

Festkörperelektronik

Prof. Burte

Gestaltung:
Jörg Neumann
Stefan Scharfenberg
Marcel Thränhardt

Inhaltsverzeichnis

1	Eigenschaften von Einkristallen	7
1.1	Kristall	7
1.2	Kristallgitter	7
1.2.1	Vektoren einer Gittertranslation und Gitterformen	7
1.2.2	Basis und Kristallstruktur	7
1.2.3	Primitive Gitterzelle	8
1.2.4	Fundamentale Gitterarten	9
1.2.5	Millersche Indizes für Kristallebenen	10
1.2.6	Diamantstruktur	11
1.3	Halbleitermaterialien	12
2	Atome und Elektronen	13
2.1	Einführung	13
2.2	Experimentelle Beobachtungen	13
2.2.1	Der photoelektrische Effekt	13
2.2.2	Atomspektren	14
2.3	Das Bohr'sche Atommodell	15
2.4	Quantenmechanik	17
2.4.1	Wahrscheinlichkeit und Unschärferelation	17
2.4.2	Die Schrödinger Gleichung	18
2.4.3	Das Potentialwallproblem	19
2.4.4	Der Tunnelprozess	20
2.5	Atomstruktur und Periodensystem	22
2.5.1	Das Wasserstoffatom	22
2.5.2	Das Periodensystem	24
3	Energiebänder und Ladungsträger in Halbleitern	27
3.1	Bindungskräfte und Energiebänder in Festkörpern	27
3.1.1	Atome im Festkörper	27
3.1.2	Bindungskräfte in Festkörpern	27
3.1.3	Energiebänder	28
3.1.4	Metalle, Halbleiter und Isolatoren	29
3.1.5	Direkte und indirekte Halbleiter	30
3.2	Ladungsträger in Halbleitern	30
3.2.1	Elektronen und Löcher	30
3.2.2	Effektive Masse von Ladungsträgern	32
3.2.3	Intrinsisches Material	32
3.2.4	Extrinsisches Material	33
3.3	Ladungsträgerkonzentration	35
3.3.1	Das Fermi-Niveau	35
3.3.2	Elektronen- und Löcherkonzentrationen im Gleichgewicht	36
3.3.3	Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerkonzentrationen	38
3.3.4	Kompensation und Raumladungsneutralität	39
3.4	Drift von Ladungsträgern in elektrischen und magnetischen Feldern	39
3.4.1	Leitfähigkeit und Beweglichkeit, Ohmsches Gesetz	39
3.4.2	Einfluss von Temperatur und Dotierung auf die Beweglichkeit	41
3.4.3	Hochfeldeffekte	42
3.4.4	Hall-Effekt	43

Abbildungsverzeichnis

1.1	Translation eines 2-dimensionalen Gitters	8
1.2	Primitive Achsen eines Raumgitters bilden eine primitive Elementarzelle (3-dim.)	8
1.3	Primitive Elementarzelle des kubisch flächenzentrierten Gitters	10
1.4	Darstellung der Kristallebene mit den Millerschen Indizes (233)	11
1.5	Kristallstruktur von Diamant	11
2.1	Der photoelektrische Effekt	13
2.2	Wichtige Linien im Emissionsspektrum von Wasserstoff	14
2.3	Beziehung der Photonenenergien im Wasserstoffspektrum	15
2.4	Elektronenorbitals und Übergänge im Bohrschen Modell des Wasserstoffs	17
2.5	Das Problem eines Teilchens im Potentialwall	21
2.6	Quantenmechanisches Tunneln	21
2.7	Das sphärische Koordinatensystem	22
3.1	Kovalente Bindung im Silicium	28
3.2	Energiebänder in einer Diamantformation in Abhängigkeit vom Abstand der Atome	29
3.3	Typische Bandstrukturen bei einer Temperatur von $0K$	29
3.4	Bandstrukturen für Si und GaAs	30
3.5	Elektronen-Loch-Paare im Bändermodell des Halbleiters	31
3.6	E-k-Diagramm des gefüllten Valenzbandes	31
3.7	Skizze zum Zyklotron-Resonanz-Experiment	32
3.8	Elektron-Loch-Paare im Bindungsmodell des intrinsischen Siliciums	33
3.9	Donator im Bändermodell bei $T = 0K$ und $T \approx 50K$	34
3.10	Akzeptor im Bändermodell bei $T = 0K$ und $T \approx 50K$	34
3.11	Donator- und Akzeptoratome im Silicium	34
3.12	Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion bei unterschiedlichen Temperaturen	35
3.13	Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion für verschiedene Halbleitermaterialien bei konstanter Temperatur $T > 0K$	36
3.14	Schematisches Banddiagramm, Zustandsdichteverteilung, Fermi-Dirac-Verteilung und Ladungsträgerkonzentration für verschiedene Halbleitermaterialien im thermischen Gleichgewicht	37
3.15	Intrinsische Ladungsträgerkonzentration als Funktion der inversen Temperatur für Ge, Si und GaAs	38
3.16	Ladungsträgerkonzentration über der inversen Temperatur für Silicium, dotiert mit 10^{15} Donatoren $\cdot cm^{-3}$	39
3.17	Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit (ungefährer Verlauf) mit Einfluss der Streuung an Verunreinigungen und am Gitter	42
3.18	Einfluss der totalen Dotierstoffkonzentration (N_a und N_d) auf die Beweglichkeit der Elektronen und Löcher für Si, Ge und GaAs bei $300K$	42
3.19	Sättigung der Elektronendriftgeschwindigkeit in Silicium bei hohen elektrischen Feldstärken	43
3.20	Schema zum Hall-Effekt	43

Tabellenverzeichnis

1.1	Übersicht über die 14 dreidimensionalen Gittertypen	9
1.2	Charakteristische Eigenschaften der kubischen Gitter	10
1.3	Dotierelemente und Halbleiter	12
2.1	Quantenzahlen	24
2.2	Elektronenstruktur im Grundzustand	26
3.1	Effektive Massen für Silicium und Germanium (m_0 ist die freie Elektronenmasse)	32

1 Eigenschaften von Einkristallen

Der atomare Aufbau von Festkörpern kann sich durch eine besondere Regelmäßigkeit auszeichnen. Die Kristallstruktur ist ein Beispiel dafür. Beim Vorliegen von nur einer solchen Struktur spricht man von einem Einkristall.

1.1 Kristall

Ein Kristall ist eine dreidimensionale periodische Anordnung von Atomen. Durch Beobachtung von Interferenzerscheinungen an Kristallen mittels Röntgenstrahlen konnte erstmals die Bestätigung für den regelmäßigen Aufbau dieser Festkörper gefunden werden. Laue entwickelte 1912 eine elementare Theorie der Beugung von Röntgenstrahlen an einer periodischen Anordnung von Atomen. Daraufhin wurde eindeutig der Beweis erbracht, dass Kristalle aus einer periodischen Anordnung von Atomen zusammengesetzt sind. Ein idealer Kristall baut sich durch die unendliche Wiederholung identischer Struktureinheiten im dreidimensionalen Raum auf. Im einfachsten Fall bestehen die Struktureinheiten aus einem Atom. Beispiel: Einkristalle aus Kupfer, Aluminium, Silber, Eisen und Alkalimetallen. Einzelne Struktureinheiten können aber auch bis zu 10.000 Atome umfassen, z.B. Proteinkristalle.

1.2 Kristallgitter

1.2.1 Vektoren einer Gittertranslation und Gitterformen

Die Struktur eines jeden Kristalls wird durch ein Gitter beschrieben. Jedem Gitterpunkt wird eine Gruppe (Struktureinheit) von Atomen zugeordnet. Diese Atomgruppe wird Basis genannt, sie wiederholt sich im Raum und bildet so die Kristallstruktur. Ein idealer Kristall setzt sich aus Atomen zusammen, die in einem durch drei fundamentale Translationsvektoren \underline{a}_1 , \underline{a}_2 und \underline{a}_3 definiertem Gitter angeordnet sind. Diese Translationsvektoren haben die Eigenschaft, dass von dem Punkt \underline{r} aus betrachtet, die Anordnung der Atome in jeder Hinsicht gleich aussieht wie vom Punkt

$$\underline{r}' = \underline{r} + u\underline{a}_1 + v\underline{a}_2 + w\underline{a}_3 \quad u, v, w \in \mathbb{Z} \quad (*)$$

Die Menge aller Punkte \underline{r}' mit $u, v, w \in \mathbb{Z}$ definiert ein Gitter. Ein Gitter ist eine regelmäßige periodische Anordnung von Punkten im Raum und eine mathematische Abstraktion. Eine ideale Kristallstruktur wird erst aufgebaut, wenn eine Basis aus Atomen völlig gleichartig jeden Gitterpunkt besetzt. *Gitter + Basis = Kristallstruktur*. Das Gitter und die Translationsvektoren \underline{a}_i heißen primitiv, wenn für alle Punkte \underline{r} und \underline{r}' , von denen die Anordnung der Atome gleich aussieht, stets die Gleichung (*) für ganze Zahlen u, v, w erfüllbar ist. Diese Definition der primitiven Translationsvektoren garantiert, dass es keine Elementarzellen mit kleinerem Volumen gibt, die als Baustein der Struktur dienen kann. Die Kristallachsen \underline{a}_i bilden drei sich schneidende Achsen eines Parallelepipeds. Wenn die Gitterpunkte ausschließlich die Endpunkte des Parallelepipeds besetzen, handelt es sich um ein primitives Parallelepipeds.

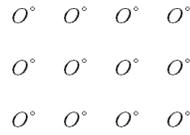
1.2.2 Basis und Kristallstruktur

Jedem Gitterpunkt wird eine Basis aus Atomen zugeordnet. Alle Basisgruppen sind einander in Zusammensetzung, Anordnung und Orientierung gleich. Beispiel: (zweidimensional)

Raumgitter \Rightarrow Basis aus zwei Atomen \Rightarrow Kristallstruktur



O°



Der Mittelpunkt des Atoms

j der Basis wird relativ zu einem Gitterpunkt durch den Ortsvektor \underline{r}_j beschrieben:

$$\underline{r}_j = x_j \underline{a}_1 + y_j \underline{a}_2 + z_j \underline{a}_3 \quad \text{mit} \quad 0 \leq x, y, z \leq 1$$

Translation eines Gitters Eine Gittertranslation ist eine Verschiebung des Kristalls parallel zu sich selbst um einen Translationsvektor

$$I = u \underline{a}_1 + v \underline{a}_2 + w \underline{a}_3$$

Zwei beliebige Gitterpunkte können immer durch einen solchen Vektor verbunden werden [Gleichung (*)].

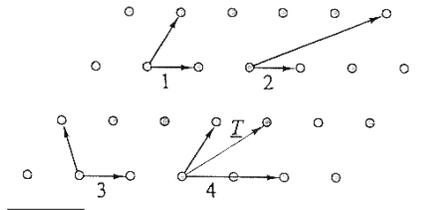


Abbildung 1.1: Translation eines 2-dimensionalen Gitters

Alle Vektorpaare in [Abbildung 1.1](#) sind Translationen des Gitters, d.h. eine Verschiebung in Richtung einer Linearkombination eines Vektorpaares bildet das Gitter aus sich selbst ab. Das Vektorpaar 4 ist jedoch keine primitive Translation, weil es Translationen gibt, z.B. I in 2.1., die sich nicht durch ganzzahlige Kombinationen darstellen lassen. Die von solchen Vektoren aufgespannte Fläche ist nun größer als die primitive Elementarzelle.

1.2.3 Primitive Gitterzelle

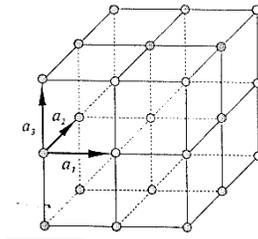
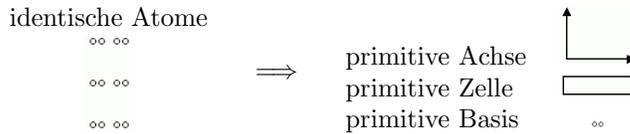


Abbildung 1.2: Primitive Achsen eines Raumgitters bilden eine primitive Elementarzelle (3-dim.)

Das Parallelepiped, das in [Abbildung 1.2](#) durch \underline{a}_i aufgespannt wird, heißt primitive Elementarzelle. Sie ist eine Einheitszelle und erfüllt den ganzen Raum, wenn geeignete Transformationsoperationen angewendet werden. Die primitive Elementarzelle ist die Zelle mit dem kleinsten Volumen, die diese Bedingung erfüllt. Bei gegebenem Gitter gibt es für die Wahl der primitiven Achsen und damit der primitiven Elementarzellen unterschiedliche Möglichkeiten. In jedem Fall ist die Zahl der Atome in der primitiven Basis gleich. Auf jede primitive Elementarzelle kommt

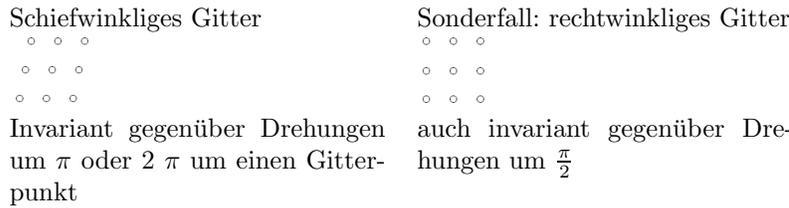
ein Gitterpunkt. Beispiel:



1.2.4 Fundamentale Gitterarten

Kristallgitter können durch Gittertranslation und einige andere Symmetrieeoperationen in sich selbst überführt werden. Eine typische Symmetrieeoperation ist die Drehung um eine Achse durch einen Gitterpunkt. Ein Gittertyp ist dadurch definiert, dass die zugehörigen Gitter gegenüber einer Gruppe von Operatoren invariant sind und damit bestimmte mathematische Bedingungen erfüllt.

Beispiel:



Dreidimensionale Gitter: In drei Dimensionen ergeben sich 14 verschiedene Gitter, ein allgemeines und 13 spezielle. Die 14 Grundgitter werden in 7 kristallographische Systeme eingeteilt. In **Tabelle 1.1** sind die Gittertypen angegeben. Die zur Charakterisierung verwendeten Parameter a_1 , a_2 , a_3 heißen Gitterparameter.

System	Anzahl der Gitter	Einschränkungen bezüglich der Achsen und Winkel der gebräuchlichen Einheitszelle
triklin	1	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
monoklin	2	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
orthorhombisch	4	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tetragonal	2	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
kubisch	3	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
rhomboedrisch (bzw. trigonal)	1	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
hexagonal	1	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

Tabelle 1.1: Übersicht über die 14 dreidimensionalen Gittertypen

Das kubische Gittersystem besteht aus 3 Gittern:

- einfach kubisch sc (simple cubic)
- kubisch raumzentriert bcc (body centered cubic)
- kubisch flächenzentriert fcc (face centered cubic)

Die primitive Elementarzellen müssen nicht unbedingt kubisch sein. Die des fcc Gitters ist z.B. ein Rhomboeder, siehe [Abbildung 1.3](#).

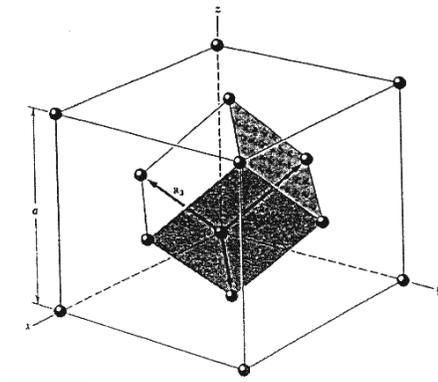


Abbildung 1.3: Primitive Elementarzelle des kubisch flächenzentrierten Gitters

Tabelle 1.2 zeigt die wichtigsten Eigenschaften der kubischen Gitterarten.

Eigenschaft	einfach kubisch	raumzentriert	flächenzentriert
Volumen der gebräuchlichen Einheitszelle	a^3	a^3	a^3
Anzahl der Gitterpunkte pro Einheitszelle	1	2	4
Volumen der primitiven Zelle	a^3	$\frac{1}{2}a^3$	$\frac{1}{4}a^3$
Anzahl der Gitterpunkte pro Einheitsvolumen	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
Anzahl der nächsten Nachbarn	6	8	12
Abstand zweier nächster Nachbarn	a	$\frac{\sqrt{3}}{2}a = 0,866 a$	$\frac{\sqrt{2}}{2}a = 0,707 a$
Anzahl der übernächsten Nachbarn	12	6	6
Abstand zum übernächsten Nachbarn	$\sqrt{2}a$	a	a
Packungsverhältnis	$\frac{1}{6}\pi = 0,524$	$\frac{1}{8}\pi\sqrt{3} = 0,680$	$\frac{1}{6}\pi\sqrt{2} = 0,740$

Tabelle 1.2: Charakteristische Eigenschaften der kubischen Gitter

1.2.5 Millersche Indizes für Kristallebenen

Ort und Lage einer Kristallebene im Raum sind durch 3 beliebige, nicht linear abhängige, Punkte festgelegt. Vorzugsweise wählt man als Bestimmungspunkt die Schnittpunkte mit den Kristallachsen und kann dann die Lage der Ebene in Einheiten der Gitterparameter beschreiben. In der Strukturanalyse werden nicht die Einheiten der Gitterparameter, sondern die Millerschen Indizes verwendet, die durch folgende Regeln bestimmt sind.:

- Man ermittelt die Schnittpunkte der Ebene mit den Achsen

- Von den Achsenabschnitten in Einheiten der Gitterparameter bildet man die Kehrwerte und stellt die kleinste ganze Zahl, die zueinander in gleichen Verhältnissen stehen, wie die Kehrwerte
- Liegt der Schnittpunkt im Unendlichen, ist der Millersche Index Null
- Ist der Index negativ, so wird das Minuszeichen durch einen Querstrich über der Zahl ersetzt ($\bar{1}00 \cong -100$).
- Das Ergebnis wird in Klammern gesetzt (H, K, L).

