k
- ▶ k kann nur diskrete Werte annehmen, s. Potentialtopf
- ▶ Annahme: das Elektron ist im Kristall mit Volumen V eingesperrt

$$V = L_x \cdot L_y \cdot L_z \equiv L^3$$

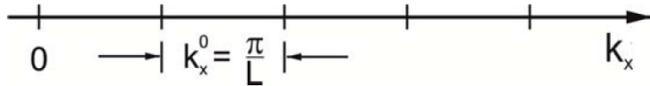
- ▶ Elektron soll sich in L^3 quasi-frei im Leitungsband bewegen können
- ▶ gerade und ungerade Wellenfunktionen sind möglich mit

$$k_x = n \cdot \frac{\pi}{L} \equiv n \cdot k_x^0; \quad k_x^0 = \frac{\pi}{L}; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ d.h. pro Intervall k_x^0 im k -Raum gibt es genau *einen* erlaubten k -Wert
- ▶ daraus berechnen wir die absolute Zustandsdichte $N_{\text{abs}}^{(1D)}$ im eindimensionalen k -Raum

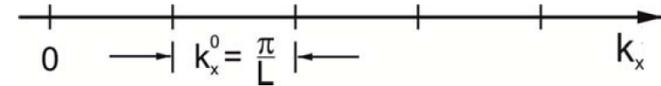
$$N_{\text{abs}}^{(1D)} = \frac{1}{k_x^0} = \frac{1}{\pi/L} = \frac{L}{\pi}$$



Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ d.h. pro Intervall k_x^0 im k -Raum gibt es genau *einen* erlaubten k -Wert
- ▶ daraus berechnen wir die absolute Zustandsdichte $N_{\text{abs}}^{(1D)}$ im eindimensionalen k -Raum

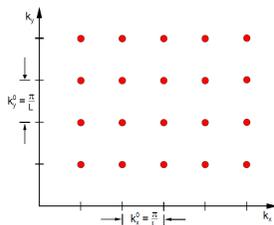
$$N_{\text{abs}}^{(1D)} = \frac{1}{k_x^0} = \frac{1}{\pi/L} = \frac{L}{\pi}$$



Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ in zwei Dimensionen müssen k_x und k_y die Randbedingung erfüllen
- ▶ hier ist also die absolute Zustandsdichte $N_{\text{abs}}^{(2D)}$ gegeben als

$$N_{\text{abs}}^{(2D)} = \frac{1}{k_x^0} \cdot \frac{1}{k_y^0} = \frac{1}{\pi/L} \cdot \frac{1}{\pi/L} = \left(\frac{L}{\pi}\right)^2$$



Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ in drei Dimensionen müssen k_x , k_y und k_z die Randbedingung erfüllen
- ▶ absolute Zustandsdichte $N_{\text{abs}}^{(3D)}$

$$N_{\text{abs}}^{(3D)} = \frac{1}{k_x^0} \cdot \frac{1}{k_y^0} \cdot \frac{1}{k_z^0} = \frac{1}{\pi/L} \cdot \frac{1}{\pi/L} \cdot \frac{1}{\pi/L} = \left(\frac{L}{\pi}\right)^3$$

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ absolute Zustandsdichten im k -Raum für einen Körper mit Volumen $V^{(1D)} = L$, $V^{(2D)} = L^2$, $V^{(3D)} = L^3$

$$N_{\text{abs}}^{(1D)} = \frac{L}{\pi}$$

$$N_{\text{abs}}^{(2D)} = \left(\frac{L}{\pi}\right)^2$$

$$N_{\text{abs}}^{(3D)} = \left(\frac{L}{\pi}\right)^3$$

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ Normierung auf Volumen $V^{(1D)} = L$, $V^{(2D)} = L^2$, $V^{(3D)} = L^3$
- ▶ relative Zustandsdichten im k -Raum

$$N^{(1D)} = \frac{1}{L} \cdot N_{\text{abs}}^{(1D)} = \frac{1}{\pi}$$

$$N^{(2D)} = \frac{1}{L^2} \cdot N_{\text{abs}}^{(2D)} = \frac{1}{\pi^2}$$

$$N^{(3D)} = \frac{1}{L^3} \cdot N_{\text{abs}}^{(3D)} = \frac{1}{\pi^3}$$

- ▶ mit der Beziehung $W \sim k^2$ können wir dies auf eine energieabhängige Zustandsdichte $g(W)$ umrechnen

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ gesuchte Zustandsdichte $g(W)$ ist Anzahl der Zustände dn im Energieintervall dW_{kin}

$$2 \cdot dn = g(W) \cdot dW_{\text{kin}}$$

$$g(W) = 2 \cdot \frac{dn}{dW_{\text{kin}}} = 2 \cdot \frac{\partial n}{\partial k} \cdot \frac{\partial k}{W_{\text{kin}}}$$

- ▶ wobei der Elektronenspin mit aufgenommen wurde über einen Faktor 2

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ im 3D- k -Raum sind Kugelschalen mit Radius k Flächen konstanter Energie W (wegen $W \sim k^2$)
- ▶ die Kugelschale der Dicke dk im k -Raum hat das Volumen

$$dV_k^* = 4\pi k^2 dk$$

- ▶ die Wellenzahlen k_x , k_y , k_z dürfen nur positive Werte annehmen, daher wird nur ein Oktant der Kugel berücksichtigt

$$dV_k = \frac{1}{8} dV_k^* = \frac{1}{2} \pi k^2 dk$$

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

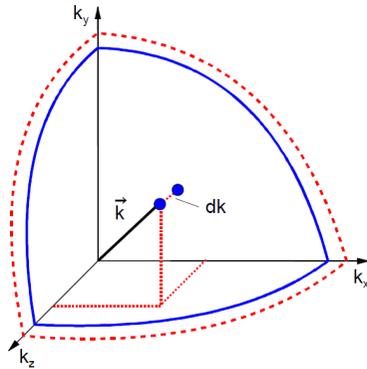


Abbildung: Flächen konstanter Energie im 3D-Kristall

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ mit relativer Zustandsdichte $N^{(3D)}$ im k -Raum kann die Anzahl der Zustände in der Kugelschale berechnet werden

$$dn = dV_k \cdot N^{(3D)} = \frac{1}{2} \pi k^2 dk \frac{1}{\pi^3}$$

- ▶ daraus berechnen wir den Differentialquotient $\partial n / \partial k$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial k} &= \frac{1}{\pi^3} \cdot \frac{1}{2} \pi k^2 \\ &= \frac{1}{\pi^3} \cdot \frac{1}{2} \pi \left(\frac{W_{\text{kin}} \cdot 2m^*}{\hbar^2} \right) \end{aligned}$$

