



**Physik der
Kondensierten Materie 2**

Rudolf Gross

SS 2021

Teil 3

Vorlesungsstunde: 13.04.2021-1

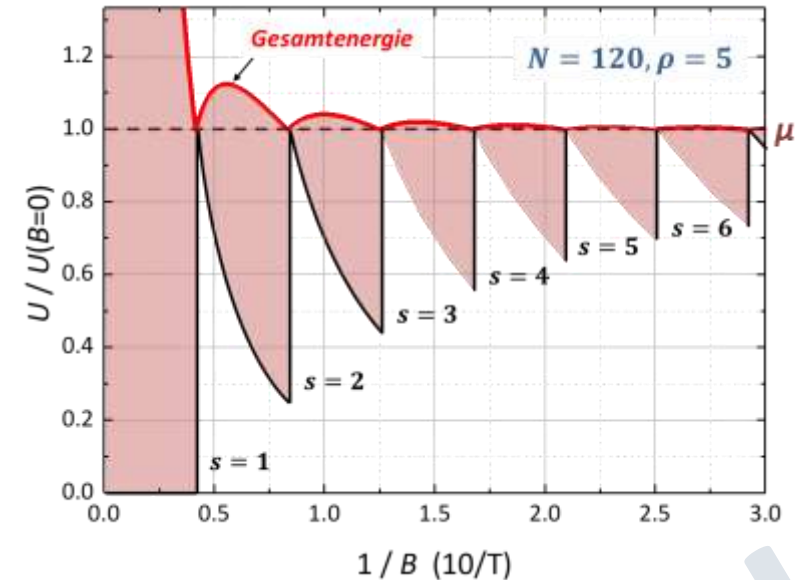
- experimentelle Bestimmung der Fermi-Flächen mit Bahnquantisierungseffekten

(i) **de Haas – van Alphen – Effekt: Oszillation von $M(B)$**

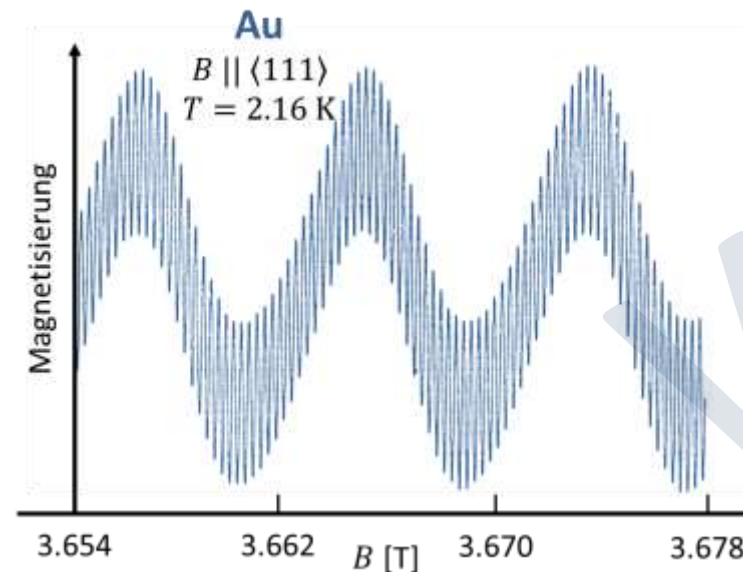
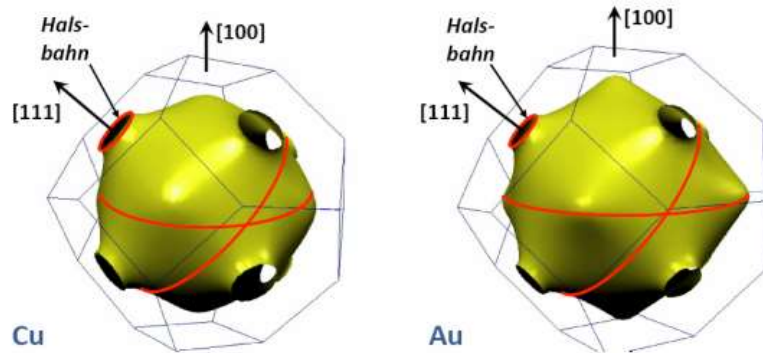
$$M = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right)_{T,V} \approx -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial U}{\partial B} \right)_{T,V} \quad F = U - TS \approx U \text{ bei tiefen } T$$

$$U = \hbar\omega_c \left[N \left(s + \frac{1}{2} \right) - p \frac{s^2}{2} - p \frac{s}{2} \right] \quad \text{mit Entartung } p = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \cdot \frac{2\pi q B}{\hbar}$$

$$\Delta = \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi q}{\hbar S} \quad \text{Oszillationsperiode } \Delta \text{ liefert Größe der Extremalfläche } S \perp B$$



Extremalbahnen



(ii) **Shubnikov - de Haas - Effekt:**

Oszillation von R als Funktion von B

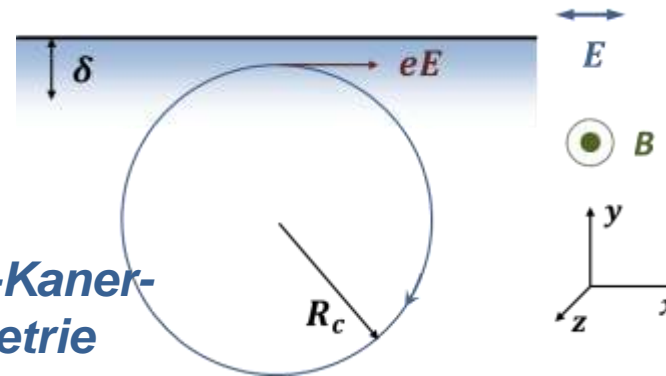
(iii) **Zyklotronresonanz:**

resonante Mikrowellenabsorption bei

$$\omega = n \cdot \omega_c = n \cdot \frac{eB}{m_c}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\rightarrow \text{Zyklotronmasse } m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S(k_{\perp})}{\partial \epsilon}$$

**Azbel-Kaner-
Geometrie**



• **Klassifizierung von Halbleitern**

- intrinsisch ↔ dotiert, kristallin ↔ amorph, direkt ↔ indirekt,
- Element-HL, Verbindungs-HL (binär, ternär, ...), organische HL
- oxidische HL, Schicht-HL, magnetische HL, ...

