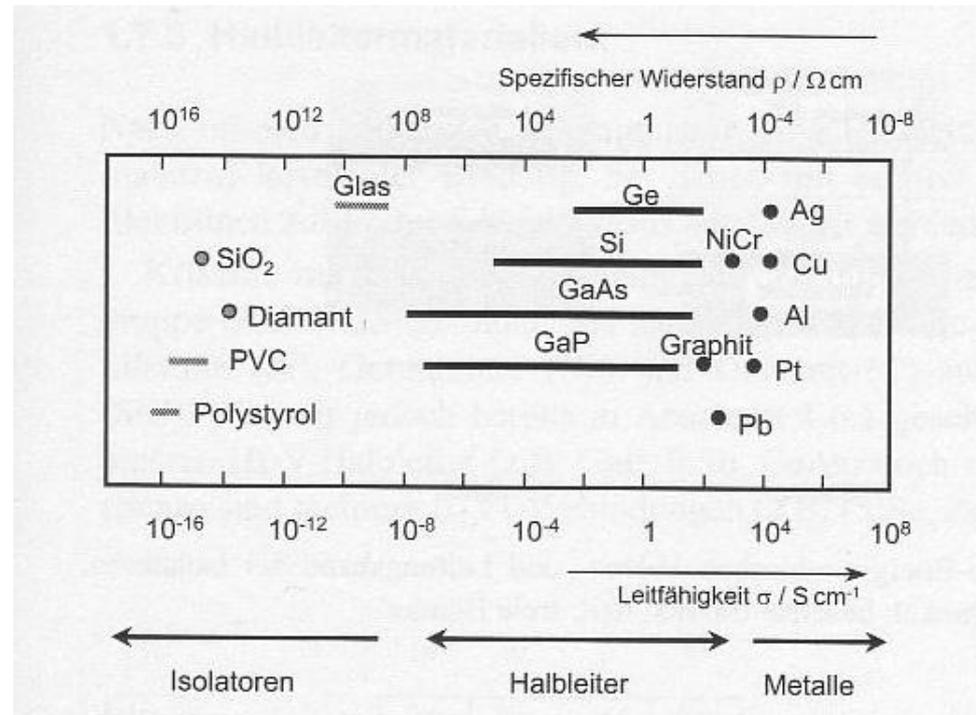


3 Halbleiter-Grundlagen

Definition



Nach O. Madelung, Grundlagen der Halbleiterphysik,
Springer 1970:

„Halbleiter sind physikalisch definierte Festkörper, die in reinem Zustand in der Nähe des absoluten Nullpunkts der Temperatur isolieren, bei höherer Temperatur jedoch entweder eine eindeutig nachweisbare elektronische Leitfähigkeit besitzen, durch Störung des idealen Gitteraufbaus eine Leitfähigkeit erhalten oder bei welchen zumindest durch äußere Einwirkung eine Leitfähigkeit erzwungen werden kann.“

Beispiele für „optische“ Halbleiter-Materialien

Photodetektoren	„viele“ Halbleiter, abhängig von λ
Solarzellen	Si
Leuchtdioden (LEDs)	GaAs (IR), GaP (grün, gelb, rot), AlGaAs, SiC (blau), (InGaAl)N (blau), (InGaAl)P (IR)
Laserdioden (LDs), „Injektionslaser“	GaAs, AlGaAs, Ternäre und quaternäre III-V-Verbindungen, wie (InGaAl)N, (InGaAl)P, PbSnTe (far IR)

binär: 2 Elemente

ternär: 3 Elemente

quaternär: 4 Elemente

(2 aus III. & 2 aus V. HG)

Bindung und Kristallstrukturen

Kovalente Bindung bei Si

Si [Ne] 3s² 3p²

über sp³ – Molekülorbitale

→ tetraedrische Bindung

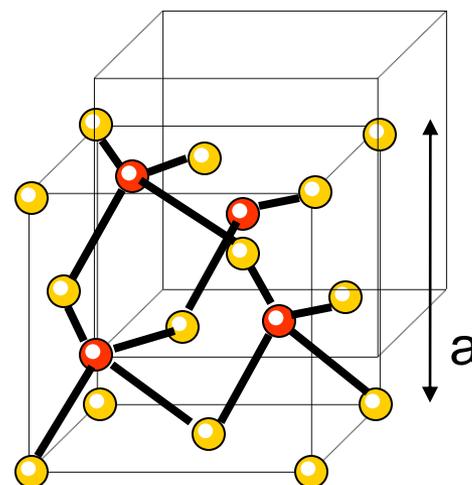
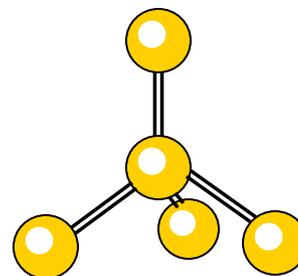
Si, Ge → Diamantstruktur

2 „kubisch flächenzentrierte“ Gitter
ineinander verschoben

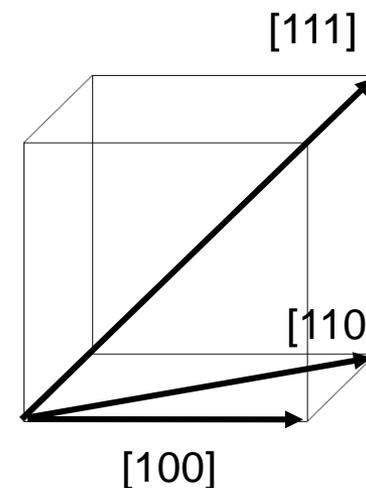
Atomsorten in den Gittern verschieden
Diamantgitter → Zinkblendestruktur

