Berechnung der Leitfähigkeit

- Quantitativ wird die Leitfähigkeit σ berechnet durch:

$$\sigma = e\left(\mu_n n + \mu_p p\right)$$

Ladung des Elektrons

Beweglichkeit der Ladungsträger im Leitungsband

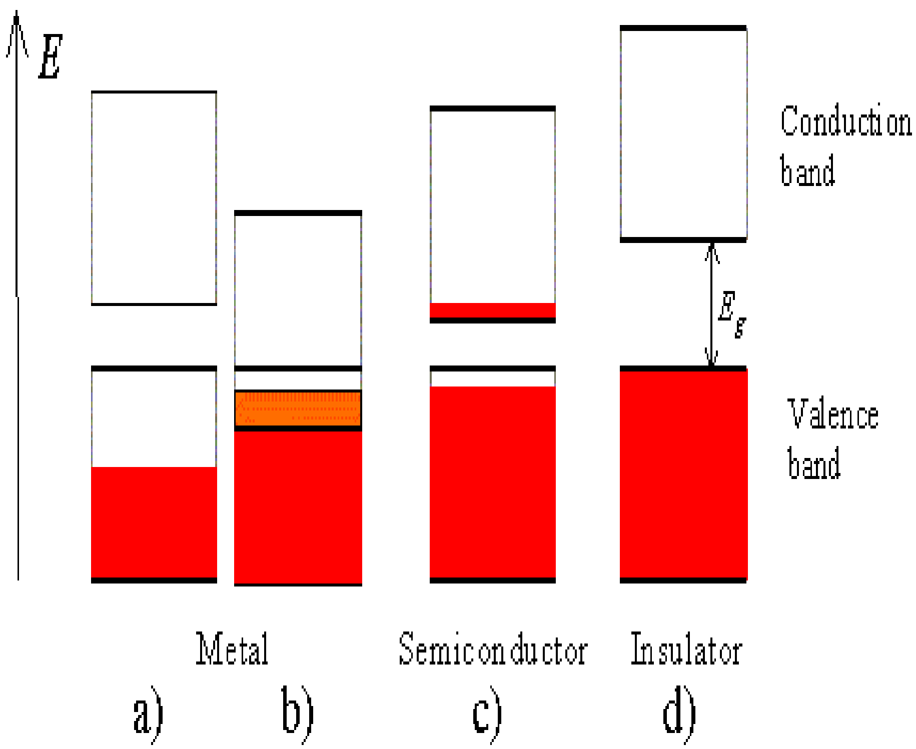
Anzahl der Ladungsträger im Leitungsband

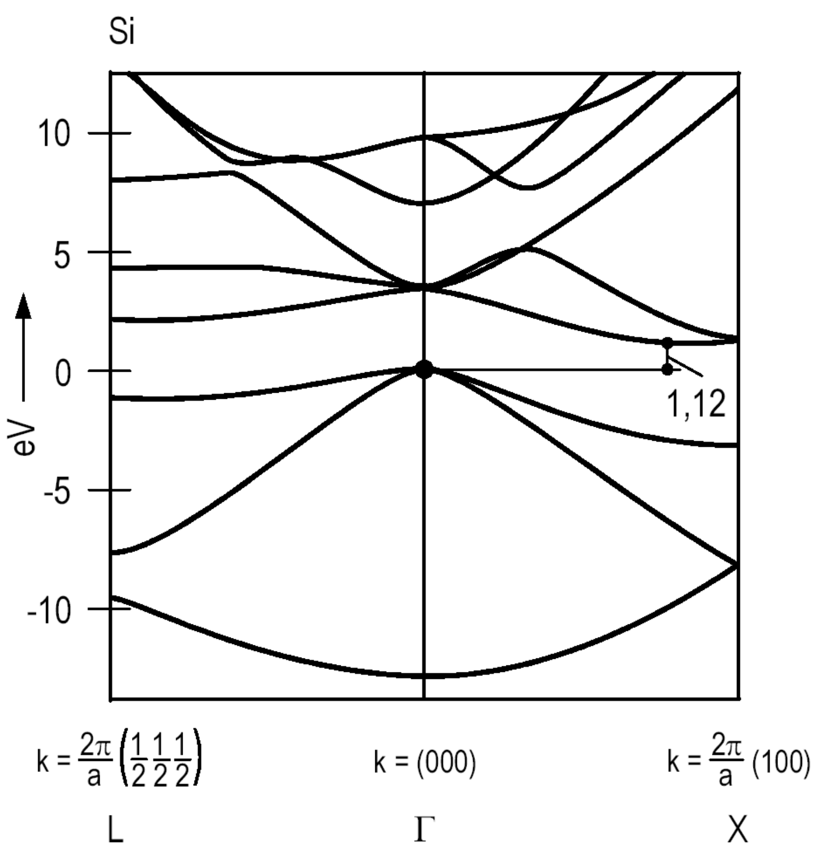
Beweglichkeit der Ladungsträger im Valenzband