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ der zweite benötigte Differentialquotient ist $\partial k / \partial W_{\text{kin}}$, den bekommen wir aus der parabolischen Näherung $W_{\text{kin}} \sim k^2$

$$\frac{\partial k}{\partial W_{\text{kin}}} = \sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^2 W_{\text{kin}}}}$$

- ▶ und damit das Ergebnis für die Zustandsdichte $g(W)$

$$\begin{aligned} g(W) &= 2 \cdot \frac{dn}{dW_{\text{kin}}} = 2 \cdot \frac{\partial n}{\partial k} \cdot \frac{\partial k}{\partial W_{\text{kin}}} \\ &= \frac{\sqrt{2} (m^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{W_{\text{kin}}} \end{aligned}$$

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ Zustandsdichte $g(W)$ steigt wurzelförmig von der Bandkante

$$g(W) = \frac{\sqrt{2} (m^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{W_{\text{kin}}}$$

- ▶ dies gilt nur nahe der Bandkante, wo die effektive-Masse-Näherung zutrifft

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- für das Leitungsband messen wir die kinetische Energie $W_{\text{kin}} = W - W_L$ von der Unterkante W_L

$$g_L(W) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} (m_1^*)^{3/2} \cdot \sqrt{W - W_L}$$

- für das Valenzband messen wir die kinetische Energie $W_{\text{kin}} = W - W_L$ von der Oberkante W_V

$$g_V(W) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} (m_2^*)^{3/2} \cdot \sqrt{W_V - W}$$

- wobei die i.A. unterschiedlichen effektiven Massen des Elektrons im LB (m_1^*) und im VB (m_2^*) eingesetzt wurden

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

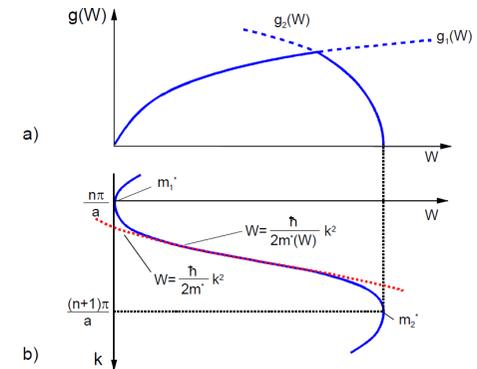


Abbildung: Zustandsdichte (a) und Banddiagramm (b) für Elektron mit eff. Masse im LB (g_1, m_1^*) und im VB (g_2, m_2^*)

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- bis zu welcher Energie sind die Zustände in den Bändern aufgefüllt?
→ Fermienergie W_F
- Beispiel: monovalentes Metall, $f(W) = 1$ für $W < W_F$

$$\begin{aligned} n &= \int_0^{W_F} g(W) \cdot f(W) dW = \int_0^{W_F} g(W) \cdot 1 dW \\ &= \int_0^{W_F} \frac{\sqrt{2} (m_0)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{W} dW \\ &= \frac{2}{3} \cdot \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} (m_0)^{3/2} W^{3/2} \Big|_0^{W_F} \end{aligned}$$

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- aufgelöst nach W_F

$$W_F = (3n\pi^2)^{2/3} \cdot \frac{\hbar^2}{2m_0}$$

- hier kann $m = m_0$ gesetzt werden, weil in der Mitte des Bandes $W(k)$ dem freien Elektron ähnelt
- für $n = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ und $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ erhält man $W_F \approx 4,9 \text{ eV}$

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ vergleiche $W_F \approx 4,9 \text{ eV}$ mit thermischer Energie $W = kT$
- ▶ Fermitemperatur $T_F \approx 57\,000 \text{ K}$
- ▶ auf diese Temperatur müsste das Metall aufgeheizt werden, um ein Elektron von der LB-Unterkante thermisch bis zur Fermienergie anzuheben!
- ▶ Besetzung der Zustände im monovalenten Metall bis zum Schmelzpunkt (1000 K bis 3000 K) unabhängig von der Temperatur
- ▶ elektronische Eigenschaften der Metalle kaum temperaturabhängig
- ▶ für Halbleiter ist das grundsätzlich anders!

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ Annahme $f(W) = 1$ für $W < W_F$ ist Näherung für $T \approx 0$
- ▶ für $T \gg 0$ gilt die Fermi-Dirac-Verteilung

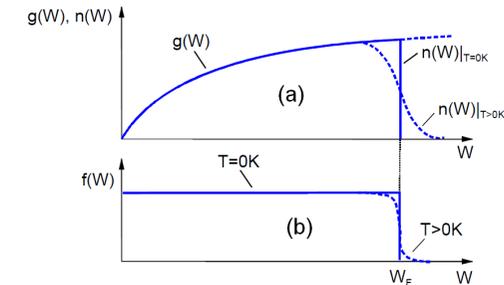
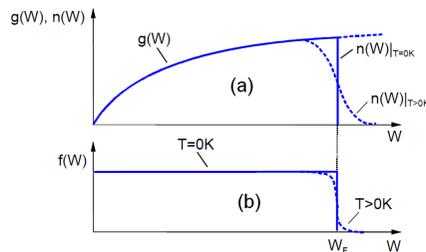


Abbildung: Zustandsdichte und Elektronendichte (a) und Verteilungsfunktion (b), gestrichelte Kurven für $T > 0$

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper



- ▶ für $T > 0$ kann auf einige Elektronen thermische Energie übertragen werden
- ▶ einige Elektronen nehmen $W > W_F$ an und hinterlassen bei $W < W_F$ unbesetzte Plätze
- ▶ Wahrscheinlichkeit für diesen Prozess steigt mit T