eine Gitterkonstante a

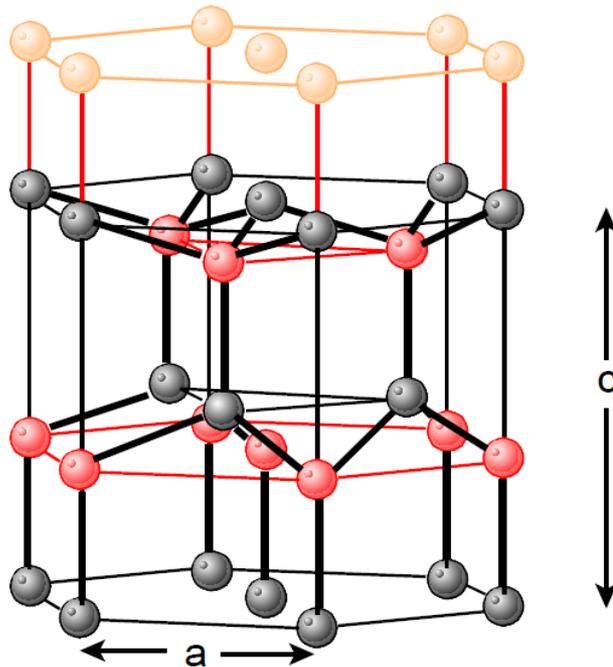
z.B. GaAs



Kristallrichtungen



Kristallstrukturen



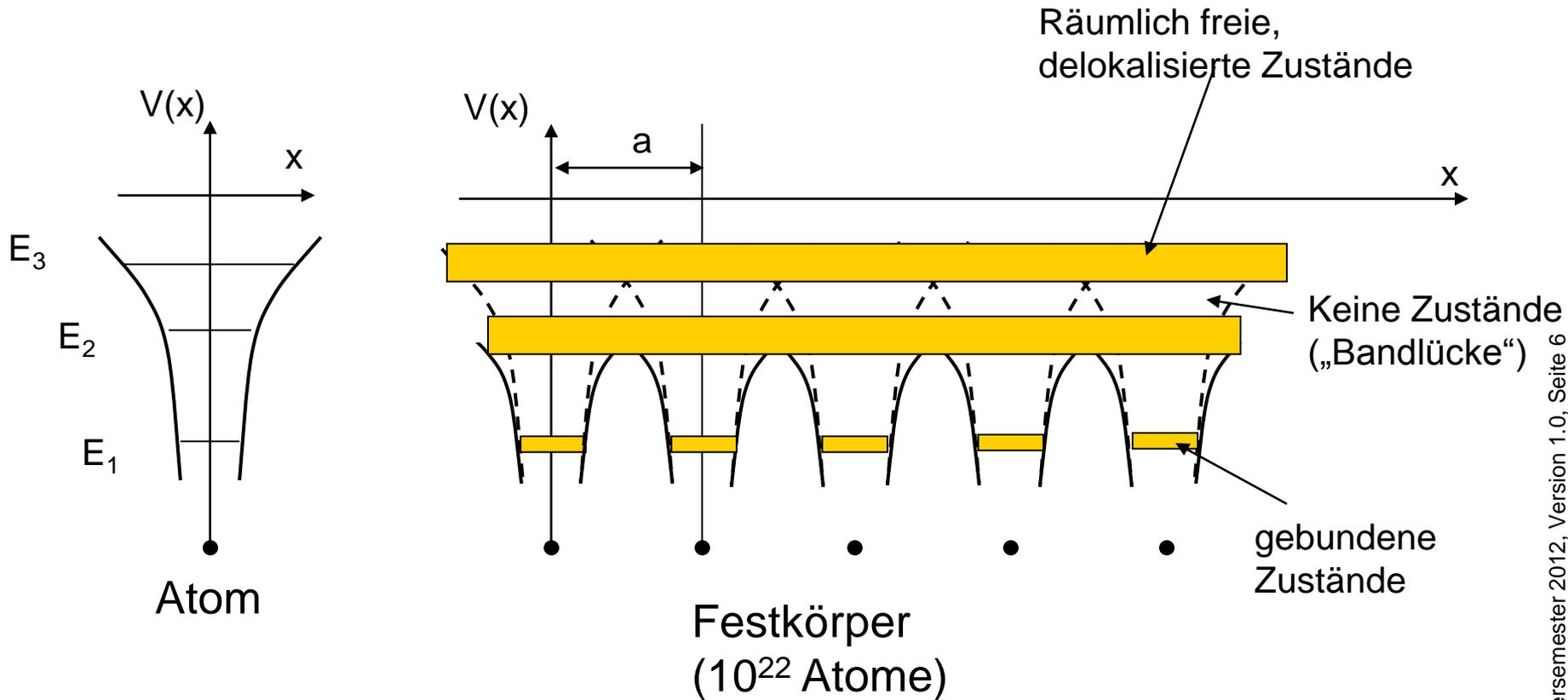
Hexagonales Kristallgitter
(Wurtzit)

SiC
GaN

2 Gitterkonstanten a , c

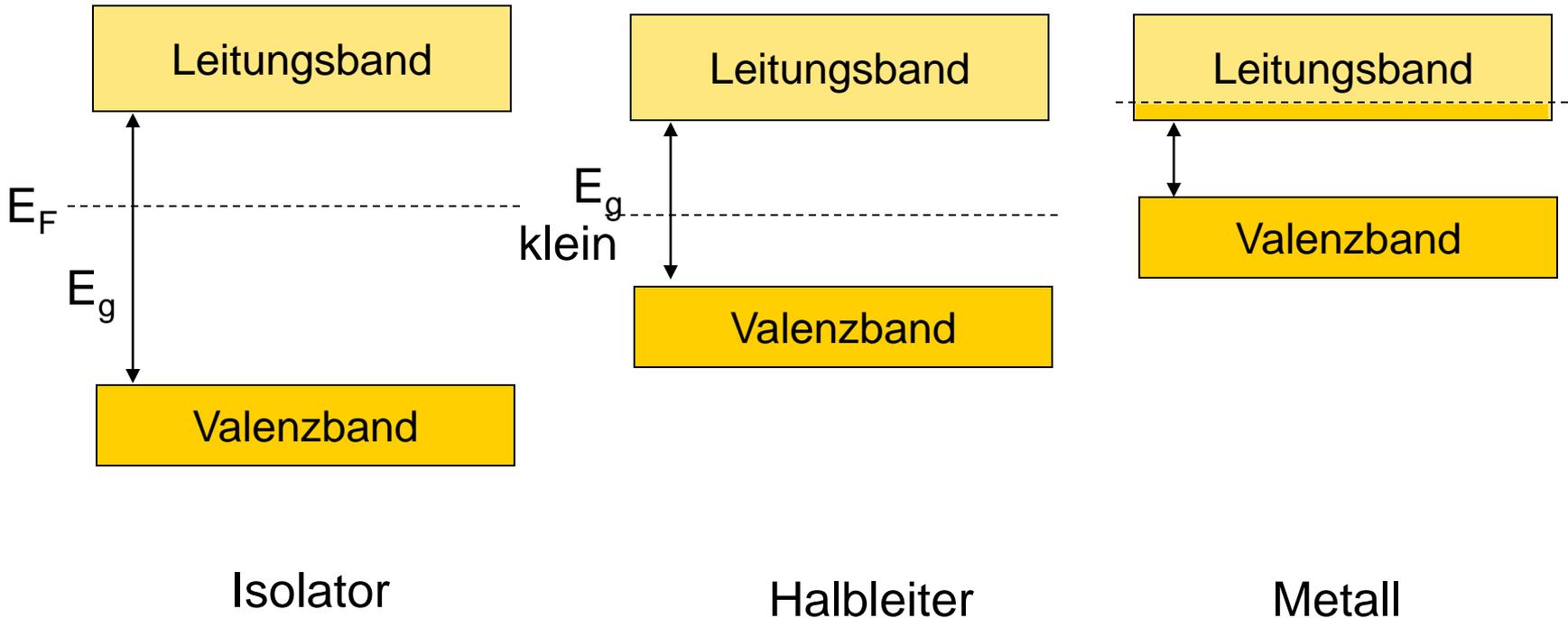
Wichtig vor allem für blaue
Laser und LEDs

