



**Physik der
Kondensierten Materie 2**

Rudolf Gross

SS 2021

Teil 4

Vorlesungsstunde: 13.04.2021-2

• Bandstruktur

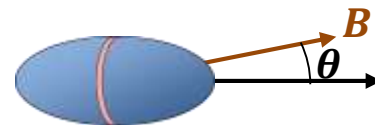
- parabolische Näherung der LB-Unterkante und der VB-Oberkante
- Bandkrümmung → effektive Masse-Tensor $(m^*)_{ij}$
- **Leitungsband**: Flächen konstanter Energie sind Ellipsoide, charakterisiert durch Angabe von drei Hauptachsen, drei effektiven Massen: zwei sind gleich, da Rotationsellipsoid, Position 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- ↔ soh-Band

• optische Absorption

- Absorptionskoeffizient: $\alpha = -\frac{1}{I} \left(\frac{dI}{dx} \right)$
- α bestimmt durch Interbandübergänge VB ↔ LB → Bestimmung der Bandlücke E_g
- E- und \mathbf{k} -Erhaltung: **Photonen liefern Energie, Phononen den Impuls** (ohne Phononen ≈ 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: $m_c = \sqrt{\left(\frac{\cos^2 \theta}{m_{\text{et}}^2} + \frac{\sin^2 \theta}{m_{\text{et}} m_{\text{el}}} \right)^{-1}}$



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

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- Ladungsträgerdichte von intrinsischen Halbleitern

- **intrinsische HL:** freie LT in LB nur durch Anregung vom VB ins LB

- Dichte der Elektronen im LB:

$$n_c = \frac{1}{V} \int_{E_C}^{\infty} D_C(E) f(E, T) dE$$

- Dichte der Löcher (fehlenden Elektronen) im VB:

$$p_v = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{E_V} D_C(E) [1 - f(E, T)] dE$$

- **parabolische Näherung:**

- Zustandsdichte der Elektronen im LB:

$$D_C(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{e,DOS}^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_C} \quad \text{für } E \geq E_C$$

- Zustandsdichte der Löcher im VB:

$$D_V(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{h,DOS}^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_V - E} \quad \text{für } E \leq E_V$$

- **effektive Zustandsdichtemasse:**

- Leitungsband: $(m_{e,DOS}^*)^{3/2} = p (m_1^* m_2^* m_3^*)^{1/2}$ Entartung p (Si: 6, Ge: 4,
 m_i^* = eff. Massen entlang Hauptachsen von Ellipsoiden

- Valenzband: $(m_{h,DOS}^*)^{3/2} = (m_{hh}^*)^{3/2} + (m_{lh}^*)^{3/2} + (m_{soh}^*)^{3/2}$ Addition der DOS von hh, lh, soh

Effektive Zustandsdichtemasse:

Fermi-Kugel = Fermi-Ellipsoid

$$\frac{4}{3} \pi k_F^3 = \frac{4}{3} \pi p k_1 k_2 k_3$$

$$\rightarrow k_F^2 = p^{2/3} (k_1 k_2 k_3)^{2/3}$$

Fermi-Energie:

$$\frac{2mE_F}{\hbar^2} = k_F^2 = p^{2/3} (k_1 k_2 k_3)^{2/3}$$

$$\frac{2m^* E_F}{\hbar^2} = p^{2/3} (k_1^2 k_2^2 k_3^2)^{1/3}$$

$$\frac{2mE_F}{\hbar^2} = \frac{2E_F}{\hbar^2} p^{2/3} (m_1^* m_2^* m_3^*)^{1/3}$$

$$\rightarrow m^* = p^{2/3} (m_1^* m_2^* m_3^*)^{1/3}$$

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- Ladungsträgerdichte von intrinsischen Halbleitern

- annähern der Fermi-Verteilung durch Boltzmann-Verteilung, da $E_g \gg k_B T$:

$$\frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right)+1} \simeq \exp\left(-\frac{E-\mu}{k_B T}\right) \text{ für } E \geq E_C$$

- zusammen mit $D_C(E)$ und $D_V(E)$ erhalten wir:

$$\frac{1}{\exp\left(\frac{\mu-E}{k_B T}\right)+1} \simeq \exp\left(-\frac{\mu-E}{k_B T}\right) \text{ für } E \leq E_V$$

$$n_c = \left(\frac{2m_{e,\text{DOS}}^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\mu/k_B T} \int_{E_C}^{\infty} \sqrt{E - E_C} e^{-E/k_B T} dE$$

- Substitution von $x_c = (E - E_C)/k_B T$ ergibt:

$$n_c = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{e,\text{DOS}}^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} e^{-(E_C-\mu)/k_B T} \int_0^{\infty} \sqrt{x_c} e^{-x_c} dx_c = \sqrt{\pi} / 2$$