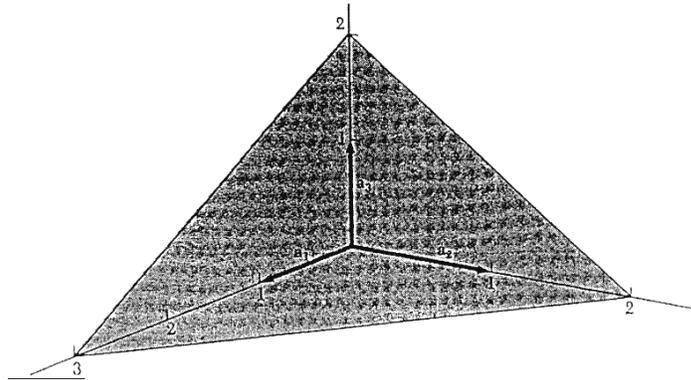


Abbildung 1.4: Darstellung der Kristallebene mit den Millerschen Indizes (233)

1.2.6 Diamantstruktur

Das Raumgitter ist kubisch flächenzentriert. Mit jedem Gitterpunkt ist eine primitive Basis aus zwei identischen Atomen bei $0, 0, 0$ und $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ verbunden. Die tetraedische Bindung in der Diamantstruktur (Gruppe \overline{IV}) ist in [Abbildung 1.5](#) gezeigt. Jedes Atom hat vier nächste Nachbarn. In jedem Einzelwürfel befinden sich acht Atome. Das Diamantgitter ist relativ lose, die Zwischenräume also recht groß. Die Packungsdichte beträgt nur 0,46 der dichtesten Kugelpackung. Der Raumanteil, der mit harten Kugeln ausgefüllt werden kann, beträgt 0,34. Kohlenstoff, Silicium, Germanium und Zinn kristallisieren in der Diamantstruktur. Die Diamantstruktur ist das Ergebnis der gerichteten kovalenten Bindung. Die Gitterkonstante für Silicium ist $5,43 \text{ \AA} = 0,543 \text{ nm}$.

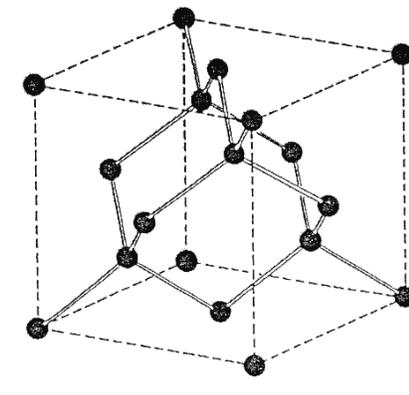


Abbildung 1.5: Kristallstruktur von Diamant

1.3 Halbleitermaterialien

Halbleiter bilden eine Gruppe von Materialien, deren Leitfähigkeit zwischen denen von Metallen und Isolatoren liegt. Eine charakteristische Eigenschaft ist, dass die Leitfähigkeit dieser Materialien über Größenordnungen verändert werden kann, indem Temperatur, optische Anregung und Verunreinigungsgehalt verändert werden. Deshalb sind Halbleitermaterialien für elektronische Bauelemente prinzipiell gut geeignet.

Halbleitermaterialien befinden sich in der Gruppe \overline{IV} und benachbarten Gruppen. Die Gruppe \overline{IV} -Halbleiter, Silicium und Germanium, sind elementare Halbleiter, da sie aus einer einzigen Art von Atomen bestehen. Über die elementaren Materialien hinaus, gibt es Verbindungshalbleiter aus Gruppe $\overline{IV} - \overline{IV}$ Elementen, $\overline{III} - \overline{V}$ Elementen und gewisse Kombinationen aus $\overline{II} - \overline{VI}$ Elementen. Damit verbunden ist eine Vielzahl elektrischer und optischer Eigenschaften. Silicium ist dabei das am meisten industriell genutzte Halbleitermaterial.

Anwendung in Bauelementen: Transistoren, Dioden, Thyristoren, integrierte Schaltkreise usw. Verbindungshalbleiter werden in Hochgeschwindigkeitsbauelementen und Bauelementen, die mit Emission oder Absorption von Licht verbunden sind, eingesetzt. $\overline{III} - \overline{V}$ -Verbindungshalbleiter, wie z.B. GaAs und GaP sind üblich in lichtemittierenden Dioden. Fluoreszente Materialien die z.B. in Bildschirmen verwendet werden, sind üblicherweise $\overline{II} - \overline{VI}$ -Verbindungshalbleiter, wie ZnS . Lichtdetektoren werden aus $InSb$, $CdSe$ oder anderen Verbindungen wie $PeTe$ und $HgCdTe$. Silicium und Germanium werden als Detektoren für Infrarot und nukleare Strahlung eingesetzt. Um die nutzbringenden Eigenschaften von Halbleitern untersuchen zu können, ist es notwendig, die atomare Grundstruktur des Materials zu verstehen.

(a)	II	III	IV	V	VI
		B	C		
		Al	Si	P	S
	Zn	Ga	Ge	As	Se
	Cd	In		Sb	Te

(b)	Elemental	IV compounds	Binary III-V compounds	Binary II-VI compounds
	Si	SiC	AlP	ZnS
	Ge	SiGe	AlAs	ZnSe
			AlSb	ZnTe
			GaP	CdS
			GaAs	CdSe
			GaSb	CdTe
			InP	
			InAs	
			InSb	

Tabelle 1.3: Dotierelemente und Halbleiter

2 Atome und Elektronen

2.1 Einführung

Das Verhalten von Festkörpern steht in direkter Beziehung zur Atomphysik und Quantenmechanik. Wichtige Eigenschaften von Elektronen:

1. die elektronische Struktur von Atomen
2. die Wechselwirkung von Atomen und Elektronen mit Photonen durch Absorption und Emission

2.2 Experimentelle Beobachtungen

Die Experimente, die zur Entwicklung der Quantentheorie führten, befassen sich mit der Natur von Licht und der Wechselwirkung von optischer Energie mit Elektronen innerhalb von Atomen.

2.2.1 Der photoelektrische Effekt

Eine wichtige Beobachtung von Planck zeigte, dass Strahlung einer geheizten Probe nur in diskreten Einheiten der Energie, genannt Quanten, ermittelt wird. Die Energieeinheiten werden durch $h \cdot \nu$ beschrieben. ν ist die Frequenz der Strahlung und h die nach Planck benannte Konstante $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$. Kurz nach der Entwicklung der Planckschen Hypothese interpretierte Einstein ein wichtiges Experiment, das die diskrete Natur des Lichtes aufzeigt. Diese beinhaltet die Absorption optischer Energie durch Elektronen eines Metalls und die Beziehung zwischen der absorbierten Energie und der Frequenz des Lichtes. Fällt monochromatisches Licht auf die Oberfläche einer metallischen Platte im Vakuum, so nehmen die Elektronen im Metall Energie aus dem Licht auf; einige enthalten genügend Energie, um aus dem Metall auszutreten. Dies heißt: Der photoelektrische Effekt, siehe [Abbildung 2.1](#).

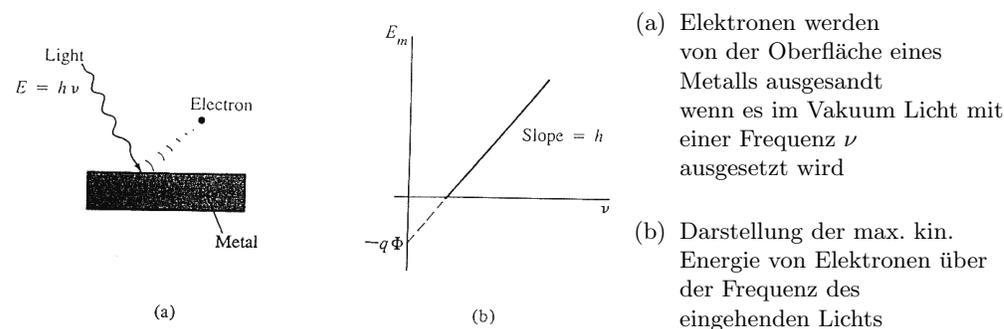


Abbildung 2.1: Der photoelektrische Effekt

Misst man die Energie der frei zugeordneten Elektronen, so kann diese als Funktion der Frequenz des einfallenden Lichtes dargestellt werden. Zur Bestimmung der maximalen Elektronenenergie wird eine zweite Metallplatte über der ersten angeordnet und ein elektrisches Feld angelegt. Die Spannung, die notwendig ist, um einen Elektronenfluss zwischen den beiden Platten zu verhindern, ist die maximale Energie E_m . E_m wird für verschiedene Frequenzen des einfallenden Lichtes bestimmt. Die Auftragung von E_m gegen ν ist linear. Die Steigung ist gleich der Planckschen Konstante h . Die Gleichung für die Gerade in [Abbildung 2.1\(b\)](#) lautet $E_m = h \cdot \nu - q \cdot \Phi$; q = Elementarladung; Φ charakteristisches Potential für das befindliche Metall.

Die Größe $q\Phi$ ist die minimale Energie, die man aufbringen muss, um ein Elektron aus dem Metall ins Vakuum zu befördern. Dieses Ergebnis, dass das Elektron ein Energiebetrag $h\nu$ von Licht

erhält und die Energie $q \cdot \Phi$ verliert, um die Oberfläche des Metalls zu verlassen. Dieses Experiment zeigt die Gültigkeit der Planckschen Annahme. Energie im Licht ist gequantelt. Die Quanten des Lichts sind Photonen. Die korpuskulare Natur des Lichtes tritt bei Wechselwirkungen mit Materie in Erscheinung in Ergänzung zur bekannten Wellennatur.

2.2.2 Atomspektren

Eines der wichtigsten Experimente der (modernen) Physik ist die Untersuchung der Absorption und Emission von Licht durch Atome. Beispielsweise kann eine elektrische Entladung in einem Gas erzeugt werden, so dass die Atome Licht charakteristischer Wellenlänge emittieren. Dies ist der Fall in einer Gasröhre, die mit Neon oder einer Gasmischung gefüllt ist und Elektronen zur Erzeugung der Entladung besitzt. Misst man die Intensität des erzeugten Lichtes als Funktion der Wellenlänge, findet man eine Serie scharfer Linien und weniger eine Verteilung der Wellenlänge. Ein Teil des gemessenen Emissionsspektrums für Wasserstoff ist in [Abbildung 2.2](#). gezeigt. Vertikale Linien stellen die Lage eines beobachteten Emissionspeaks dar auf der Wellenlängenskala.

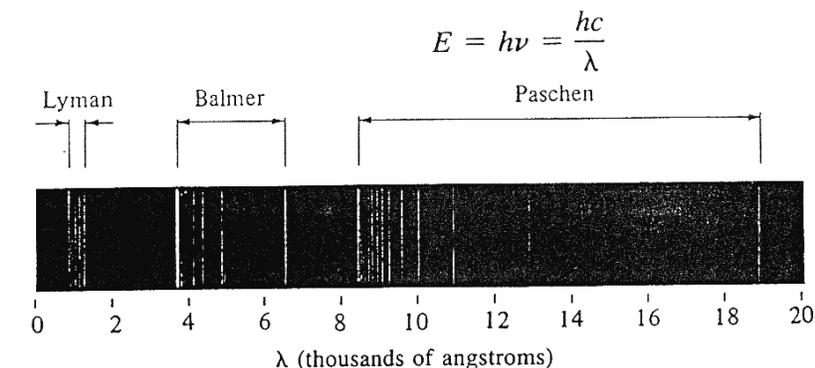


Abbildung 2.2: Wichtige Linien im Emissionsspektrum von Wasserstoff

$$\lambda \cdot \nu = c \quad c - \text{Lichtgeschwindigkeit}$$

$$E = h \cdot \nu = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad \text{Photonenenergie}$$

Die Linien in der [Abbildung 2.2](#). erscheinen in mehreren Gruppen, die nach ihren Entdeckern als Lyman, Balmer und Paschen Serien bezeichnet sind. Die verschiedenen Serien im Spektrum gehorchen folgenden empirischen Regeln:

$$\left| \begin{array}{l} \text{Lyman} \\ \text{Balmer} \\ \text{Paschen} \end{array} \right| \left| \begin{array}{l} \nu = c \cdot R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ \nu = c \cdot R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ \nu = c \cdot R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \end{array} \right| \left| \begin{array}{l} n=2,3,4,\dots \\ n=3,4,5,\dots \\ n=4,5,6,\dots \end{array} \right|$$

$R = 109678 \text{ cm}^{-1} = 1,09678 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ heißt Rydbergkonstante. Trägt man die Photonenenergie sukzessiv für die Werte der natürlichen Zahlen auf, stellt man fest, dass jede Energie durch Summen und Differenzbildung an derer Photonenenergien im Spektrum erhalten werden kann, [Abbildung 2.3](#)

Beispielsweise ist E_{42} der Balmer Serie gleich der Differenz zwischen E_{41} und E_{21} der Lyman Serie. Diese Beziehung zwischen den verschiedenen Serien heißt das Ritz'sche Kombinationsprinzip.

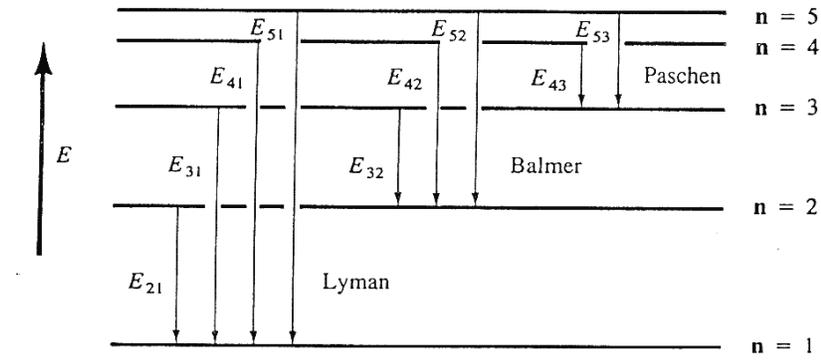


Abbildung 2.3: Beziehung der Photonenenergien im Wasserstoffspektrum

2.3 Das Bohr'sche Atommodell

Die obigen Emissionsexperimente veranlassten Niels Bohr ein auf der Mathematik des Planetensystems basierendes Atommodell zu entwickeln. Stehen dann Elektronen eines Wasserstoffatoms eine Reihe von Kreisbahnen zur Verfügung, so kann das Elektron angeregt werden, in eine äußere Bahn überzutreten, aus der es auf eine der inneren Kreisbahnen unter Abgabe von Energie entsprechend einer der Linien aus [Abbildung 2.3](#) zurückfallen kann.

Bohr stellte folgende Postulate auf:

- Elektronen befinden sich auf bestimmten Kreisbahnen um den Atomkern. Diese Annahme impliziert, dass das Elektron als eine Winkelbeschleunigung erfahrende Ladung nicht entsprechend der klassischen Theorie Strahlung abgibt und damit durch den Verlust an Energie letztendlich (auf einer Spiralbahn) in den Atomkern stürzt.
- Das Elektron kann zu einer Kreisbahn höherer oder niedriger Energie übergehen, wobei es Energie gewinnt oder verliert, gleich der Differenz in den Energieniveaus (durch Absorption oder Emission eines Photons $h \cdot \nu$).
- Der Drehimpuls D des Elektrons auf einer Kreisbahn ist immer ein ganzzahliges Vielfaches der Planck'schen Konstante h dividiert durch 2π :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad D = n \cdot \hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.1)$$

Bewegt sich das Elektron auf einer Kreisbahn mit Radius r stabil um das Atom, so gleicht die elektrostatische Anziehungskraft der Zentripetalkraft:

$$-\frac{q^2}{k \cdot r^2} = \frac{m \cdot v^2}{r} \quad k = 4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \quad (2.2)$$

m =Elektronenmasse

v =Geschwindigkeit

Aus Postulat 3:

$$D = m \cdot v \cdot r = n \cdot \hbar \quad (2.3)$$

Da n eine natürliche Zahl ist, benennen wir r zu r_n um, um die n -te Kreisbahn zu kennzeichnen. Gleichung 2-3 lässt sich jetzt schreiben als:

$$m^2 \cdot v^2 = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{r_n^2} \quad (2.4)$$

Setzt man Gleichung 2.4 in Gleichung 2.2 ein, so erhält man:

$$\frac{q^2}{k \cdot r_n^2} = \frac{1}{m \cdot r_n} \quad (2.5)$$

$$r_n = \frac{k \cdot n^2 \cdot \hbar^2}{m \cdot q^2} \quad (2.6)$$

für den Radius r_n der n -ten Kreisbahn.