Entstehung von „Bändern“



Isolatoren, Halbleiter und Metalle

Valenz und Leitungsbänder



E_F : Fermi-Energie

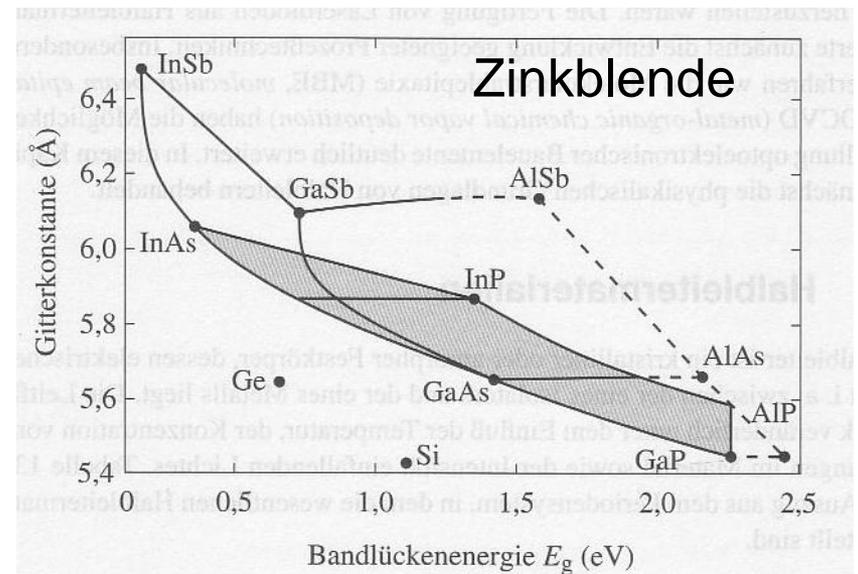
Halbleiter-Materialien

Verbindungshalbleiter
III-V und II-VI

	II	III	IV	V	VI
2		B	C	N	
3		Al	Si	P	S
4	Zn	Ga	Ge	As	Se
5	Cd	In		Sb	Te
6	Hg				

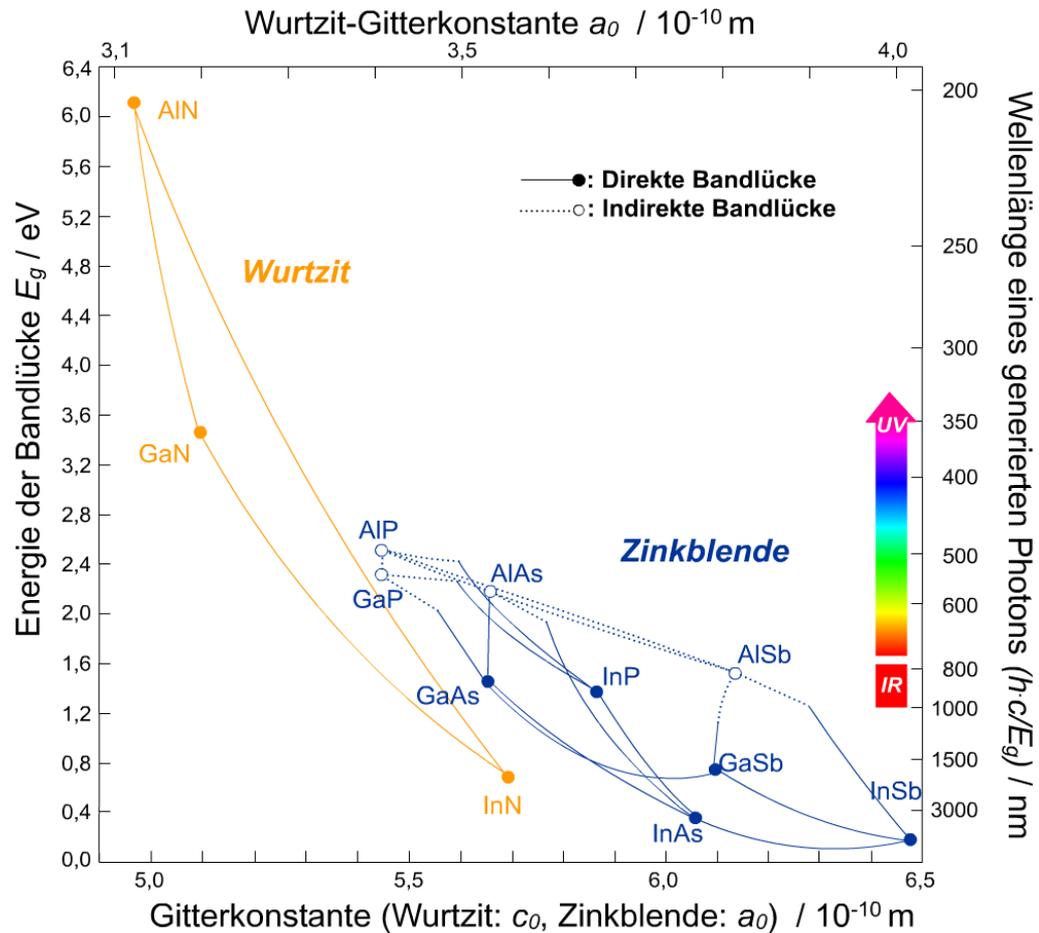
↑
Elementhalbleiter

Bandlückenenergie vs.
Gitterkonstante (III-V)



Bandlückenenergie bestimmt
wesentlich optische Eigenschaften

Halbleiter-Materialien



Bandlücken-Energie in Abhängigkeit der Temperatur

aufgrund von

- thermischer Ausdehnung des Atomgitters
- temperaturabhängiger Wechselwirkung von Elektronen und Gitterschwingungen

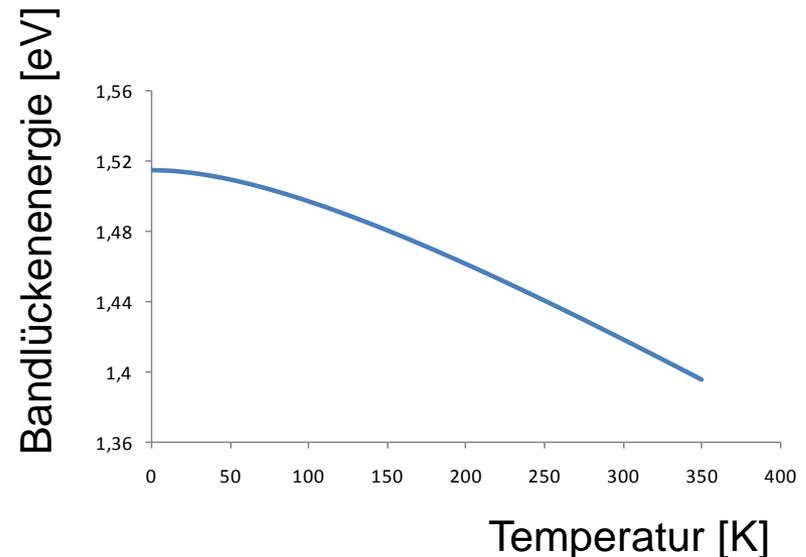
Empirische Formel

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T}$$

α , β : Varshni-Parameter
für GaAs ($E_g(0)=1,515\text{eV}$):

$$\alpha = 5,405 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{K}}, \quad \beta = 204\text{K}$$

Bandlücke in Abhängigkeit der Temperatur für GaAs



Bandlückendesign in Mischungshalbleitern

Technisch sehr wesentliche Eigenschaft: III-V Halbleiter:
Mischbarkeit der Komponenten

Legierung	Direkte Bandlücke	
	E_g (eV) bei T = 300K	Bemerkung
$Al_xIn_{1-x}P$	$1,351 + 2,23x$	
$Al_xGa_{1-x}As$	$1,424 + 1,245x$	$x \lesssim 0,33$, dann Bandkreuzung
$Al_xIn_{1-x}As$	$0,360 + 2,012x + 0,698x^2$	
$Al_xGa_{1-x}Sb$	$0,726 + 1,129x + 0,368x^2$	
$Al_xIn_{1-x}Sb$	$0,172 + 1,621x + 0,43x^2$	
$Ga_xIn_{1-x}P$	$1,351 + 0,643x + 0,786x^2$	$x \lesssim 0,7$, dann Bandkreuzung
$Ga_xIn_{1-x}As$	$0,36 + 1,064x$	
$Ga_xIn_{1-x}Sb$	$0,172 + 0,139x + 0,415x^2$	
GaP_xAs_{1-x}	$1,424 + 1,150x + 0,176x^2$	$x \lesssim 0,45$, dann Bandkreuzung
$GaAs_xSb_{1-x}$	$0,726 - 0,502x + 1,2x^2$	
InP_xAs_{1-x}	$0,360 + 0,891x + 0,101x^2$	
$InAs_xSb_{1-x}$	$0,18 - 0,41x + 0,58x^2$	

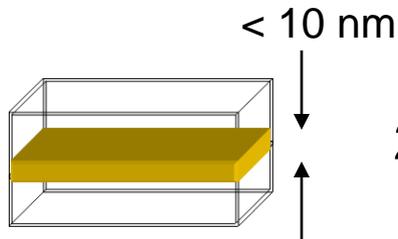
Halbleiter-Nanostrukturen

Volumenhalbleiter
„bulk material“



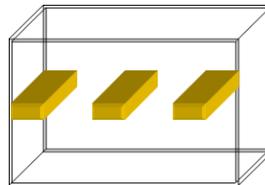
3d

Quantenfilm
„quantum-well“



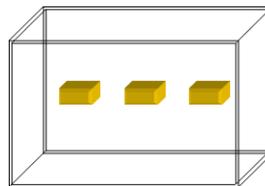
2d

Quantendraht
„quantum-wire“



1d

Quantenpunkt
„quantum-dot“



0d

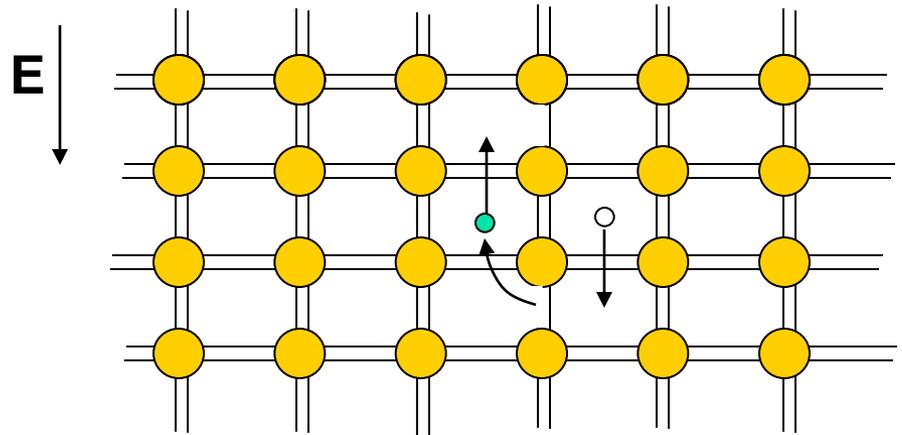
Einschränkung der Bewegung
Ladungsträger im Kristall
→ Neue optische und
elektronische Eigenschaften