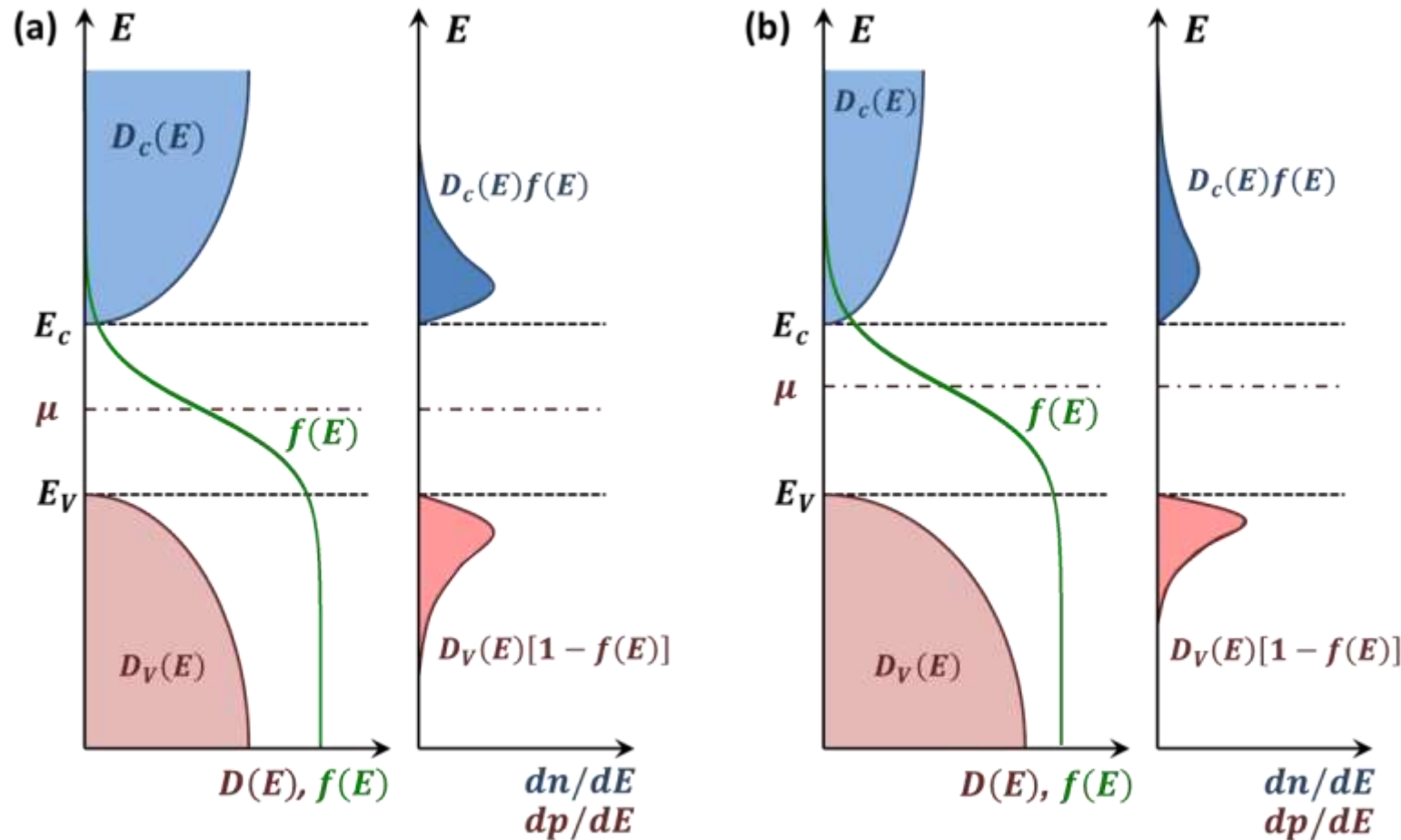
$$n_c = 2 \left(\frac{2m_{e,\text{DOS}}^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-(E_C-\mu)/k_B T} = n_c^{\text{eff}} e^{-(E_C-\mu)/k_B T}$$

$$p_v = 2 \left(\frac{2m_{h,\text{DOS}}^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-(\mu-E_V)/k_B T} = p_v^{\text{eff}} e^{-(\mu-E_V)/k_B T}$$



10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- Ladungsträgerdichte von intrinsischen Halbleitern



LB:
$$D_c(E) = \frac{V}{2\pi^3} \left(\frac{2m_{e,DOS}^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c}$$

$$f(E) = \left[\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} \approx \exp\left(-\frac{E - \mu}{k_B T}\right)$$

VB:
$$D_v(E) = \frac{V}{2\pi^3} \left(\frac{2m_{h,DOS}^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_v - E}$$

$$f(E) = \left[\exp\left(\frac{\mu - E}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} \approx \exp\left(-\frac{\mu - E}{k_B T}\right)$$

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- Produkt $n_c \cdot p_v$ und Massenwirkungsgesetz

$$n_c \cdot p_v = 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_{e,DOS}^* m_{h,DOS}^*)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{k_B T}} = n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}} e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$$

$$n_c = 2 \left(\frac{2m_{e,DOS}^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-(E_c - \mu)/k_B T} = n_c^{\text{eff}} e^{-(E_c - \mu)/k_B T}$$

$$p_v = 2 \left(\frac{2m_{h,DOS}^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-(\mu - E_v)/k_B T} = p_v^{\text{eff}} e^{-(\mu - E_v)/k_B T}$$

- $n_c \cdot p_v$ ist unabhängig von Lage des chemischen Potentials μ
- ist minimal für $n_c = p_v$
- $n_c \cdot p_v = \text{const.}$ gilt auch für dotierte Halbleiter
- Ausdruck entspricht dem **Massenwirkungsgesetz** der chemischen Reaktionskinetik

wir betrachten WW von intr. HL mit Photonenfeld eines schwarzen Strahlers der Temperatur T :
Generationsrate $A(T)$, Rekombinationsrate $B(T)n_c p_v$

- im Gleichgewicht gilt Ratengleichung: $\frac{dn_c}{dt} = A(T) - B(T)n_c p_v = \frac{dp_v}{dt} = 0$
- $n_c \cdot p_v = \frac{A(T)}{B(T)} = \text{const.}$

- für intrinsische HL gilt $n_c = p_v$ (Neutralitätsbedingung)