WMI

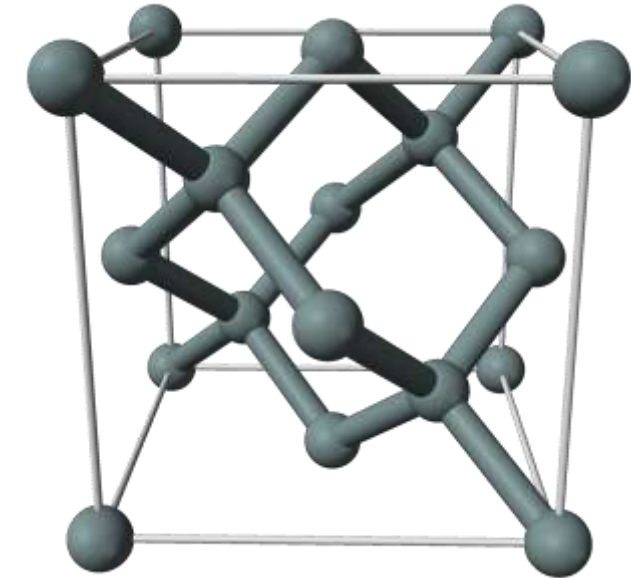
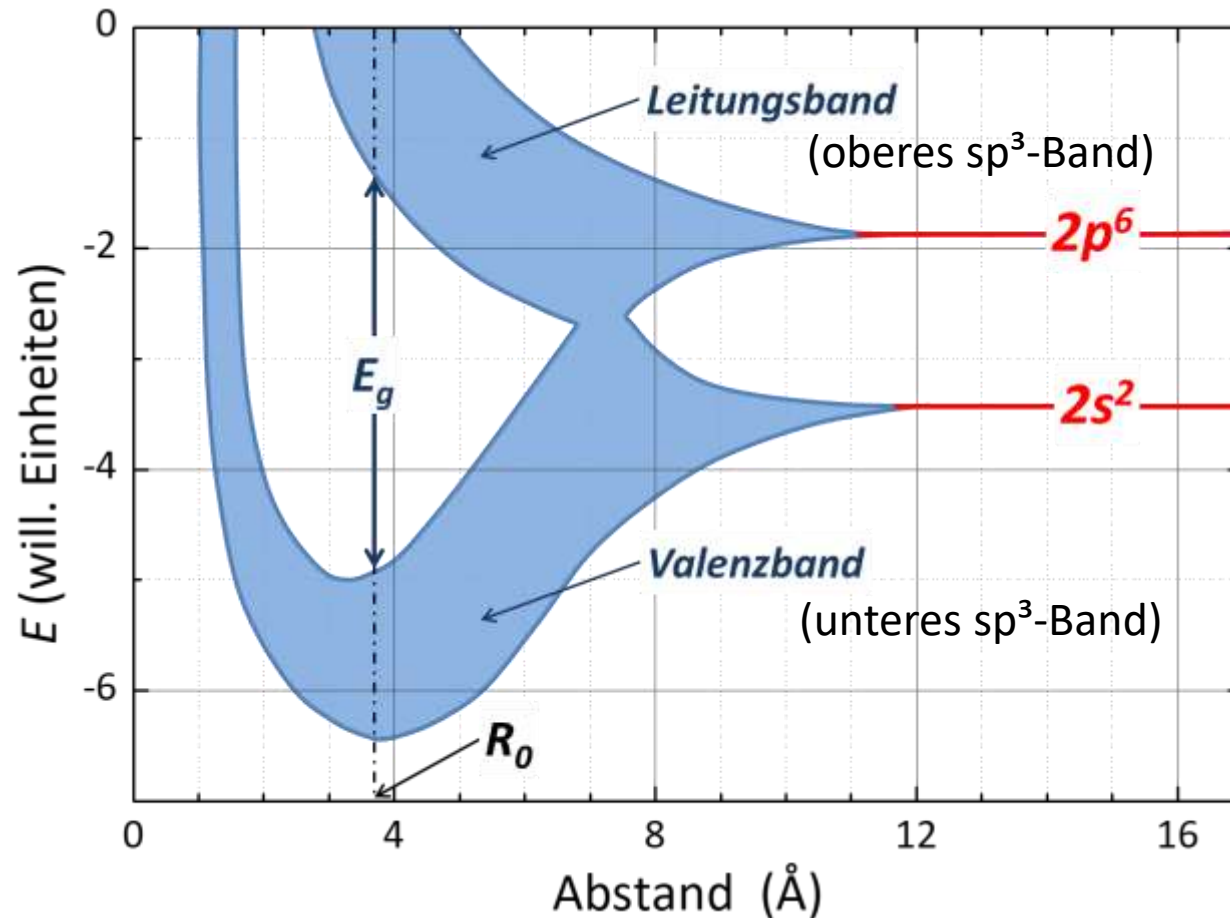
Kapitel 10

Halbleiter

WZM

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- **Bandstruktur von Halbleitern – direkte und indirekte Halbleiter**
 - viele HL besitzen Diamantstruktur (Si, Ge) oder Zinkblendestruktur (GaAs)
 - die vier s- und p-Elektronen (z.B. Si: $3s^2 3p^2$) der äußeren Schalen bilden ***sp³-Hybridorbitale*** → tetraedrische Koordination



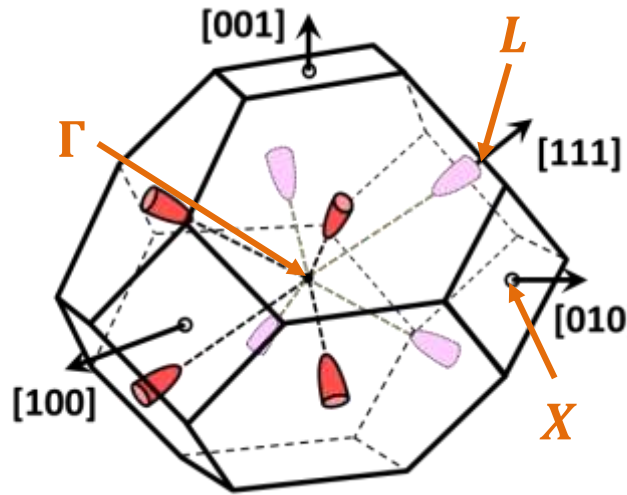
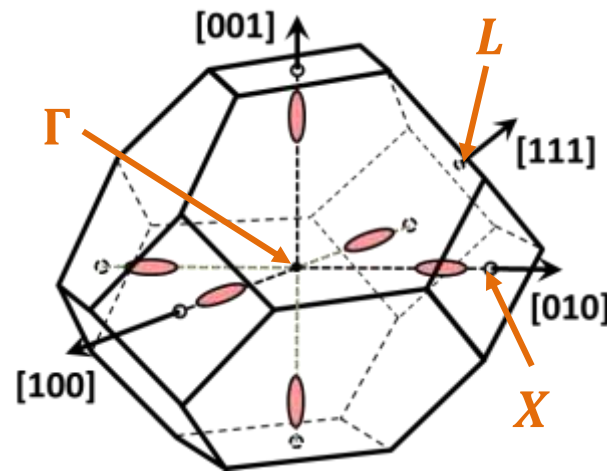
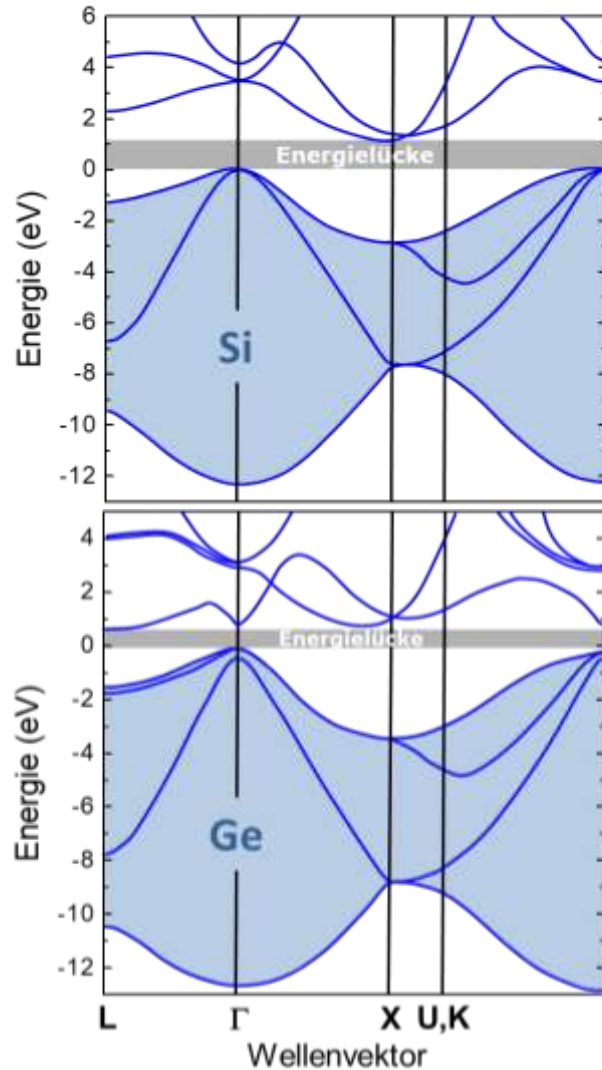
Diamantstruktur