Anzahl der Defektelektronen im Valenzband

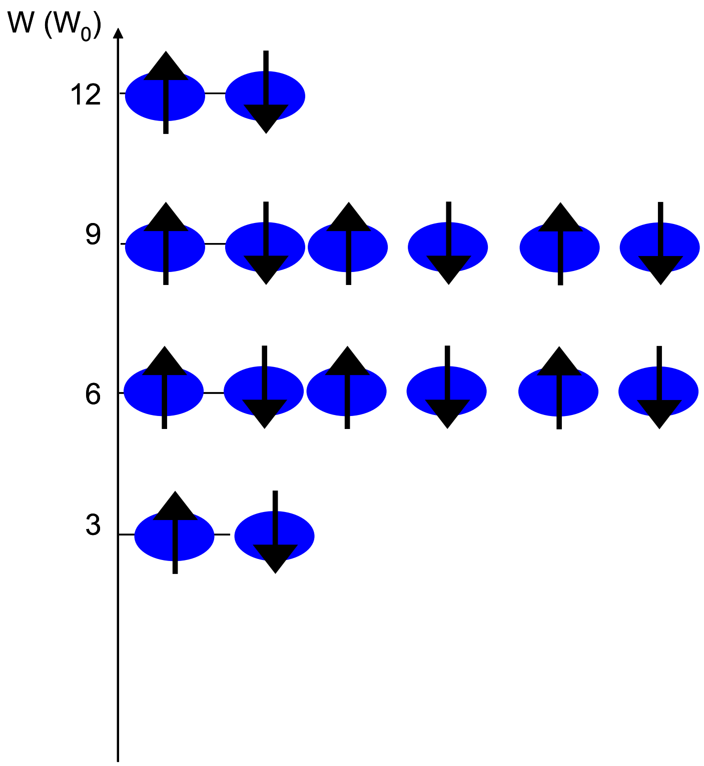
- Wie kommen die Elektronen bei Halbleitern eigentlich ins Leitungsband und wie viele gibt es dort?

Welche Zustände sind denn eigentlich besetzt ?





Welche Zustände sind denn eigentlich besetzt ?



-im Prinzip sollte das Ganze ähnlich wie beim Atom erfolgen

- Besetzung von „unten nach oben“

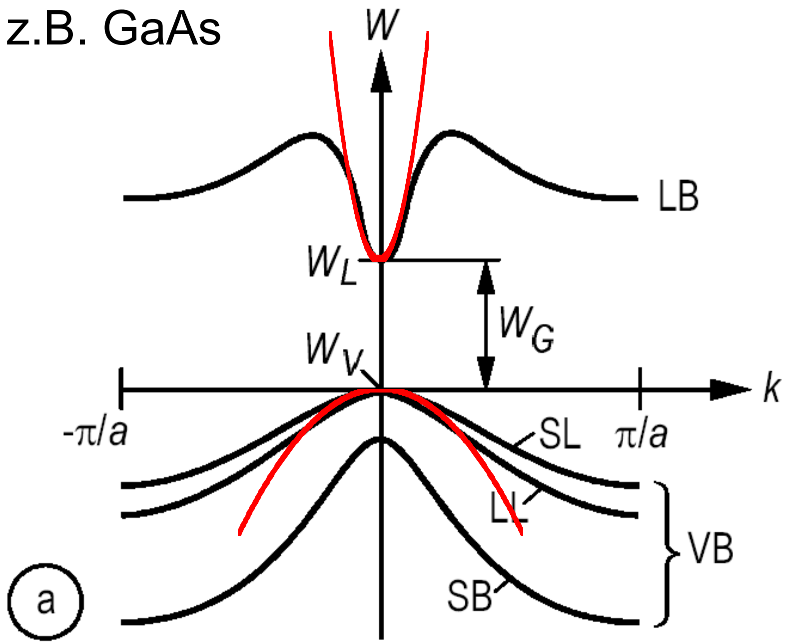
-...wie viele Elektronen kann man in ein Band hineinsetzen ?

Uns hilft: Bloch-Elektronen verhalten sich an den Bandextrema so ähnlich wie freie Elektronen, allerdings mit einer anderen Masse. Betrachten wir also den Fall von quasifreien Elektronen in einem (makroskopischen) Würfel der Kantenlänge L …

Parabelnäherung

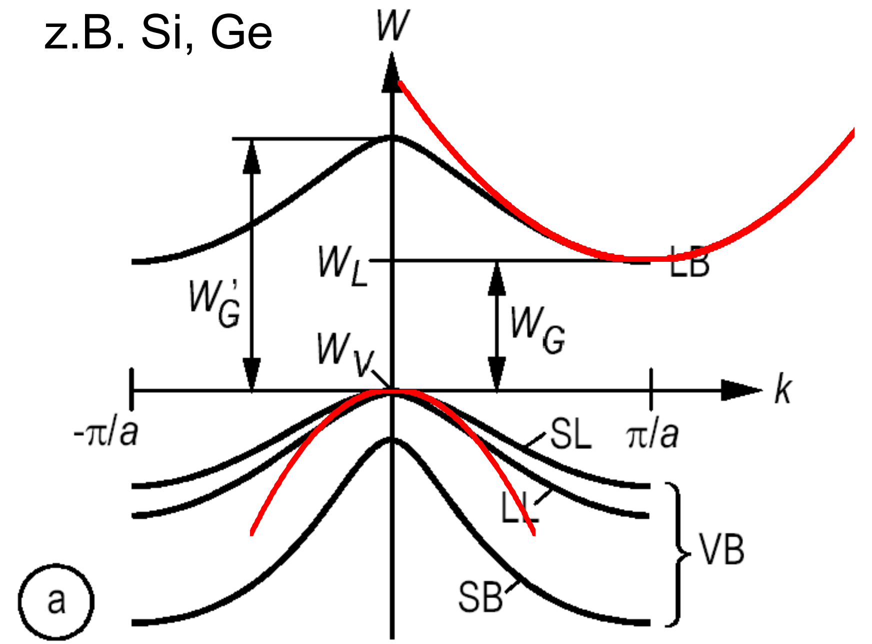
<u>Direkter Halbleiter</u>

z.B. GaAs



<u>Indirekter Halbleiter</u>

z.B. Si, Ge

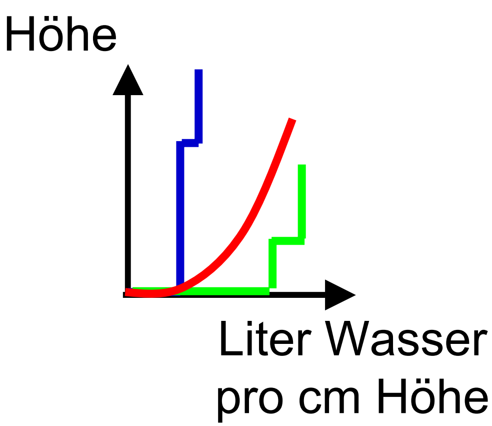


Wie sieht das dann konkret im Fall von parabolischen Bändern aus ?