- Lage des chemischen Potentials

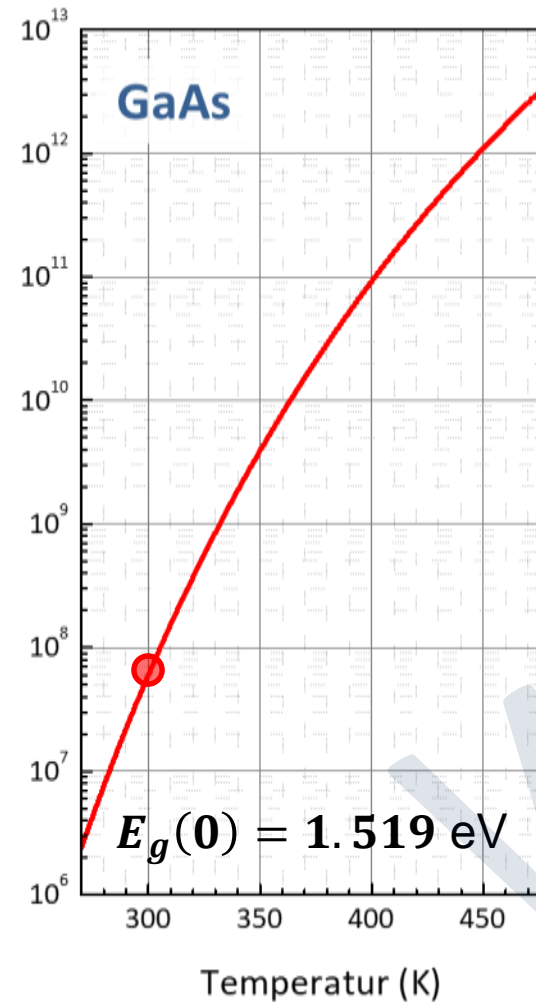
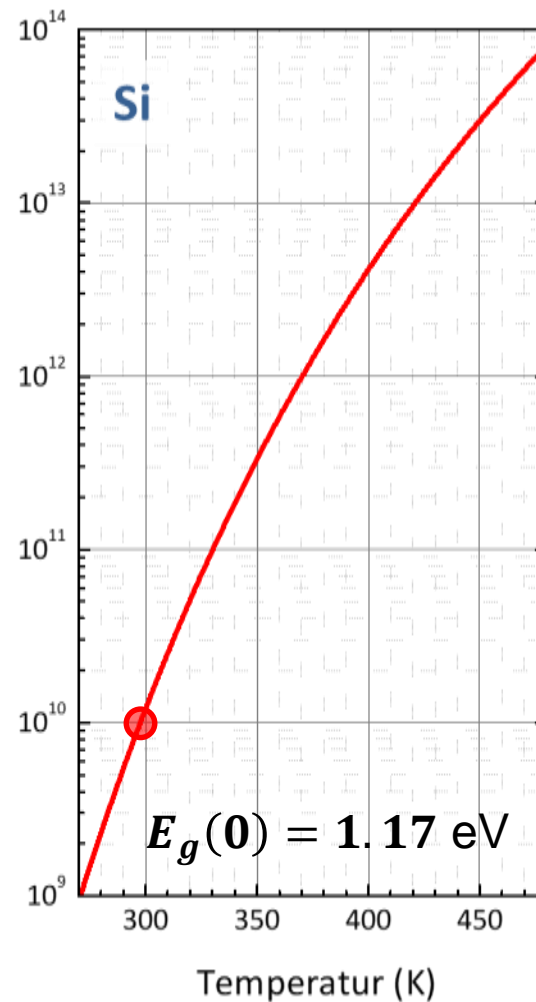
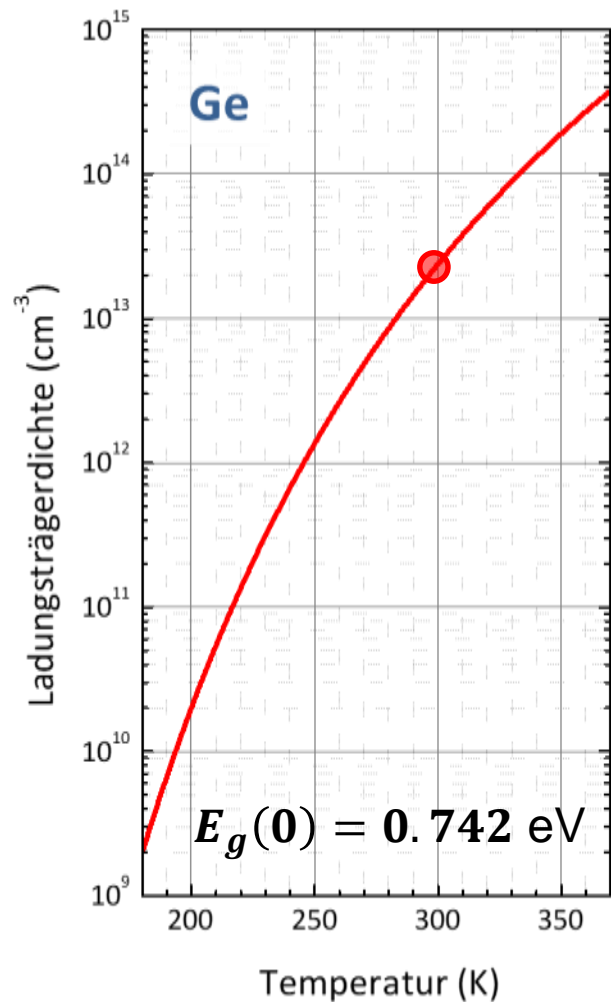
$$\mu = E_v + \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_{h,DOS}^*}{m_{e,DOS}^*} \right)$$

in Bandmitte für
 $m_{h,DOS}^* = m_{e,DOS}^*$

10.1.2 Intrinsische Halbleiter

- intrinsische Ladungsträgerdichte

$$n_i = \sqrt{n_c \cdot p_v} = \sqrt{n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}}} e^{-E_g/2k_B T}$$