- im Gleichgewichtsabstand sind das untere und obere sp^3 -Band durch die Energielücke E_g getrennt
- bei $T = 0$: unteres Band vollkommen gefüllt, oberes Band vollkommen leer

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- Bandstruktur von Germanium und Silizium

fcc-Struktur → reziprokes Gitter hat bcc-Struktur
 → 1. BZ ist abgestumpfter Oktaeder



Silizium:

- Maximum von VB: **Γ-Punkt**
- Minimum von LB bei 0.8-fachen Abstand zum **X-Punkt**
 → **indirekter Halbleiter**
- kleinste Lücke **$E_g = 1.17 \text{ eV}$**
- insgesamt 6 entartete Minima des LB

Germanium:

- Maximum von VB: **Γ-Punkt**
- Minimum von LB: **L-Punkt**
 → **indirekter Halbleiter**
- kleinste Lücke **$E_g = 0.75 \text{ eV}$**
- insgesamt 8 entartete Minima des LB (zählen nur halb, da nur die Hälfte der Rotationsellipsoiden in 1. BZ liegt)

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

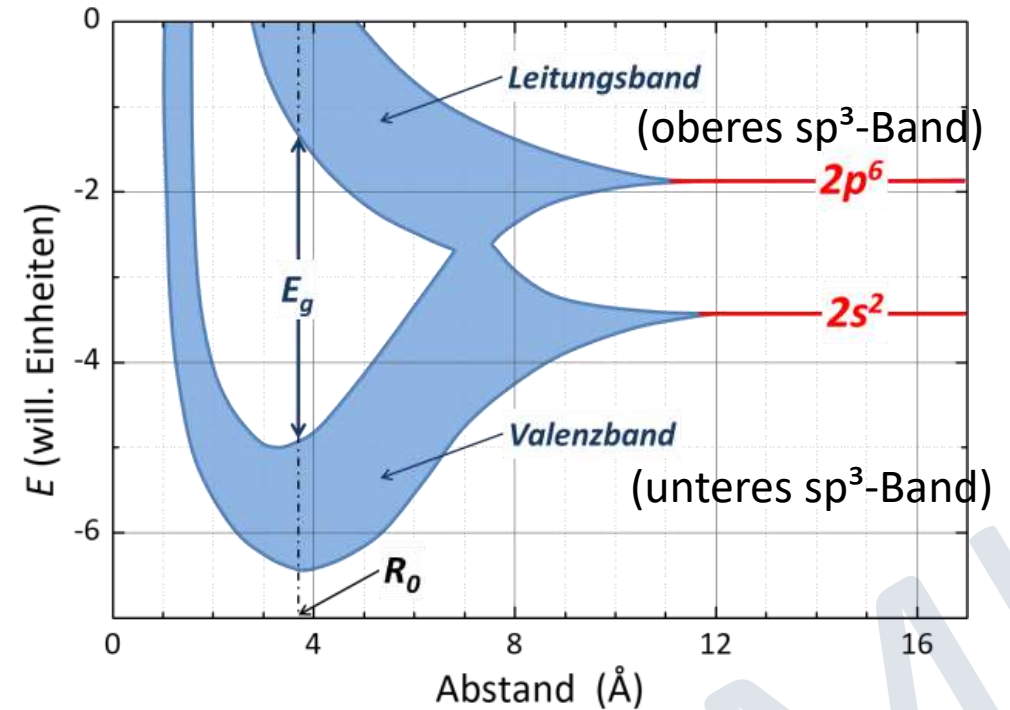
- Temperaturabhängigkeit der Energielücke

Ursachen:

- thermische Ausdehnung:
 - Gitterkonstante wird größer mit steigendem T
 - E_g nimmt ab mit steigendem T
- Phononenverteilung ändert sich:
 - E_g nimmt ab mit steigendem T

Phänomenologische Beschreibung mit Varshni-Formal:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{aT^2}{T + b}$$

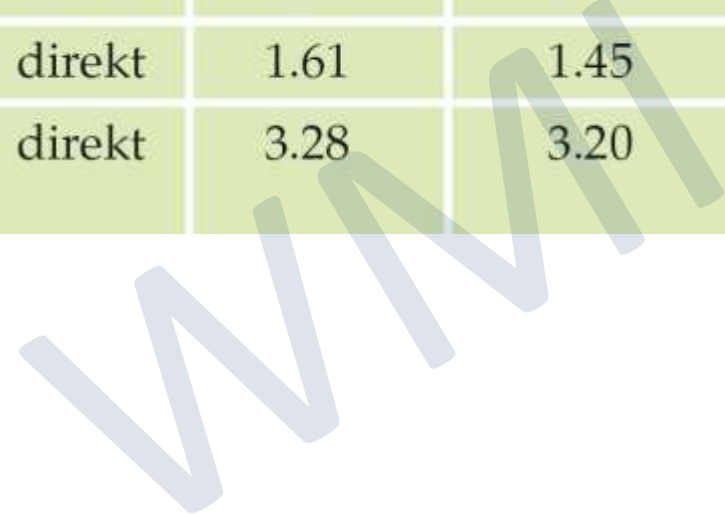


Halbleiter	$E_g(0)$ [eV]	$E_g(300\text{ K})$ [eV]	a [eV/K]	b [K]
Si	1.17	1.12	4.73×10^{-4}	636
Ge	0.742	0.661	4.774×10^{-4}	235
GaAs	1.519	1.424	5.405×10^{-4}	204