Hier ist der Bezugspunkt für die Energie das Minimum des Leitungsbandes W_L bzw. das Maximum des Valenzbandes W_V.

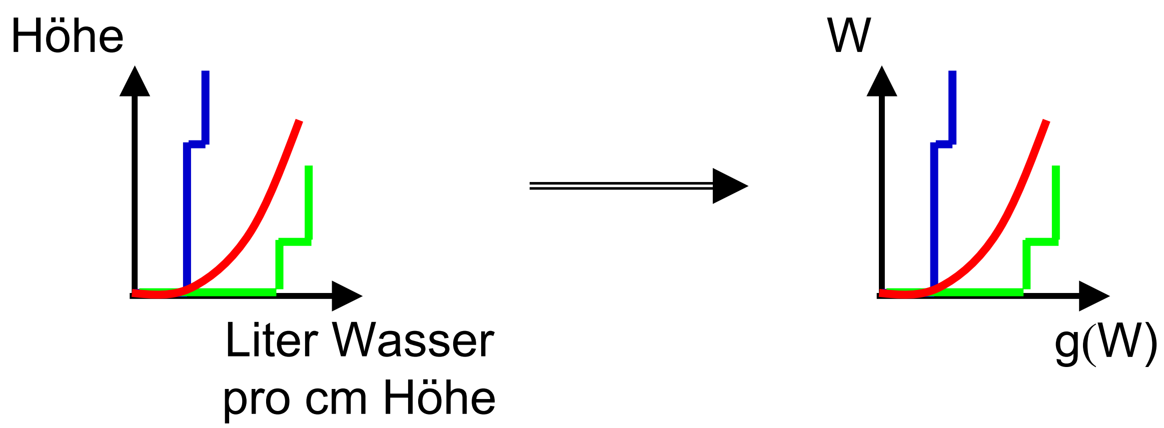
Zustandsdichte : Badewannen-Analogie

- Wie viel Wasser ist in einer Badewanne, die bis zur Höhe von 30 cm über dem Boden gefüllt ist?
- Wie viele Liter passen in die nächsten 10 cm?
- Die Antwort hängt von der Form der Badewanne ab!
- Integrieren ergibt Gesamtwassermenge.



Zustandsdichte in Kristallen

- Die Wassermenge in einer bis zu einer bestimmten Höhe gefüllten Badewanne hängt von der Form der Badewanne ab.
- Genauso hängt die Anzahl der Ladungsträger in einem bis zu einer bestimmten Energie gefüllten Band von der Form der Bandstruktur ab.
- Die Anzahl der erlaubten Zustände pro Volumeneinheit und pro Energieintervall ist durch die Zustandsdichte g(W) gegeben.



siehe Tafelanschrieb

Zustandsdichte in der Parabelnäherung

- In der Parabelnäherung verhalten sich Elektronen im LB quasifrei mit der effektiven Masse m_n. Ihre Zustandsdichte ist gegeben durch:

$$g_L(W) = \frac{4\pi\left(2m_e\right)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{W - W_L}$$

- In der Parabelnäherung verhalten sich Löcher im VB quasifrei mit der effektiven Masse m_p. Ihre Zustandsdichte ist gegeben durch:

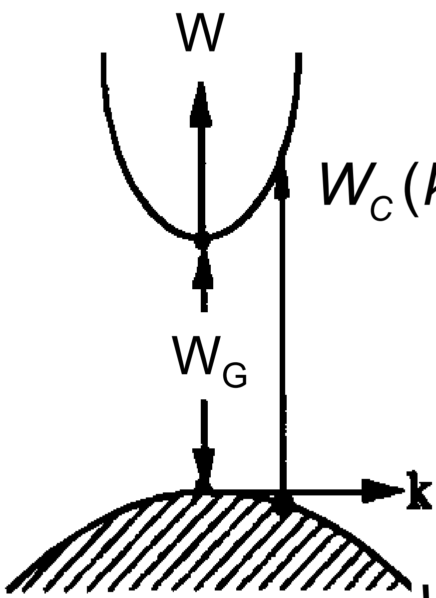
$$g_V(W) = \frac{4\pi\left(2m_h\right)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{W_V - W}$$

Zusammenfassung Parabolische Bänder

Dispersionsrelation

Zustandsdichte

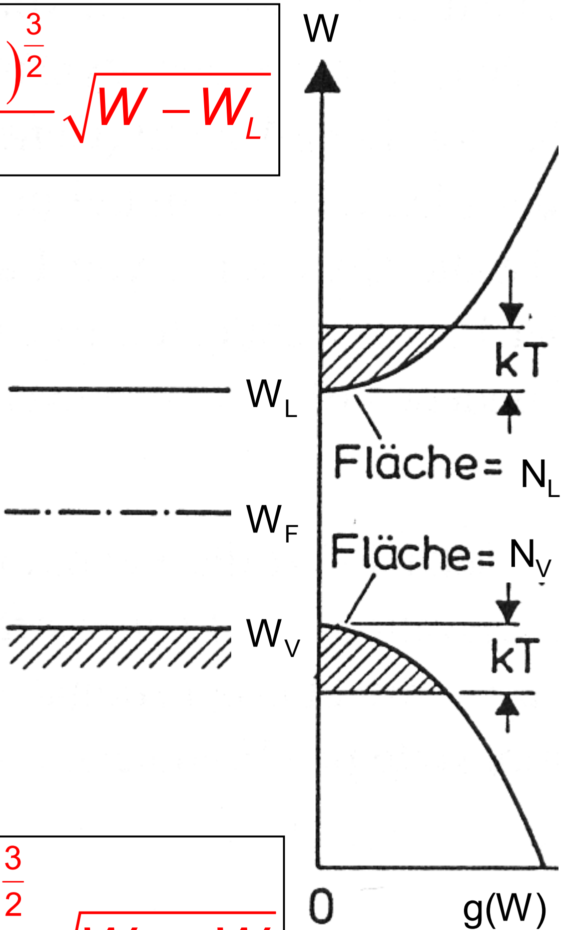
$$\boxed{g_L(W) = \frac{4\pi(2m_e)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{W - W_L}}$$