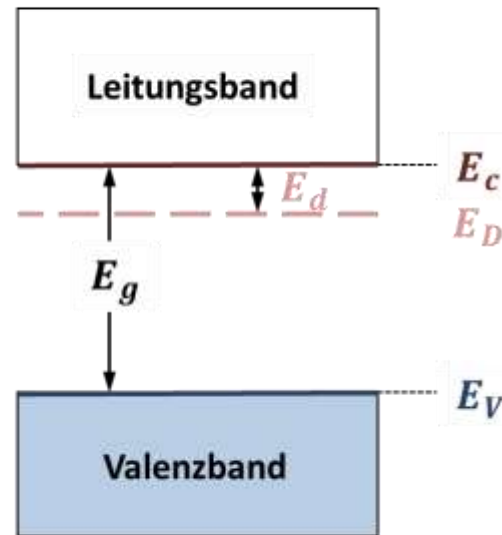
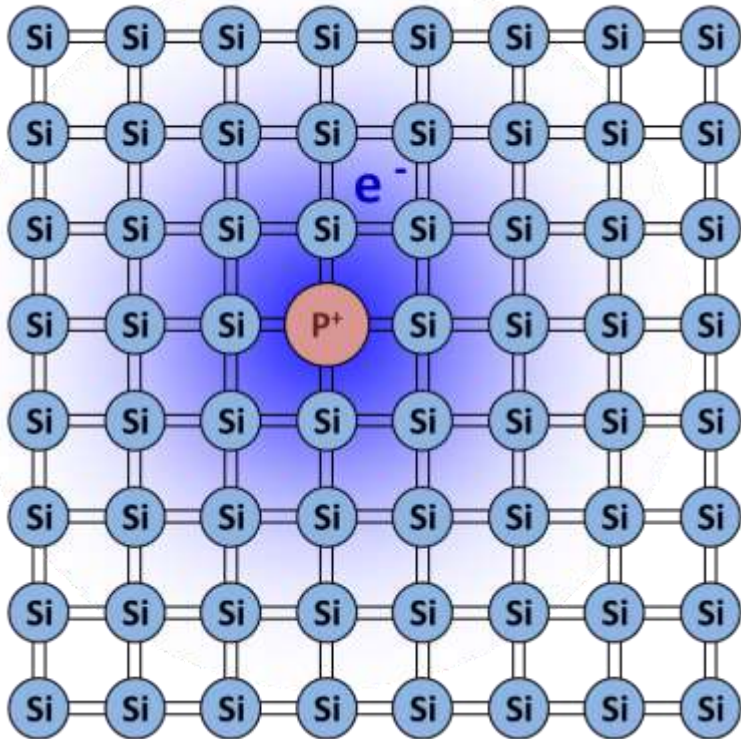
Si und GaAs:
 $n_i(300 \text{ K})$ ist so klein,
 dass sie experimentell
 nicht beobachtet werden
 kann

→ Dotierung durch
 Verunreinigung
 dominiert

- intrinsische Ladungsträgerdichte ist für die meisten Anwendungen zu gering → zu geringe Leitfähigkeit
 - **Dotierung:**
 - Erzeugung von zusätzlichen LT durch Einbringen von Verunreinigungen
 - gezielte Dotierung von HL ist Grundlage für HL-Technologie
 - bei Metallen ist Dotierung nicht (kaum) möglich (intrinsisch hohe LT-Dichte), auch kein elektrischer Feldeffekt
 - **Verunreinigungen in Halbleitern:**
 - **Donatoren:**
 - haben im Vergleich zu HL-Atomen zu viele Elektronen
 - geben zusätzliche LT an Gitter ab
 - Beispiele: P, As, Sb, Bi für Si und Ge
 - **Akzeptoren:**
 - haben im Vergleich zu HL-Atomen zu wenige Elektronen
 - nehmen fehlende Elektronen von Gitter auf, es bleiben Löcher zurück
 - Beispiele: B, Al, Ga, In für Si und Ge

10.1.3 Dotierte Halbleiter

- Donator- und Akzeptor-Niveaus, wie groß ist die Bindungsenergie der überschüssigen/fehlenden Elektronen
 - **Wasserstoffatom-Modell für Donatoren:**
 - ➔ zusätzliches Elektron ist an einfach geladenes Donatoratom gebunden



Energieniveaus von H-Atom:

$$E_n^H = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \frac{1}{n^2}, \quad E_1^H = 13.6 \text{ eV}$$

Was ändert sich im Festkörper?

- Coulomb-Potenzial ist abgeschirmt
➔ Berücksichtigung mit Dielektrizitätskonstante
 $\epsilon_{\text{Si}} = 11.7, \epsilon_{\text{Ge}} = 15.8$
- Bandelektroen statt freie Elektronen
➔ $m_e \rightarrow m_e^*$