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

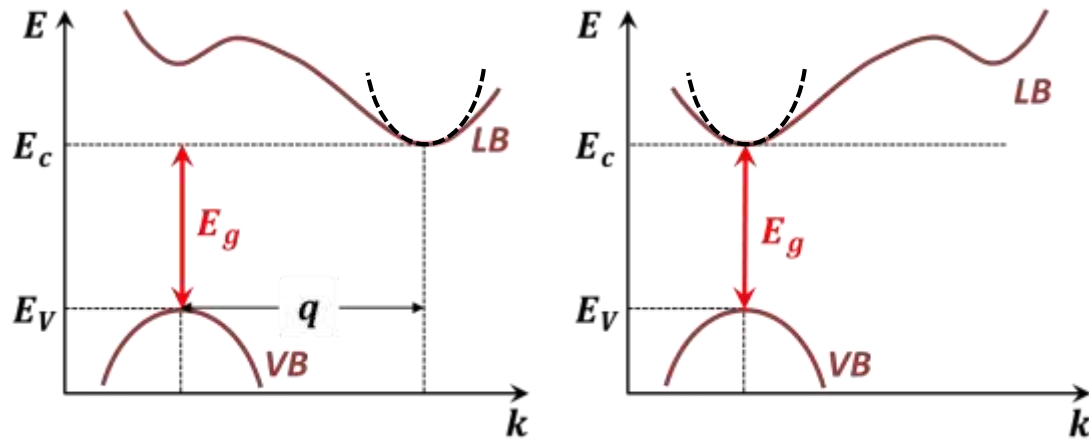
- Bandlücken einiger wichtigen Halbleiter

Halbleiter	Typ	E_g (0 K)	E_g (300 K)	Halbleiter	Typ	E_g (0 K)	E_g (300 K)
Si	indir.	1.17	1.12	GaP	indir.	2.32	2.26
Ge	indir.	0.742	0.661	InP	direkt	1.421	1.344
GaAs	direkt	1.519	1.424	ZnO	direkt	3.44	3.2
InSb	direkt	0.24	0.17	ZnS	–	3.91	3.6
InAs	direkt	0.415	0.354	CdS	direkt	2.58	2.42
AlSb	indir.	1.65	1.58	CdTe	direkt	1.61	1.45
GaN (Wur- zit)	indir.	3.47	3.39	GaN (ZnS)	direkt	3.28	3.20



10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- Parabolische Bandnäherung und effektive Bandmasse



Parabolische Bandnäherung:

- Bandverlauf an Oberkante von VB (E_V) und Unterkante von LB (E_C) kann gut durch Parabel angenähert werden
- Bandkrümmung wird durch Tensor der effektiven Bandmasse beschrieben:

$$E(k) \approx \frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} k_i \left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} k_j$$

Leitungsbandminimum:

$$E(k) = E_C + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} k_i \left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} k_j$$

Valenzbandmaximum:

$$E(k) = E_V + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} k_i \left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} k_j$$

in diagonalen



Form

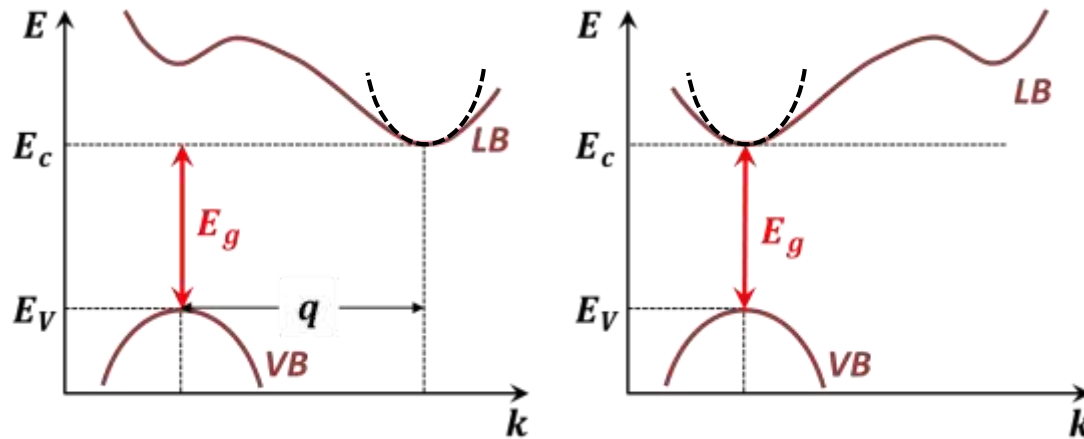
$$E(k) = E_C + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{2m_{1,LB}} + \frac{k_2^2}{2m_{2,LB}} + \frac{k_3^2}{2m_{3,LB}} \right)$$

$$E(k) = E_V + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{2m_{1,VB}} + \frac{k_2^2}{2m_{2,VB}} + \frac{k_3^2}{2m_{3,VB}} \right)$$

- Flächen konstanter Energie sind Ellipsoide
- bestimmt durch Angabe von drei Hauptachsen, drei effektiven Massen, Position in k -Raum

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- Parabolische Bandnäherung und effektive Bandmasse



Leitungsbandminimum:

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{2m_{1,LB}} + \frac{k_2^2}{2m_{2,LB}} + \frac{k_3^2}{2m_{3,LB}} \right)$$

- nach oben gekrümmte Parabel → LT mit positiver effektiver Masse
- Elektronen im LB mit positiven effektiven Massen m_{e1}, m_{e2}, m_{e3}

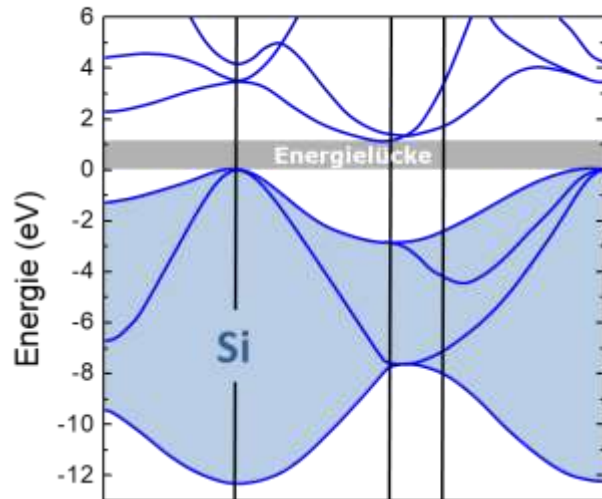
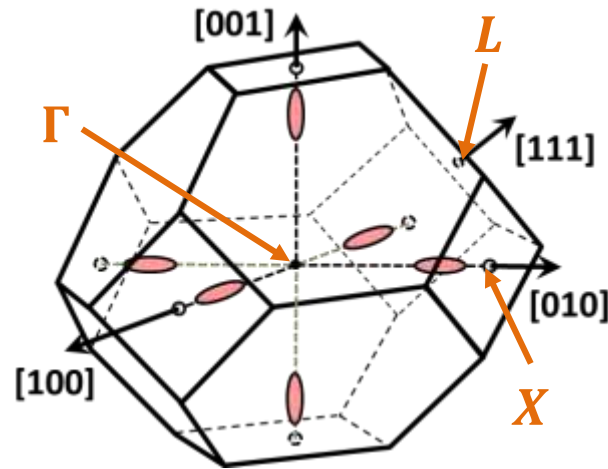
Valenzbandmaximum:

$$E(k) = E_v + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{2m_{1,VB}} + \frac{k_2^2}{2m_{2,VB}} + \frac{k_3^2}{2m_{3,VB}} \right)$$