(a)

$$W_C(k) = W_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

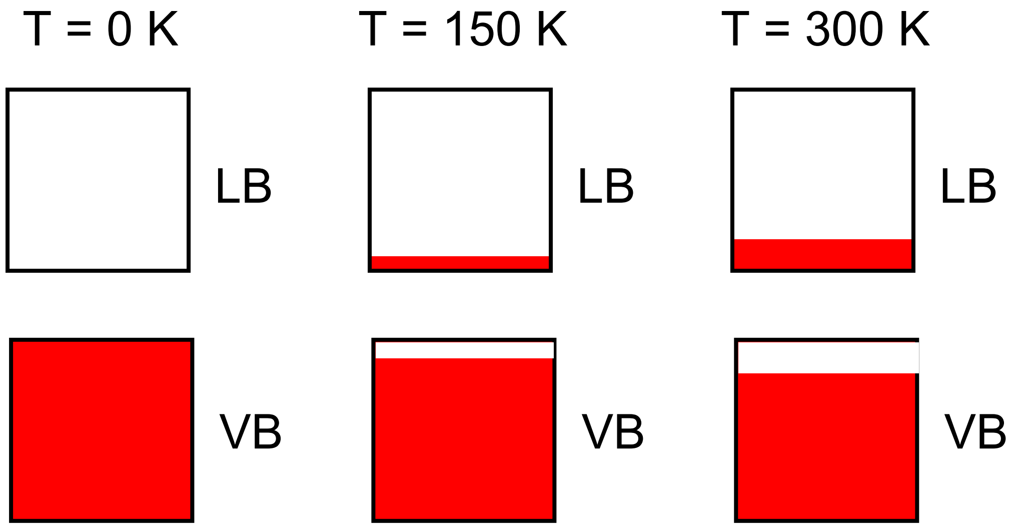
$$W_V = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$$



$$\boxed{g_V(W) = \frac{4\pi(2m_h)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{W_V - W}}$$

Besetzung der Bänder

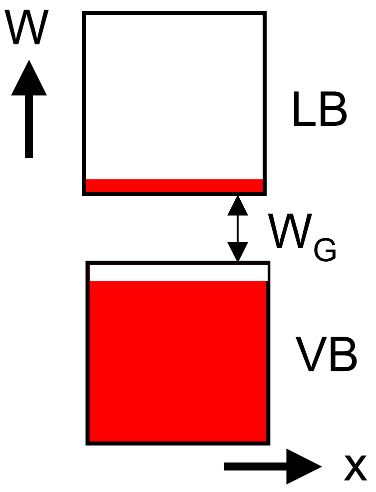
- Bei $T = 0$ K sind alle Zustände im Valenzband (VB) mit Elektronen besetzt und alle Zustände im Leitungsband (LB) sind unbesetzt.
  - Leitfähigkeit $\sigma = 0$, da es keine beweglichen Ladungsträger gibt.
- Bei steigender Temperatur T beobachtet man, dass mehr und mehr Zustände im Leitungsband besetzt sind und mehr und mehr Zustände im Valenzband frei sind.
  - Da es mehr bewegliche Träger gibt, steigt die Leitfähigkeit zunächst mit der Temperatur.
- Wie können wir die Besetzung der Zustände berechnen ???



Wie kommen Elektronen ins LB?

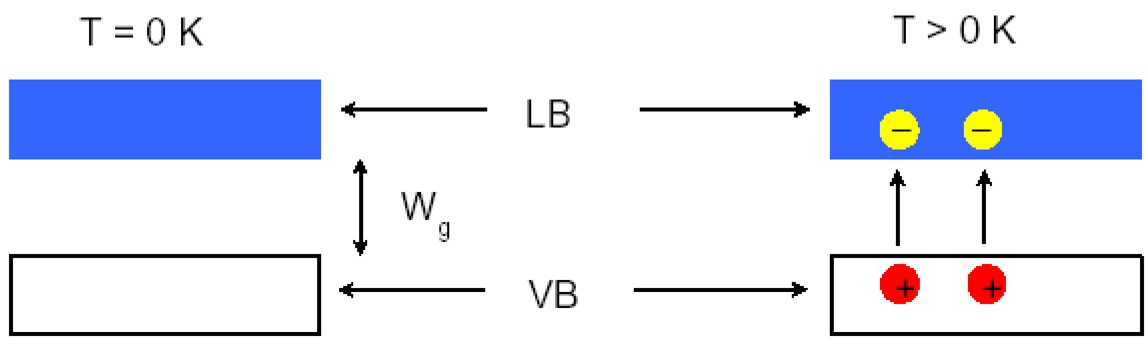
- Elektronen können vom Valenzband (VB) ins Leitungsband (LB) übergehen, wenn ihnen mindestens die Energie W_G zugeführt wird.
  - Quantenmechanisch gesehen geht das Elektron durch Energiezufur von einem Zustand im Valenzband in einen Zustand im Leitungsband über.