Konzentration von Elektronen und Löchern im Festkörper

- ▶ Fermiverteilung $f(W)$ kann aus der Quantenstatistik hergeleitet werden

$$f(W) = \frac{1}{e^{\frac{W-W_F}{kT}} + 1}$$

- ▶ für $W = W_F$ gilt damit

$$f(W) = \frac{1}{2}$$

Besetzungsstatistik in Halbleitern

Besetzungsstatistik in Halbleitern

- ▶ Eigenhalbleiter
- ▶ Störstellenhalbleiter
 - ▶ Verunreinigungen
 - ▶ gezielte Dotierung

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

- ▶ Elektronenkonzentration im LB

$$n = \int_{LB} n(W) dW = \int_{LB} g_L(W) \cdot f(W) dW$$

- ▶ Näherung der Verteilungsfunktion nach Boltzmann, da Bandkante weit weg vom intrinsischen Fermi-niveau ist: $W_L - W_{Fi} \gg kT$

$$f_L(W) = \frac{1}{e^{\frac{W-W_{Fi}}{kT}} + 1} \approx e^{-\frac{W-W_{Fi}}{kT}}$$

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

- ▶ Einsetzen der Zustandsdichte $g(W)$

$$g(W) = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{W_{\text{kin}}}$$

- ▶ und der Boltzmann-Verteilung

$$f(W) = e^{-\frac{W-W_{Fi}}{kT}}$$

$$\begin{aligned} n &= \int_{LB} n(W) dW = \int_{LB} g_L(W) \cdot f(W) dW \\ &= \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \int_{LB} \sqrt{W - W_L} \cdot e^{-\frac{W-W_{Fi}}{kT}} dW \end{aligned}$$

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

$$n = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \int_{LB} \sqrt{W - W_L} \cdot e^{-\frac{W - W_{Fi}}{kT}} dW$$

- ▶ Erweiterung der oberen Integrationsgrenze $W \rightarrow \infty$ möglich, weil e -Funktion dabei schnell gegen 0 geht
- ▶ Substitution $x \equiv \frac{W - W_L}{kT}$
- ▶ Ausnutzung des Fermi-Integrals

$$\int_0^\infty \sqrt{x} e^{-x} dx = 1/\sqrt{2}$$

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

- ▶ Ergebnis für die Ladungsträgerkonzentration n

$$n = N_L \cdot e^{-\frac{W_L - W_{Fi}}{kT}}$$

$$N_L \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\hbar^3} \left(\frac{m_n^* kT}{\pi} \right)^{3/2}$$

- ▶ effektive Zustandsdichte N_L
- ▶ gibt Elektronenkonzentration, wenn $W_F = W_L$
→ Störstellenleitung

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

- ▶ Löcherkonzentration p im Valenzband analog zu n

$$p = \int_{VB} dp = \int_{VB} g_V(W) \cdot (1 - f(W)) \cdot dW$$

- ▶ statt $f(W)$ steht hier $1 - f(W)$, weil Löcher *fehlende* Elektronen sind
- ▶ Näherung für $1 - f(W)$ wenn $W_{Fi} - W \gg kT$

$$f_V(W) = 1 - f(W) = \frac{e^{-\frac{W_{Fi} - W}{kT}}}{e^{-\frac{W_{Fi} - W}{kT}} + 1}$$

$$\approx e^{-\frac{W_{Fi} - W}{kT}}$$

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

- ▶ eingesetzt in Löcherkonzentration $p = \int_{VB} g_V(W) \cdot [1 - f(W)] \cdot dW$

$$p = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} (m_p^*)^{3/2} \cdot \int_{VB} \sqrt{W_V - W} \cdot e^{-\frac{W_{Fi} - W}{kT}} dW$$

$$= N_V \cdot e^{-\frac{W_{Fi} - W}{kT}}$$

$$N_V \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\hbar^3} \left(\frac{m_p^* kT}{\pi} \right)^{3/2}$$

- ▶ N_V ist die effektive Zustandsdichte des Valenzbands, in Einheiten $[N_V] = \text{cm}^{-3}$

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

- ▶ Reaktionsgleichung $e^- + h^+ \rightleftharpoons 0$
- ▶ Einstellung eines Gleichgewichts
- ▶ Massenwirkungsgesetz beschreibt Gleichgewichtslage

$$n \cdot p = n_i^2$$

- ▶ Einsetzen der Ausdrücke für n und p gibt

$$\begin{aligned} n_i &= \sqrt{N_L \cdot N_V} \cdot e^{-\frac{W_L - W_V}{2kT}} \\ &= \sqrt{N_L \cdot N_V} \cdot e^{-\frac{W_g}{2kT}} \end{aligned}$$

- ▶ intrinsische Konzentration n_i und Bandlücke E_g

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

- ▶ Temperaturabhängigkeit der Eigenleitung

$$n_i = \sqrt{N_L \cdot N_V} \cdot e^{-\frac{W_g}{2kT}}$$

$$N_L = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar^3} \left(\frac{m_n^* kT}{\pi} \right)^{3/2}$$

$$N_V = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar^3} \left(\frac{m_p^* kT}{\pi} \right)^{3/2}$$

$$\sqrt{N_L \cdot N_V} = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar^3} \left[\sqrt{m_n^* m_p^*} \cdot \frac{kT}{\pi} \right]^{3/2} \sim T^{3/2}$$

$$n_i = A \cdot T^{3/2} \cdot e^{-\frac{W_g}{2kT}}$$

$$A \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\hbar^3} \left[\sqrt{m_n^* m_p^*} \cdot \frac{k}{\pi} \right]^{3/2}$$