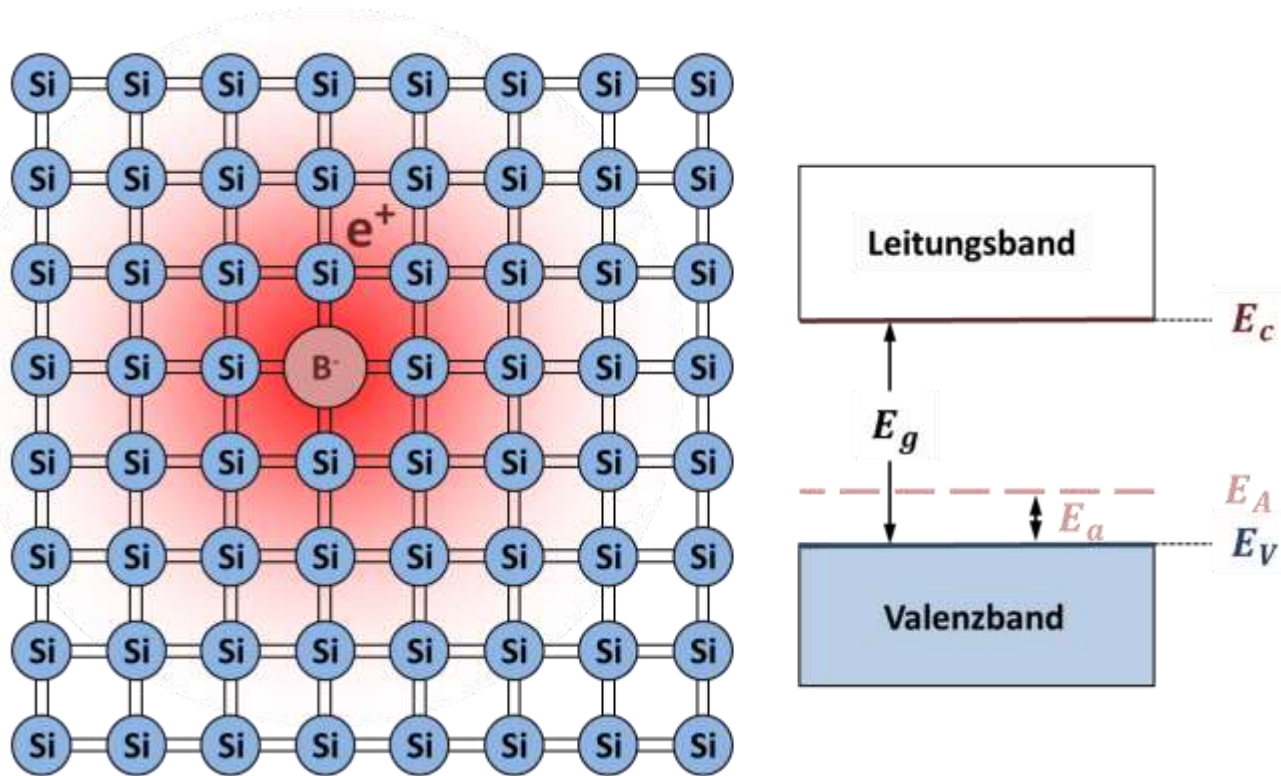
Donatorniveaus

$$E_{n,d} = \frac{m_e^* e^4}{2(4\pi\epsilon_0 \epsilon \hbar)^2} \frac{1}{n^2}$$

$$E_{1,d} \sim 10 - 100 \text{ meV (für Si und Ge)}$$

10.1.3 Dotierte Halbleiter

- Donator- und Akzeptor-Niveaus, wie groß ist die Bindungsenergie der überschüssigen/fehlenden Elektronen
 - **Wasserstoffatom-Modell für Akzeptoren:**
 - ➔ fehlendes Elektron (positiv geladenes Loch) ist an einfach negativ geladenes Akzeptoratom gebunden



Akzeptorniveaus

$$E_{n,A} = \frac{m_h^* e^4}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \frac{1}{n^2}$$

$E_{1,A} \sim 10 - 100 \text{ meV}$ (für Si und Ge)

Bohrscher Radius für Akzeptoren und Donatoren

$$r_{A,D} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_{h,e}^* e^4}$$

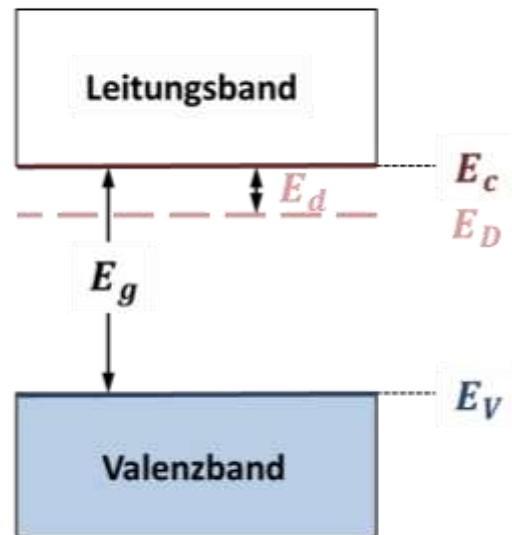
$r_{A,D} \sim 5 - 50 \text{ \AA}$ (für Si und Ge)

➔ $r_{A,D} \gg$ Atomabstand

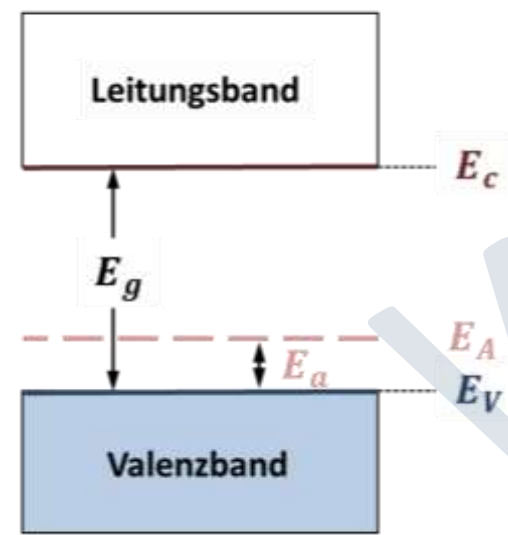
10.1.3 Dotierte Halbleiter

- Ionisierungsenergien einiger Donatoren und Akzeptoren in Si und Ge

Halbleiter	Donatoren					Akzeptoren			
	P	As	Sb	Bi		B	Al	Ga	In
E_d	(meV)	(meV)	(meV)	(meV)	E_a	(meV)	(meV)	(meV)	(meV)
Si	45	54	43	69		45	72	74	157
Ge	13	14	9.6	13		11	11	11	12



$$E_d = E_C - E_D$$



$$E_a = E_A - E_V$$

10.1.3 Dotierte Halbleiter

- Ladungsträgerdichte in dotierten Halbleitern

– es gilt:

$$n_c = n_c^{\text{eff}} e^{-(E_c - \mu)/k_B T}$$

$$p_v = p_v^{\text{eff}} e^{-(\mu - E_v)/k_B T}$$

$$n_c \cdot p_v = n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}} e^{-E_g/k_B T}$$

– Dichte der Donatoren und Akzeptoren:

$$n_A = n_A^0 + n_A^-$$

neutral geladen/ionisiert

$$n_D = n_D^0 + n_D^+$$

neutral geladen/ionisiert

– Neutralitätsbedingung:

$$n_c + n_A^- = p_v + n_D^+$$

Wie groß ist Anteil der neutralen und geladenen Donatoren/Akzeptoren?