Aus Gleichung 2.3 und Gleichung 2.6 folgt für die Geschwindigkeit v des Elektrons:

$$v_n = \frac{n \cdot \hbar}{m \cdot r_n} \quad (2.7)$$

$$v = \frac{n \cdot \hbar \cdot q^2}{k \cdot n^2 \cdot \hbar^2} = \frac{q^2}{k \cdot n \cdot \hbar} \quad (2.8)$$

Die kinetische Energie des Elektrons E_{kin}

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 = \frac{1}{2} \cdot m \cdot \frac{q^4}{k^2 \cdot n^2 \cdot \hbar^2} \quad (2.9)$$

Die potentielle Energie E_{pot} ist gleich dem Produkt der elektronischen Kraft und dem Abstand zwischen den Ladungen.

$$E_{pot} = -\frac{q^2}{k^2 \cdot r_n} = -\frac{m \cdot q^4}{k^2 \cdot n^2 \cdot \hbar^2} \quad (2.10)$$

Die Gesamtenergie eines Elektrons auf der n -ten Kreisbahn ist somit:

$$E_n = E_{kin} + E_{pot} = -\frac{m \cdot q^4}{2 \cdot k^2 \cdot n^2 \cdot \hbar^2} \quad (2.11)$$

Die entscheidende Frage ist, ob das Modell über die Energiedifferenzen zwischen den Kreisbahnen die beobachteten Photonenenergien des Wasserstoffspektrums erklären kann. Die Übergänge zwischen den Kreisbahnen der Lyman-, Balmer-, und Paschen-Serie zeigt [Abbildung 2.4](#). Die Energiedifferenzen zwischen Kreisbahnen n_1 und Kreisbahn n_2 ist gegeben durch:

$$E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{m \cdot q^4}{2 \cdot k^2 \cdot \hbar^2} \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (2.12)$$

Die Frequenz von Licht, welches bei diesem Übergang abgegeben wird, ist:

$$\nu_{n_2 n_1} = \frac{m \cdot q^4}{2 \cdot k^2 \cdot \hbar^2 \cdot h^2} \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (2.13)$$

Ein Vergleich von [Gleichung 2.13](#) mit den experimentellen Ergebnissen zeigt, dass die Bohr'sche Theorie in guter Weise die elektronischen Übergänge im Wasserstoffatom beschreiben kann. Allerdings beschreibt dieses Modell die Eigenschaften des Spektrums nur in gröberer Weise, einige feinere Erscheinungen kann es nicht erklären. Einige Niveaus sind in mehrere dicht benachbarte Niveaus aufgespalten. Enorme Schwierigkeiten treten auf, wenn man das Modell auf kompliziertere Atome als das Wasserstoffatom anwenden will. Der teilweise Erfolg des Bohr'schen Modells war ein wichtiger Schritt zur Entwicklung der Quantenmechanik.

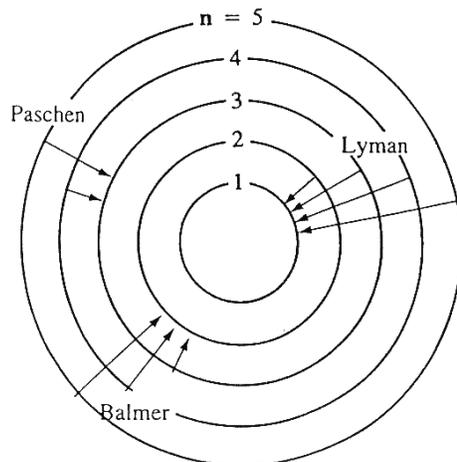


Abbildung 2.4: Elektronenorbits und Übergänge im Bohrschen Modell des Wasserstoffs

2.4 Quantenmechanik

Die Grundsätze der Quantenmechanik wurden von zwei verschiedenen Standpunkten aus praktisch zur gleichen Zeit entwickelt (1920-1930). Der eine Ansatz, entwickelt von Heisenberg, benutzt die Matrizenmechanik, der andere von Schrödinger entwickelt, greift auf eine Wellengleichung zurück und wird Wellenmechanik genannt. Obwohl die mathematische Vorgehensweise völlig verschieden ist, zeigt sich, dass die grundsätzlichen Prinzipien beider Ansätze gleich und ineinander überführt sind. Wir betrachten nur den wellenmechanischen Ansatz.

2.4.1 Wahrscheinlichkeit und Unschärferelation

Es ist nicht möglich, einen Vorgang, der mit einem individuellen Teilchen im atomaren Maßstab in Zusammenhang steht, mit absoluter Genauigkeit zu beschreiben. Stattdessen müssen wir den Erwartungswert des Ortes, des Impulses und der Energie eines Teilchens, wie eines Elektrons, beachten. Diese Ungewissheiten der quantenmechanischen Berechnungen stellen keinen Mangel der Theorie dar, sondern die Wahrscheinlichkeit, mit der Ereignisse von Elektronen und Atomen charakterisiert werden, sind gerade die Stärke des Ansatzes. Größen wie Ort und Energie eines einzelnen Elektrons können nicht losgelöst von einer gewissen Unschärfe beobachtet werden. Die Größe dieser Unschärfe und Ungewissheit wird durch die Heisenbergsche Unschärferelation beschrieben. Bei jeder Messung von Ort und Impuls eines Teilchens stehen die Schwankungsbreiten der gemessenen Größen in folgendem Zusammenhang:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar \quad (2.14)$$

Gleichermaßen ist die Schwankungsbreite bei der Energiebestimmung in Beziehung mit der Schwankungsbreite der Zeit, bei der die Messung erfolgt:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar \quad (2.15)$$

Diese Unschärferelationen zeigen auf, dass die gleichzeitigen Messungen von Ort und Impuls oder Energie und Zeit in gewissem Maße unexakt sind. Die Plancksche Konstante h ist sehr klein ($6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$). Daher treten bei makroskopischen Objekten keine Probleme auf während Messung von Ort und Impuls eines Elektrons durch die Unschärferelation begrenzt ist. Die Unschärferelation impliziert, dass man nicht mehr vom Ort eines Elektrons sprechen kann, sondern nur von der Wahrscheinlichkeit, ein Elektron an einer bestimmten Stelle zu finden. Ein wichtiges Ergebnis der Quantenmechanik ist, dass ein Teilchen durch eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion beschrieben werden kann. Diese Funktion kann benutzt werden, um die Erwartungswerte für Ort, Impuls und

Energie zu bestimmen. Es sei $P(x)$ die Wahrscheinlichkeitsfunktion für ein eindimensionales Problem. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Intervall $x, x + dx$ zu finden, ist dann durch $P(x)dx$ gegeben. Da das Teilchen irgendwo im eindimensionalen Raum ist, impliziert diese Definition, dass

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)dx = 1 \quad (2.16)$$

Wenn man P geeignet wählt, dass heißt normiert (Integral = 1). Um den Mittelwert einer Funktion von x zu bestimmen, ist der Wert der Funktion in jedem infinitesimalen Bereich dx mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x)$ um x zu multiplizieren und über alle x zu summieren.

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)P(x)dx \quad (2.17)$$

Sollte P nicht normiert sein, so gilt:

$$\langle f \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)P(x)dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)dx} \quad (2.18)$$

2.4.2 Die Schrödinger Gleichung

Der einfachste Ansatz, die Wellengleichung durch Verwendung quantenmechanischer Konzepte aus der klassischen Mechanik zu entwickeln, ist die Betrachtung einiger Postulate, aus denen die Wellengleichung abgeleitet wird, um dann über die Ergebnisse den Ansatz zu rechtfertigen. Grundlegende Postulate:

- Jedes Teilchen in einem physikalischen System wird durch eine Wellenfunktion $\Psi(\underline{r}, t)$; $\underline{r} = (x, y, z)$ beschrieben. Diese Funktion und ihre partiellen Ableitungen hinsichtlich des Ortes $\left(\frac{\partial\Psi}{\partial x}, \frac{\partial\Psi}{\partial y}, \frac{\partial\Psi}{\partial z}\right)$ sind stetig, eindeutig und endlich (keine Polstellen).
- Klassische Größen wie Energie und Impuls werden durch quantenmechanische Operatoren ersetzt:

Klassische Variante	Quantenmechanischer Operator
x	x
$f(x)$	$f(x)$
$P(x)$	$\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x}$
E	$-\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial t}$

und analog für weitere Ortsachsen:

$$\hbar = \frac{h}{2 \cdot \pi} \quad j^2 = -1$$

- Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen mit Wellenfunktion Ψ in dem Volumen $d\underline{r} = dx \cdot dy \cdot dz$ um \underline{r} zu finden ist:

$$\Psi^*(\underline{r}) \cdot \Psi(\underline{r})d\underline{r}$$

Das Produkt $\Psi^* \cdot \Psi$ ist normiert, d.h. $\int \Psi^* \cdot \Psi d\underline{r} = 1$. Ψ^* ist die komplex Konjugierte Größe von Ψ , die man aus Ψ erhält, indem man j durch $-j$ ersetzt, z.B. $(e^{jx})^* = e^{-jx}$

Der Mittelwert $\langle Q \rangle$ einer Größe Q wird mit Hilfe der Wellenfunktion berechnet, unter der Benutzung des Operators Q_{OP} der in 2. definiert ist, nach $\langle Q \rangle = \int \Psi^* \cdot Q_{op} \cdot \Psi dx$ Liegt die Wellenfunktion Ψ für ein Teilchen vor, lassen sich seine Mittelwerte des Ortes, der Energie und des Impulses innerhalb der Grenzen der Unschärferelation bestimmen. Die Wahrscheinlichkeitsfunktion für ein Teilchen ist durch $\Psi^* \cdot \Psi = |\Psi|^2$, Ψ komplexwertig, gegeben. Die klassische Gleichung für die Gesamtenergie E eines Teilchens lautet:

$$\frac{1}{2 \cdot m} \cdot p^2 + V = E \quad (2.19)$$

$$E_{kin} + E_{pot} = E_{gesamt} \quad (p = m \cdot v)$$

In der Quantenmechanik benutzt man die Operatorenform für diese Variablen (Postulat 2) und wendet die Operatoren auf die Wellenfunktion Ψ an; für ein eindimensionales Problem lautet dann Gleichung 2.19:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \cdot \Psi(x, t) = -\frac{\hbar}{j} \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} \cdot \Psi \right) = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

Gleichung 2.20 ist die Schrödinger'sche Wellengleichung. Sie lautet für ein eindimensionales Problem:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \nabla^2 \Psi + V \cdot \Psi = -\frac{\hbar}{j} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (2.21)$$

$$\text{wobei } \nabla^2 \Psi = \Delta \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$$

Die Wellenfunktion Ψ in den Gleichungen Gleichung 2.20 und Gleichung 2.21 enthält Orts- und Zeitabhängigkeit. Es ist üblich diese Abhängigkeiten getrennt zu berechnen (Produktansatz). Außerdem sind viele Probleme zeitunabhängig. Mit dem Produktansatz $\Psi(x, t) = \Psi(x) \cdot \Phi(t)$ gehen wir in Gleichung Gleichung 2.20 und erhalten.

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} \cdot \Phi(t) + V(x) \cdot \Psi(x) \cdot \Phi(t) = -\frac{\hbar}{j} \cdot \Psi(x) \cdot \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} \quad (2.22)$$

Die Variablen können nun getrennt werden

$$\frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} + \frac{j \cdot E}{\hbar} \cdot \Phi(t) = 0 \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \Psi(x)}{\partial x^2} - \frac{2 \cdot m}{\hbar^2} \cdot [E - V(x)] \cdot \Psi(x) = 0 \quad (2.24)$$

Die Variablenrennungskonstante E entspricht der Energie E des Teilchens, so dass einer Wellenfunktion Ψ_n die Teilchenenergie E_n zuzuordnen ist. Diese Gleichungen sind die Grundlagen der Wellenmechanik. Aus ihnen können die Wellenfunktionen für Teilchen verschieden einfach Systemen abgeleitet werden. Bei Elektronen ist der Potentialterm $V(x)$ aus dem elektrischen oder magnetischen Feld ableitbar.

2.4.3 Das Potentialwallproblem

Eine Lösung der Schrödinger Gleichung für reale Potentiale zu finden, stellt eine schwierige Aufgabe dar. Relativ einfach ist es noch für das Wasserstoffatom, für andere Atome ist es komplizierter. Eine einfache Lösung gibt es für den Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden, in dem sich ein Teilchen befindet. Für die potentielle Energie gilt:

$$V(x) = 0 \quad , 0 < x < L$$

$$V(x) = \infty \quad x = 0; x = L \quad (2.25)$$

Setzt man Gleichung 2.25 in Gleichung 2.24 ein, so erhält man

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E\Psi(x) = 0 \quad , 0 < x < L \quad (2.26)$$

Dies ist die Wellengleichung für ein freies Teilchen innerhalb des Potentialtopfs. Mögliche Lösungen für Gleichung 2.26 sind die Funktionen $\Psi(x) = \sin(kx)$ und $\Psi(x) = \cos(kx)$ wobei $k = \sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2}}$. Eine Lösungsfunktion muss die Randbedingungen erfüllen! Das heisst: Ψ muss an den Orten $x = 0$ und $x = L$ Null sein. Wäre außer für $0 < x < L$ $\Psi(x) \neq 0$, so wäre die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi|^2$ ebenfalls verschieden von Null außerhalb des Potentialtopfes, was aufgrund der unendlich hohen Wände nicht möglich ist. Damit ist nur die Sinusfunktion eine brauchbare Lösung. Ferner gilt:

$$\sin(kL) = 0 \quad , k = \frac{\sqrt{2 \cdot m \cdot E_n}}{\hbar}$$

$$\Psi = A \cdot \sin(kx) \quad (2.27)$$

Aus der Randbedingung folgt:

$$k = n \cdot \frac{\pi}{L} \quad , n = 1, 2, 3, .. \quad (2.28)$$

Aus Gleichung 2.27 und Gleichung 2.28 folgt:

$$\frac{\sqrt{2 \cdot m \cdot E_n}}{\hbar} = \frac{n \cdot \pi}{L} \quad (2.29)$$

Wird Gleichung 2.29 nach E_n aufgelöst, folgt:

$$E_n = \frac{n^2 \cdot \hbar^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot m \cdot L^2} \quad , n = 1, 2, 3, .. \quad (2.30)$$

Jedem erlaubten Wert von n ist eine Teilchenenergie gemäß Gleichung 2.30 zugeordnet. Die Energiewerte sind gequantelt und nicht kontinuierlich. Das ist der Unterschied zur klassischen Physik. Nur bestimmte Energiewerte sind erlaubt. Die Zahl n heißt Quantanzahl. Die Wellenfunktion Ψ_n und die Energie E_n beschreiben den Zustand eines Teilchens. Die quantisierten Energieniveaus von Gleichung 2.30 sind zu beobachten und treten in einer Vielzahl von Strukturen kleiner geometrischer Größe wie z.B. Halbleiterbauelementen, auf.

Die Amplitude A folgt aus Postulat 3:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot \Psi dx = \int_0^L A^2 \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L} \cdot x\right)^2 dx = A^2 \cdot \frac{L}{2} \equiv 1 \quad (2.31)$$

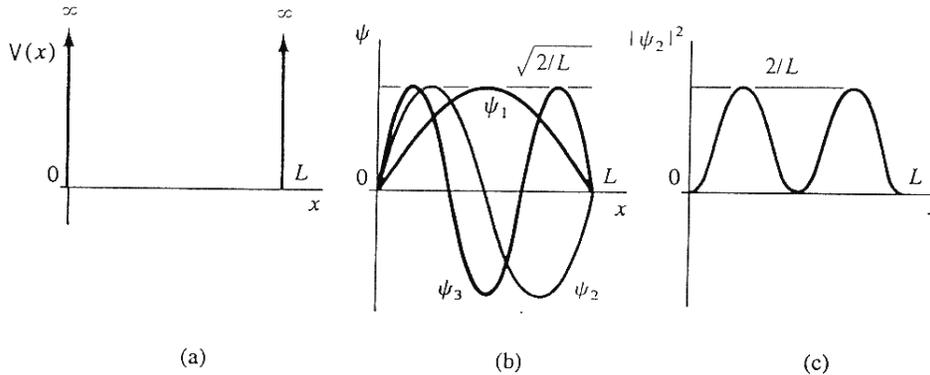
Daher folgt:

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad \Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{L} \cdot x\right) \quad (2.32)$$

Die ersten drei Wellenfunktionen Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 zeigt Abbildung 2.5.