Eigenleitung im Halbleiter

Leitungselektronen



Defektelektronen
(„Löcher“)



paarweise:

$$n = p = n_i = p_i$$

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

Si:

$$n_i = 6,7 \cdot 10^9 \frac{1}{\text{cm}^{-3}}$$

GaAs:

$$n_i = 2,2 \cdot 10^6 \frac{1}{\text{cm}^{-3}}$$

$$T = 300\text{K}$$

k_B : Boltzmannkonstante

N_C, N_V : Effektive Zustandsdichten
(Materialkonstanten)

Bandstruktur

... beschreibt den Zusammenhang zwischen Energie und Impuls
(k: Wellenzahl ~ Impuls) der Ladungsträger
... ist von herausragender Bedeutung für die optischen Eigenschaften
der Halbleiter

Wellenfunktion eines freien Elektrons
(analog der ebenen Welle für Photonen):

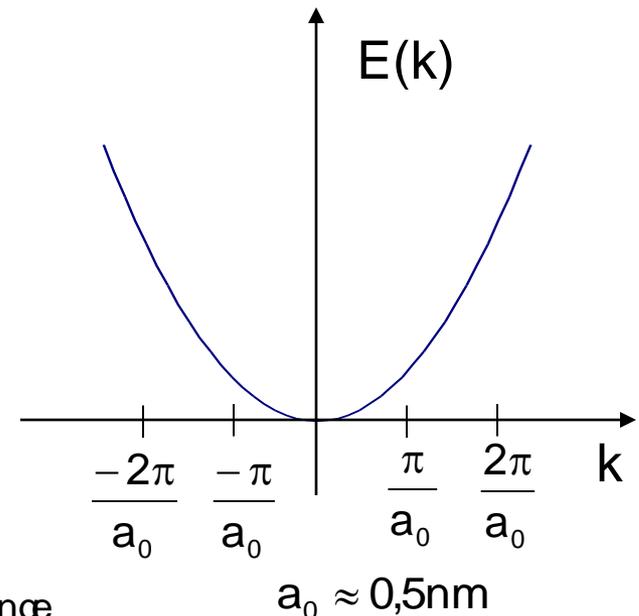
$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

Energiewerte sind kontinuierlich:

$$E = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

p : Impuls des Elektrons

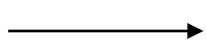
$k = \frac{2\pi}{\lambda}$: Wellenzahl mit Elektronenwellenlänge



Bandstruktur

...mit „Störung“: periodisches Potential $V(\mathbf{r})$ der Atomrümpfe:

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{a})$$



$$\Psi(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r}) e^{j\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

Bloch'sche Wellenfunktionen

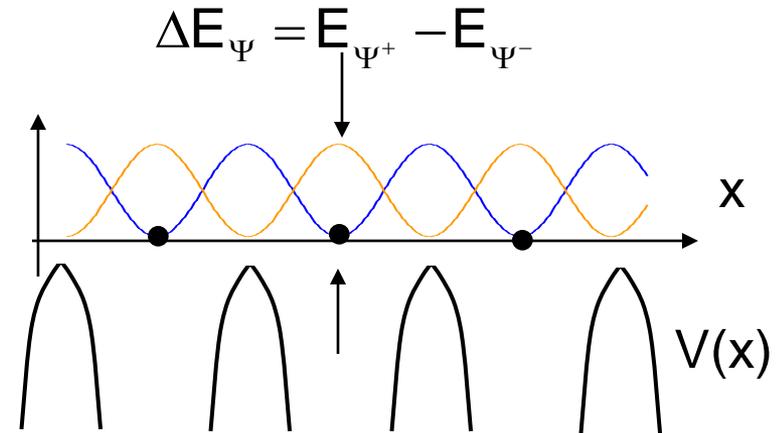
eindimensional: $u_k(x) = u_k(x + a)$

→ Lösungen für $k = \frac{n\pi}{a}$

sind „stehende Wellen“

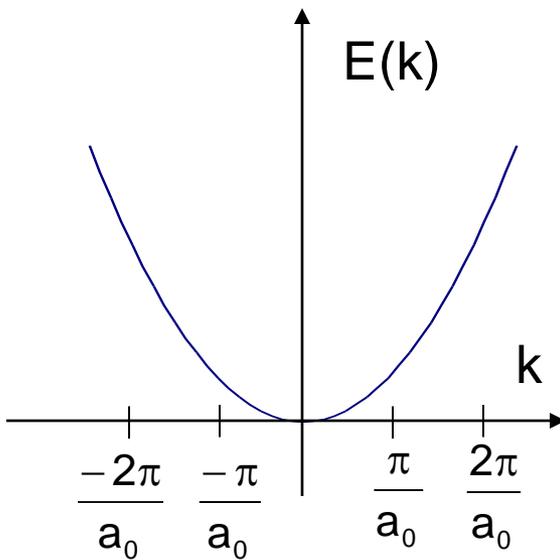
$$\Psi^+ \propto \cos \frac{\pi}{a} x \quad \rightarrow \quad \rho^+ \propto |\Psi^+|^2 \propto \cos^2 \frac{\pi}{a} x$$

$$\Psi^- \propto j \sin \frac{\pi}{a} x \quad \rightarrow \quad \rho^- \propto |\Psi^-|^2 \propto \sin^2 \frac{\pi}{a} x$$