$$\frac{n_D^0}{n_D} = 2 \frac{1}{e^{(E_D - \mu)/k_B T} + 1}$$

Spin-Entartung

$$\frac{n_A^0}{n_A} = 4 \frac{1}{e^{(\mu - E_A)/k_B T} + 1}$$

Spin-Entartung, Entartung von hh-, lh-Band

10.1.3 Dotierte Halbleiter

- Berechnung der Ladungsträgerdichte in n -Typ Halbleiter ($n_D \gg n_A$)

Annahmen:

- $n_A^0 \simeq 0$, $n_A^- \simeq n_A$, da für $n_D \gg n_A$ alle Akzeptoren ein Elektron einfangen können
- $n_D^+ \gg p_v$, gilt immer bei genügend tiefen $T \rightarrow$ Wahrscheinlichkeit für VB \rightarrow LB Anregung gering
- wir vernachlässigen Entartungsfaktoren

Neutralitätsbedingung:

$$n_c + n_A^- = p_v + n_D^+ \Rightarrow n_c + n_A = n_D^+ = n_D - n_D^0 \quad \Rightarrow n_c = n_D - n_D^0 - n_A$$

- mit $\frac{n_D^0}{n_D} = \frac{1}{e^{(E_D - \mu)/k_B T} + 1}$ erhalten wir $n_c = n_D \left(1 - \frac{1}{e^{(E_D - \mu)/k_B T} + 1} \right) - n_A$
- aus $n_c = n_c^{\text{eff}} e^{-(E_C - \mu)/k_B T}$ erhalten wir $e^{\mu/k_B T} = \frac{n_c}{n_c^{\text{eff}}} e^{E_C/k_B T}$ und können μ eliminieren
- wir erhalten: $n_c = n_D \left(1 - \frac{n_c}{n_c^{\text{eff}} e^{E_d/k_B T} + n_c} \right) - n_A = \frac{n_D}{1 + \frac{n_c}{n_c^{\text{eff}}} e^{E_d/k_B T}} - n_A$ ($E_d = E_C - E_D$)
- Umformen ergibt: $\frac{n_c(n_c + n_A)}{n_D - n_A - n_c} = n_c^{\text{eff}} e^{-E_d/k_B T}$ (quadratische Gleichung für n_c)

10.1.3 Dotierte Halbleiter

- Näherungen des Ausdrucks für die LT-Dichte

$$\frac{n_c(n_c + n_A)}{n_D - n_A - n_c} = n_c^{\text{eff}} e^{-E_d/k_B T}$$

- i. **Kompensationsbereich:** $k_B T \lll E_d \Rightarrow n_c \ll n_A \ll n_D$

$$n_c \simeq \frac{n_D n_c^{\text{eff}}}{n_A} e^{-E_d/k_B T}$$

für sehr tiefe T werden die sehr wenigen von Donatoren freigesetzten Elektronen alle von den Akzeptoren eingefangen \rightarrow "Kompensation"

- ii. **Störstellenreserve:** $k_B T \ll E_d \Rightarrow n_c \gg n_A, n_c \ll n_D$

$$n_c \simeq \sqrt{n_D n_c^{\text{eff}}} e^{-E_d/2k_B T}$$

durch thermische Aktivierung werden mit steigendem $k_B T$ jetzt immer mehr Elektronen von Donatoren freigesetzt, so dass $n_c \gg n_A$
 $k_B T$ ist aber immer noch niedrig genug, dass $n_c \ll n_D \rightarrow$ "Störstellenreserve"

- iii. **Störstellenerschöpfung:** $k_B T \gtrsim E_d \Rightarrow n_c \gg n_A, \exp(-E_d/k_B T) \simeq 1 \Rightarrow \frac{n_c^2}{n_c^{\text{eff}}} \simeq (n_D - n_c) \simeq 0$, da $n_c \ll n_c^{\text{eff}}$

$$n_c \simeq n_D$$

$k_B T$ ist so groß, dass alle Elektronen von Donatoren frei gesetzt sind \rightarrow "Störstellenerschöpfung"