2.4.4 Der Tunnelprozess

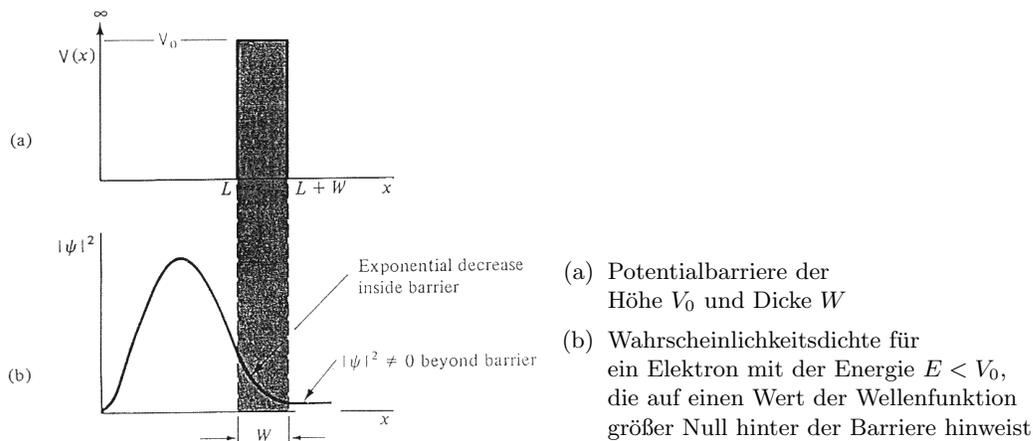
Die Wellenfunktionen sind für einen Potentialwall mit unendlich hohen Wänden relativ einfach zu erhalten, da die Randbedingung $\Psi = 0$ an den Wänden gilt. Eine leichte Modifizierung des Problems führt zu einem Prinzip, das in einigen Halbleiterbauelementen sehr wichtig ist - das



- (a) Diagramm der potentiellen Energie
- (b) Wellenfunktion der ersten drei Quantenzustände
- (c) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung des zweiten Zustandes

Abbildung 2.5: Das Problem eines Teilchens im Potentialwall

quantenmechanische Tunneln eines Elektrons durch eine Barriere begrenzter Höhe und Dicke, siehe **Abbildung 2.6**. Ist das Potential V_0 endlich, so gilt nicht $\Psi(x = L) = 0$ als Randbedingung. Stattdessen gilt die Bedingung, dass Ψ und $\frac{d\Psi}{dx}$ auf jeder Seite der Barriere stetig sind. Daher muss Ψ einem von Null verschiedenen Wert in der Barriere $L \leq x \leq (L + W)$ und jenseits der Barriere $x \leq (L + W)$ besitzen. Daher ist die Wahrscheinlichkeitsdichte $\Psi^* \cdot \Psi \neq 0$ für $x \leq (L + W)$ und es besteht eine gewisse Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in diesem Bereich zu finden. Dabei geht das Teilchen nicht über die Barriere hinweg, da seine gesamte Energie kleiner als V_0 ist. Der Mechanismus, dass das Teilchen die Barriere durchdringt, heißt **Tunneln**. In der klassischen Physik gibt es keine analoge Erscheinung. Quantenmechanisches Tunneln ist eng an die Unschärferelation gebunden. Wenn die Barriere ausreichend dünn ist, kann man nicht mit Gewissheit sagen, dass das Teilchen sich nur auf einer Seite befindet. Jedoch wird die Amplitude der Wellenfunktion durch die Barriere erniedrigt. Wird W größer, so wird $|\Psi|^2$ für $x \leq (L + W)$ letztlich so klein, dass das Tunneln vernachlässigt werden kann. Tunneln tritt nur bei sehr kleinen Dimensionen auf, z.B. bei Siliciumoxidbarrieren mit einer Dicke in der Größenordnung 1 - 2 nm.



- (a) Potentialbarriere der Höhe V_0 und Dicke W
- (b) Wahrscheinlichkeitsdichte für ein Elektron mit der Energie $E < V_0$, die auf einen Wert der Wellenfunktion größer Null hinter der Barriere hinweist

Abbildung 2.6: Quantenmechanisches Tunneln

2.5 Atomstruktur und Periodensystem

Die Schrödingergleichung beschreibt die Wechselwirkung von Teilchen mit Potentialfeldern, sowie es für Elektronen in einem Atom zutrifft. Das moderne Verständnis der Atommodelle rührt von der Wellengleichung und Heisenberg'schen Matrizenmechanik her. Die Lösung einer Schrödingergleichung für ein Atom höherer Kernladungszahl ist äußerst komplex. Nur für das Wasserstoffatom kann eine geschlossene Lösung in analytischer Weise angegeben werden. Die Lösung für das Wasserstoffatom ist wichtig für die Erstellung der Auswahlregeln, um erlaubte, d.h. besetzbare Energieniveaus zu charakterisieren. Die quantenmechanischen Ergebnisse müssen mit den experimentellen Spektren übereinstimmen.

2.5.1 Das Wasserstoffatom

Um die Wellenfunktion für das Wasserstoffatom finden zu können, muss die Schrödingergleichung in drei Dimensionen für ein Coulombsches Potentialfeld gelöst werden. Da das Problem kugelsymmetrisch ist, können Kugelkoordinaten für die Berechnung benutzt werden.

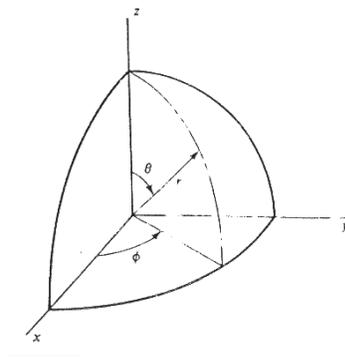


Abbildung 2.7: Das sphärische Koordinatensystem

Der Ausdruck $V(x, y, z)$ in Gleichung 2.21 muss durch $V(\nu, \theta, \varphi)$, dem Coulombschen Potential, welches das Elektron in der Nähe des Protons erfährt, ersetzt werden. Das Coulombsche Potential V lautet in Kugelkoordinaten:

$$V(\nu, \theta, \varphi) = -\frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{q^2}{\nu} \quad (2.33)$$

Nach Variablentrennung kann die zeitunabhängige Gleichung 2.33 geschrieben werden als:

$$V(\nu, \theta, \varphi) = R(\nu)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (2.34)$$

Einzelne Lösungen für die Orts- und Winkelabhängigkeiten können bestimmt werden. Nachdem diese drei Gleichungen gelöst wurden, ist die Wellenfunktion Ψ als das Produkt darstellbar. Wie in dem einfachen Potentialwallproblem, führt jede der drei Gleichungen des Wasserstoffatoms zu einer equantelten Lösung. Daher ist jedem der drei Teile eine Quantenzahl zu zuordnen. Nach Variablentrennung erhält man für den Winkel (φ) die Abhängigkeit:

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m^2 \cdot \Phi = 0 \quad \text{mit } m \text{ als Quantenzahl} \quad (2.35)$$

Die Lösung der Gleichung lautet:

$$\Phi_m(\varphi) = A \cdot e^{j \cdot m \cdot \varphi} \quad (2.36)$$

Die Amplitude A kann aus der Normierungsbedingung berechnet werden:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\phi) \cdot \Phi_m(\phi) d\phi = 1 \quad (2.37)$$

$$A^2 \int_0^\pi e^{-j \cdot m \phi} e^{j \cdot m \cdot \phi} d\phi = A^2 \int_0^\pi d\phi = 2 \cdot \pi \cdot A^2 \quad (2.38)$$

$$\Leftrightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \quad (2.39)$$

Die ϕ -abhängige Wellenfunktion lautet daher:

$$\Phi_m(\phi) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{jm\phi} \quad (2.40)$$

Da sich die Werte von (φ) mit der Periode $2(\pi)$ wiederholen, muss dies auch für kleines φ_m gelten, da diese Zustände nicht unterscheidbar sind. Daher folgt, dass m eine ganze Zahl ist. Die φ -Abhängigkeit ist quantisiert mit der folgenden Auswahlregel für die Quantenzahlen:

$$m = \dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.41)$$

Durch analoge Vorgehensweisen erhält man die Funktionen $R(r)$ und $\Theta(\theta)$, wobei jede Funktion durch ihre eigene Auswahlregel quantisiert ist. Für die r -abhängige Gleichung kann die Quantenzahl jede natürliche Zahl sein, für die θ -Abhängigkeit kann die Quantenzahl l Null oder natürlich sein. Es besteht eine Beziehung zwischen den Gleichungen, welche die erlaubten Quantenzahlen für eine Wellenfunktion

$$\Psi_{n,l,m} = R_n(r) \cdot \Theta_l(\theta) \cdot \Phi_m(\phi) \quad (2.42)$$

einschränkt.

Die Einschränkungen lauten wie folgt:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1 \quad (2.43)$$

$$m = -l, \dots, -1, 0, 1, \dots, l$$

Zusätzlich zu den 3 Quantenzahlen, die von den 3 Teilen der Wellengleichung herkommen, gibt es eine weitere Quantisierungsbedingung, den Eigendrehimpuls des Elektrons, den sogenannten Spin. Der Eigendrehimpuls s eines Elektrons kann die Werte $s = \pm \frac{\hbar}{2}$. Für eine gegebene Wellenfunktion $\Psi_{n,l,m}$ annehmen. In Einheiten von \hbar hat das Elektron einen Spin von $\frac{1}{2}$ und der Eigendrehimpuls, der mit der Spinquantenzahl zusammenhängt, ist positiv oder negativ (*spin up* oder *spin down*). Jeder erlaubte energetische Zustand eines Elektrons in einem Wasserstoffatom wird exakt durch vier Quantenzahlen beschrieben: n, l, m und s . Mit diesen Quantenzahlen können unterschiedliche Zustände, die ein Elektron im Wasserstoffatom einnehmen kann, eindeutig beschrieben werden. Die Zahl n entspricht der Kreisbahnzahl des Elektrons im Bohr'schen Atommodell. Das Konzept der Kreisbahn ist durch die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion in den quantenmechanischen Berechnungen ersetzt worden. Zustände für die Quantenzahl n werden als einer Schale zugehörig bezeichnet (anstatt den Begriff Kreisbahn zu verwenden). Zusätzlich existiert eine Feinstruktur in den Energieniveaus über die Bohrschen Energiewerte hinaus. Die Ursache dafür sind die drei weiteren Quantenbedingungen. Zum Beispiel kann ein Elektron mit $n = 1$ nur $l = 0$ und $m = 0$ haben entsprechend Gleichung Gleichung 2.43, aber es gibt zwei Spinwerte. Für $n = 2$ kann $l = 0$ oder 1 sein, $m = -1, 0, 1$. Die erlaubten Kombinationen der erlaubten Quantenzahlen sind in der ersten Spalte von Tabelle 2.1 aufgeführt. Aus diesen erlaubten Möglichkeiten folgt, dass ein Elektron in einem Wasserstoffatom irgendeine der größten Zahl angeregter Zustände zusätzlich zum Grundzustand Ψ_{100} einnehmen kann. Energiedifferenzen zwischen den verschiedenen Zuständen führen zu den beobachteten Linien im Wasserstoffspektrum. Quantenzahlen bis $n = 3$ und erlaubte Zustände in einem Wasserstoffatom. Die ersten vier Spalten zeigen die verschiedenen erlaubten Kombinationen von Quantenzahlen gemäß der Auswahlregel. Die letzten beiden Spalten geben die Anzahl der erlaubten energetischen Zustände an.

n	l	m	s/\hbar	Allowable states in subshell	Allowable states in complete shell
1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	2
2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	8
	1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	6	
		0	$\pm \frac{1}{2}$		
1		$\pm \frac{1}{2}$			
3	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	18
	1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	6	
		0	$\pm \frac{1}{2}$		
		1	$\pm \frac{1}{2}$		
	2	-2	$\pm \frac{1}{2}$	10	
		-1	$\pm \frac{1}{2}$		
0		$\pm \frac{1}{2}$			
1		$\pm \frac{1}{2}$			
		2	$\pm \frac{1}{2}$		

Tabelle 2.1: Quantenzahlen

2.5.2 Das Periodensystem

Die Quantenzahlen des letzten Abschnittes ergeben sich aus den Lösungen des Wasserstoffatoms. Daher sind die aus den Wellenfunktionen berechneten Energieniveaus einzig dem Wasserstoffatom zuzuordnen und können nicht auf kompliziertere Atome übertragen werden, ohne geeignete Anpassungen vorzunehmen. Jedoch sind die Auswahlvorgaben für Quantenzahlen weiterhin auch für komplexere Atome gültig, so dass damit ein Verständnis für die Anordnung der Atome im Periodensystem der Elemente (PSE) gewonnen werden kann. Ohne diese Auswahlregeln ist kaum verständlich, warum das Energieniveau $n = 1$ nur mit zwei Elektronen besetzt werden kann, während in das Niveau $n = 2$ acht Elektronen passen. Ein weiteres äußerst wichtiges Gesetz der Quantenmechanik ist das Pauli-Prinzip. Es besagt, dass in einem wechselwirkendem System keine zwei Elektronen genau den gleichen Zustand einnehmen können, das heißt, dass sie in ihren Quantenzahlen n, l, m, s vollständig übereinstimmen. Ein Wechselwirkendes System ist dabei ein System, in dem sich die Wellenfunktionen der Elektronen überlappen. Die Bedeutung des Pauli-Prinzips ist außerordentlich hoch. Es ist die Grundlage der Elektronenstruktur aller Atome im Periodensystem der Elemente. Durch Auflisten verschiedener Kombinationen der Quantenzahlen ist es unter Anwendung des Pauli-Prinzips möglich zu ermitteln in welche Schale ein jedes Elektron eines komplexen Atoms gehört und wie viele Elektronen pro Schale erlaubt sind. Die Quantenzustände der Tabelle 2.1 zeigen die Elektronenkonfiguration für Atome im niedrigsten energetischen Zustand. In der Schale $n = 1$ kann l nur 0 sein, ebenso ist $m = 0$. Zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin sind erlaubt im Zustand Ψ_{100} ; daher können nur zwei Elektronen in der Schale existieren. Für das Heliumatom (Atomordnungszahl $z = 2$) können im Grundzustand beide Elektronen im Orbit $n = 1$ Platz finden, beide haben $l = 0$ und $m = 0$ aber entgegengesetztem Spin $+\frac{1}{2}$ und $-\frac{1}{2}$. Aus der Tabelle ist ersichtlich, dass in der Unterschale $l = 0$ zwei Elektronen und in der Unterschale $l = 1$ sechs Elektronen und in der Unterschale $l = 2$ zehn Elektronen unterschiedliche Zustände einnehmen können. Die Elektronenkonfiguration verschiedener Atome im Periodensystem kann aus der Aufstellung der erlaubten Zustände abgeleitet werden. Die Elektronenstruktur im Grundzustand für einige Atome ist in Tabelle 2.2 aufgeführt. Üblicherweise wird die elektronische Struktur

anstelle einer Tabelle wie folgt angegeben: Die Werte der Quantenzahl l werden durch Buchstaben dargestellt.

$$\left| \begin{array}{c} l = \\ \hline 0 \\ \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline 4 \\ \hline \dots \\ \hline \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} s \\ \hline p \\ \hline d \\ \hline f \\ \hline g \\ \hline \dots \\ \hline \end{array} \right|$$

Diese Nomenklatur geht auf frühere Spektroskopische Untersuchungen zurück. Mit dieser Konvention für l wird ein Elektronenzustand folgendermaßen beschrieben: $n = 3$

3p⁶ ($l = 1$); Exponent: 6 Elektronen in der $3p$ Unterschale

Beispielsweise ist die gesamte Elektronenkonfiguration von Silicium ($z = 14$) im Grundzustand $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$. Sie hat damit eine Neonkonfiguration, d.h. abgeschlossen, vollständig mit Elektronen gefüllte Schalen $n = 1$ und $m = 2$ und zusätzlich vier Valenzelektronen. Zwei im s -Zustand, zwei im p -Zustand.

Germanium hat die Konfiguration wie Argon und zusätzlich $3d^{10} 4s^2$ und $4p^4$ und den weiteren Unterschalen. Wie Silicium besitzt es zwei Elektronen im s und zwei im p Zustand. Eigenschaften, die für die Halbleiternatur entscheidend sind.