- nach unten gekrümmte Parabel → LT mit negativer effektiver Masse
- mit $m_h^* = -m_e^*$ und $E_h(k) = -E_e(k)$
 - Löcher im VB mit positiven effektiven Massen m_{h1}, m_{h2}, m_{h3}
 - Energie der Löcher nimmt mit Abstand von Valenzbandoberkante zu („Seifenblasen, die unter Wasserfläche gedrückt werden“)

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- effektive Bandmasse



Silizium:

- Leitungsband:**

- LB hat sechs Minima entlang der {100}-Richtungen
- $E = const.$ Ellipsoide müssen rotationssymmetrisch sein bez. Rotation um Würfelachsen
 - **zigarrenförmige Ellipsoide**, gestreckt in Richtung der Würfelachsen
 - **zwei effektive Massen:**

longitudinale effektive Masse $m_{el}^* \approx 0.98 m_e$ (entlang Achse)
 transversale effektive Masse $m_{et}^* \approx 0.19 m_e$ (senkrecht Achse)

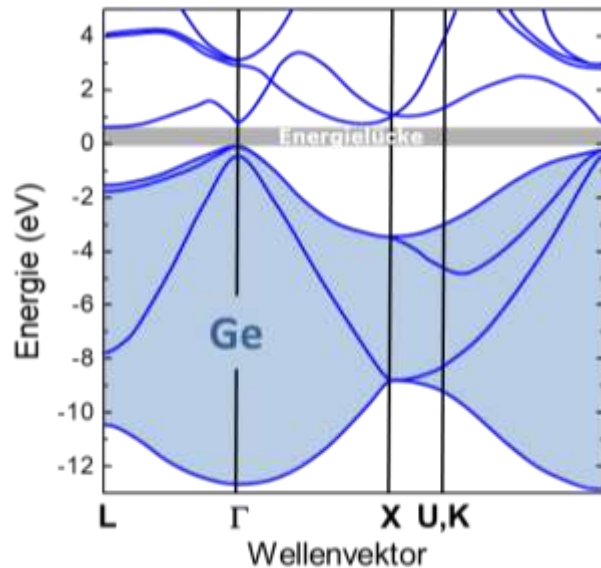
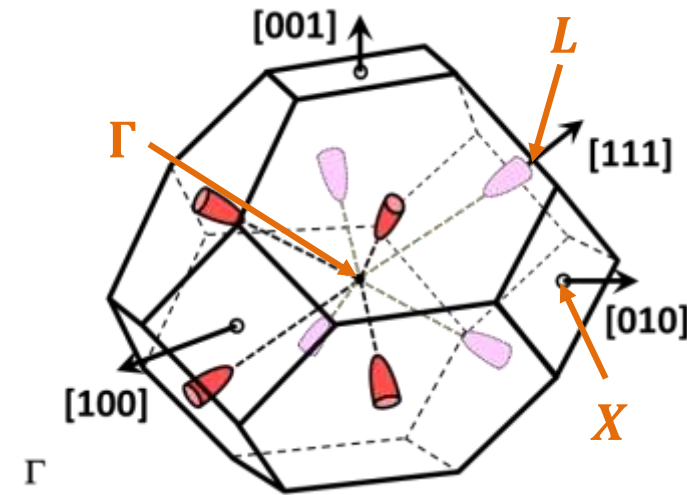
- Valenzband:**

- zwei entartete Valenzbänder bei $k = 0$ (Γ -Punkt)
- $E = const.$ Flächen sind kugelsymmetrisch
 - **Kugeln um Γ -Punkt**
 - jeweils **eine effektive Masse** für jedes Band

light holes: $m_{lh}^* \approx 0.16 m_e$
 heavy holes: $m_{hh}^* \approx 0.49 m_e$

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- effektive Bandmasse



Germanium

- Leitungsband:**

- LB hat acht (halbe) Minima entlang der {111}-Richtungen
- $E = const.$ Ellipsoide müssen rotationssymmetrisch sein bez. Rotation um Würfeldiagonalen
 - **zigarrenförmige Ellipsoide**, gestreckt in Richtung der Würfeldiagonalen
 - **zwei effektive Massen:**

longitudinale effektive Masse $m_{el}^* \approx 1.59 m_e$ (entlang Achse)
 transversale effektive Masse $m_{et}^* \approx 0.081 m_e$ (senkrecht Achse)

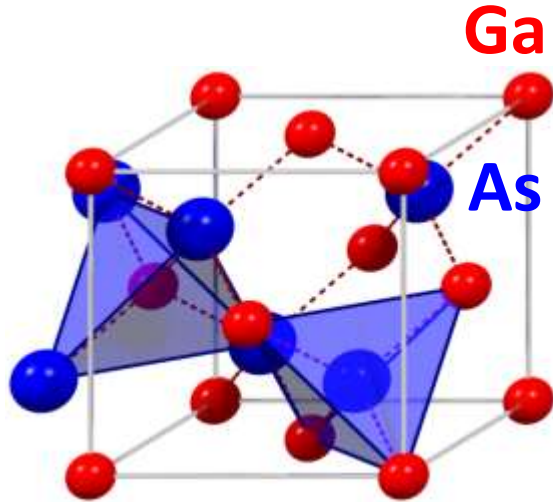
- Valenzband:**

- zwei entartete Valenzbänder bei $k = 0$ (Γ -Punkt)
- $E = const.$ Flächen sind kugelsymmetrisch
 - **Kugeln um Γ -Punkt**
 - jeweils **eine effektive Masse** für jedes Band

light holes: $m_{lh}^* \approx 0.043 m_e$
 heavy holes: $m_{hh}^* \approx 0.33 m_e$

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- effektive Bandmasse



GaAs (tetraedrisch koordinierte Zinkblendestruktur)