- Die Energie kann auf verschiedene Arten zugeführt werden:
  - Thermische Energie (Stoß mit dem „wackelnden“ Atomgitter)
  - Elektromagnetische Strahlung
  - Elektrische Felder
  - …



Quantenstatistik

Warum befinden sich bei höheren Temperaturen eigentlich Elektronen in höheren Niveaus ?



Aus der Thermodynamik: Die Besetzung der Zustände erfolgt so, dass die freie Energie minimiert wird:

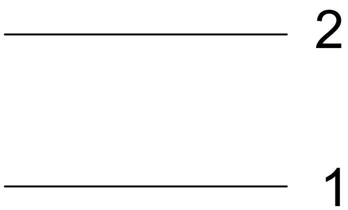
$$\boxed{F=U-TS=\text{Min!}}$$

Die innere Energie ergibt als Summe der Energie der einzelnen Elektronen:

$$U = \sum_i n_i W_i$$

Quantenstatistik

$\boxed{F=U-TS=Min!}$



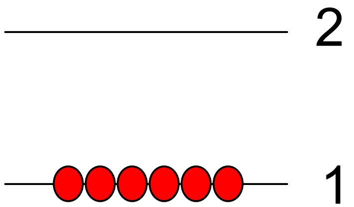
Für die Entropie gilt: $S = k \ln P$

$k=1{,}3805\cdot10^{-23}JK^{-1} = 8{,}61eV \cdot K^{-1}$ ist die Boltzmannkonstante

Hierbei ist P die Anzahl der Realisierungsmöglichkeiten.

Nehmen wir an, wir hätten 6 Elektronen auf zwei Energieniveaus 1 und 2 zu verteilen:

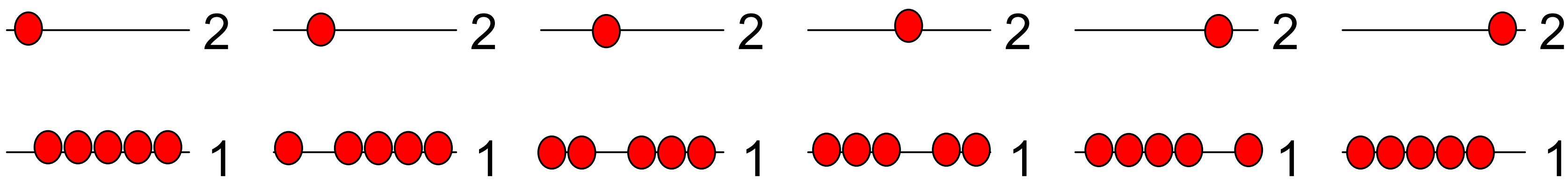
Wenn alle Elektronen im Zustand 1 sind, gibt es nur eine einzige Realisierungsmöglichkeit.



S=0

Das ist der Zustand für T=0.

Quantenstatistik



Der Zustand (5 e‘s in 1, und 1 e in 2) lässt sich mehrfach realisieren.

D.h. seine Entropie S=k lnP ist endlich.

F=U-TS=Min!

Je höher die Temperatur ist, desto stärker sorgt die damit verbundene Entropieerhöhung für eine Besetzung der höheren Zustände.

Obwohl die innere Energie größer wird, wird u. U. die freie Energie kleiner !

siehe Tafelanschrieb!

Quantenstatistik

Aus einer konsequenten thermodynamischen Betrachtung dieser Situation lässt sich die Wahrscheinlichkeit ableiten, dass ein Zustand bei einer Energie W mit einem Elektron besetzt ist.

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein quantenmechanischer Zustand der Energie W bei gegebener Temperatur T besetzt ist, ist

$$\boxed{f(W,T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{W - W_F}{kT}\right)}}$$

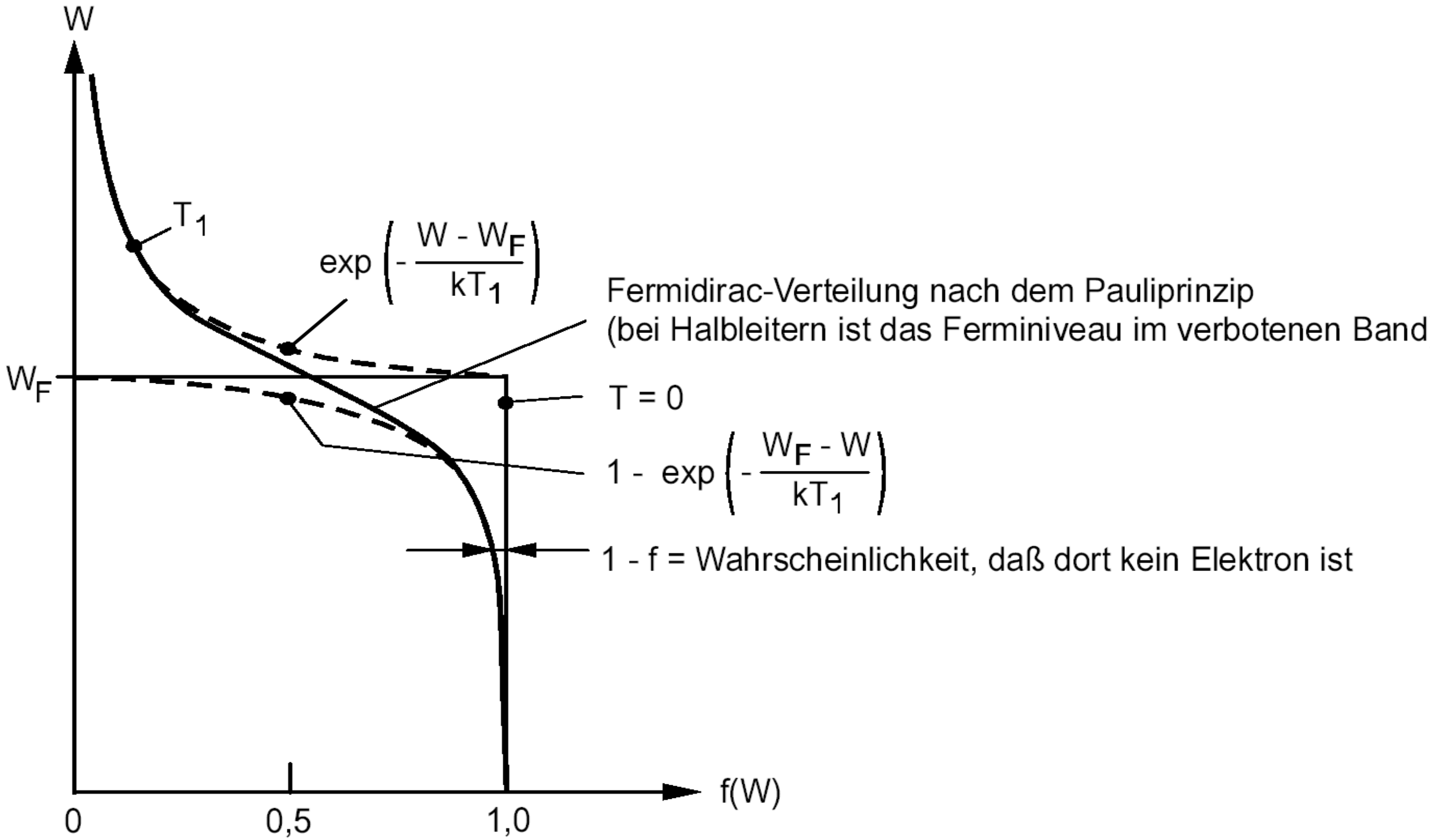
W_F wird als Fermi-Energie bezeichnet.