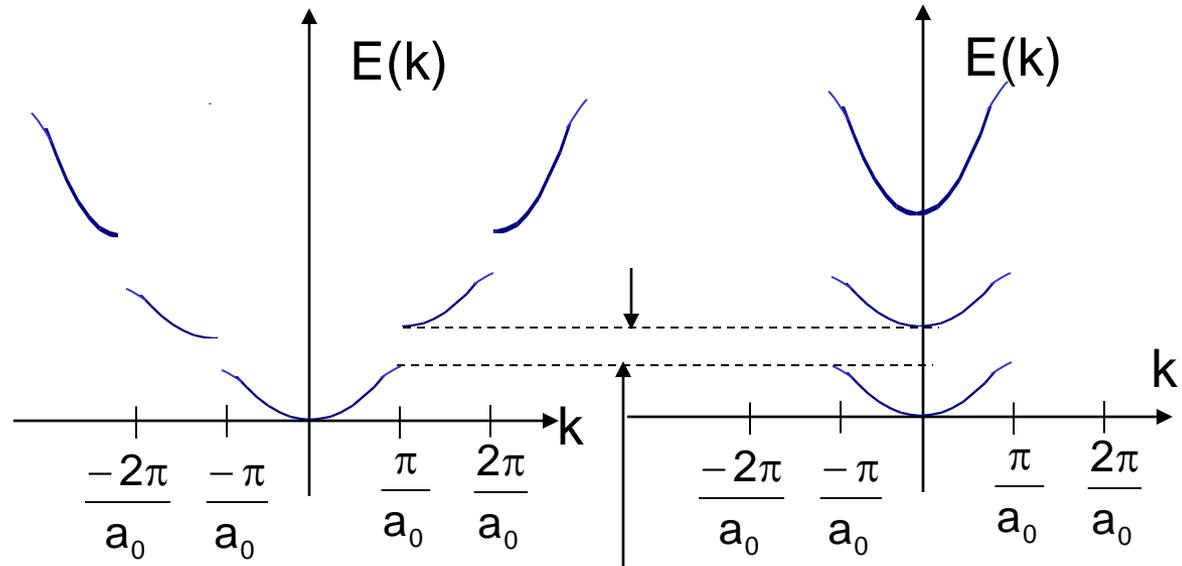


Bandstruktur

freies Elektron



periodisches Potential

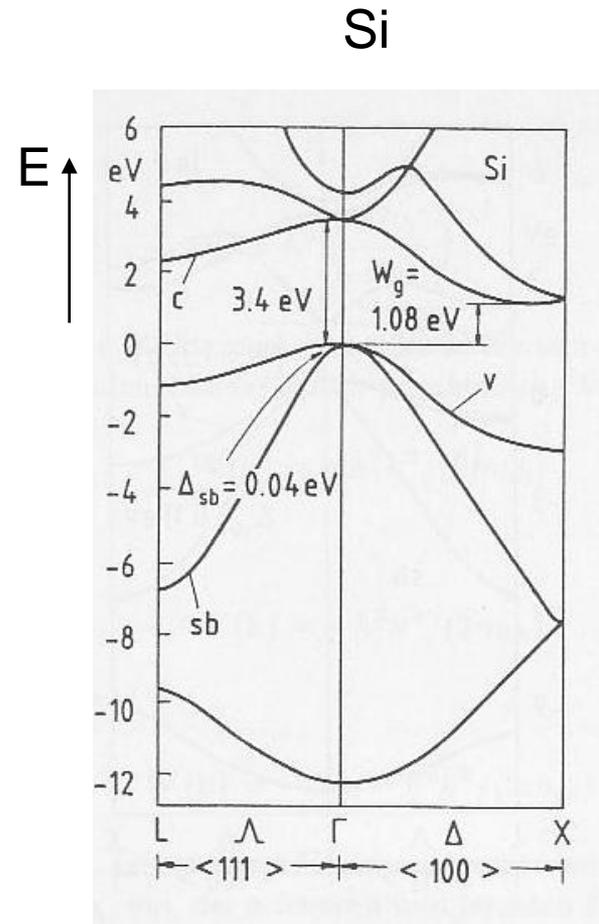
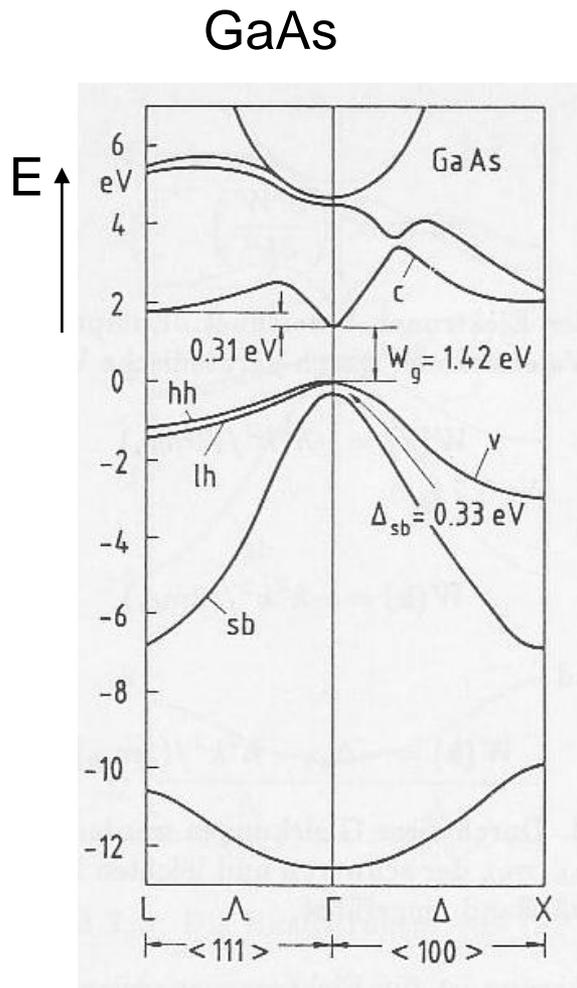


„erweiteres
Zonenschema“

„reduziertes
Zonenschema“

Bespiele

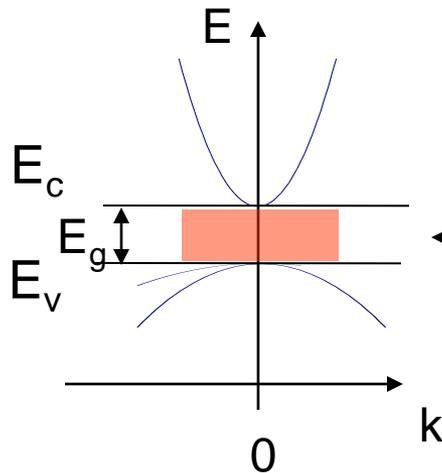
Bandstruktur von GaAs und Si



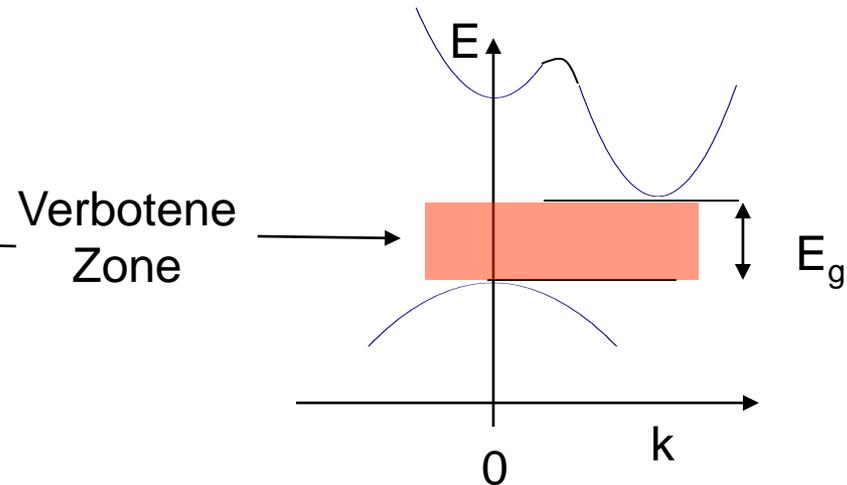
Bandstruktur

Direkte und indirekte Halbleiter

direkte Halbleiter



indirekte Halbleiter



Verbotene Zone

Parameter „effektive Masse“

$$m_{v/c}^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1}$$

Verlauf $E(k)$ nahe der Bandkante

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}$$

Leitungsband

$$E = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}$$

Valenzband

Besetzung der Energiezustände durch Elektronen und Löcher

Besetzung (Konzentration) der Ladungsträger in Leitungs- bzw. Valenzband entscheidend für die optischen Eigenschaften.