Atomic number (Z)	Element	n = 1 l = 0		2		3			4		Shorthand notation	
		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p			
		Number of electrons										
1	H	1									$1s^1$	
2	He	2									$1s^2$	
3	Li		1								$1s^2 2s^1$	
4	Be		2								$1s^2 2s^2$	
5	B	helium core, 2 electrons	2	1							$1s^2 2s^2 2p^1$	
6	C		2	2							$1s^2 2s^2 2p^2$	
7	N		2	3							$1s^2 2s^2 2p^3$	
8	O		2	4							$1s^2 2s^2 2p^4$	
9	F		2	5							$1s^2 2s^2 2p^5$	
10	Ne		2	6								$1s^2 2s^2 2p^6$
11	Na			1							[Ne] $3s^1$	
12	Mg			2							$3s^2$	
13	Al	neon core, 10 electrons	2	1							$3s^2 3p^1$	
14	Si		2	2							$3s^2 3p^2$	
15	P		2	3							$3s^2 3p^3$	
16	S		2	4							$3s^2 3p^4$	
17	Cl		2	5							$3s^2 3p^5$	
18	Ar		2	6								$3s^2 3p^6$
19	K					1					[Ar] $4s^1$	
20	Ca					2					$4s^2$	
21	Sc				1	2					$3d^1 4s^2$	
22	Ti				2	2					$3d^2 4s^2$	
23	V				3	2					$3d^3 4s^2$	
24	Cr				5	1					$3d^5 4s^1$	
25	Mn				5	2					$3d^5 4s^2$	
26	Fe				6	2					$3d^6 4s^2$	
27	Co				7	2					$3d^7 4s^2$	
28	Ni				8	2					$3d^8 4s^2$	
29	Cu	argon core, 18 electrons				10	1				$3d^{10} 4s^1$	
30	Zn					10	2				$3d^{10} 4s^2$	
31	Ga					10	2	1			$3d^{10} 4s^2 4p^1$	
32	Ge					10	2	2			$3d^{10} 4s^2 4p^2$	
33	As					10	2	3			$3d^{10} 4s^2 4p^3$	
34	Se					10	2	4			$3d^{10} 4s^2 4p^4$	
35	Br					10	2	5			$3d^{10} 4s^2 4p^5$	
36	Kr					10	2	6				$3d^{10} 4s^2 4p^6$

Tabelle 2.2: Elektronenstruktur im Grundzustand

3 Energiebänder und Ladungsträger in Halbleitern

Wichtig für die Beschreibung der elektronischen Vorgänge in Halbleitern sind neben den Grundlagen über deren Aufbau und Struktur Modellvorstellungen über die Bindungskräfte zwischen den einzelnen Atomen. Einhergehend mit der Energieverteilung der sowohl an den Bindungen als auch am Transport elektrischer Ladungen beteiligten Elektronen. Aus diesen Modellvorstellungen lassen sich die grundlegenden Eigenschaften und Parameter von elektronischen Halbleiterbauelementen beschreiben bzw. herleiten.

3.1 Bindungskräfte und Energiebänder in Festkörpern

3.1.1 Atome im Festkörper

In einem Atom können Elektronen nur bestimmte diskrete Energiezustände annehmen. Große Lücken existieren in den Energieschalen, in denen keine besetzbaren Energiezustände verfügbar sind.

In ähnlicher Weise sind Elektronen im Festkörper beschränkt auf bestimmte Energiebereiche. Der große Unterschied zwischen Einzelatomen und Festkörpern ist, dass im Festkörper das Elektron einen Bereich oder ein Band erlaubter Energiezustände einnehmen kann. Diskrete Energieniveaus des isolierten Atoms spreizen sich in Energiebänder auf, da sich im Festkörper die Wellenfunktionen der Elektronen überlappen und das Elektron nicht mehr nur an ein einzelnes Atom gebunden ist. Ein Elektron in der Außenschale eines Atoms spürt den Einfluss der Nachbaratome. Dadurch wird seine Wellenfunktion geändert, ebenso die potentielle Energie und die Randbedingungen für die Schrödingergleichung. Der Einfluss kann als Störung behandelt werden, die sich in einer Verschiebung und Aufspaltung der diskreten Energieniveaus in Energiebänder auswirkt.

3.1.2 Bindungskräfte in Festkörpern

- Ionische Bindung

Als Beispiel sei $NaCl$ betrachtet, ein Alkalihalogenid. Im $NaCl$ -Kristall ist jedes Na -Atom von 6 Cl -Atomen als nächste Nachbarn umgeben und umgekehrt. Natrium gibt sein $3s$ -Elektron an das Chloratom ab, so dass der Kristall aus Na^+ und Cl^- Ionen besteht. Jedes Na^+ übt eine elektrostatische Kraft auf die umgebenden 6 Cl -Nachbarn aus und umgekehrt, d.h. durch die Coulombsche Anziehung wird das Gitter zusammengezogen, bis ein Gleichgewicht mit den abstoßenden Kräften auftritt. Alle Elektronen sind dabei fest an die Atome gebunden, die äußeren Atomshalen sind gefüllt. $NaCl$ ist dabei ein guter Isolator.

- Metallische Bindung

Bei einem Metallatom ist die äußere elektronische Schale nur teilweise gefüllt, normalerweise nicht mehr als mit 3 Elektronen, die nur leicht an den Rumpf gebunden sind. In einem Metall-Festkörper gibt jedes Atom seine äußeren Elektronen ab, es entsteht gewissermaßen ein See freier Elektronen. Der Festkörper besteht aus den Atomrümpfen und dem Elektronensee (auch oft Elektronengas genannt). Die Kräfte, die den Festkörper zusammenhalten, rühren von der Wechselwirkung zwischen den positiven Atomrümpfen und den freien Metallelektronen her. Dies ist eine typische metallische Bindung. Allen Metallen ist das Vorhandensein eines Elektronensees gemeinsam, aus dem die freie Beweglichkeit dieser Elektronen im Festkörper um damit auch die gute elektrische (thermische) Leitfähigkeit folgt. Die jeweiligen Metalle weisen jedoch komplizierte Unterschiede in den Bindungskräften auf, was auch in den unterschiedlichen Schmelztemperaturen zum Ausdruck kommt.

- Kovalente Bindung

Ein dritter Bindungstyp wird u.a. durch die im Diamantgitter kristallin vorliegenden Halbleiter dargestellt. Jedes Atom im Ge , Si oder C Diamantgitter ist von vier nächsten Nachbarn umgeben. Jedes Atom besitzt vier Valenzelektronen. In diesen Kristallen teilt jedes Atom seine Valenzelektronen mit den Nachbarn, siehe [Abbildung 3.1](#).

Die Bindungskräfte haben ihre Ursache in der quantenmechanischen Wechselwirkung zwischen den gemeinsamen Elektronen und den Rumpfen. Diese Bindungsart heißt kovalente Bindung. Jedes Elektronenpaar stellt eine kovalente Bindung dar. Es ist daher auch nicht mehr relevant zu fragen, welches Elektron zu welchem Atom gehört - sie sind nicht unterscheidbar und gehören beide zur Bindung, haben jedoch entgegengesetzten Spin. Wie im Falle von Ionenkristallen sind in der kovalenten Diamantstruktur keine freien Elektronen verfügbar; *Ge* und *Si* sollten daher Isolatoren sein. Dies trifft aber nur im idealen Kristall bei 0 Kelvin zu. Elektronen können thermisch oder optisch angeregt, d.h. aus der kovalenten Bindung befreit werden, und stehen dann zum Ladungsträgertransport zur Verfügung.

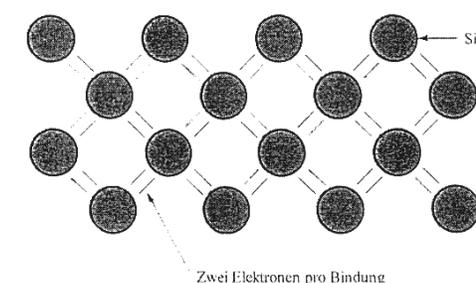


Abbildung 3.1: Kovalente Bindung im Silicium

3.1.3 Energiebänder

Wenn isolierte Atome zusammengebracht werden und einen Festkörper bilden, gibt es verschiedene Wechselwirkungen zwischen den benachbarten Atomen. Anziehende und abstoßende Kräfte zwischen den Atomen führen zu einem Gleichgewichtszustand mit einem entsprechendem interatomaren Abstand im Festkörper. Dabei treten wichtige Änderungen in Energieniveaueonfiguration der Elektronen ein. Werden Atome einander so nahe gebracht, dass eine Überlappung der Wellenfunktion erfolgt, ist dabei immer das Paulische Ausschlussprinzip zu beachten. Es besagt, dass in einem wechselwirkenden System keine zwei Elektronen in exakt dem gleichen Quantenzustand sind. Daher spalten diskrete Energieniveaus des isolierten Atoms in neue Niveaus auf, die zu einem Elektronenpaar gehören. In einem Festkörper, wo viele Atome zusammengebracht werden, entstehen gleichsam kontinuierliche Energiebänder, siehe [Abbildung 3.2](#).

Die [Abbildung 3.2](#) illustriert eine imaginäre Formation eines Diamantkristalls aus isolierten Kohlenstoffatomen. Im Grundzustand hat jedes *C*-Atom die Elektronenkonfiguration $1s^2 2s^2 2p^2$, wobei 6 $2p$ -Zustände existieren. Werden N Atome betrachtet, so gibt es je $2N$ $1s$ - und $2s$ - Zustände und $6N$ $2p$ -Zustände. Wenn die Atome zusammengebracht werden, spalten die diskreten Energieniveaus in Bänder auf, beginnend mit der Schale $n = 2$. Mit der zunehmenden Aufspaltung der $2s$ - und $2p$ -Bänder tritt eine Verschmelzung zum $2s$ - $2p$ -Band auf, welches $8N$ Zustände enthält. Bei weiterer Annäherung tritt eine erneute Aufspaltung in ein Valenzband und ein Leitungsband auf, welche durch eine Energielücke E_g im Gleichgewichtszustand des Festkörpers getrennt. Valenz- und Leitungsband enthalten je $4N$ Zustände. Die $1s$ -Zustände formen ein Band der festgebundenen Elektronen, das für die Halbleitereigenschaften nicht mehr betrachtet werden muss. Die Energielücke E_g heißt verbotenes Band, da es in einem perfektem Kristall keine elektronischen Energiezustände enthält. Insgesamt gibt es $6N$ Elektronen. $2N$ Elektronen sitzen im $1s$ -Band, und die verbleibenden $4N$ Elektronen müssen Zustände im Valenz- bzw. Leitungsband einnehmen. Bei einer Temperatur von 0 Kelvin ist das Valenzband vollständig besetzt, während das Leitungsband vollkommen leer ist, da der niedrigste Energiezustand eingenommen wird.

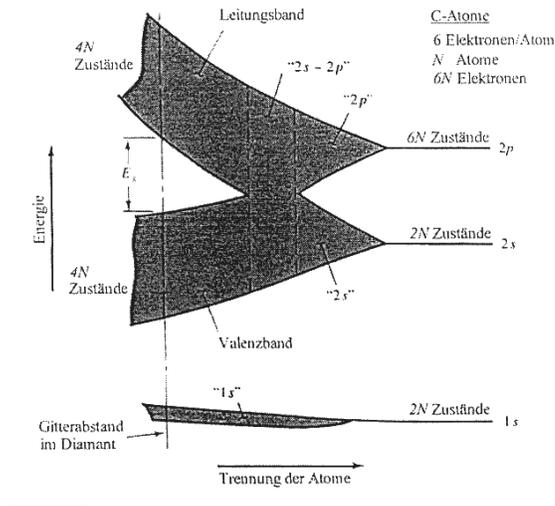


Abbildung 3.2: Energiebänder in einer Diamantformation in Abhängigkeit vom Abstand der Atome

3.1.4 Metalle, Halbleiter und Isolatoren

Damit Strom in einem Festkörper fließen kann (bzw. damit dessen Elektronen in einem elektrischen Feld beschleunigt werden können), muss nur die Möglichkeit bestehen, dass die Elektronen in neue energetische Zustände gelangen können. D.h., ein freier, besetzbarer Elektronenzustand ist verfügbar. Wenn es nur wenige Elektronen in einem sonst leeren Band gibt, dann sind genügend unbesetzte Zustände verfügbar, die ein Elektron mit vernachlässigbar geringen Energieaufwand besetzen kann. Anders ist das bei der Diamantstruktur bei 0 Kelvin. Das Leitungsband ist vollkommen leer, das Valenzband ist vollständig besetzt, so dass kein Ladungstransport stattfinden kann, da keine freien Zustände im Valenzband existieren und die Elektronen von dort mit der verfügbaren Energie nicht über die Bandlücke ins Leitungsband gelangen können. Kohlenstoff in der Diamantstruktur ist somit ein guter Isolator. Es werden nur typische Bandstrukturen bei 0 Kelvin betrachtet, siehe [Abbildung 3.3](#).

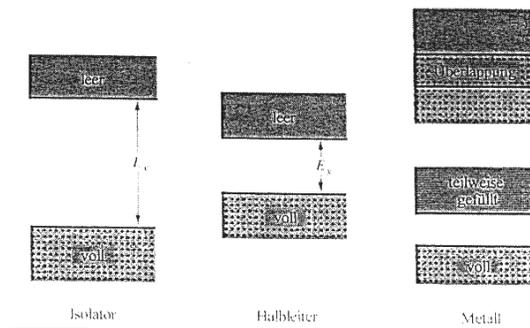


Abbildung 3.3: Typische Bandstrukturen bei einer Temperatur von 0K

Halbleitermaterialien haben im Prinzip die gleiche Bandstruktur wie Isolatoren, allerdings ist das verbotene Band wesentlich kleiner (z.B. 1,1 eV bei Si) als bei einem Isolator (z.B. Diamant 5 eV). Der relativ kleine Bandabstand bei Halbleitern erlaubt die Anregung von Elektronen aus dem Valenz- in das Leitungsband durch relativ geringe thermische oder optische Energien, so dass eine gewisse Leitfähigkeit bei $T > 0$ Kelvin erreicht wird. In Metallen überlappen sich die Bänder oder sind teilweise gefüllt. Daher finden Elektronen freie Zustände vor, so dass sie sich unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes frei bewegen können.

3.1.5 Direkte und indirekte Halbleiter

Um quantitativ die Bandstruktur bestimmen zu können, wird angenommen, dass sich ein einzelnes Elektron durch ein perfektes und periodisches Gitter bewegt. Die quantenmechanische Beschreibung des Elektrons erfolgt durch eine ebene Welle, die sich z.B. in x -Richtung mit dem Wellenvektor $\underline{k} = (k_x, k_y, k_z)$ ausbreitet. Die ortsabhängige Wellenfunktion für das Elektron ist $\Psi_{\underline{k}}(x) = U(k_x, x) \cdot e^{ik_x x}$; wobei $U(k_x, x)$ die Wellenfunktion entsprechend der Periodizität des Gitters moduliert. In solchen Berechnungen können die Energiewerte E in Abhängigkeit vom Wellenvektor \underline{k} , der die Ausbreitungsrichtung der Welle definiert, dargestellt werden. Da diese Periodizität der meisten Gitter in verschiedenen Richtungen unterschiedlich ist, muss das $E(\underline{k})$ -Diagramm für die verschiedenen Kristallrichtungen berechnet werden. **Abbildung 3.4** zeigt allgemeine Eigenschaften der $E(\underline{k})$ -Diagramme für *Si* und *GaAs* für die [111]- und [100]-Richtungen.

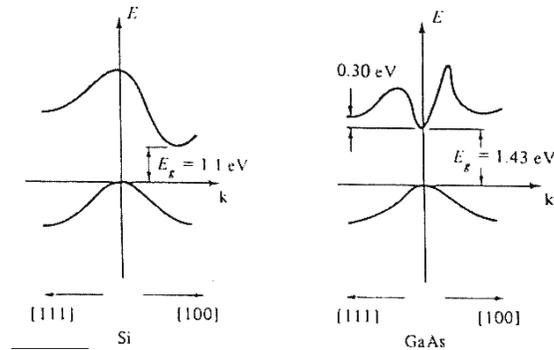


Abbildung 3.4: Bandstrukturen für Si und GaAs

Wichtig ist hier, dass bei *GaAs* das Maximum des Valenzbandes und das Minimum des Leitungsbandes bei $k = 0$ liegen. D.h. ein Elektron kann mit der niedrigst möglichen Energie vom Valenz- ins Leitungsband übergehen, ohne den Wert von \underline{k} , d.h. seinen Impuls zu verändern. Ein derartiger Halbleiter heißt direkter Halbleiter. Bei *Si* hingegen sind die Vektoren \underline{k} für das Maximum des Valenzbandes und das Minimum des Leitungsbandes verschieden. Ein Übergang mit niedrigst möglicher Energie bedarf einer Änderung von \underline{k} . Ein derartiger Halbleiter heißt indirekt. Da \underline{k} mit Elektronenimpuls verknüpft ist, muss wegen der Impulserhaltung ein Betrag von Gitter geleistet werden. In einem direkten Halbleiter wird die Energie beim Übergang eines Elektron vom Leitungs- ins Valenzband als Photon freigesetzt. Beim indirekten Halbleiter ist der direkte Übergang mit minimaler Energie (Bandabstand) nicht möglich, das Elektron muss sowohl Impuls als auch Energie ändern. Der Übergang kann über Defektzustand im verbotenen Band erfolgen oder über einen indirekten, wobei die freiwerdende Energie vorzugsweise als Wärme an das Gitter abgegeben wird und dabei der Wert von \underline{k} über Stöße mit dem Gitter geändert wird.