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

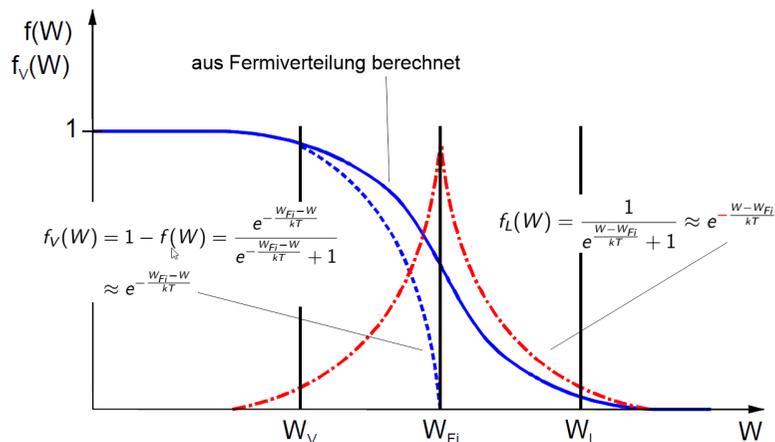


Abbildung: Verteilungsfunktion $f(W)$ und Näherungen $f_L(W)$ für Leitungsband und $f_v(W)$ für Valenzband

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

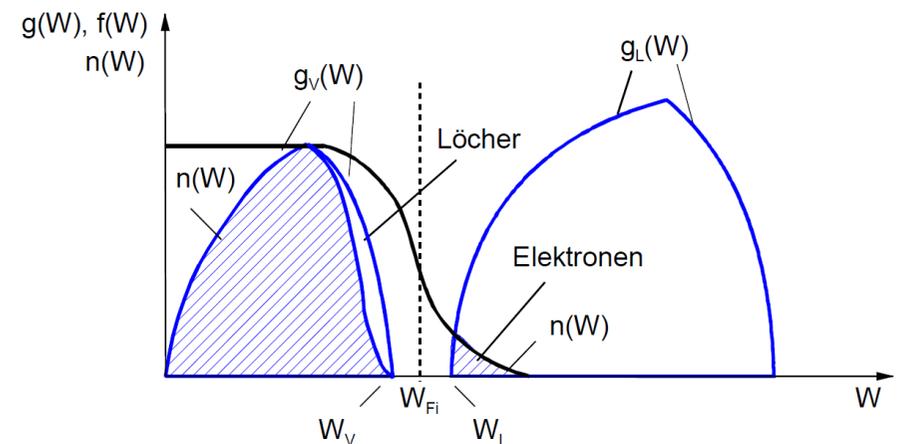
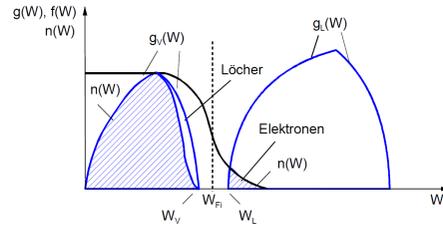


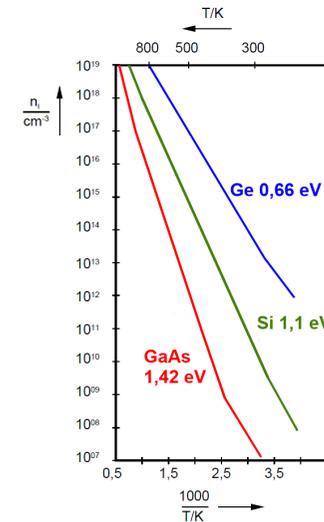
Abbildung: Verteilungsfunktion f , Zustandsdichte g und Konzentrationen n und p bei $T > 0$ K

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)



- ▶ Zustandsdichten $g_V(W)$ im VB und $g_L(W)$ im LB, zusammengesetzt aus Näherungen
- ▶ Faltung der $g_{\{V,L\}}(W)$ mit Verteilungsfunktion $f(W)$
- ▶ einige Elektronen werden ins Leitungsband thermisch angehoben für $T > 0$, schraffiert im LB
- ▶ diese Elektronen hinterlassen eine gleichgroße Zahl an Löchern:
 $\int n(W) dW = \int p(W) dW = n_i$

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)



- ▶ exponentielle Temperaturabhängigkeit
- ▶ Bandlücke geht auch exponentiell ein
- ▶ deutliche Unterschiede für verschiedene Materialien
- ▶ zu beachten: Hintergrundkonzentration durch Störstellen und Verunreinigungen

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

- ▶ Berechnung der Fermienergie aus $n = p = n_i$

$$N_L \cdot e^{-\frac{W_L - W_{Fi}}{kT}} = N_V \cdot e^{-\frac{W_{Fi} - W_V}{kT}}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}\hbar^3} \left(\frac{m_n^* kT}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\frac{W_L - W_{Fi}}{kT}} = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar^3} \left(\frac{m_p^* kT}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\frac{W_{Fi} - W_V}{kT}}$$

$$\exp\left(\frac{-W_L + W_{Fi} + W_{Fi} - W_V}{kT}\right) = \left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)^{3/2}$$

$$\exp\left(\frac{-W_g - W_V + W_{Fi} + W_{Fi} - W_V}{kT}\right) = \left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)^{3/2}$$

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

$$\exp\left(\frac{-W_g - W_V + W_{Fi} + W_{Fi} - W_V}{kT}\right) = \left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)^{3/2}$$

$$\exp\left(\frac{-W_g - 2 \cdot W_V + 2 \cdot W_{Fi}}{kT}\right) = \left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)^{3/2}$$

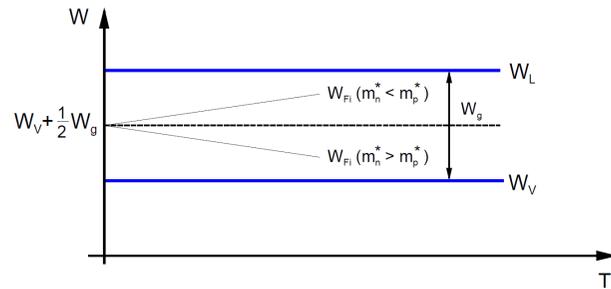
$$\frac{-W_g - 2 \cdot W_V + 2 \cdot W_{Fi}}{kT} = \ln\left[\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)^{3/2}\right]$$

$$-W_g - 2 \cdot W_V + 2 \cdot W_{Fi} = \frac{3}{2} kT \ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)$$

$$W_{Fi} - W_V = \frac{1}{2} W_g + \frac{3}{4} kT \ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)$$

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

$$W_{Fi} - W_V = \frac{1}{2}W_g + \frac{3}{4}kT \ln \left(\frac{m_p^*}{m_n^*} \right)$$