Konzentration der Ladungsträger pro dE : $n_\varepsilon = \rho_c(\varepsilon)f_e(\varepsilon)d\varepsilon$

Konzentration (Dichte) der Ladungsträger: $n = \int_0^\infty \rho_c(\varepsilon)f_e(\varepsilon)d\varepsilon$ $\varepsilon = E - E_c$

Besetzungswahrscheinlichkeit (-> Fermi-Verteilung): $f_e(E)$

Zustandsdichte (Anzahl der Zustände pro Energie-Intervall):

Leitungsband

$$\rho_c(E) = \frac{(2m_c)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{(E - E_c)}$$

$$\rho_c(E) = C_E \sqrt{(E - E_c)}$$

Valenzband

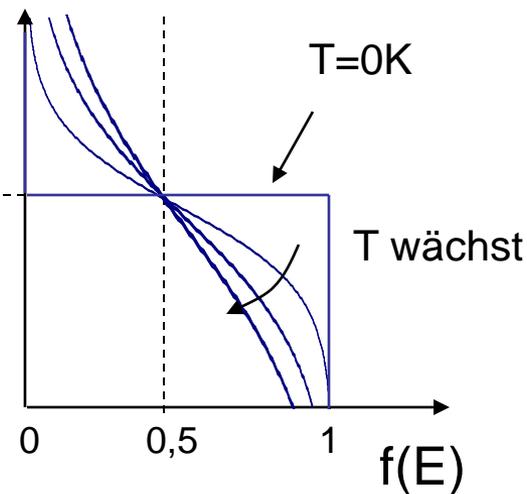
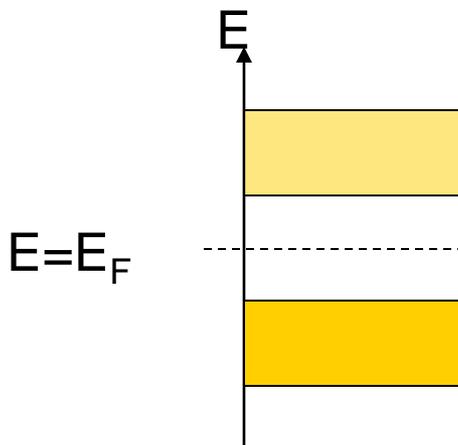
$$\rho_v(E) = \frac{(2m_v)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{(E_v - E)}$$

$$\rho_v(E) = C_L \sqrt{(E_v - E)}$$

Fermi-Verteilung

... gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass Energiezustände durch Elektronen besetzt sind

$$f_e(E) = \frac{1}{e^{\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)} + 1}$$



$$f_h(E) = 1 - f_e(E) = 1 - \frac{1}{e^{\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)} + 1} = \frac{1}{e^{\left(\frac{E_F-E}{k_B T}\right)} + 1}$$

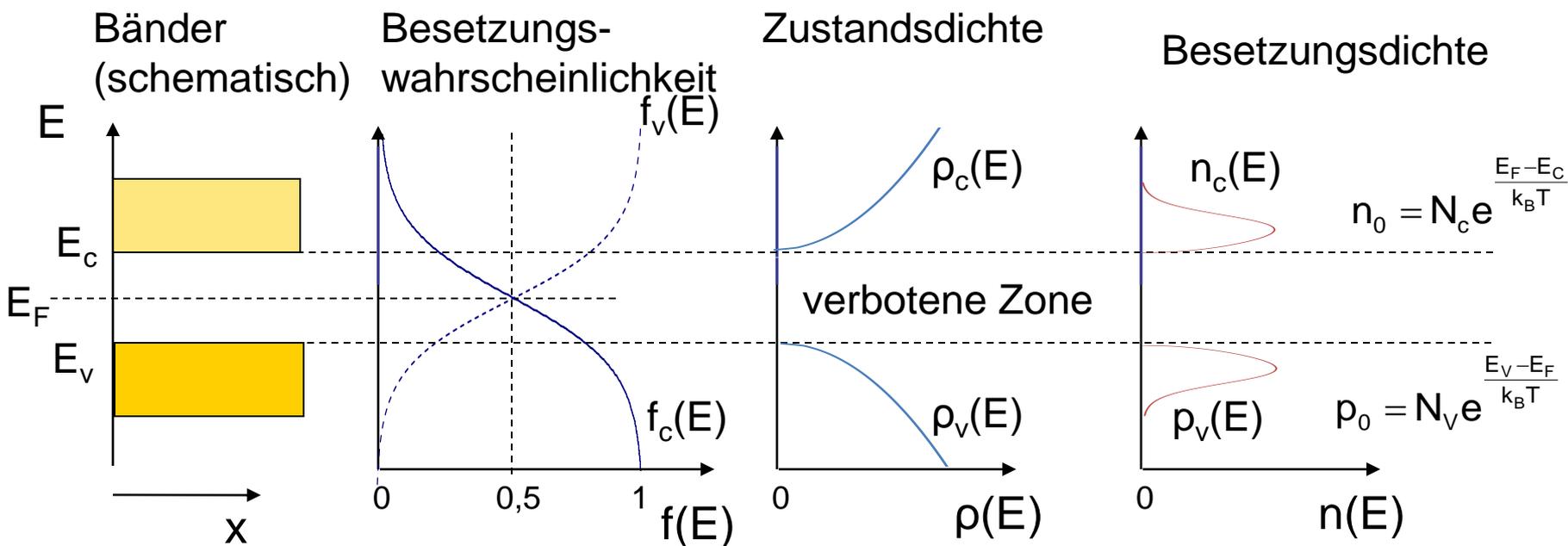
T=0K:

$$f_e(E) = \begin{cases} 1 & \text{für } E \leq E_F \\ 0 & \text{für } E > E_F \end{cases}$$

für $E \gg E_F$ Boltzmann-Näherung:

$$f_e(E) = \frac{1}{e^{\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)} + 1} \approx e^{\left(\frac{-E-E_F}{k_B T}\right)}$$

Ladungsträgerverteilung



Ladungsträgerkonzentrationen
(Massenwirkungsgesetz)
Intrinsische Konzentration

$$n_0 p_0 = n_i^2$$

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

N_c, N_v : effektive
Zustandsdichten

Effektive Zustandsdichten

Intrinsische Ladungsträgerkonzentration

Halbleiter	N_c/cm^{-3}	N_v/cm^{-3}	n_i/cm^{-3}
Si	$2,73 \cdot 10^{19}$	$1,08 \cdot 10^{19}$	$6,71 \cdot 10^9$
Ge	$1,04 \cdot 10^{19}$	$5,42 \cdot 10^{18}$	$2,14 \cdot 10^{13}$
GaP	$3,33 \cdot 10^{19}$	$9,96 \cdot 10^{18}$	$1,892 \cdot 10^0$
GaAs	$4,25 \cdot 10^{17}$	$9,96 \cdot 10^{18}$	$2,25 \cdot 10^6$
InSb	$3,98 \cdot 10^{16}$	$1,17 \cdot 10^{19}$	$2,10 \cdot 10^{16}$

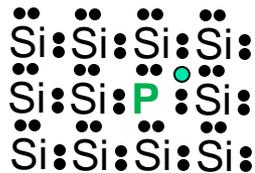
bei T=300 K aus Thuselt, „Physik der Halbleiterbauelemente“

Dotierung

Dotierung: Einbringen von Störstellen in den Kristall während der Züchtung
 typ. techn. relevante Dotierungskonzentrationen: $10^{14}..10^{20} \text{ cm}^{-3}$

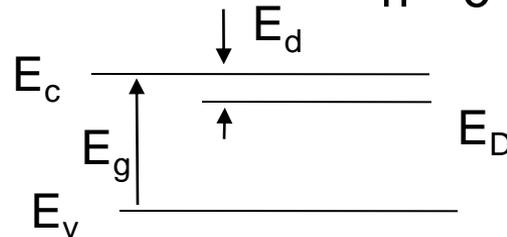
Donatoren

Dotierung von Si (IV*) mit P (V*)



n-Leitung: $n \sim e^{-\frac{E_d}{2k_B T}}$

Majoritäts- Minoritäts-
ladungsträger



n p

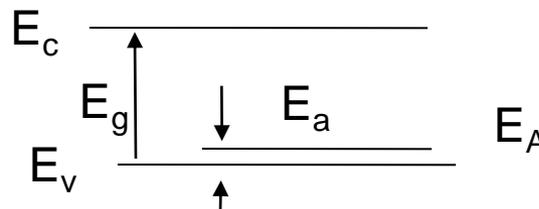
Akzeptoren

Dotierung von Si (IV) mit B (III)