3.2 Ladungsträger in Halbleitern

3.2.1 Elektronen und Löcher

Im Falle eines Metalls ist der Stromleitungsmechanismus relativ einfach zu veranschaulichen; die Metallatomrümpfe sind in einem See mehr oder minder freien Elektronen eingebettet. Diese Elektronen können sich als Gruppe unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes bewegen. Diese Sichtweise ist eine etwas zu einfache Darstellung, aber viele wichtige Leitungseigenschaften von Metallen lassen sich so verstehen. Schwieriger ist die Situation beim Halbleiter, bei $T = 0\text{K}$ ist das Valenzband vollständig gefüllt und das Leitungsband vollständig leer. Erst bei Temperaturen $T > 0\text{K}$ können durch thermische Anregung Ladungsträger über das verbotene Band hinweg in das Leitungsband gelangen. Im Valenzband verbleiben einige unbesetzte Zustände zurück, siehe **Abbildung 3.5**.

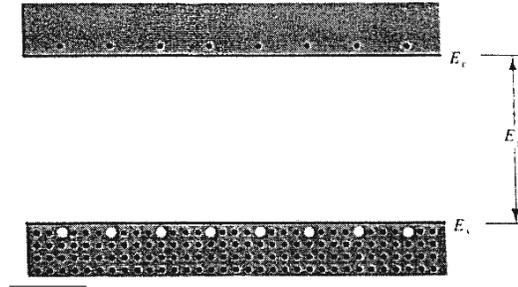


Abbildung 3.5: Elektronen-Loch-Paare im Bändermodell des Halbleiters

Auch diese freien Zustände im Valenzband können dann zur Leitfähigkeit beitragen. Verunreinigungen (Dotierstoffe) aus Elementen der Gruppe III und V beeinflussen und verändern die Energiebandstrukturen und die Verfügbarkeit von Ladungsträgern nachhaltig. Ein leerer, d.h. elektronenfreier Zustand im Valenzband heißt Loch (hole). Durch den Übergang eines Elektrons aus dem Valenz- in das Leitungsband wird ein Elektron-Loch-Paar erzeugt. Nach dem Übergang in das Leitungsband steht dem Elektron eine Vielzahl freier Zustände zur Verfügung.

Beispiel: $T=293\text{K}$, reines Si ; Im thermischen Gleichgewicht existieren ca. $1 \cdot 10^{10}\text{cm}^{-3}$ Elektronen-Loch-Paare (EHP) bei mehr als $10^{22} \frac{\text{Atomen}}{\text{cm}^3} \leftrightarrow$ über $4 \cdot 10^{12}\text{cm}^{-3}$ mehr Zustände sind im Leitungsband als Elektron-Loch-Paare! Damit können sich die Elektronen im Leitungsband praktisch frei bewegen.

Das entsprechende Problem des Ladungstransports im Valenzband ist etwas komplizierter. In einem gefüllten Band sind alle verfügbaren Zustände besetzt. Zu jedem Elektron, welches sich mit der Geschwindigkeit \underline{v} bewegt, gibt es im Band eine entgegengesetzt gleiche Elektronenbewegung. Wenn nun ein elektrisches Feld angelegt wird, ist der Nettostrom Null, da es zu jedem Elektron j mit v_j ein entsprechendes Elektron j' mit $-v_j$ gibt. Die Abbildung 3.6 erläutert diesen Effekt in der Darstellung der Elektronenenergie über den Wellenvektor \underline{k} (Impuls) für das Valenzband.

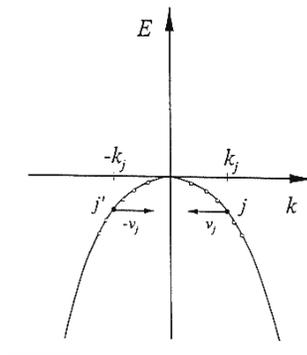


Abbildung 3.6: E-k-Diagramm des gefüllten Valenzbandes

Da \underline{k} proportional zum Elektronenimpuls ($\hbar \underline{k}$) ist, haben die zwei Elektronen entgegengesetzt gleiche Geschwindigkeiten. Bei $N \frac{\text{Elektronen}}{\text{cm}^3}$ im Band wird die Stromdichte als Summe über alle Elektronengeschwindigkeiten ausgedrückt, $j = (-q) \sum_{i=1}^N \underline{v}_i = 0$ gefülltes Band; $q =$ Elementarladung. Nun wird ein Loch generiert, in dem das Elektron j entfernt wird; die Nettostromdichte im Valenzband ist wieder die Summe über alle Elektronengeschwindigkeiten, vermindert um den Beitrag des entfernten Elektrons, d.h. $j = (-q) \sum_{i=1}^N \underline{v}_i - (-q) \underline{v}_j$ das Elektron j fehlt.

Der erste Term ist Null, daher ist der Nettostrom $+q \cdot v_j$; d.h. der Strombeitrag eines Loches ist betrachtbar als der einer positiven Ladung mit der Geschwindigkeit v_j . Natürlich ist der Ladungstransport ursächlich auf die Bewegung des nun nicht mehr kompensierten Elektrons j zurückzuführen. Der Einfachheit halber wird jedoch ein freier oder leerer Zustand im Valenzband als ein positiver Ladungsträger mit der Geschwindigkeit v_j betrachtet. Der Stromfluss im Halbleiter lässt sich durch die Bewegung von Elektronen im Leitungsband und von Löchern im Valenzband beschreiben.

3.2.2 Effektive Masse von Ladungsträgern

Elektronen in einem Kristall sind nicht vollkommen frei, sondern wechselwirken mit periodischen Potential des Gitters. Um die Standardgleichungen der Elektrodynamik auf Ladungsträger anwenden zu können, muss eine effektive Teilchenmasse eingeführt werden. Damit werden pauschal die Einflüsse des Gitters berücksichtigt, so dass Elektronen und Löcher als quasi freie Ladungsträger behandelt werden können. Zur Berechnung der effektiven Masse ist die Form des Energiebandes im $E(\underline{k})$ -Raum zu berücksichtigen, was in der Regel eine schwierige theoretische Aufgabe ist. Jedoch kann experimentell ein Mittelwert der effektiven Masse m^* mittels Zyklotronresonanz bestimmt werden, siehe Abbildung 3.7.

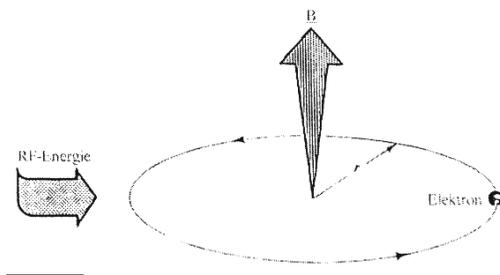


Abbildung 3.7: Skizze zum Zyklotron-Resonanz-Experiment

Es werde angenommen, ein Elektron bewegt sich in einem Magnetfeld der Stärke B . Es beschreibt dann eine Kreisbahn und es gibt vereinfacht

$$\frac{m \cdot v^2}{r} = q \cdot v \cdot b \quad \text{Zentrifugalkraft} = \text{Lorentzkraft}$$

Daraus folgt $v = \frac{q \cdot v \cdot b}{m^*}$; $\omega_c = \frac{v}{r} = \frac{q \cdot B}{m^*} \omega_c$ ist die Winkelgeschwindigkeit der Elektronenbewegung.

Nun wird ein elektromagnetisches Wechselfeld an die Probe angelegt. Die Absorption ist solange vernachlässigbar, bis die Resonanz auftritt, d.h. bis die Frequenz des Wechselfeldes gleich ω_c wird. Nun findet Resonanzabsorption von Energie statt. Daher kann man aus dem Energieverlust des Wechselfeldes im ω -scan den Wert von ω_c , der im Mikrowellenbereich liegt, ermitteln und damit m^* bestimmen. Gleiches gilt für Löcher, siehe Tabelle 3.1.

		Ge	Si
Elektron	m_n^*	$0,55 m_0$	$1,1 m_0$
Loch	m_p^*	$0,37 m_0$	$0,56 m_0$

Tabelle 3.1: Effektive Massen für Silicium und Germanium (m_0 ist die freie Elektronenmasse)

3.2.3 Intrinsisches Material

Ein perfekter Halbleiterkristall ohne Verunreinigung oder Kristalldefekte heißt intrinsischer Halbleiter. In einem solchen Material gibt es bei $T = 0\text{K}$ keine Leitfähigkeit, da das Valenzband

vollständig mit Elektronen gefüllt und das Leitungsband leer ist. Bei höheren Temperaturen werden Elektronen-Loch-Paare generiert. Diese sind die einzigen Ladungsträger im intrinsischen Material, siehe [Abbildung 3.8](#).

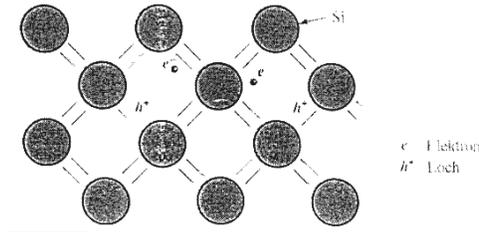


Abbildung 3.8: Elektron-Loch-Paare im Bindungsmodell des intrinsischen Siliciums

Wird ein Valenzelektron aus seiner Bindung befreit und gelangt in das Leitungsband, steht es als Ladungsträger zur Verfügung. Die dazu notwendige Energie ist mindestens E_g . Die Elektronenkonzentration n im Leitungsband und die Löcherkonzentration p im Valenzband sind gleich, da Elektronen und Löcher als Paare erzeugt werden. Jeder dieser intrinsischen Ladungsträgerkonzentrationen ist nach der Definition gleich n_i , $n = p = n_i$. Diese intrinsische Ladungsträgerkonzentration ist temperaturabhängig. Da sich im allgemeinen bei jeder Temperatur ein thermodynamisches Gleichgewicht einstellt, müssen Elektronen-Loch Paare mit der gleichen Rate, wie sie generiert werden auch rekombinieren, d.h. ein Elektron geht aus dem Leitungsband in einen leeren Zustand (Loch) des Valenzbandes. Es gilt: $r_i = g_i$; mit r_i =Rekombinationsrate $[\frac{EHP}{cm^3 \cdot s}]$ g_i =Generationsrate.

Die Rekombinationsrate r_i steigt mit zunehmender Temperatur. Bei jeder Temperatur ist die Rekombinationsrate von Elektronen und Löchern proportional zu den Gleichgewichtskonzentrationen von Elektronen n_0 und Löchern p_0 :

$$r_i = a_r \cdot n_0 \cdot p_0 = a_r \cdot n_i^2 = g_i$$

Wobei a_r ein konstanter Faktor ist.

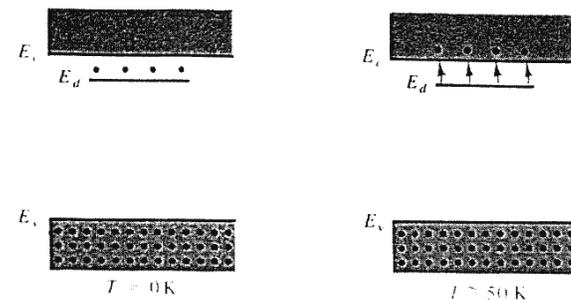
3.2.4 Extrinsisches Material

Zusätzlich zu den intrinsischen thermisch generierten Ladungsträger können Ladungsträger in Halbleitern eingebrachte Dotierstoffe erzeugt werden. Es gibt zwei Arten von dotierten Halbleitern:

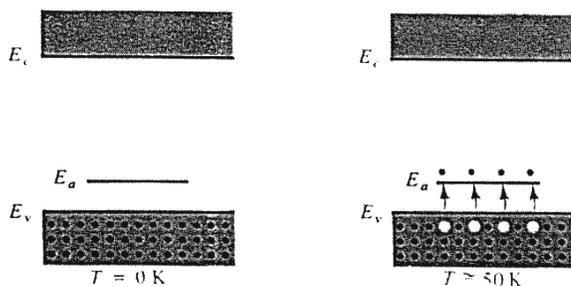
- n -Typ mit überwiegend elektronischer Leitung
- d -Typ mit überwiegend Löcherleitung

Ist ein Kristall dotiert, so dass die Gleichgewichtskonzentration n_0 und p_0 verschieden von der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration n_i sind, heißt das Material extrinsisch. Durch Dotierstoffe in einem sonst perfektem Kristall werden zusätzliche Niveaus in der Energiebandstruktur geschaffen, normalerweise im verbotenen Band.

Dotierstoffe der Gruppe \overline{V} im Periodensystem (P, As, Sb) führen zu örtlich lokalisierten Niveaus nahe des Leitungsbandes in Si und Ge . Diese Niveaus sind bei $T = 0K$ mit Elektronen gefüllt, und nur wenig thermische Energie ist nötig, die Elektronen in das Leitungsband anzuregen. Bei $T = 50 - 100K$ befinden sich praktisch alle Elektronen im Leitungsband. Ein solches Niveau heißt Donator (*donare (lat.) = geben*) und die Dotierstoffe der Gruppe \overline{V} heißen Donatoren. Mit Donatoren dotiertes Material kann beträchtliche Konzentration ($10^{19} cm^{-3}$) von Elektronen im Leitungsband auf relativ niedrigen Temperaturen aufweisen. Dieses Material heißt n -dotiert (n -Typ), siehe [Abbildung 3.9](#).

Abbildung 3.9: Donator im Bändermodell bei $T = 0K$ und $T \approx 50K$

Atome der Gruppe III (*B, Al, Ga, In*) führen zu Niveaus nahe dem Valenzband in *Si* und *Ge*. Bei $T = 0K$ sind die Niveaus unbesetzt mit Elektronen, siehe [Abbildung 3.10](#).

Abbildung 3.10: Akzeptor im Bändermodell bei $T = 0K$ und $T \approx 50K$

Bereits bei niedrigen Temperaturen steht genügend thermische Energie zur Verfügung, um Elektronen aus dem Valenzband anzuregen, wodurch ein Loch im Valenzband entsteht. Dieser Typ von Niveaus heißt Akzeptorniveau und die Elemente der Gruppe III folglich Akzeptoren in *Si* und *Ge*. Mit ihnen wird die Löcherkonzentration p_0 viel größer als die Elektronenkonzentration im Leitungsband (*p*-Typ). Die Verhältnisse im kovalenten Bindungsmodell zeigt die [Abbildung 3.11](#).

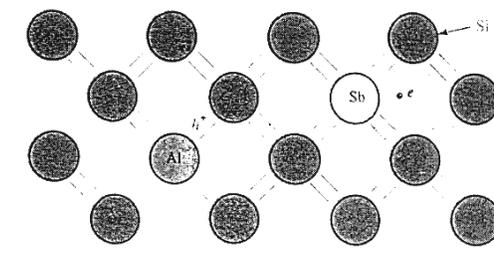


Abbildung 3.11: Donator- und Akzeptoratome im Silicium

Ein *Sb*-Atom im Gitter braucht 4 Elektronen für die vollständige kovalente Bindung mit den 4 *Si*-Nachbaratomen, ein Elektron ist übrig. Dieses Elektron ist nur locker gebunden und kann sehr leicht abgegeben werden, d.h. aus der Coulombschen Bindung entkommen und damit als quasi freies Elektron zur Leitfähigkeit zur Verfügung stehen. Bei einem Element der Gruppe III fehlt ein Elektron, die kovalente Bindung ist unvollständig. Mit einem geringen Energieaufwand kann ein Elektron aus einer anderen *Si-Si* Bindung in diese Stelle hüpfen und so ein Loch schaffen, das sich durch dieses Hüpfen von Elektronen weiter bewegt. In *Si* liegen Donatoren und Akzeptoren etwa 0,03 bis 0,06 eV vom jeweiligen Band entfernt. Die intrinsische Ladungsträgerkonzentration

n_i liegt bei $R \cdot T$ bei $n_i \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3}$. Die Dotierung kann bis 10^{19} cm^{-3} getrieben werden. Dotiert man Si mit $10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ Sb}$, so steigt die Elektronenkonzentration um 10^5 cm^{-3} (Faktor 100000!). Der spezifische Widerstand sinkt von $2 \cdot 10^5 \Omega \text{ cm}$ auf $5 \Omega \text{ cm}$ mit dieser Dotierung. Wenn ein Halbleiter p - oder n -dotiert ist, dominiert ein Ladungsträgertyp. In einem n -dotierten Halbleiter bezeichnet man die Elektronen als Majoritätsladungsträger und die Löcher als Minoritätsladungsträger, während in einem p -dotierten Halbleiter die Löcher Majoritäten und die Elektronen Minoritäten heißen.