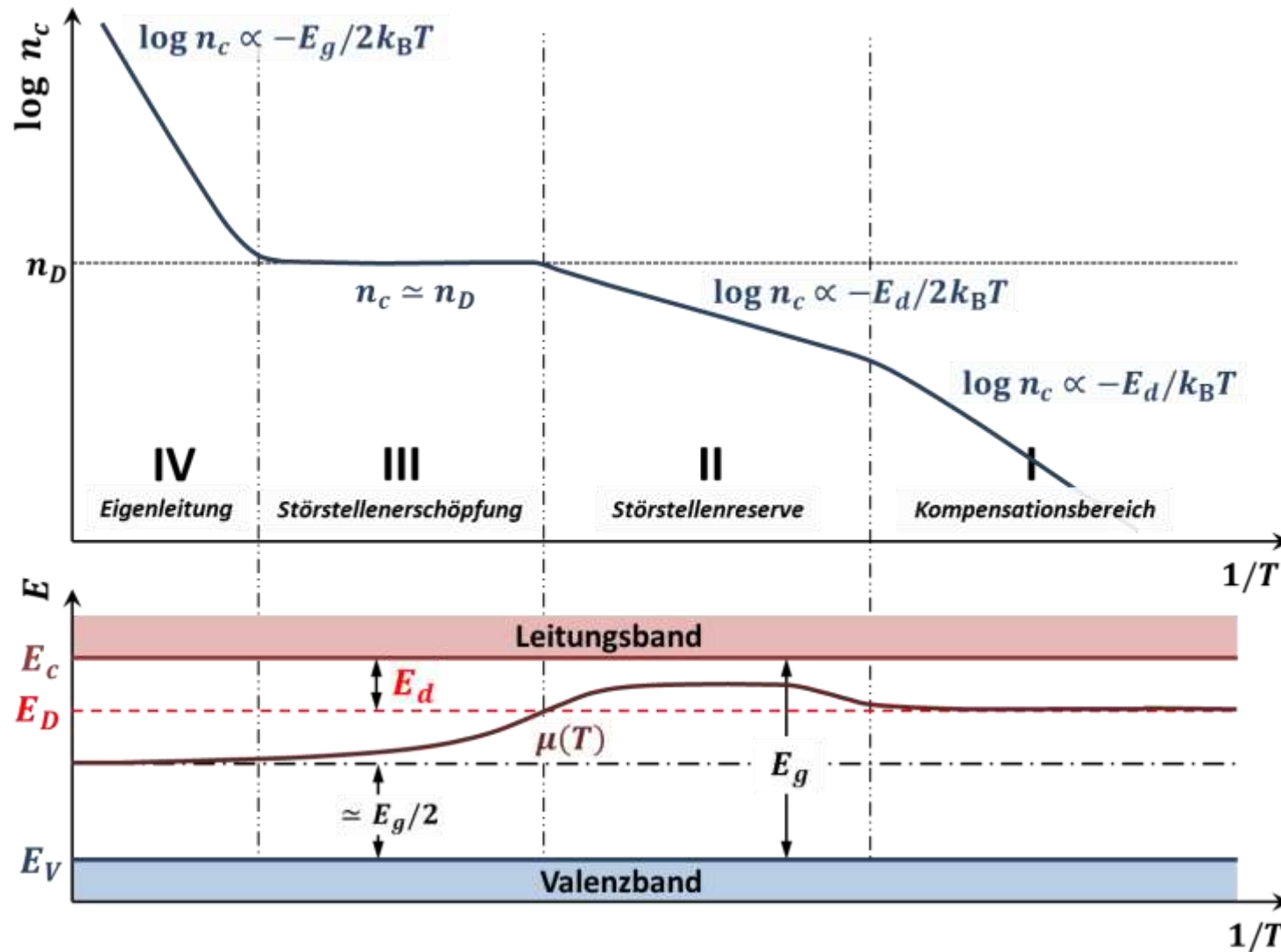
- iv. **Eigenleitung:** $k_B T \gg E_d$, obiger Ausdruck für n_c gilt nicht mehr, da er unter Annahme $n_D^+ \gg p_v$ abgeleitet wurde

$$n_c \simeq n_c^{\text{eff}} e^{-E_g/2k_B T}$$

$k_B T$ ist jetzt so groß, dass n_c durch die thermische Anregung aus dem VB dominiert wird, es gilt dann Ausdruck für intrinsischen HL \rightarrow "Eigenleitung"

10.1.3 Dotierte Halbleiter

- Temperaturabhängigkeit von n_c in n -Typ HL: $n_D \gg n_A$, $n_D^+ \gg p_v$, $n_A^- \approx n_A$



$k_B T \lll E_d$ (**Kompensationsbereich**) $n_c \ll n_A \ll n_D$

$$n_c \approx \frac{n_D n_c^{\text{eff}}}{n_A} \exp\left(-\frac{E_d}{k_B T}\right)$$

$k_B T \ll E_d$ (**Störstellenreserve**) $n_c \gg n_A, n_c \ll n_D$

$$n_c \approx \sqrt{n_D n_c^{\text{eff}}} \exp\left(-\frac{E_d}{2k_B T}\right)$$

$k_B T \geq E_d$ (**Störstellenerschöpfung**) $n_c \gg n_A, e^{-\frac{E_d}{k_B T}} \approx 1$

$$n_c^2 \approx n_c^{\text{eff}}(n_D - n_c) \Rightarrow n_c \approx n_D$$

$k_B T \gg E_d$ (**Eigenleitung**) $n_c \gg n_A, n_c \gg n_D$

$$n_c \approx n_c^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

Ladungsträgerdichte von intrinsischen Halbleitern

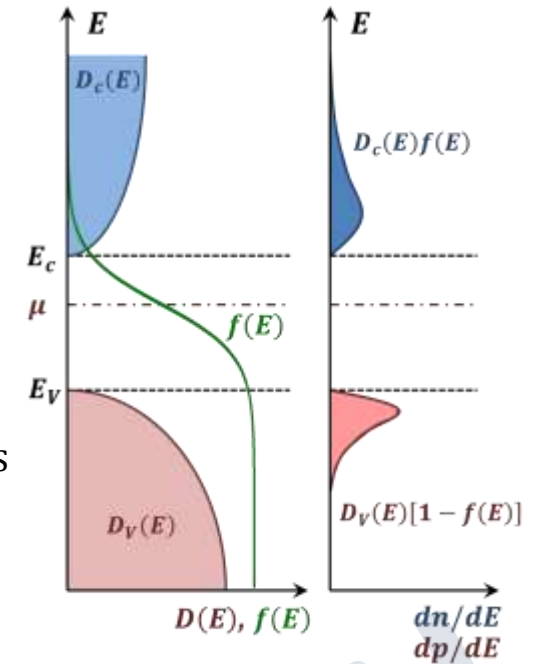
$$n_c = 2 \underbrace{\left(\frac{2m_{e,DOS}^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}}_{n_c^{\text{eff}}} e^{-(E_c - \mu)/k_B T}$$

$$p_v = 2 \underbrace{\left(\frac{2m_{h,DOS}^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}}_{p_v^{\text{eff}}} e^{-(\mu - E_v)/k_B T}$$

- Produkt $n_c \cdot p_v \propto \exp(E_g/k_B T)$ ist unabhängig von μ , minimal für $n_c = p_v$
- Neutralitätsbedingung: $n_c = p_v$