- ▶ Fermi-Energie bei $T = 0$ in der Mitte der Energielücke
- ▶ für $T > 0$ abhängig vom Verhältnis m_p^*/m_n^*
- ▶ im Allgemeinen ist $m_p^* > m_n^*$

Eigenhalbleiter (intrinsischer Halbleiter)

- ▶ manche Halbleiter haben sehr unterschiedliche eff. Massen m_n^* und m_p^* bei kleiner Bandlücke
- ▶ z.B. InSb mit $m_p^*/m_n^* \approx 50$ und $E_g = 0,16$ eV

$$W_{Fi} - W_V = \frac{1}{2}W_g + \frac{3}{4}kT \ln \left(\frac{m_p^*}{m_n^*} \right)$$

- ▶ bei diesem Halbleiter liegt bei 300 K die Fermienergie im Leitungsband: $W_{Fi} = W_L$
- ▶ hier gilt die Boltzmann-Näherung nicht
- ▶ man spricht von einem *entarteten* Halbleiter wenn $W_F \geq W_L$ oder $W_F \leq W_V$

Störstellenleitung

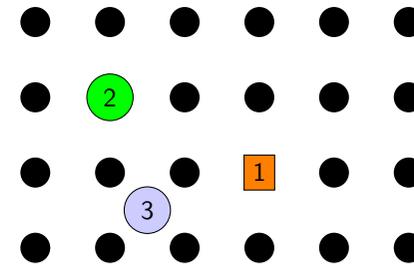
Störstellenleitung

- ▶ in der Praxis sind alle Halbleiter durch **Defekte** oder **Verunreinigungen** betroffen
- ▶ Hintergrunddotierung 10^{15} cm^{-3} bis 10^{16} cm^{-3}
- ▶ in Bauelementanwendungen möchte man die Leitfähigkeit einstellen können
- ▶ die Leitfähigkeit soll gerade nicht von der Temperatur abhängen (positive Rückkopplung)
- ▶ gezielte **Dotierung** mit Fremdatomen bekannter Konzentration zur Einstellung der Ladungsträgerkonzentration n oder p

Defekte

- ▶ Unterscheidung nach Geometrie und Ausdehnung
 - ▶ Punktdefekte
 - ▶ linienförmige Defekte
 - ▶ dreidimensionale Defekte

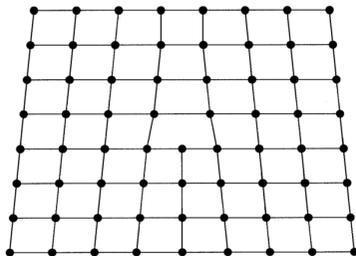
Punktdefekte



1. Leerstelle (vacancy)
2. substitutionelle Störstelle (substitutional defect)
3. Zwischengitterstörstelle (interstitial defect)

heute erreichbar: Punktdefekt-Konzentration bis $\geq 10^{10} \text{ cm}^{-3}$

Liniendefekte



- ▶ ganze Gitterebene nicht fortgesetzt
- ▶ z.B durch mechanische Verspannung
- ▶ gestörter Gitterabstand führt zu Ausbildung von sekundärem mechanischen Spannungsfeld
- ▶ bevorzugte Anlagerung von Fremdatomen
→ elektrisches Verhalten
- ▶ typische Versetzungsdichten 10^3 cm^{-2} bis 10^4 cm^{-2}

2D- und 3D-Defekte

- ▶ räumlich ausgedehnte Ansammlungen von Fremdatomen (Cluster)
- ▶ lokale Konzentrationsabweichung von Verbindungshalbleitern, z.B. $\text{In}_{0,30}\text{Ga}_{0,70}\text{N}$

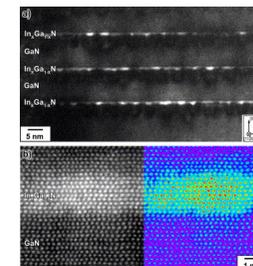


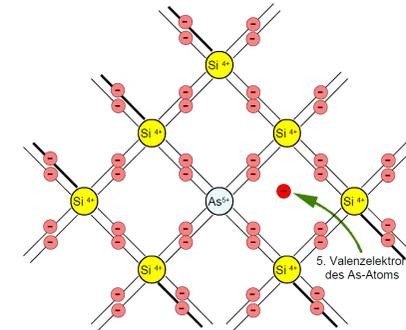
Abbildung: (a) annular dark-field STEM of InGaN quantum wells; (b) Z-contrast micrographs (HAADF-STEM) <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2005.10.030>

Dotierung

- ▶ Dotierung ist Einbringung gewollter **substitutioneller Defekte**, siehe Punkt (2) auf Folie "Punktdefekte"
- ▶ Beispiel Silizium
 - ▶ 4-wertig
 - ▶ jedes Si-Atom ist mit 4 Nachbarn kovalent gebunden
 - ▶ nächste Nachbarn sind tetraederförmig angeordnet
 - ▶ im Kristall ergibt sich eine kubische Anordnung (Rechteckgitter)
- ▶ Dotierung durch Ersetzen eines Silizium-Atoms mit ...
 - ▶ 3-wertigem Atom – ein Elektron fehlt, ergibt Löcher, *p*-Dotierung
 - ▶ 5-wertigem Atom – ein Elektron zuviel, ergibt freie Elektronen, *n*-Dotierung

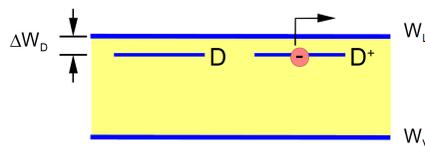
Donatoren

- ▶ Arsen (As) ist fünfwertig, d.h. 5 Valenzelektronen
- ▶ ein Elektron wird nicht in die Bindungen eingebaut, sondern kann sich frei bewegen (im Leitungsband)
- ▶ As-Atom wirkt als Spender (*Donator*), es stellt ein Elektron zur Verfügung