3.3 Ladungsträgerkonzentration

3.3.1 Das Fermi-Niveau

Elektronen in Festkörpern gehorchen der Fermi-Dirac Statistik. In diese Statistik fließen ein:

- die Nichtunterscheidbarkeit der Elektronen
- ihre Wellennatur
- das Pauli'sche Ausschlussprinzip

Im thermischen Gleichgewicht kann die Verteilung der Elektronen über einen Bereich erlaubten Energien durch die Fermi-Dirac Verteilungsfunktion beschrieben werden.

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}}$$

mit der Boltzmannkonstante $k = 8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{K}^{-1}$. Die Verteilungsfunktion $f(E)$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass ein erlaubter Energiezustand E mit einem Elektron bei der absoluten Temperatur T besetzt ist. Dabei ist E_F das Fermi-Niveau.

Für $E = E_F$ gilt:

$$f(E_F) = \left[1 + e^{\frac{E_F-E_F}{k \cdot T}} \right]^{-1} = \frac{1}{2}$$

Bei $T = 0 \text{ K}$ nimmt $f(E)$ eine einfache rechteckige Form an, mit $f(E) = 1$ für $E < E_F$ und $f(E) = 0$ für $E > E_F$. Durch diese Rechteckform bei $T = 0 \text{ K}$ kommt zum Ausdruck, dass alle elektrischen Zustände bis E_F voll besetzt, alle höheren leer sind, in [Abbildung 3.12](#) ist die Fermi-Dirac Verteilungsfunktion für $T = 0 \text{ K}$ und $T > 0 \text{ K}$ dargestellt.

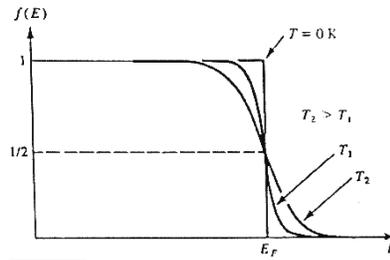


Abbildung 3.12: Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion bei unterschiedlichen Temperaturen

Bei Temperaturen $T > 0 \text{ K}$ existiert eine gewisse Wahrscheinlichkeit $f(E)$, dass Zustände $E > E_F$ gefüllt sind, entsprechend einer Wahrscheinlichkeit $(1 - f(E))$, dass ein Zustand $E < E_F$ leer ist. Die Fermifunktion ist symmetrisch bzgl. E_F , das heißt

$$f(E_F + \delta E) = 1 - f(E_F - \delta E)$$

Wird diese Verteilung auf den Halbleiter angewendet, so muss berücksichtigt werden, dass $f(E)$

nur die Besetzungswahrscheinlichkeit angibt, wenn bei der Energie auch besetzbare Zustände existieren. Dazu wird die Funktion $f(E)$ um 90° gedreht und in das Bänderschema eingetragen. Im intrinsischen Zustand ist die Zahl der Elektronen und Löcher gleich. Daher muss das Fermi-Niveau in der Mitte des verbotenen Bandes liegen (bis auf eine kleine Korrektur), siehe [Abbildung 3.13](#).

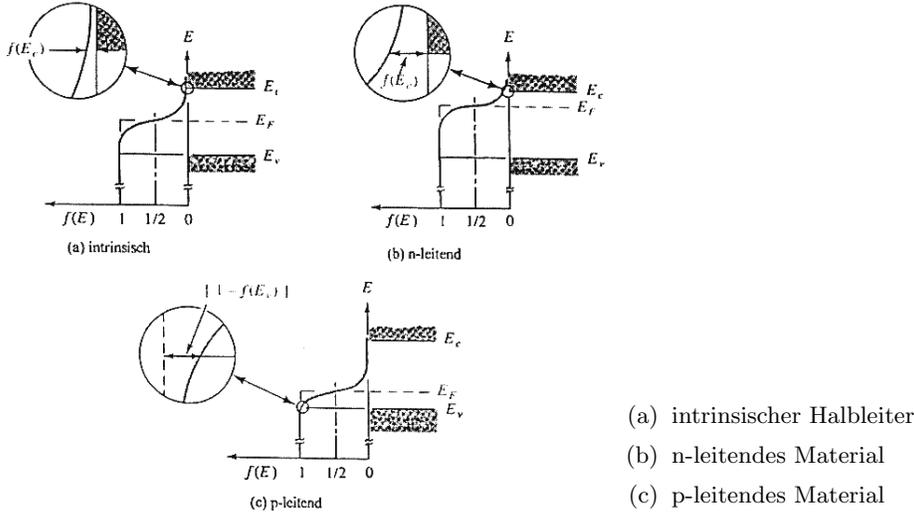


Abbildung 3.13: Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion für verschiedene Halbleitermaterialien bei konstanter Temperatur $T > 0K$

Die Wahrscheinlichkeitswerte bei E_V und E_C sind erwartungsgemäß sehr klein für intrinsische Halbleiter. Für *Si* ist bei $T = 300K$: $n_i = p = n \approx 10^{10} cm^{-3}$, wogegen die Dichte verfügbarer Zustände bei E_C und E_V um die $10^{19} cm^{-3}$ ist.

Wegen der relativ hohen Zustandsdichte können kleine Änderungen von $f(E)$ große Änderungen der Ladungsträgerkonzentrationen nach sich ziehen. Im n-leitenden Silicium besteht eine hohe Konzentration von Elektronen im Leitungsband und daher muss das Fermi-Niveau über der intrinsischen Position liegen. Da $f(E)$ für eine feste Temperatur seine Form behält, steht der hohen Elektronenkonzentration bei E_C eine niedrige Löcherkonzentration bei E_V gegenüber. Für p-leitendes Silicium liegt das Fermi-Niveau nahe am Valenzband, so dass der $(1 - f(E))$ - Ausläufer unterhalb von E_V größer ist als der $f(E)$ - Ausläufer oberhalb von E_C . Der Wert von $E_F - E_V$ gibt in diesem Fall an, wie hoch das Material p-dotiert ist. Es ist unüblich $f(E)$ über E bei jedem Energieband darzustellen. Man beschränkt sich nur auf die Angabe der Lage von E_F . [Abbildung 3.14](#) zeigt, wie aus der Lage des Fermi-Niveaus bei bestimmter Temperatur Rückschlüsse auf die jeweilige Ladungsträgerkonzentration gezogen werden können.

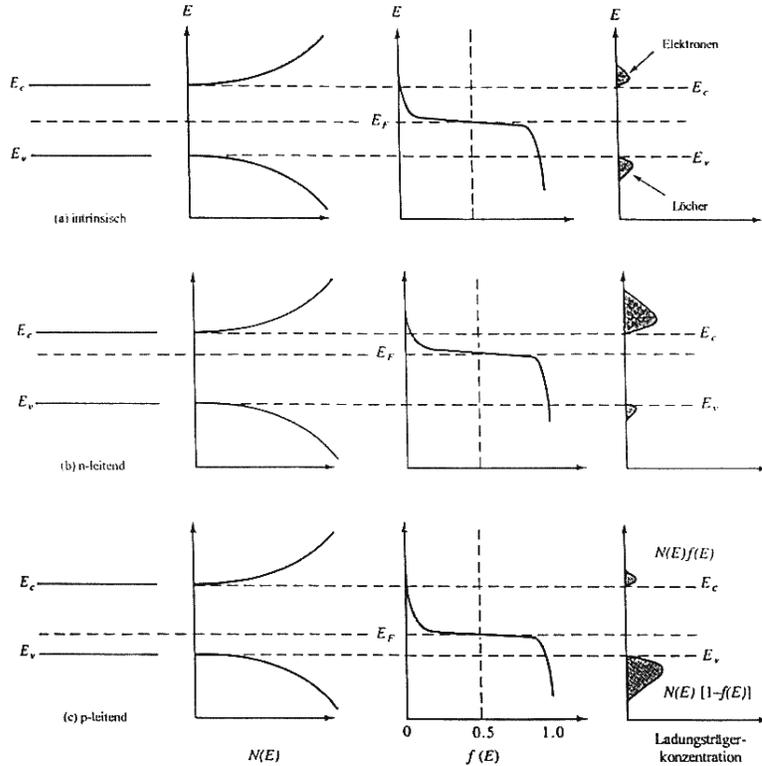
3.3.2 Elektronen- und Löcherkonzentrationen im Gleichgewicht

Die Fermi-Funktion kann benutzt werden, um die Dichte von Elektronen und Löchern im Halbleiter zu berechnen, wenn die Dichten verfügbarer Zustände im Valenz- und Leitungsband bekannt sind.

Die Dichte von Elektronen im Leitungsband ist $n_0 = \int_{E_C}^{\infty} N(E)dE$, wobei $N(E)dE$ die Dichte

besetzbarer Zustände in dE ist. Der Index $_0$ gibt das thermische Gleichgewicht an. Dieses Integral kann gelöst werden, wenn vorher $N(E)$ berechnet wird. Für die praktische Anwendung ist es wichtig, dass n_0 als Produkt einer effektiven Zustandsdicht N_C mit Zuständen, die nur zur Energie E_C gehören, und der Besetzungswahrscheinlichkeit $f(E_C)$ darstellbar ist, $n_0 = N_C \cdot f(E_C)$. Liegt E_F neben kT unterhalb E_C , so lässt sich $f(E_C)$ vereinfachen:

$$f(E_C) = \left[1 + e^{\frac{E_C - E_F}{kT}} \right]^{-1} \approx e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}$$



- (a) intrinsischer Halbleiter
- (b) n-leitendes Material
- (c) p-leitendes Material

Abbildung 3.14: Schematisches Banddiagramm, Zustandsdichteverteilung, Fermi-Dirac-Verteilung und Ladungsträgerkonzentration für verschiedene Halbleitermaterialien im thermischen Gleichgewicht

Da kT bei Raumtemperatur nur $0,026eV$ ist, kann dies allgemein als gute Näherung gelten. Es folgt dann $n_0 \approx N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}$, wobei $N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$; h = Plancksche Konstante. Mit ähnlichen Argumenten gilt für die Löcherkonzentration im Valenzband $p_0 N_V [1 - f(E_V)]$. Hier ist N_V die effektive Zustandsdichte an der Valenzbandkante, es gilt

$$1 - f(E_V) = 1 - \left[1 + e^{\frac{E_V - E_F}{kT}} \right]^{-1} \approx e^{-\frac{E_V - E_F}{kT}} .$$

Die Fermi-Energie E_F ist dabei um einige kT größer als E_V . Die Löcherkonzentration im Valenzband ist

$$p_0 = N_V e^{-\frac{E_V - E_F}{kT}} \quad \text{mit} \quad N_V = 2 \left[\frac{2\pi \cdot m_p^* \cdot k \cdot T}{h^2} \right]^{3/2} .$$

Die Gleichung für n_0 und p_0 sind gültig, ob das Material intrinsisch oder dotiert ist, vorausgesetzt es herrscht thermodynamisches Gleichgewicht. Für intrinsisches Material liegt $E_F = E_i$ nahe der Bandmitte. Elektronen- und Löcherkonzentrationen sind $n_i = N_C \cdot e^{-\frac{E_C - E_i}{kT}}$ und $p_i = N_V \cdot e^{-\frac{E_i - E_V}{kT}}$.

Das Produkt aus n_0 und p_0 ist materialspezifisch konstant, unabhängig von der Dotierung,

$$n_0 \cdot p_0 = N_C \cdot e^{-\frac{E_C - E_F}{k \cdot T}} \cdot N_V \cdot e^{-\frac{E_F - E_V}{k \cdot T}} = N_C \cdot N_V \cdot e^{-\frac{E_C - E_V}{k \cdot T}} = N_C \cdot N_V \cdot e^{-\frac{E_g}{k \cdot T}} = n_i \cdot p_i$$

Da im intrinsischen Fall $n_i = p_i$ gilt, folgt für die intrinsische Ladungsträgerkonzentration $n_i = \sqrt{N_C \cdot N_V e^{-\frac{E_g}{2k \cdot T}}}$ und $n_0 \cdot p_0 = n_i^2$. Bei Raumtemperatur gilt für Silicium $n_i \approx 1,5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$.

Wäre $N_C = N_V$ so läge das intrinsische Niveau E_i in der Mitte des verbotenen Bandes, $E_C - E_i = \frac{E_g}{2}$.

Da aber die effektiven Massen nicht gleich sind, ist E_i leicht aus der Bandmitte verschoben. Eine andere Darstellung ist abgeleitet von der obigen Formel, $n_0 = n_i \cdot e^{\frac{E_F - E_i}{k \cdot T}}$ bzw. $p_0 = n_i \cdot e^{-\frac{E_i - E_F}{k \cdot T}}$.

3.3.3 Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerkonzentrationen

Die Temperaturabhängigkeit von n_0 und p_0 ist durch die von n_i und E_F , sowie die direkte Temperaturabhängigkeit im Nenner des Exponentialterms gegeben. Für die intrinsische Ladungsträgerkonzentration n_i gilt

$$n_i(T) = 2 \left(\frac{2\pi kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_n^* m_p^*)^{\frac{3}{4}} \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}}$$

Der Exponentialterm dominiert die Temperaturabhängigkeit von n_i . In [Abbildung 3.15](#) ist n_i als Funktion der inversen Temperatur für verschiedene Halbleiter dargestellt, wobei die $T^{\frac{3}{2}}$ -Abhängigkeit der Zustandsdichte vernachlässigt wurde.

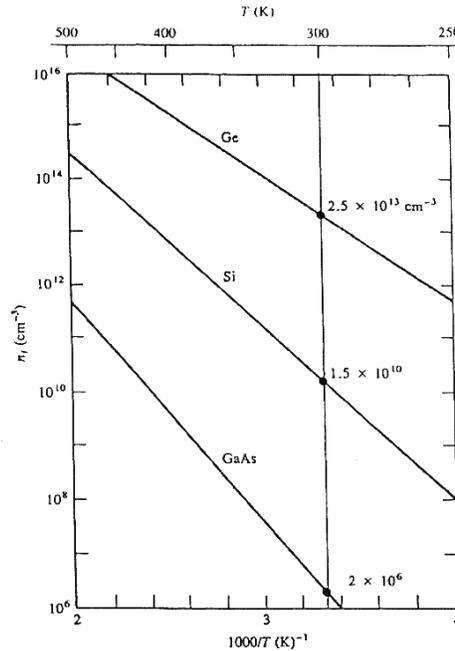


Abbildung 3.15: Intrinsische Ladungsträgerkonzentration als Funktion der inversen Temperatur für Ge, Si und GaAs

Die intrinsische Ladungsträgerkonzentration n_i ist für die meisten Materialien bekannt. Sind n_i und T gegeben, so sind E_F , n_0 , p_0 die Unbekannten. Eine dieser Größen muss gegeben sein, wenn die anderen gefunden werden sollen. **Abbildung 3.16** zeigt die Ladungsträgerkonzentration in einer Arrheniusdarstellung. Silicium ist hier dotiert mit $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

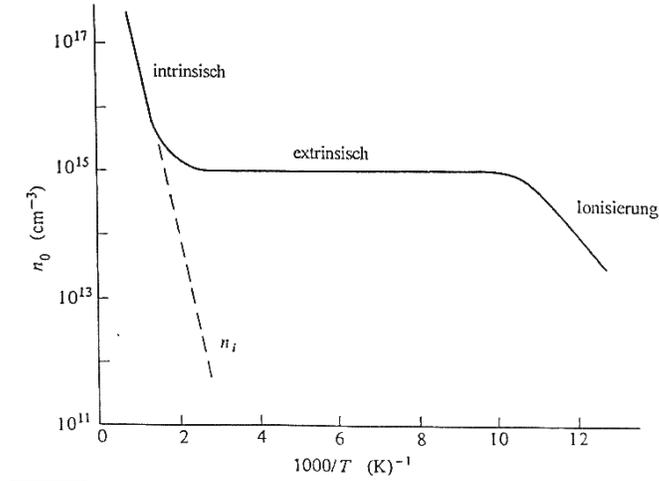


Abbildung 3.16: Ladungsträgerkonzentration über der inversen Temperatur für Silicium, dotiert mit $10^{15} \text{ Donatoren} \cdot \text{cm}^{-3}$

Bei sehr niedrigen Temperaturen (großes $\frac{1}{T}$) ist die Dichte der Elektronen-Loch-Paare vernachlässigbar klein. Die Donatoren sind neutral. Bei Temperaturanstieg werden die Elektronen an das Leitungsband abgegeben; bei 100K sind alle Donatoren ionisiert. Dieser Temperaturbereich heißt Ionisationsbereich. Sind alle Donatoren ionisiert, so gilt für die Elektronendichte im Leitungsband, $n_0 \approx N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, und n_0 ist solange konstant bis die intrinsische Ladungsträgerkonzentration die Größenordnung von N_D erreicht. Bei weiter steigenden Temperaturen dominiert schließlich n_i wegen der starken thermischen Generation von Elektronen-Loch-Paaren.