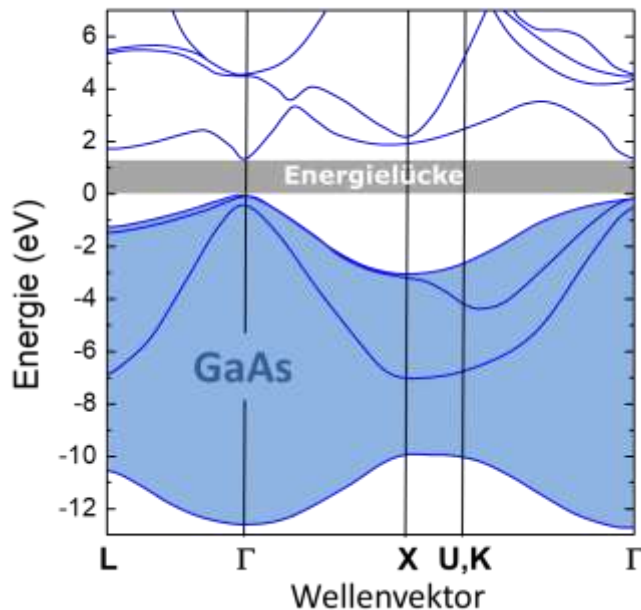
- Leitungsband:**
 - ein LB-Minimum bei $k = 0$ (Γ -Punkt)
 - $E = \text{const.}$ Fläche ist kugelsymmetrisch
 \rightarrow *Kugel um Γ -Punkt*
 \rightarrow *eine effektive Masse*

$$m_e^* \approx 0.063 m_e$$

- Valenzband:**
 - zwei entartete Valenzbänder bei $k = 0$ (Γ -Punkt)
 - $E = \text{const.}$ Flächen sind kugelsymmetrisch
 \rightarrow *Kugeln um Γ -Punkt*
 \rightarrow jeweils *eine effektive Masse* für jedes Band

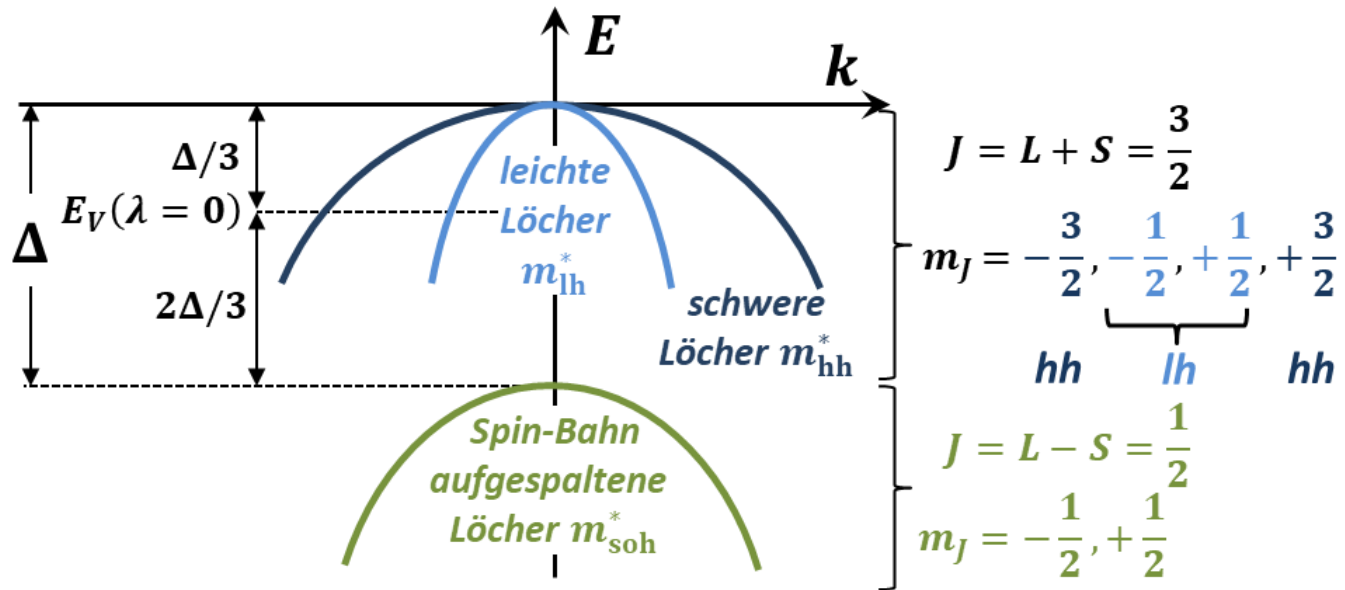
$$\text{light holes: } m_{lh}^* \approx 0.082 m_e$$

$$\text{heavy holes: } m_{hh}^* \approx 0.51 m_e$$



10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- Parabolische Bandnäherung: genaue Analyse erfordert Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung $\mathcal{H}_{SO} = -\lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$



- VB wird aus atomaren p -Zustände gebildet
- energetische Aufspaltung Δ der Zustände mit $J = L + S = 3/2$ und $J = L - S = 1/2$

– insgesamt drei Bänder:

lh: light holes
hh: heavy holes
soh: split-off holes

- weitere effektive Masse m_{soh}^*

Halbleiter	Δ [meV]
Si	44
Ge	290
GaAs	350

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

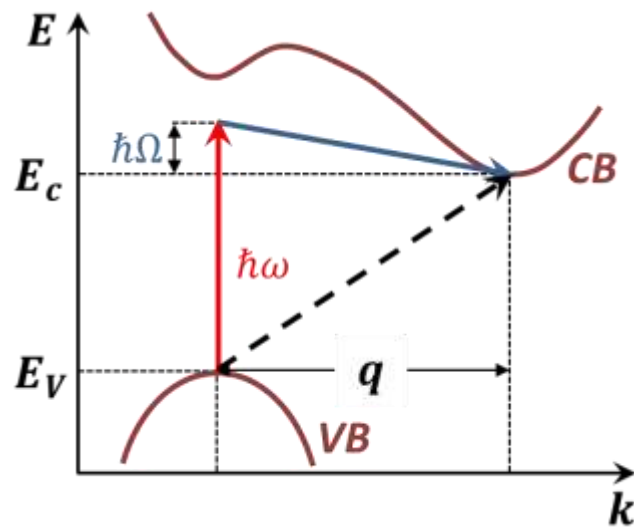
- effektive Massen von Si, Ge, GaAs und einigen anderen wichtigen Halbleitern

Halbleiter	m_e^* / m	m_{et}^* / m	m_{el}^* / m	m_{lh}^* / m	m_{hh}^* / m	m_{soh}^* / m	Δ (eV)
Si		0.19	0.98	0.16	0.49	0.24	0.044
Ge		0.081	1.59	0.043	0.33	0.084	0.295
GaAs	0.063			0.082	0.51	0.14	0.341
GaSb	0.041			0.04	0.4	0.15	0.80
GaP		1.12	0.22	0.14	0.79	0.25	0.08
InAs	0.023			0.026	0.41	0.16	0.41
InP	0.073			0.089	0.58	0.17	0.11
InSb	0.014			0.015	0.43	0.19	0.81