Donatoren

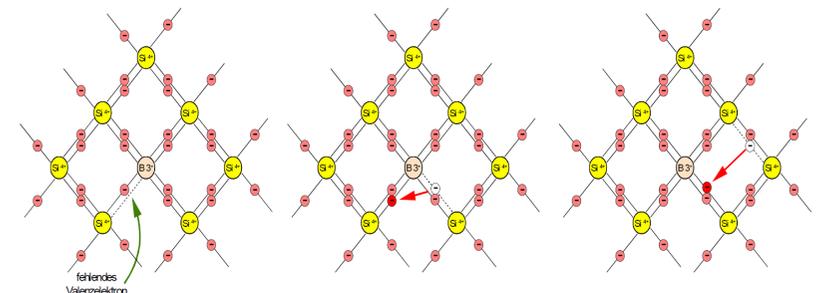
- ▶ Donator im Banddiagramm
 - ▶ zusätzliches Elektron wird vom positiven Rumpf des As^+ schwach angezogen
 - ▶ Energiegewinn \rightarrow lokalisierter Zustand unterhalb des Leitungsbands



- ▶ geringe Ionisierungsenergie $\Delta W_D \sim kT$ zur Lösung des Elektrons vom As-Atom
- ▶ großer Anteil der Dotieratome sind schon bei Raumtemperatur ionisiert

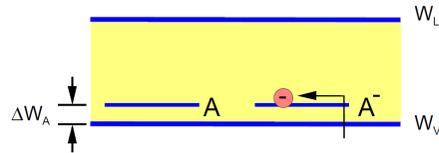
Akzeptoren

- ▶ Bor (B) ist dreiwertig, d.h. 3 Valenzelektronen
- ▶ ein Kristallelektron wird für 4-fache Bindung benötigt
- ▶ B-Atom nimmt Elektron auf, es wirkt als *Akzeptor*
- ▶ die *Lücke* in den Valenzelektronen kann sich bewegen



Akzeptoren

- ▶ Akzeptor im Banddiagramm
 - ▶ das Bor-Atom ist durch das zusätzliche Elektron negativ geladen B^-
 - ▶ frei bewegliches Loch h^+ wird durch B^- schwach angezogen
 - ▶ Energiegewinn \rightarrow lokalisierter Zustand oberhalb des Valenzbands



- ▶ geringe Ionisierungsenergie $\Delta W_A \sim kT$ zur Lösung des Lochs vom B-Atom
- ▶ großer Anteil der Akzeptoren sind schon bei Raumtemperatur ionisiert

Ionisierungsenergie

- ▶ Abschätzung mit Wasserstoffmodell

$$W_{H,ion} = \frac{q^2}{8\pi\epsilon_0 r_0} = 13,6 \text{ eV} \quad \text{mit} \quad r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{mq^2}$$

- ▶ im dotierten Halbleiter $\epsilon_0 \rightarrow \epsilon_0\epsilon_r$ und $m \rightarrow m^*$

$$\Delta W_D = \frac{m_n^* q^4}{2(4\pi\epsilon_0\epsilon_r\hbar)^2}$$

$$\Delta W_A = \frac{m_p^* q^4}{2(4\pi\epsilon_0\epsilon_r\hbar)^2}$$

Ionisierungsenergie

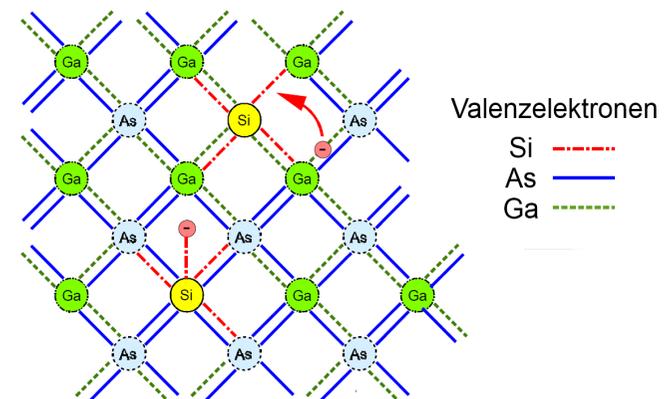
	W_D [meV]	r_0^*/r_0	W_A [meV]	r_0^*/r_0
Si	94	12	47	24
Ge	29	29	20	43
GaAs	5,3	196	36	29
InAs	1,9	568	36	30
InP	8	159	57	22
InGaAs	3,7	284	36	30

Tabelle: Donator- und Akzeptor-Ionisierungsenergien im Bohr'schen Modell mit $r_0 = 0,53 \text{ \AA}$

Ausdehnung der Störstellen-“Atome” über viele Gitterzellen!

amphotäre Dotierung

- ▶ Einheitszelle im Verbindungshalbleiter hat je ein Atom von Gruppe III und V
- ▶ 4-wertige Atome dotieren n oder p je nach Einbauplatz
- ▶ materialabhängig, Einfluss z.B. des Atomdurchmessers

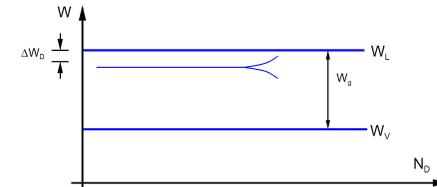


tiefe Störstellen

- ▶ manche Dotierstoffe bilden Zustände tief in der Bandlücke, z.B. Au in Si
- ▶ diese Zustände fördern die Rekombination von Elektron-Loch-Paaren → Rekombinationszentren
- ▶ Kompensation durch tiefe Störstellen mit eindeutigem Donator- bzw. Akzeptorverhalten, z.B. Cr in GaAs und V in InP
- ▶ wenn $[Cr] >$ Hintergrund n -Dotierung, dann werden alle freien Elektronen eingefangen
- ▶ wichtig für semiisolierende Substrate in HF-Anwendungen

Störstellenbänder

- ▶ niedrige Dotierkonzentration → lokalisierte Störstellenzustände
- ▶ bei hohen Konzentrationen (wenn mittlerer Abstand $< r_0^*$) tritt eine Wechselwirkung der benachbarten Zustände auf
- ▶ Störstellenniveaus bilden Bänder (s. Atom → Festkörper)



- ▶ mit steigender Dotierkonzentration sinkt die Ionisierungsenergie $\Delta W_D \rightarrow 0$
- ▶ in Halbleitern mit geringer effektiver Masse m^* (= kleines r_0^*) tritt dies schon bei moderaten Konzentrationen auf

Ladungsträgerstatistik

- ▶ Massenwirkungsgesetz $n \cdot p = n_i^2$ gilt auch für dotierte Halbleiter
- ▶ für n -Dotierung ist Löcherkonzentration sehr klein, und umgekehrt (log. Skala)
- ▶ dies ist im *Gegensatz* zum intrinsischen Halbleiter mit $n = p = n_i$
- ▶ Ionisierungs-Wahrscheinlichkeit der Dotieratome?
- ▶ Elektronen- und Löcherkonzentration im dotierten Halbleiter?