Fermi-Dirac-Verteilung

Fermi-Dirac-Verteilung

$$f(W,T) = \frac{1}{1 + \exp(\frac{W - W_F}{kT})}$$

Bei der T=0 K ergibt sich eine Stufenfunktion.



Anzahl der Ladungsträger

- Jetzt wissen wir, mit welcher Wahrscheinlichkeit f(W) ein Zustand im thermischen Gleichgewicht mit einem Elektron besetzt ist.
- Um die Anzahl der Ladungsträger zu berechnen müssen wir nur noch wissen, wie viele Zustände es insgesamt gibt.
- Die Anzahl der erlaubten Zustände pro Volumeneinheit und pro Energieintervall nennt man die Zustandsdichte *g(W)*.

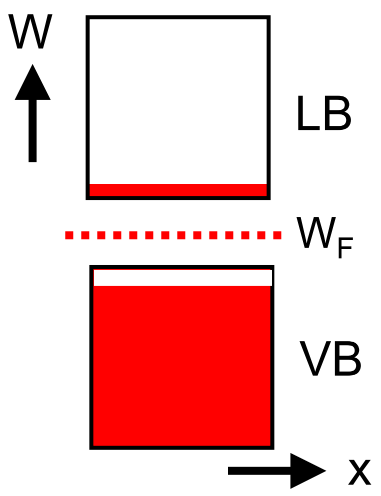
- Die Anzahl der Elektronen im Leitungsband (bzw. die Anzahl der Löcher im Valenzband) mit einer Energie W ist im thermischen Gleichgewicht gegeben durch:

$$n_W(W) = g_L(W) f(W)$$

$$bzw.$$

$$p_W(W) = g_V(W)\left(1 - f(W)\right)$$

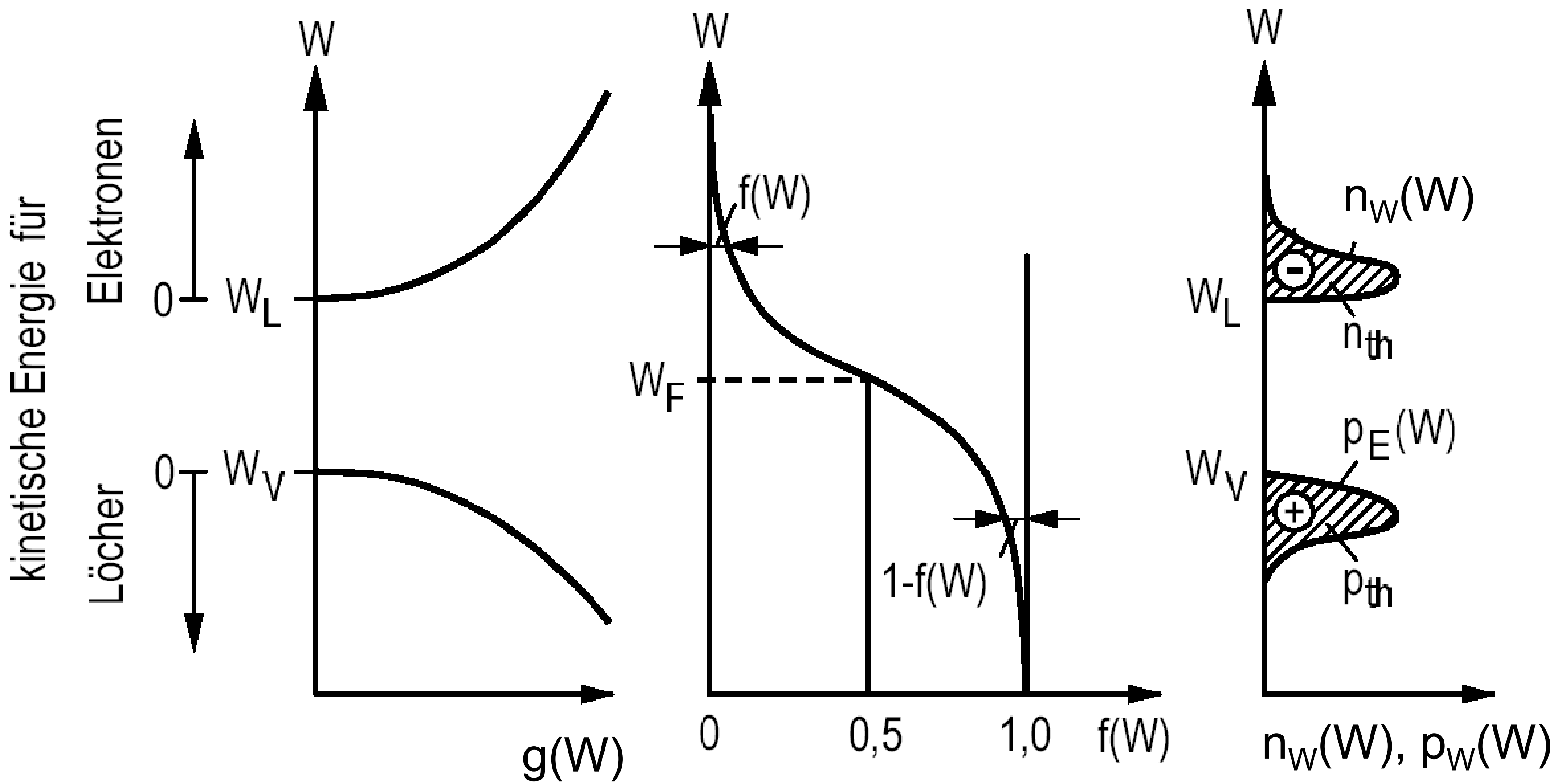
- Durch Integrieren über alle Energien W erhält man die Gesamtzahl der Ladungsträger n bzw. p.