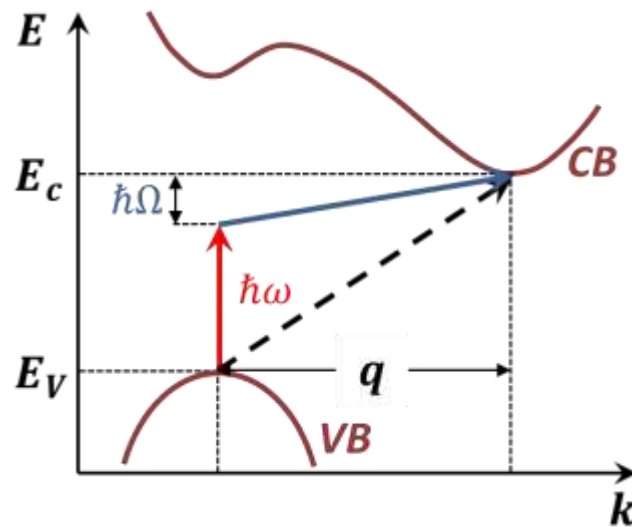
10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- optische Absorption von indirekten Halbleitern

- **Absorptionskoeffizient:** $\alpha = -\frac{1}{I} \left(\frac{dI}{dx} \right)$
- Anregung von Interband (VB – LB) Übergängen durch Photonen führt zu optischer Absorption
- optische Absorption erlaubt Bestimmung von Energielücke



indirekter Halbleiter
Erzeugung von Phonon



indirekter Halbleiter
Vernichtung von Phonon

Energie und Impulserhaltung:

$$\Delta E_{i,f} = E_g = \hbar\omega(\mathbf{k}_\gamma) \pm \hbar\Omega(\mathbf{q})$$

$$\hbar\Delta\mathbf{k} = \hbar\mathbf{k}_\gamma \pm \hbar\Omega(\mathbf{q})$$

- k_γ sehr klein ($\ll \pi/a$) für $\hbar\omega = E_g \sim 1 \text{ eV}$
 → **Photon-induzierte Übergänge verlaufen quasi vertikal**
- $\hbar\Omega \ll E_g$
 → **Phonon-induzierte Übergänge verlaufen quasi horizontal**

bei indirekten HL erfordert Impulserhaltung Erzeugung- oder Vernichtung von Phonon

→ quantitative Analyse erfordert Berechnung von Übergangsmatrixelementen, häufig $\alpha \propto (\hbar\omega - \hbar\Omega - E_g)^2$

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- optische Absorption von direkten Halbleitern

- Anregung von Interband (VB – LB) Übergängen durch Photonen erfordert keine Beteiligung von Phononen
→ nur Energieerhaltung relevant
- Absorptionskoeffizient $\alpha \propto$ **kombinierter Zustandsdichte**

Energieerhaltung:

$$\Delta E_{i,f} = E_g = E_C(\mathbf{k}) - E_V(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} = \underbrace{\left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right)}_{m_{\text{komb}}^*} \frac{\hbar^2 k^2}{2}$$

$m_{\text{komb}}^* =$ **kombinierte effektive Masse**

kombinierte Zustandsdichte (Berechnung aus m_{komb}^* mit Ausdruck für freies Elektronengas $D(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$):

$$D_{\text{komb}}(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{\text{komb}}^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\Delta E_{i,f} - E_g}$$

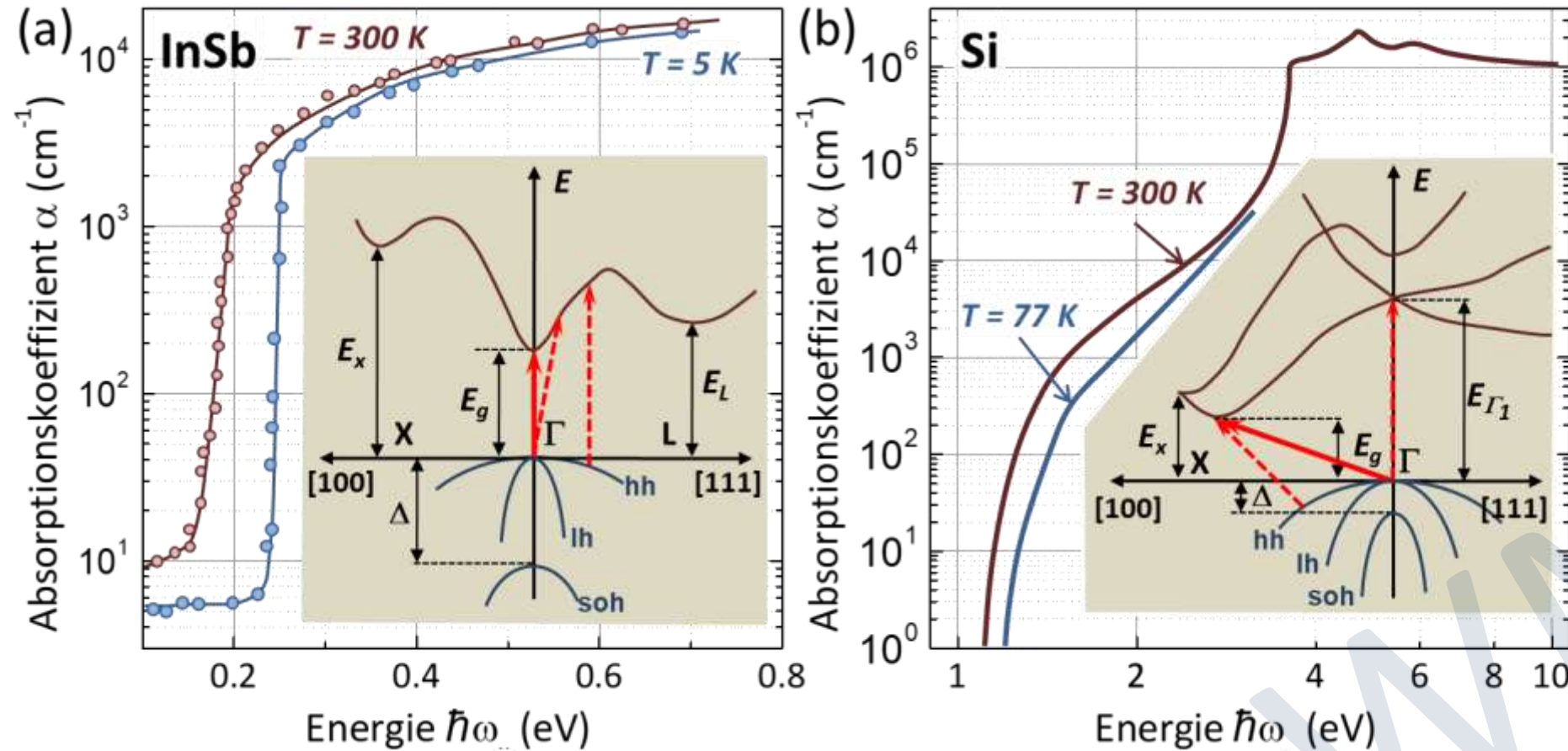
$$\alpha \propto D_{\text{komb}}(E) \propto (m_{\text{komb}}^*)^{3/2} \sqrt{\hbar\omega - E_g}$$

