

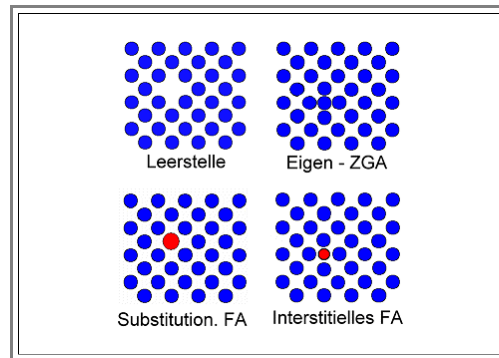
4.2.4 Merkpunkte zu Kapitel 4.2 "Atomare Fehlstellen und Diffusion"

Es gibt vier Grundtypen atomarer Fehlstellen:

- Die *intrinsischen* Fehlstellen Leerstelle (Index V = "vacancy") und Eigen-Zwischengitteratom (**ZGA**; Index i = "interstitial") sind im *thermodynamischen Gleichgewicht* immer vorhanden, mit einer Dichte $n_{V,i}$ oder der Konzentration (relative Häufigkeit) $c_{V,i}$ entsprechend

$$n_{V,i} = N_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_{V,i}^F}{k_B T}\right)$$

$$c_{V,i} = \frac{n_{V,i}}{N_0} = \exp\left(-\frac{E_{V,i}^F}{k_B T}\right)$$



Die Konzentration steigt also exponentiell mit der Temperatur.

- Typische Bildungsenergien $E_{V,i}^F$ liegen im Bereich um **1 eV**.
- Merken:** $k_B T$ bei $RT = \text{ca. } 1/40 \text{ eV} = 25 \text{ meV}$.

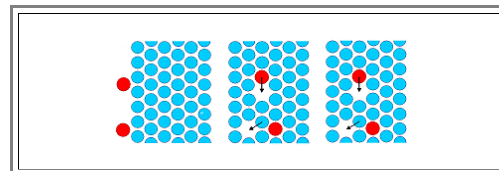
Die Konzentration der *extrinsischen AF* ist i.d.R. durch die Qualität des Ausgangsmaterials bedingt; sie liegen dann in *Über-* oder *Untersättigung* vor.

$$\text{Leerstellen: } E_{V,i}^F \approx (0,5 - 2) \text{ eV}$$

$$\text{ZGA: } E_{V,i}^F \approx (2 - 5) \text{ eV}$$

Atomare Fehlstellen sind beweglich. Sie können im Kristall *diffundieren*.

- Intrinsische und extrinsische **ZGA** diffundieren *direkt* durch Sprünge auf äquivalente Nachbarpositionen.
- Leerstellen diffundieren durch Sprünge der Nachbaratome in die Leerstelle.
- Substitutionelle Fremdatome diffundieren über einen *Leerstellenmechanismus* \Rightarrow



Diffusion ist eine Grundtechnologie, insbesondere für Halbleitertechnik.

Entscheidend ist die Sprungrate r .

- v_0 = Schwingungsfrequenz der Atome im Kristall $\approx 10^{13} \text{ Hz}$.

Wesentliche Erkenntnis: Der Boltzmannfaktor $\exp[-E/(k_B T)]$ ist die *Wahrscheinlichkeit*, daß ein Teilchen innerhalb eines Ensembles bei der Temperatur T die Energie E "hat".

$$r = v_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_M}{k_B T}\right)$$

Zahl der Anläufe / s Wahrscheinlichkeit, daß es klappt

Makroskopische **Diffusionsströme** \mathbf{j} (= Teilchen pro s und cm^2) werden durch Dichtegradienten ∇n getrieben:

- Das **1. Ficksche Gesetz** koppelt Ströme und Gradienten.
- Der **Diffusionskoeffizient** D beschreibt Teilcheneigenschaften (a = Gitterkonstante). Typische **Wanderungsenergien** E_M (M: "migration") liegen im Bereich von **1 eV**.
- Das **2. Ficksche Gesetz** beschreibt die zeitliche Änderung der Dichte.

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} \right) = D \cdot \Delta n$$

$$j_x \propto \frac{\partial n(x,y,z)}{\partial x}$$

$$j(\vec{r}) = -D \cdot \nabla n(\vec{r})$$

$$D(T) = a^2 \cdot \nu(T) = a^2 \cdot \nu_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_M}{k_B T}\right)$$

$$= D_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_M}{k_B T}\right)$$

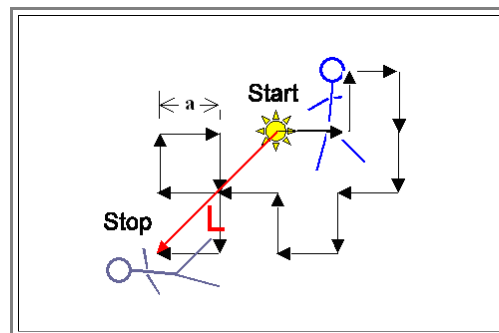
- Diffusionsströme **geladener** Teilchen sind **elektrische** Ströme!

Diffundierende Teilchen machen einen "**random walk**":

- Zwischen Schrittweite (meist \approx Gitterkonstante a), Zahl der Schritte N , Diffusionskoeffizient D , "Laufzeit" τ und der **Diffusionslänge** L gibt es einfache Zusammenhänge:

$$L^2 = N \cdot a^2$$

$$L = (D \cdot \tau)^{1/2}$$



- Die letzte der beiden Gleichungen **muß** man wissen!