Anzahl/Dichte der Ladungsträger

- Für die Anzahl der Ladungsträger gilt damit:

$$n_{th} = \int_{W_L}^{\infty} n_W(W)dW = \int_{W_L}^{\infty} g_L(W)f(W)dW \text{ bzw. } \mathrm{p_{th}} = \int_{-\infty}^{W_V} p_W(W)dW = \int_{-\infty}^{W_V} g_V(W)\left(1-f(W)\right)dW$$



Berechnung der Dichte der Ladungsträger

$$f_{FD}(W) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{W - W_F}{kT}\right)} \approx \exp\left(-\frac{W - W_F}{kT}\right) = f_{MB}(W)$$

„Boltzmann'scher Grenzfall der Fermi-Dirac-Verteilung"

Damit ergibt sich dann:

$$n = \int_{W_L}^{\infty} g_L(W) f(W) dW = \int_{W_L}^{\infty} \frac{4\pi (2m_e)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{W - W_L} \exp\left(-\frac{W - W_F}{kT}\right) dW$$

$$= \frac{4\pi (2m_e)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \exp\left(\frac{W_F}{kT}\right) \exp\left(\frac{-W_L}{kT}\right) \int_{W_L}^{\infty} \sqrt{W - W_L} \exp\left(-\frac{W - W_L}{kT}\right) dW$$

Jetzt kann substituiert werden: $x = \frac{W - W_L}{kT}$

Berechnung der Dichte der Ladungsträger

$$n = \frac{4\pi\left(2m_e\right)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\exp\left(\frac{W_F}{kT}\right)\exp\left(\frac{-W_L}{kT}\right)\int_{W_L}^{\infty}\sqrt{W - W_L}\,\exp\left(-\frac{W - W_L}{kT}\right)dW$$

Integrationsgrenzen: $W_L \rightarrow 0; \infty \rightarrow \infty$

$dW = kTdx$

$$n = \frac{4\pi\left(2m_e\right)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\left(kT\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{W_L - W_F}{kT}\right)\underbrace{\int_{W_L}^{\infty}\sqrt{x}\,\exp\left(-x\right)dx}_{=\frac{\sqrt{\pi}}{2}}$$

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

mit $N_L = 2\left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$

N_L ist die effektive Zustandsdichte des Leitungsbandes

Berechnung der Dichte der Ladungsträger

Genauso kann für die Besetzung des Valenzbandes mit Löchern abgeleitet werden:

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

$$\text{mit } N_V = 2\left(\frac{2\pi m_h kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

N_V ist die effektive Zustandsdichte des Valenzbandes

-Beschreibung des Halbleiters durch zwei effektive Niveaus mit entsprechend großer Zustandsdichte

-Besetzung erfolgt mit einem Boltzmann-Faktor.

- …allerdings ist $N_{L,V}$ kein echter Materialparameter, da T-abhängig

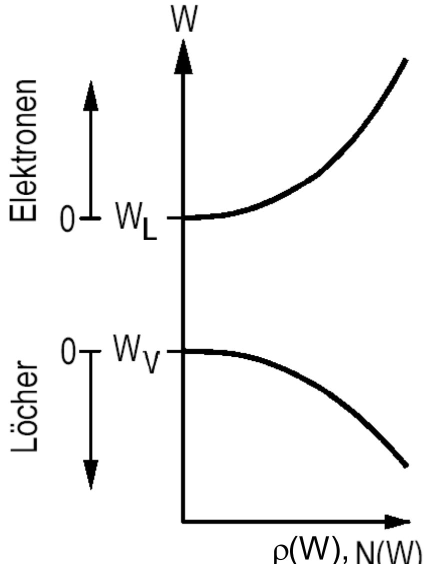
Der intrinsische Halbleiter

Multiplikation ergibt:

$$np = N_L \exp\left(-\frac{W_L - W_F}{k_B T}\right) N_V \exp\left(\frac{W_V - W_F}{k_B T}\right) =$$

$$= N_L N_V \exp\left(-\frac{W_L - W_V - W_F + W_F}{k_B T}\right) = N_L N_V \exp\left(-\frac{W_G}{k_B T}\right)$$

mit $W_G = W_L - W_V$



D.h. Elektronen- und Lochkonzentration stellen sich ein nach einer Art „Massenwirkungsgesetz" !