Fermi's Goldene Regel:

Übergangswahrscheinlichkeit \propto Dichte der Anfangs- und Endzustände

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- optische Absorption von (a) direktem und (b) indirektem Halbleiter



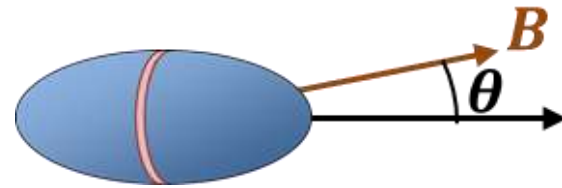
bei $T = 300\text{ K}$ steigt α bereits bei kleinerem $\hbar\omega$ an, da hier häufiger Übergänge mit Phononen-Vernichtung stattfinden können

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- Bestimmung der effektiven Masse mit Hilfe der Zyklotron-Resonanz

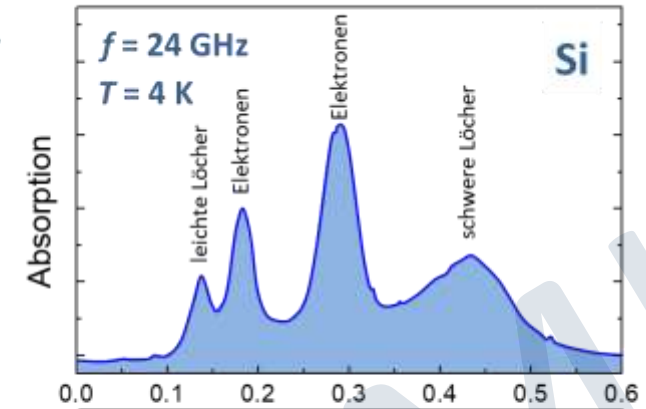
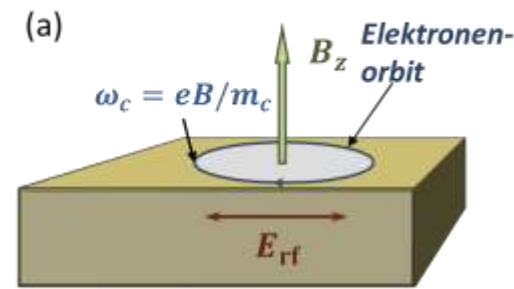
Zyklotronmasse:

(Elektronen im LB)



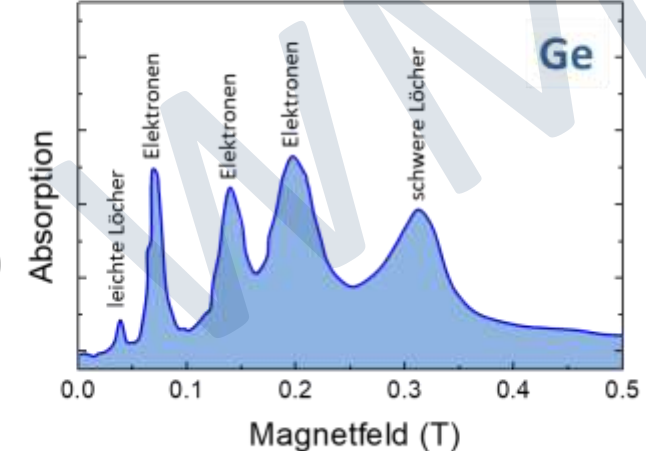
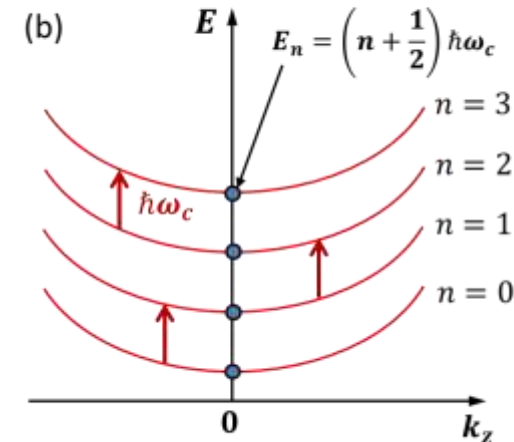
$$m_c = \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{\hat{B}_1^2 m_1 + \hat{B}_2^2 m_2 + \hat{B}_3^2 m_3}} = \sqrt{\left(\frac{\cos^2 \theta}{m_{et}^2} + \frac{\sin^2 \theta}{m_{et} m_{el}}\right)^{-1}}$$

Messung der Mikrowellenabsorption:



Zusammenhang zwischen m^* und m_c :

$$m_c = \sqrt{\frac{\det(m^*)}{m_{zz}}} \quad \text{für } B \parallel \hat{z}$$



• Bandstruktur

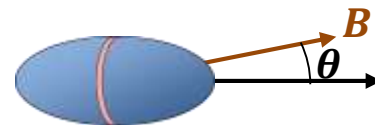
- parabolische Näherung der LB-Unterkante und der VB-Oberkante
- Bandkrümmung → effektive Masse-Tensor $(m^*)_{ij}$
- **Leitungsband**: Flächen konstanter Energie sind Ellipsoide, charakterisiert durch Angabe von drei Hauptachsen, drei effektiven Massen: zwei sind gleich, da Rotationsellipsoid, Position im \mathbf{k} -Raum: Si (0.8 x Entfernung zu X-Punkt), Ge (L-Punkt)
- **Valenzband**: Flächen konstanter Energie sind Kugeln um Γ -Punkt, eine effektive Masse für jedes der drei VB: lh-, hh- und soh
- **Spin-Bahn-Kopplung**: Aufspaltung der drei entarteten VB → lh-, hh- \leftrightarrow soh-Band

• optische Absorption

- Absorptionskoeffizient: $\alpha = -\frac{1}{I} \left(\frac{dI}{dx} \right)$
- α bestimmt durch Interbandübergänge VB \leftrightarrow LB → Bestimmung der Bandlücke E_g
- E- und \mathbf{k} -Erhaltung: **Photonen liefern Energie, Phononen den Impuls** (ohne Phononen \approx vertikale Übergänge in $E(k)$ Diagramm)
- quantitative Analyse erfordert Kenntnis des Übergangsmatrixelemente und der Dichte der Anfangs- und Endzustände (Fermi's Goldene Regel)
→ kombinierte effektive Masse $\frac{1}{m_{\text{komb}}^*} = \frac{1}{m_h^*} + \frac{1}{m_e^*}$, komb. Zustandsdichte $D_{\text{komb}} \propto (m_{\text{komb}}^*)^{3/2}$

• Zyklotron-Resonanz

- Bestimmung der effektiven Masse: $m_c = \sqrt{\left(\frac{\cos^2 \theta}{m_{\text{et}}^2} + \frac{\sin^2 \theta}{m_{\text{et}} m_{\text{el}}} \right)^{-1}}$



$$m_c = \sqrt{\frac{\det(m^*)}{m_{zz}}} \quad \text{für } B \parallel \hat{z}$$