p-Leitung: $p \sim e^{-\frac{E_d}{2k_B T}}$

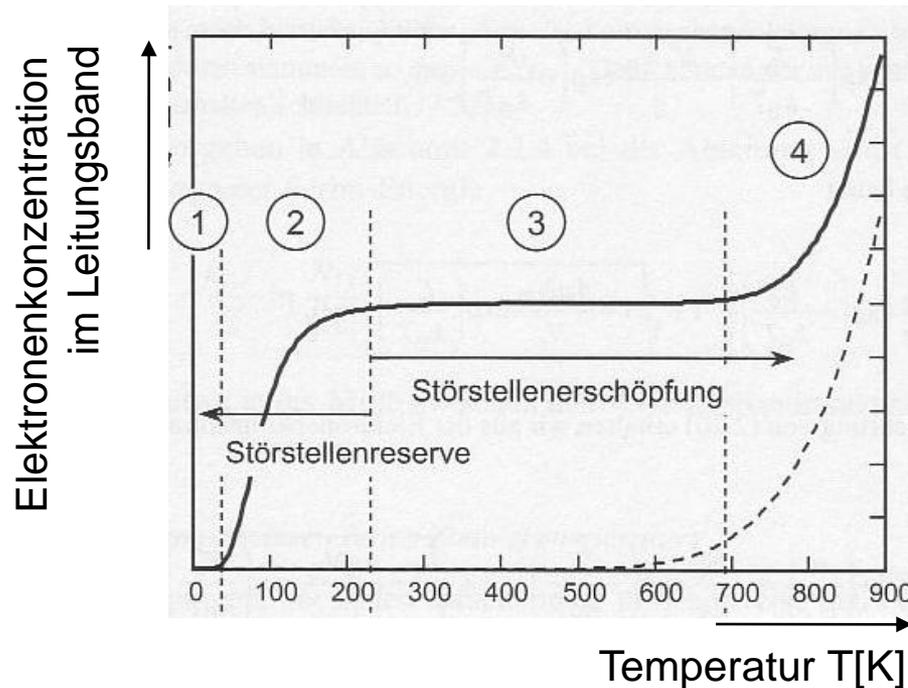
p n



* Nummer der Hauptgruppe

Dotierung: Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerkonzentration

Beispiel: Elektronenkonzentration im Leitungsband bei n-Dotierung



① sehr tiefe Temperaturen: n sehr klein

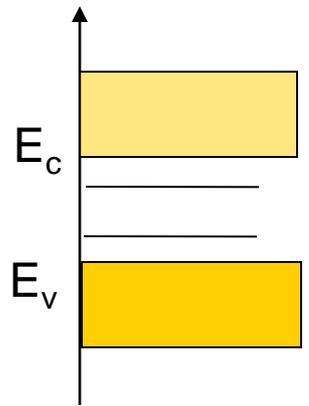
② mittlere Temperaturen exponentieller Anstieg mit steigender Temperatur

③ Zimmertemperatur, $n = N_D$

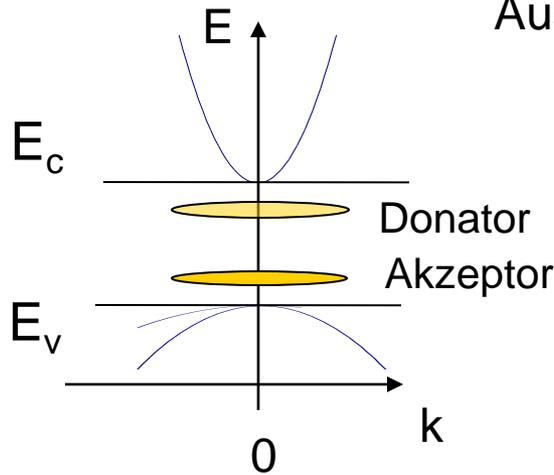
④ Hohe Temperaturen, exponentieller Anstieg (Eigenleitung)

Dotierung und Bandstruktur

Donator- und Akzeptorzustände in der Bandstruktur



Bandmodell



Bandstruktur

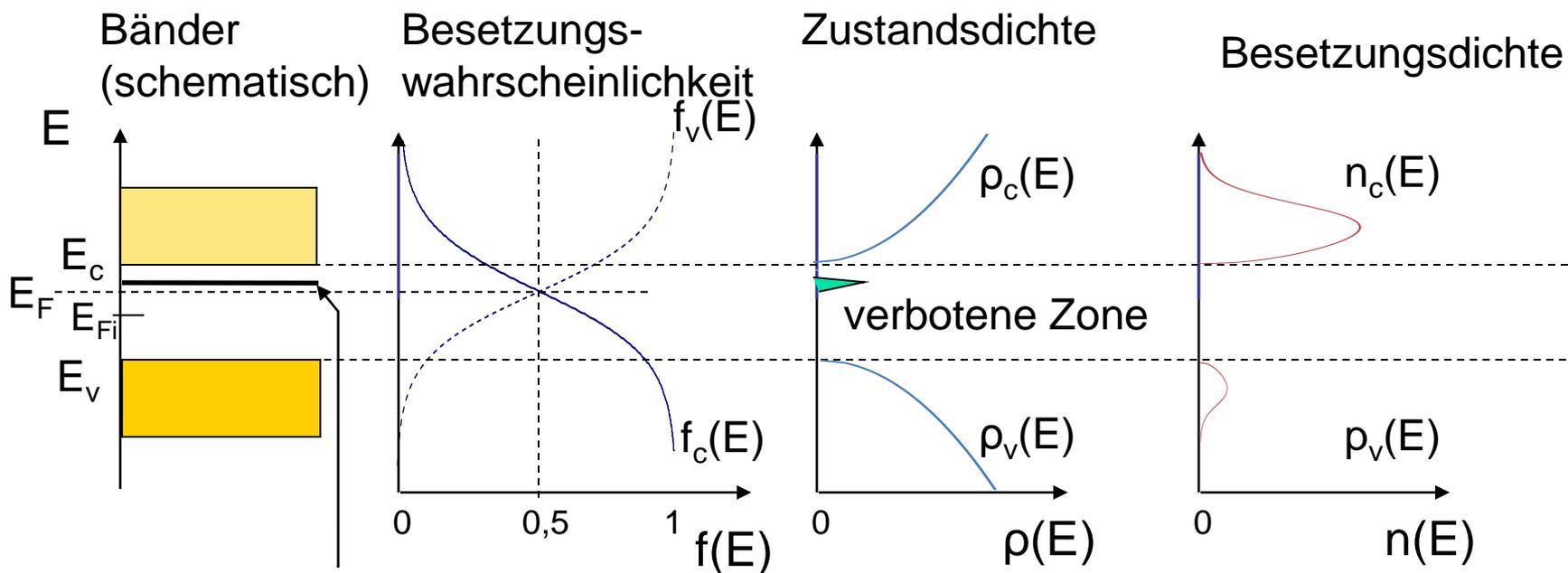
Ausdehnung der Zustände im k-Raum

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq \frac{1}{2} \quad (p = \hbar k)$$