<u>Für den intrinsischen Halbleiter gilt:</u>

$$n_i = p_i = \sqrt{N_L N_V} \exp\left(-\frac{W_G}{2 k_B T}\right)$$

Eigenleitungsträgerdichte

- Da im Halbleiter Elektronen im LB und Löcher im VB paarweise entstehen gilt:

$$n_{th} = p_{th} = n_i$$

n_i nennt man die Eigenleitungsträgerdichte.

- Berechnung des Produktes ergibt:

$$n_{th} p_{th} = n_i^2(T) = N_L N_V \exp\left(-\frac{W_G}{kT}\right)$$

- Die Ladungsträgeranzahl n_i im thermischen Gleichgewicht hängt vom Bandabstand W_G, den effektiven Massen der Bänder und der Temperatur ab.

Beispiele für Eigenleitungsträgerdichten bei Zimmertemperatur (T=293 (300) K):

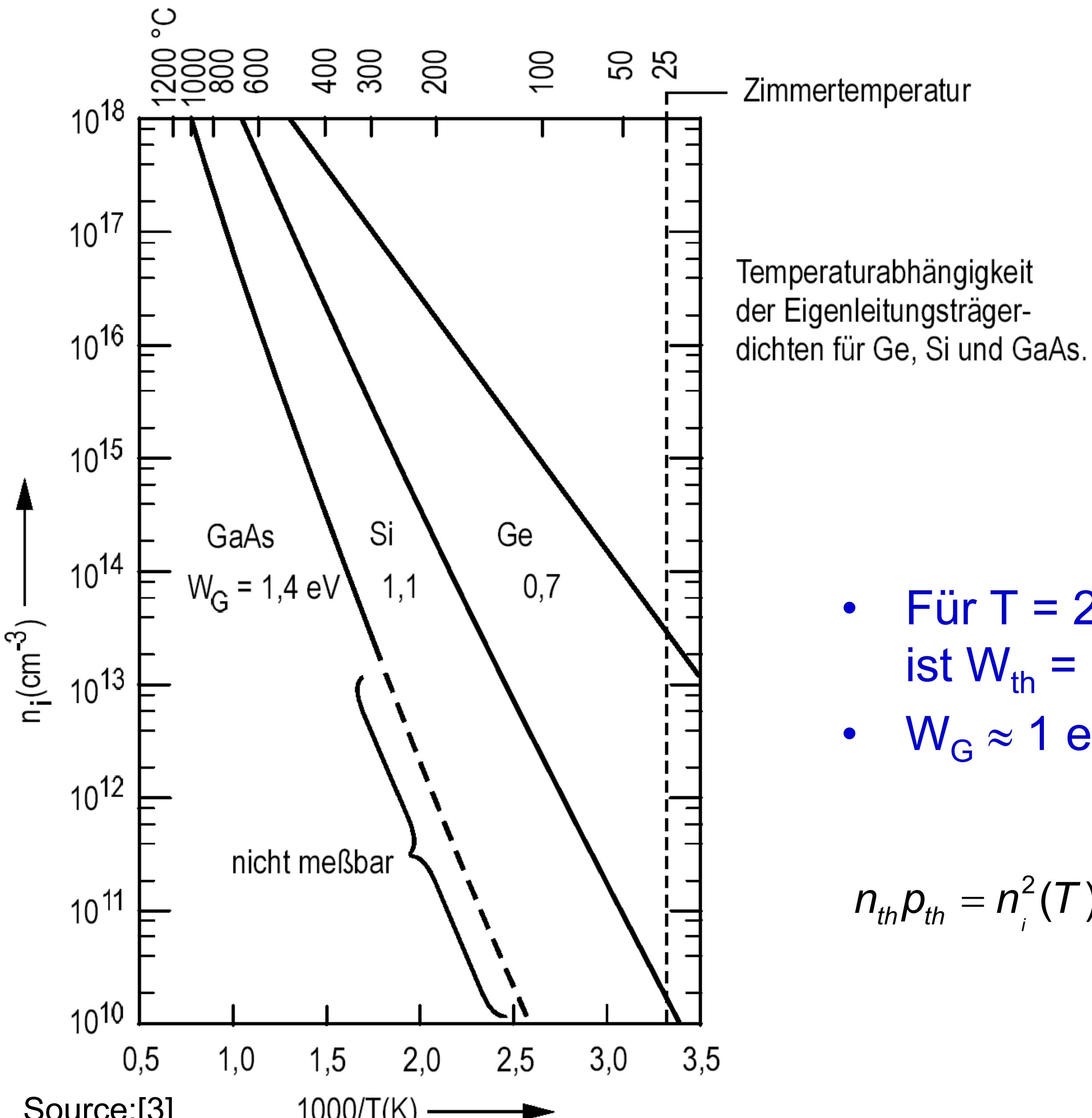
$$\text{Ge}: \; n_i = 2.4 \cdot 10^{13}\, cm^{-3}$$

$$\text{Si}: \; n_i = 1.5 \cdot 10^{10}\, cm^{-3}$$

$$\text{InP}: \; n_i = 1.2 \cdot 10^{8}\, cm^{-3}$$

$$\text{GaAs}: \; n_i = 1.2 \cdot 10^{8}\, cm^{-3}$$

Temperaturabhängigkeit von n_i



Source:[3]

- Für T = 293 K (Raumtemperatur) ist $W_{th} = kT = 25$ meV.
- $W_G \approx 1$ eV = 40 W_{th}.

$$n_{th} p_{th} = n_i^2(T) = N_L N_V \exp\left(-\frac{W_G}{kT}\right)$$