Ladungsträgerstatistik

- ▶ Elektronenkonzentration

$$n = N_L \cdot \exp\left(-\frac{W_L - W_F}{kT}\right)$$

- ▶ Löcherkonzentration

$$p = N_V \cdot \exp\left(-\frac{W_L - W_F}{kT}\right)$$

- ▶ wie beim intrinsischen Halbleiter, aber wir ersetzen W_{F_i} mit der allgemeinen Fermienergie W_F
 - ▶ für n -Dotierung liegt W_F nahe dem Leitungsband
 - ▶ für p -Dotierung nahe dem Valenzband
- ▶ Massenwirkungsgesetz $n \cdot p = n_i^2$ ist erfüllt, $n_i^2 = N_L \cdot N_V \cdot \exp\left(-\frac{W_L - W_V}{kT}\right)$

Störstellenbesetzung n -Halbleiter

- ▶ Besetzung der Störstellen aus Faltung der Zustandsdichte $g(W)$ mit Verteilungsfunktion $f(W)$
- ▶ Störstelle ist lokalisiert \rightarrow diskretes Energieniveau W_D , Faltung ist einfache Multiplikation

$$N_D^0 = \int g_D \cdot f(W_D) dW = N_D \cdot \frac{1}{e^{\frac{W_D - W_F}{kT}} + 1}$$

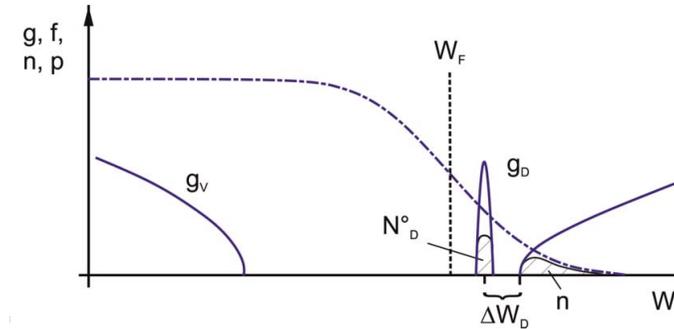
- ▶ Gesamtzahl der Donatoren als Summe der neutralen (= mit Elektron besetzt) und ionisierten (= Elektron abgegeben)

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

Störstellenbesetzung n -Halbleiter

$$N_D^0 = N_D \cdot \frac{1}{e^{\frac{W_D - W_F}{kT}} + 1}$$

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



Störstellenbesetzung p -Halbleiter

- ▶ im p -Halbleiter ist der besetzte Akzeptor negativ geladen

$$N_A^- = \int g_A \cdot f(W_A) dW = N_A \cdot \frac{1}{e^{\frac{W_A - W_F}{kT}} + 1}$$

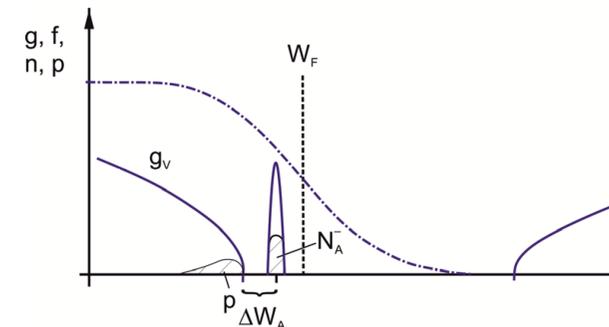
- ▶ Gesamtzahl der Donatoren als Summe der neutralen (= mit Elektron besetzt) und ionisierten (= Elektron abgegeben)

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

Störstellenbesetzung p -Halbleiter

$$N_A^- = N_A \cdot \frac{1}{e^{\frac{W_A - W_F}{kT}} + 1}$$

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



Ladungsträgerkonzentration

- ▶ es gilt elektrische Neutralität im Gleichgewicht

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

- ▶ außerdem gilt für N_D^+

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

- ▶ Einsetzen von p und n in die Neutralitätsbedingung

$$\begin{aligned} N_L \cdot e^{-\frac{W_L - W_F}{kT}} + N_A \cdot \frac{1}{e^{\frac{W_A - W_F}{kT}} + 1} \\ = N_V \cdot e^{-\frac{W_F - W_V}{kT}} + N_D \cdot \left(1 - \frac{1}{e^{\frac{W_D - W_F}{kT}} + 1}\right) \end{aligned}$$

- ▶ Gleichung beschreibt Abhängigkeiten der p , n von Dotierung N_D , N_A und Materialparametern N_L , N_V

n -Halbleiter

- ▶ Näherung mit nur einer n -Dotierkonzentration N_D und Ionisierungsenergie ΔW_D
- ▶ Vernachlässigung der Eigenleitung $n_i \ll N_D$

$$\begin{aligned} n &= N_D^+ \\ &= N_D \cdot (1 - f(W_D)) \\ &= N_D \cdot \left(1 - \frac{1}{e^{\frac{W_D - W_F}{kT}} + 1}\right) \\ &= N_D \cdot \left(1 - \frac{1}{e^{-\Delta W_D/kT} \cdot e^{\frac{W_L - W_F}{kT}} + 1}\right) \end{aligned}$$

- ▶ mit

$$W_D - W_F = -W_L + W_D + W_L - W_F = -\Delta W_D + W_L - W_F$$

n -Halbleiter

$$n = N_D \cdot \left(1 - \frac{1}{e^{-\Delta W_D/kT} \cdot e^{\frac{W_L - W_F}{kT}} + 1}\right)$$