3.3.4 Kompensation und Raumladungsneutralität

Bisher wurde davon ausgegangen, dass nur N_A Akzeptoren oder N_D Donatoren im Kristall sind; d.h. dass $p_0 \approx N_A$ bzw. $n_0 \approx N_D$ ist. In praktischen Fällen enthält ein Halbleiter oft beide Typen, z.B. mit $N_D > N_A$. Dann liegt das Fermi-niveau in der oberen Bandhälfte und damit sind alle Akzeptorniveaus mit Elektronen gefüllt. Die Löcherkonzentration ist hier aber nicht durch N_A bestimmt, da diese in den Akzeptoren sitzenden Elektronen direkt zu lasten der Donatoren gehen. Es tritt eine Teilkompensation ein und die Elektronendichte ist $N_D - N_A$ anstatt N_D .

Raumladungsneutralität bedeutet, dass der Halbleiter elektrostatisch neutral bleibt, d.h. die Summe der positiven Ladungen ist gleich der Summe der negative Ladungen. $p_0 + N_D^+ = n_0 + N_A^-$. Da der intrinsische Halbleiter elektrisch neutral ist, wie auch die zugefügten Dotieratome, gilt diese Beziehung stets im thermodynamischen Gleichgewicht.

3.4 Drift von Ladungsträgern in elektrischen und magnetischen Feldern

3.4.1 Leitfähigkeit und Beweglichkeit, Ohmsches Gesetz

In einem Festkörper sind die Ladungsträger in inherenter Bewegung, auch im Falle der thermodynamischen Gleichgewichts. Die thermische Bewegung eines Elektrons kann als zufälligen durch Streuung an Gitteratomen, Verunreinigungen und anderen Elektronen geprägter Weg betrachtet werden, so dass bei einer Gruppe von Elektronen im zeitlichen Mittel die Nettobewegung Null ist.

Es gibt keine bevorzugte Richtung!

Stationärer Stromfluss:

Wird nun ein elektrisches Feld in x -Richtung angelegt, so erfährt jedes Elektron eine Kraft $-q \cdot E_x$ durch das Feld. Auch wenn diese Kraft nicht ausreichen sollte, die Zufallsbewegung eines einzelnen Elektrons wesentlich zu ändern, so ist die Wirkung gemittelt über alle Elektronen n , so dass diese Gruppe eine Nettobewegung in die $-x$ -Richtung aufweist. Sei p_x die x -Komponente des Gesamtimpulses der Gruppe, dann ist die elektrische Feldkraft auf die n -Elektronen pro Volumenelement:

$$-n \cdot q \cdot E_x = \frac{dp_x}{dt} \Big|_{Feld}$$

Diese Gleichung vermittelt den Eindruck, als ob die Elektronen kontinuierlich beschleunigt werden würden. Dies ist aber nicht der Fall, da durch Stoßprozesse hauptsächlich mit Gitteratomen eine Abbremsung erfolgt. Ein stationäres elektrisches Feld ($\dot{E}_x = 0$) verursacht einen Nettoimpuls p_x (für den Fall eines stationären Stromflusses). Die Nettoänderung des Impulses ist aber Null, wenn die Stöße mitbetrachtet werden. Wird nun angenommen, dass die Stöße rein zufällig sind, dann besteht für jedes Elektron eine konstante Stoßwahrscheinlichkeit zu jeder Zeit. Betrachtet man eine Gruppe von N_0 Elektronen zur Zeit $t = 0$ und definiert $N(t)$ als die Zahl der Elektronen, die zur Zeit t noch keinen Stoß erlitten haben, dann ist die Zahl dN der Elektronen, die im Zeitintervall dt einen Stoß erleiden proportional zu $N(t)$. D.h.:

$$dN = -\frac{1}{\bar{\tau}} \cdot N(t) dt$$

, wobei $\bar{\tau}^{-1}$ ein Proportionalitätsfaktor ist. Die Lösung dieser DGL lautet :

$$N(t) = N_0 \cdot e^{-\frac{t}{\bar{\tau}}}$$

mit $\bar{\tau}$ als der mittleren freien Zeit zwischen zwei Stößen. Die Wahrscheinlichkeit, dass eine beliebiges Elektron einen Stoß im Zeitintervall dt erfährt, ist $\frac{dt}{\bar{\tau}}$. Daher ist die differentielle Änderung des Gruppenimpulses p_x aufgrund von Stößen im Zeitintervall dt :

$$dp_x = -p_x \cdot \frac{dt}{\bar{\tau}} \quad \text{bzw.} \quad \frac{p_x}{dt} = -\frac{p_x}{\bar{\tau}}$$

Die Summe von Impulszunahme und -abnahme der Gruppe von Elektronen im (statischen Fall) stationären Zustand ist Null, daher folgt:

$$-\frac{p_x}{\bar{\tau}} - n \cdot q \cdot E_x = 0$$

Der gemittelte Impuls $\langle p_x \rangle = \frac{p_x}{n} = -q \cdot \bar{\tau} \cdot E_x$ ist der über die gesamte Gruppe gemittelter Impuls. Jedes Elektron hat im stationären Fall im zeitlichen Mittel eine konstante mittlere Geschwindigkeit in x -Richtung.

$$\langle v_x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m_n^*} = -\frac{q \cdot \bar{\tau}}{m_n^*} \cdot E_x$$

Obwohl sich das Elektron thermisch in diese Richtung bewegt, hat es eine Nettodrift in x -Richtung. Für die elektrische Stromdichte, die aus diesem Drift im Feld resultiert, gilt:

$$j_x = -q \cdot n \cdot \langle v_x \rangle$$

Das ohmsche Gesetz:

Die Stromdichte j ist das Produkt aus Ladung $-q$ und der Zahl der Elektronen, die Einheitsfläche pro Zeiteinheit überqueren. Damit folgt das ohmsche Gesetz:

$$j_x = \frac{n^2 \cdot q^2 \cdot \bar{\tau}}{m_n^*} \cdot E_x \quad \text{bzw.} \quad j_x = \sigma \cdot E_x \quad \text{mit} \quad \sigma = \frac{n^2 \cdot q^2 \cdot \bar{\tau}}{m_n^*}$$

Die Leitfähigkeit σ ist $\sigma = n \cdot q \cdot \mu_n$ mit $\mu_n = \frac{q \cdot \bar{\tau}}{m_n^*}$ der Elektronenbeweglichkeit. Die Beweglichkeit ist somit ein Proportionalitätsfaktor zwischen der mittleren Driftgeschwindigkeit der Elektronen und dem elektrischen Feld dar, d.h.:

$$\mu_n = -\frac{\langle v_x \rangle}{E_x} \quad [\mu_n] = \frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}}$$

Die Stromdichte lässt sich damit auch schreiben als

$$j_x = q \cdot n \cdot \mu_n \cdot E_x$$

Diese Ableitung wurde für Elektronen ausgeführt, für die Löcherleitung ersetzt man n durch p , $-q$ durch $+q$, μ_n durch μ_p wobei gilt:

$$\mu_p = +\frac{\langle v_x \rangle}{E_x}$$

Als Summe für die gesamte Stromdichte in x -Richtung folgt:

$$j_x = q \cdot (n \cdot \mu_n + p \cdot \mu_p) \cdot E_x = \sigma \cdot E_x$$

3.4.2 Einfluss von Temperatur und Dotierung auf die Beweglichkeit

Zwei grundlegende Streumechanismen beeinflussen die Elektronen- und Löcherbeweglichkeit:

- Gitterstreuung
- Streuung an Verunreinigungen

In Abhängigkeit von der Temperatur haben diese Streumechanismen einen unterschiedlichen Einfluss auf die Beweglichkeit. In der [Abbildung 3.17](#) ist dies schematisch dargestellt.

Bei der Gitterstreuung spürt ein Ladungsträger, der sich durch das Gitter bewegt, die Atome, die auf Grund ihrer thermischen Schwingungen aus ihrer normalen Gitterposition ausgelenkt sind. Die Häufigkeit solcher Streuprozesse wächst mit der Gittertemperatur. Daher sinkt durch diesen Effekt die Beweglichkeit mit steigender Temperatur (rechter Kurventeil von [Abbildung 3.17](#)). Andererseits dominiert die Streuung durch Gitterdefekte, wie ionisierte Dotieratome, bei niedrigen Temperaturen. Bei tiefen Gittertemperaturen, ist das Gitter wenig angeregt, die Gitterstreuung damit unbedeutender, allerdings ist auch die thermische Bewegung der Ladungsträger langsamer. Ein sich langsam bewegendes Ladungsträger erfährt eine stärkere Wechselwirkung mit einem geladenen Ion als ein Ladungsträger mit hohem Impuls. Die Streuung an Verunreinigungen senken daher die Beweglichkeit mit abnehmender Temperatur (linker Kurventeil [Abbildung 3.17](#)). Die Temperaturabhängigkeit für die Gitterstreuung ist $T^{-\frac{3}{2}}$, und jene für die Streuung an Störstellen ist $T^{+\frac{3}{2}}$. Die Streuwahrscheinlichkeit durch $\frac{dt}{d\bar{\tau}}$ gegeben ist, und die Beweglichkeit μ proportional zu $\bar{\tau}$ ist, addieren sich die Reziprokwerte der Beweglichkeiten, die durch die jeweiligen Streumechanismen bedingt sind:

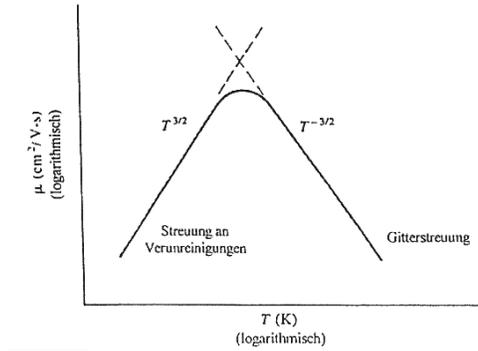


Abbildung 3.17: Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit (ungefährer Verlauf) mit Einfluss der Streuung an Verunreinigungen und am Gitter

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2}$$

Folglich dominiert der Mechanismus, der niedrigere Beweglichkeit verursacht. Außer von der Temperatur ist die Beweglichkeit auch von der Dotierstoffkonzentration abhängig (Abbildung 3.18) für verschiedene Halbleiter-Materialien dargestellt. Eine Zunahme der Verunreinigung, bewirkt ein Sinken der Beweglichkeit.

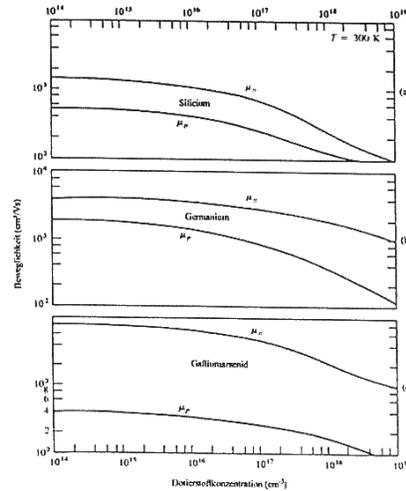


Abbildung 3.18: Einfluss der totalen Dotierstoffkonzentration (N_a und N_d) auf die Beweglichkeit der Elektronen und Löcher für Si, Ge und GaAs bei 300K

3.4.3 Hochfeldeffekte

In der Ableitung des ohmschen Gesetzes für Halbleiter wurde angenommen, dass bei konstanter Leitfähigkeit σ die Driftgeschwindigkeit proportional zum elektrischen Feld ist. Diese Annahme gilt für weitere Bereiche der Feldstärke E . Für $E > 10^3 \frac{V}{cm}$ kann die Driftgeschwindigkeit **schwächer** als linear von E abhängen, siehe [Abbildung 3.19](#).

Diese Abhängigkeit von σ von E ist ein Beispiel eines *hot-carrier-Effektes* (heißer Ladungsträger-Effekt), d.h. wobei die Driftgeschwindigkeit V_D , den Bereich der thermischen Geschwindigkeit

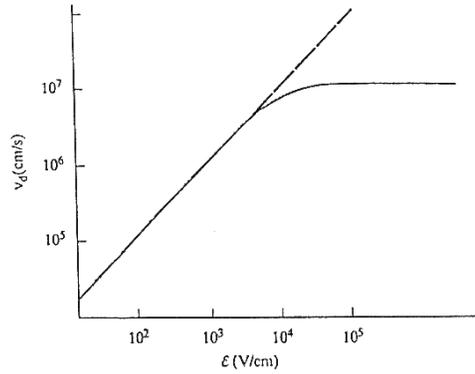


Abbildung 3.19: Sättigung der Elektronendriftgeschwindigkeit in Silicium bei hohen elektrischen Feldstärken

($10^7 \frac{cm}{s}$) erreicht. Dies ist der Punkt, wo zusätzliche Energie nur Teilweise zur Erhöhung der Geschwindigkeit führt, zum anderen Teil aber dem Gitter zugeführt wird. Die Geschwindigkeit ist dann durch Streuprozesse begrenzt.

3.4.4 Hall-Effekt

Wird ein magnetisches Feld senkrecht zur Bewegung eines Loches in einem elektrischen Feld an einem *p*-Halbleiter angelegt, so wird das Loch abgelenkt. In *Abbildung 3.20* ist eine schematische Darstellung dafür angegeben.

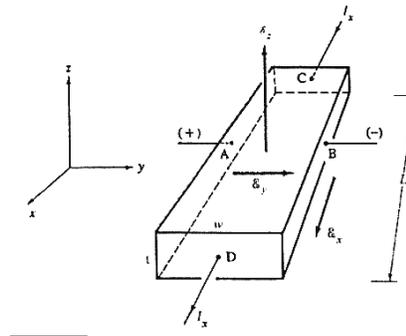


Abbildung 3.20: Schema zum Hall-Effekt

Infolge der Überlagerung von elektrischem und magnetischem Feld wirkt auf das Loch eine Kraft von $\underline{F} = q \cdot (\underline{E} + \underline{v} \times \underline{b})$. In *y*-Richtung ist die Kraft $F_y = q \cdot (E_y - v_x \cdot B_z)$. Das wichtige Ergebnis ist, dass das Loch eine Beschleunigung in die $(-y)$ -Richtung erfährt, falls nicht eine zusätzliche Feldkomponente E_y existiert. Um nun ein stationären Löcherfluss über die Länge des Halbleiterstreifens aufrecht zu erhalten, muss E_y das Produkt $-v_x \cdot B_z$ kompensieren, $E_y = v_x \cdot B_z$, so dass $F_y = 0$ ist. Physikalisch bildet sich das elektrische Feld E_y dadurch aus, dass das magnetische Feld die Löcherverteilung leicht in die $(-y)$ -Richtung verschiebt. Wenn E_y so groß wie $v_x \cdot B_z$ ist, ist die laterale Kraft $F_y = 0$. Dieser Effekt heißt *Hall-Effekt* und die resultierende Spannung $U_{AB} = E_y \cdot w$ heißt *Hall-Spannung*. Mit

$$J_x = q \cdot p_0 \cdot \langle v_x \rangle \quad \text{gilt:} \quad E_y = \frac{j_x}{q \cdot p_0} \cdot B_z = R_H \cdot j_x \cdot B_z$$

mit $R_H = \frac{1}{q \cdot p_0}$ *Hall-Koeffizient*.

Die Messung der Hall-Spannung für eine bekannte Stromdichte und ein bekanntes Magnetfeld ergibt einen Wert für die Löcherkonzentration p_0 .

$$p_0 = \frac{1}{q \cdot R_H} = \frac{j_x \cdot B_z}{q \cdot E_y} = \frac{\frac{I_x}{w \cdot t} \cdot B_z}{q \cdot \frac{U_{AB}}{w}} = \frac{I_x \cdot B_z}{q \cdot t \cdot U_{AB}}$$

Da alle Größen auf der rechten Seite der Gleichung gemessen werden können, lässt sich der Wert für die Ladungsträgerkonzentration bestimmen. Weiterhin lassen sich nach erfolgter Messung ermitteln:

$$\varrho = \frac{R \cdot w \cdot t}{L} = \frac{U_{CD} \cdot I_x^{-1} \cdot w \cdot t}{L} \quad \sigma = \frac{1}{\varrho} = q \cdot \mu_p p_0$$

$$\mu_p = \frac{\sigma}{q \cdot p_0} = \frac{\frac{1}{\varrho}}{q \cdot \frac{1}{q \cdot R_H}} = \frac{R_H}{\varrho}$$

Die Größe μ_p heißt *Hall-Beweglichkeit*. Sie kann leicht von der Ladungsträgerbeweglichkeit ohne magnetische Felder abweichen. Die Ableitung lässt sich analog für Elektronen durchführen, wobei q durch $-q$ zu ersetzen ist und das Vorzeichen des *Hall-Koeffizienten* gibt Auskunft, ob die Probe vom p -Typ oder n -Typ ist. Messungen auf der Grundlage des *Hall-Effektes* stellen somit ein wichtiges Mittel zur Charakterisierung von Halbleitern dar.