$$\Delta k \geq \frac{1}{2a_0} \quad (\Delta x \approx a_0)$$

Dotierung und Ladungsträgerdichte



Donator-
zustände

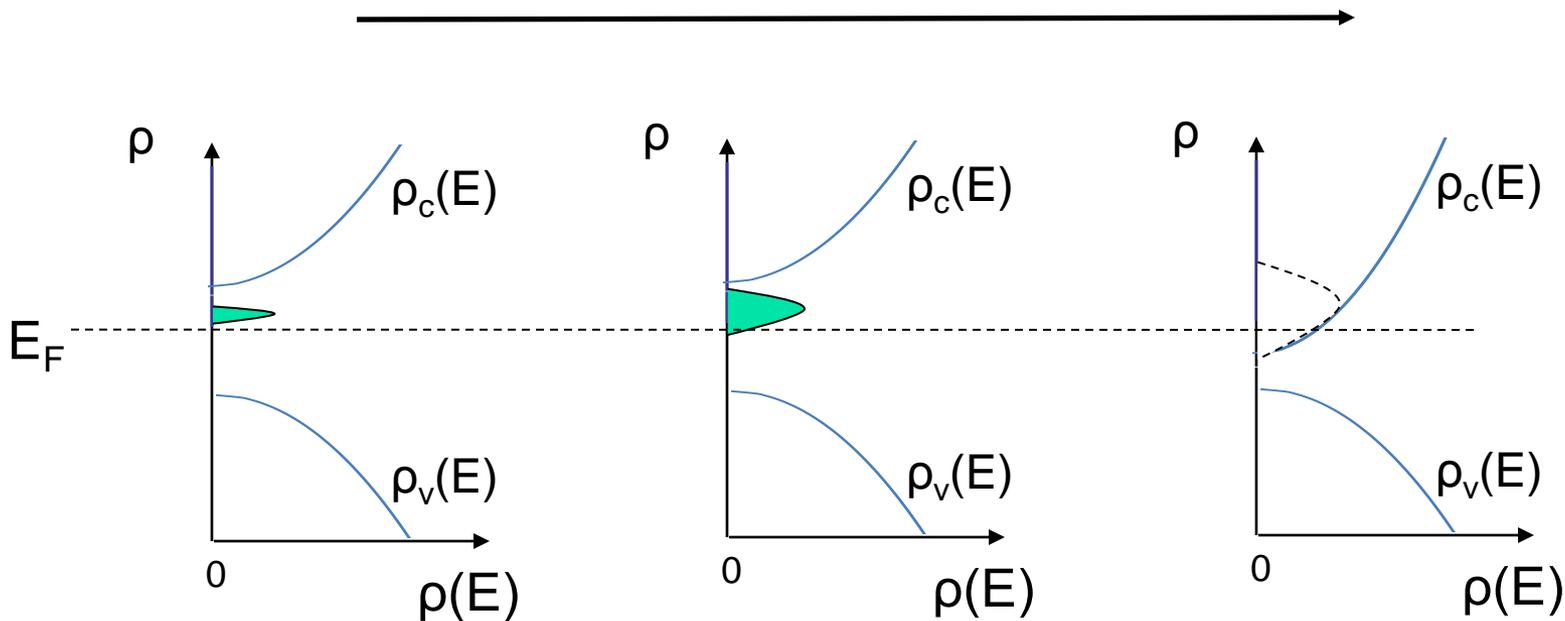
$$n_0 p_0 = n_i^2$$

$$p_0 = \frac{n_i^2}{N_D}, \quad N_D \uparrow \Rightarrow p \downarrow$$

N_D : Donatordichte

Zustandsdichte in Abhängigkeit der Dotierungsstärke

Zunahme der Dotierungsdichte (hier n-Dotierung)

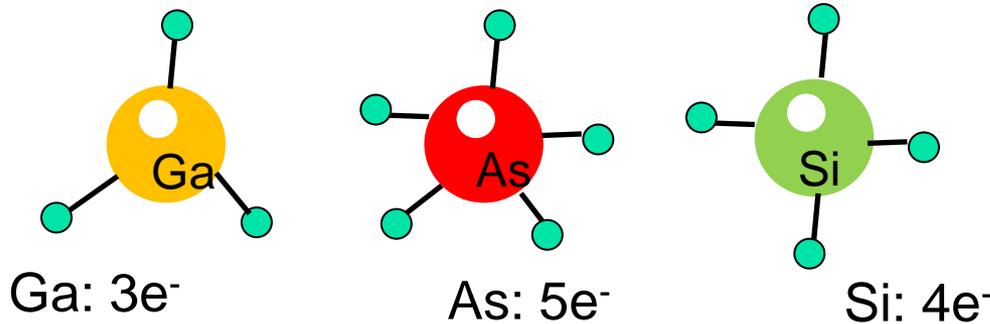


- Veränderung der Bandlückenenergie
- Indirekte Halbleiter \rightarrow direkte Halbleiter
- Fermi-Niveau dringt in Leitungsband ein \rightarrow entarteter Halbleiter

Dotierung von GaAs mit Si

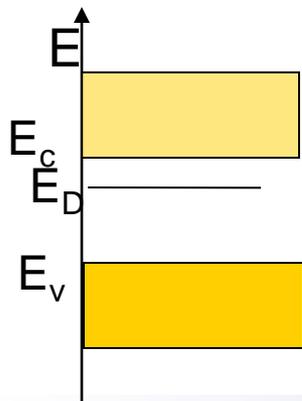
Große Bedeutung in der Halbleiteroptik:

Erzeugung von p oder n dotierten Gebieten mit nur einer Fremdatomart



Si auf Ga Platz ($T > 900^\circ\text{C}$): Donator

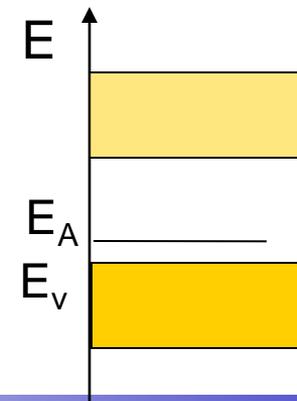
Si auf As Platz ($T < 700^\circ\text{C}$): Akzeptor



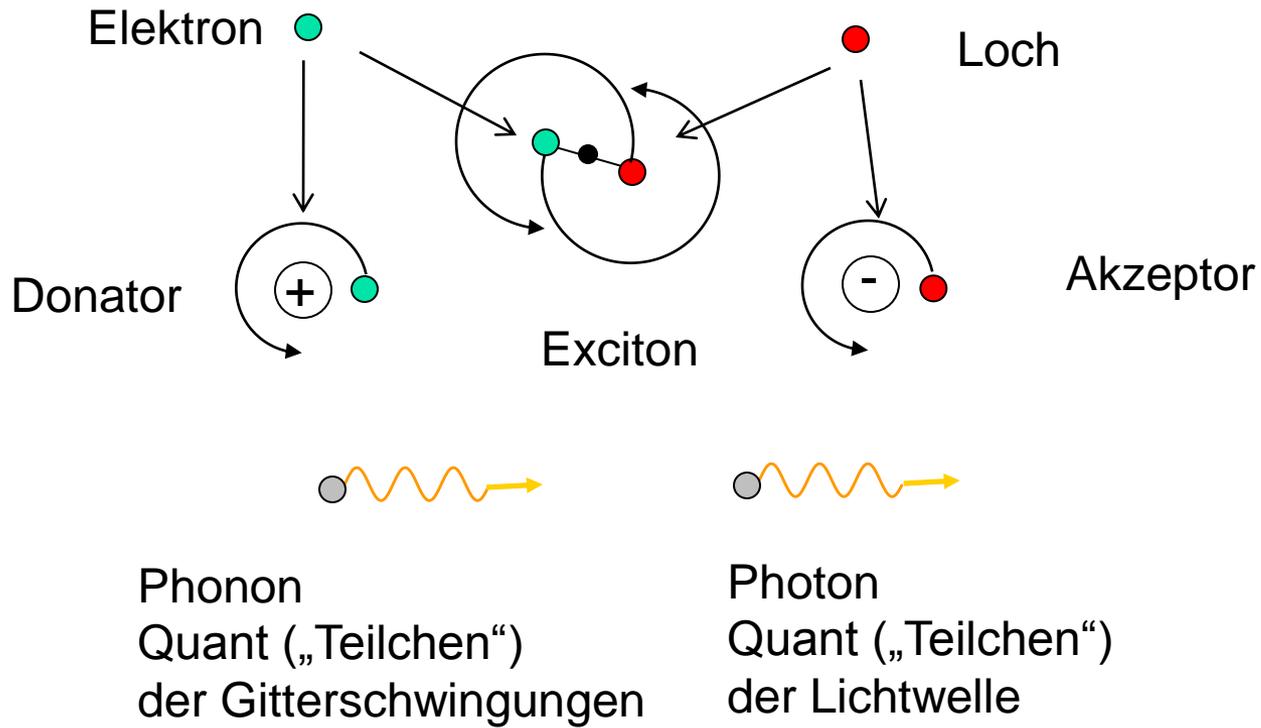
$$E_g = E_c - E_v = 1,51\text{eV}$$

$$\Delta E_D = E_c - E_D = 0,006\text{eV}$$

$$\Delta E_A = E_A - E_v = 0,35\text{eV}$$



Teilchen der Halbleiterphysik



Lernziele Kapitel 3

- Halbleiter
- Kristallstrukturen der optischen Halbleiter
- Bändermodell (Valenzband, Leitungsband)
- Bandstruktur (qualitative Vorstellung $E(k)$)
 - Direkte und indirekte Halbleiter
- Besetzung der Zustände in den Bändern
- Fermi-Energie
- Dotierung
- „Teilchenzoo“ des Halbleiters