- ▶ auf der rechten Seite ist enthalten $e^{\frac{W_L - W_F}{kT}}$

$$n = N_L \cdot e^{-\frac{W_L - W_F}{kT}} \Rightarrow e^{\frac{W_L - W_F}{kT}} = \frac{N_L}{n}$$

- ▶ eingesetzt

$$n = N_D \cdot \left(1 - \frac{1}{e^{-\Delta W_D/kT} \cdot \frac{N_L}{n} + 1}\right)$$

n -Halbleiter

$$n = N_D \cdot \left(1 - \frac{1}{e^{-\Delta W_D/kT} \cdot \frac{N_L}{n} + 1}\right)$$

- ▶ rechts erweitert mit n

$$n = N_D - \frac{n \cdot N_D}{e^{-\Delta W_D/kT} \cdot N_L + n}$$

- ▶ multipliziert mit $e^{-\Delta W_D/kT} \cdot N_L + n$

$$n \cdot e^{-\Delta W_D/kT} \cdot N_L + n^2 = N_D \cdot N_L \cdot e^{-\Delta W_D/kT} + N_D \cdot n - n \cdot N_D$$

- ▶ auf eine Seite gebracht und nach n^2 und n sortiert

$$n^2 + N_L \cdot e^{-\Delta W_D/kT} n - N_D \cdot N_L \cdot e^{-\Delta W_D/kT} = 0$$

n-Halbleiter

$$n^2 + N_L \cdot e^{-\Delta W_D / kT} n - N_D \cdot N_L \cdot e^{-\Delta W_D / kT} = 0$$

- ▶ quadratische Gleichung in n mit der Lösung

$$n = -\frac{N_L}{2} \cdot e^{-\frac{\Delta W_D}{kT}} \pm \sqrt{\left[\frac{N_L}{2} e^{-\frac{\Delta W_D}{kT}}\right]^2 + N_L \cdot N_D e^{-\frac{\Delta W_D}{kT}}}$$

- ▶ physikalisch sinnvoll ist nur die positive Wurzel (hier schon ausmultipliziert)

$$n = -\frac{N_L}{2} \cdot e^{-\frac{\Delta W_D}{kT}} \cdot \left[\sqrt{1 + 4 \frac{N_D}{N_L} e^{\frac{\Delta W_D}{kT}}} - 1 \right]$$

- ▶ der letzte Ausdruck wird jetzt in Fallunterscheidung untersucht

schwache Dotierung, hohe Temperatur

$$n = -\frac{N_L}{2} \cdot e^{-\frac{\Delta W_D}{kT}} \cdot \left[\sqrt{1 + 4 \frac{N_D}{N_L} e^{\frac{\Delta W_D}{kT}}} - 1 \right]$$

- ▶ schwache Dotierung $N_D \ll N_L$
- ▶ hohe Temperatur $kT \gg \Delta W_D$
- ▶ damit ist

$$4 \frac{N_D}{N_L} e^{\frac{\Delta W_D}{kT}} \ll 1$$

- ▶ Entwicklung der Wurzel mit $\sqrt{1+x} \approx x/2$ für kleine x

$$n = -\frac{N_L}{2} \cdot e^{-\frac{\Delta W_D}{kT}} \cdot \left[2 \frac{N_D}{N_L} e^{\frac{\Delta W_D}{kT}} - 1 \right] \approx N_D$$

- ▶ alle Dotieratome sind ionisiert und konstante Elektronenkonzentration $n = N_D$

tiefe Temperatur

$$n = -\frac{N_L}{2} \cdot e^{-\frac{\Delta W_D}{kT}} \cdot \left[\sqrt{1 + 4 \frac{N_D}{N_L} e^{\frac{\Delta W_D}{kT}}} - 1 \right]$$

- ▶ tiefe Temperatur $kT \ll \Delta W_D$
- ▶ das heißt

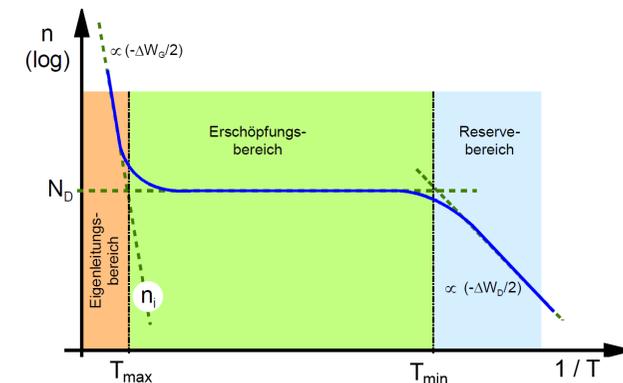
$$4 \frac{N_D}{N_L} e^{\frac{\Delta W_D}{kT}} \gg 1$$

- ▶ damit überwiegt in der Klammer $\sqrt{4 \frac{N_D}{N_L} e^{\frac{\Delta W_D}{kT}}}$

$$n = -\frac{N_L}{2} \cdot e^{-\frac{\Delta W_D}{kT}} \cdot \sqrt{4 \frac{N_D}{N_L} e^{\frac{\Delta W_D}{kT}}} \approx \sqrt{N_D \cdot N_L} \cdot e^{-\frac{\Delta W_D}{2kT}}$$

- ▶ hier nimmt n mit der Temperatur exponentiell zu, bis N_D erreicht ist

Temperaturverlauf



- ▶ rechts: Reservebereich, tiefe Temperatur $kT \ll \Delta W_D$
- ▶ Mitte: **Erschöpfungs-bereich** mit konstantem n zwischen T_{\min} und T_{\max}
- ▶ links: für hohe Temperaturen überwiegt Eigenleitung

Zusammenfassung 6. Vorlesung

- ▶ elektronische Eigenschaften des Festkörpers
- ▶ Leitfähigkeit
- ▶ Stoffklassen Isolator, Halbleiter, Metall
- ▶ Konzentration von Elektronen und Löchern
- ▶ Eigenleitung
- ▶ Dotierung
- ▶ Temperaturverlauf der Ladungsträgerkonzentration
- ▶ Erschöpfungsbereich → Bauelemente

Danke für Ihre Teilnahme!