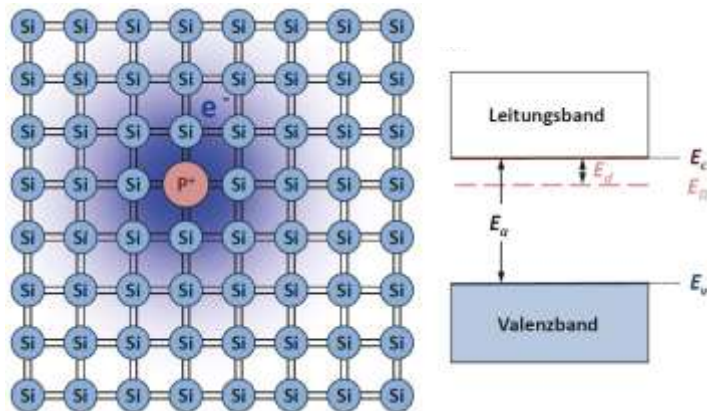
→ chemisches Potenzial: $\mu = E_v + \frac{1}{2}E_g + \frac{3}{4}k_B T \ln\left(\frac{m_{h,DOS}^*}{m_{e,DOS}^*}\right)$ in Bandmitte, falls $m_{h,DOS}^* = m_{e,DOS}^*$

- intrinsische LT-Dichte: $n_i = \sqrt{n_c \cdot p_v} = \sqrt{n_c^{\text{eff}} p_v^{\text{eff}}} e^{-E_g/2k_B T}$



Bindungsenergie von Elektronen und Löchern in Donatoren und Akzeptoren

Bindungsenergie des zusätzlichen Elektrons an Donatoratom: **Wasserstoffatom-Modell**



$$E_{n,d} = \frac{m_e^* e^4}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \frac{1}{n^2}$$

- abgeschirmtes Coulomb-Potenzial
- effektive Masse

$$\epsilon_{\text{Si}} = 11.7, \epsilon_{\text{Ge}} = 15.8, m_e^* < m_e$$

$$\rightarrow E_{1,d} = E_1 \approx 10 - 100 \text{ meV}$$

- **Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerdichte in dotierten HL**

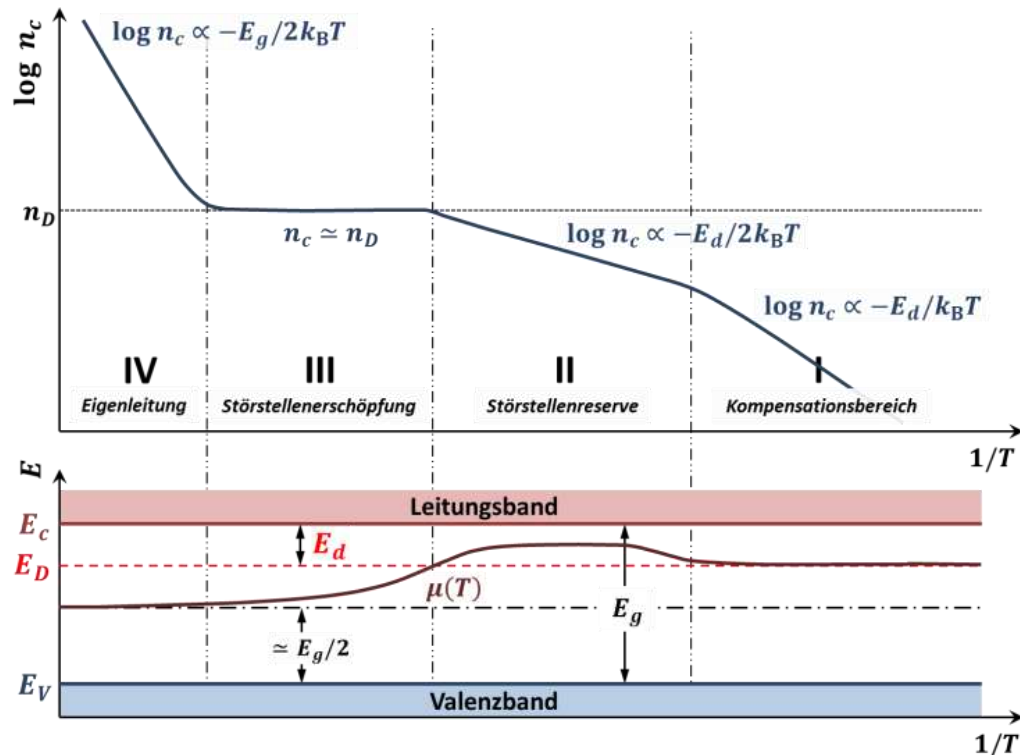
$$n_A = n_A^0 + n_A^- \quad n_D = n_D^0 + n_D^+ \quad \frac{n_D^0}{n_D} = 2 \frac{1}{e^{(E_D - \mu)/k_B T} + 1} \quad \frac{n_A^0}{n_A} = 4 \frac{1}{e^{(\mu - E_A)/k_B T} + 1}$$

↑ neutral
↑ geladen/ionisiert
↑ neutral
↑ geladen/ionisiert

Neutralitätsbedingung: $n_c + n_A^- = p_v + n_D^+$

- **Beispiel: n-Typ HL: $n_D \gg n_A$, $n_D^+ \gg p_v$, $n_A^- \approx n_A \rightarrow$**

$$\frac{n_c(n_c + n_A)}{n_D - n_A - n_c} = n_c^{\text{eff}} e^{-E_d/k_B T}$$



$k_B T \lll E_d$ (**Kompensationsbereich**) $n_c \ll n_A \ll n_D$

$$n_c \approx \frac{n_D n_c^{\text{eff}}}{n_A} \exp\left(-\frac{E_d}{k_B T}\right)$$

$k_B T \ll E_d$ (**Störstellenreserve**) $n_c \gg n_A, n_c \ll n_D$

$$n_c \approx \sqrt{n_D n_c^{\text{eff}}} \exp\left(-\frac{E_d}{2k_B T}\right)$$

$k_B T \geq E_d$ (**Störstellenerschöpfung**) $n_c \gg n_A, e^{-\frac{E_d}{k_B T}} \approx 1$

$$n_c^2 \approx n_c^{\text{eff}}(n_D - n_c) \Rightarrow n_c \approx n_D$$

$k_B T \gg E_d$ (**Eigenleitung**) $n_c \gg n_A, n_c \gg n_D$

$$n_c \approx n_c^{\text{eff}} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$