

Materialwissenschaften, SS 2008

Ernst Bauer
Ch. Eisenmenger-Sittner
Josef Fidler

- 1.) Kristallstrukturen
- 2.) Strukturbestimmung
- 3.) Mehrstoffsysteme
- 4.) Makroskopische Eigenschaften von Festkörpern
- Metalle und Halbleiter**

Vorlesung am 17. Mai 2010

Eigenschaften von Metallen

- **Glanz (Spiegelglanz)** Die frei beweglichen Elektronen können eingestrahlte, aufgenommene Energie in einem breiten Wellenlängenbereich wieder unverändert emittieren; so entstehen der Glanz und der Spiegeleffekt. Aus glatten Metalloberflächen werden deshalb Spiegel angefertigt.
- **Undurchsichtigkeit** Die an der Metalloberfläche stattfindende Reflexion (vgl. Physik II) bewirkt zugleich, dass Licht das Metall nicht durchdringen kann. Metalle sehen deshalb bereits in dünnsten Schichten in der Durchsicht grau bis schwarz aus.
- **Gute elektrische Leitfähigkeit** Die Drift der frei beweglichen Elektronen in eine Richtung begründet den makroskopischen Stromfluss.
- **Gute thermische Leitfähigkeit** Die leicht verschiebbaren Elektronen nehmen an der Wärmebewegung teil und tragen so zum Wärmetransport bei (siehe auch: Wiedemann-Franz-Gesetz).
- **Gute Verformbarkeit (Duktilität)** Im Metallgitter befinden sich Versetzungen, die sich schon bei einer Spannung unterhalb der Trennspannung bewegen können; je nach Gittertyp verformt sich also ein Metall eher, als dass es bricht.
- **Hoher Schmelzpunkt** durch die allseitig gerichteten Bindungskräfte.

Bedeutung im täglichen Leben herausragend!

Einsatz entsprechend der Eigenschaften

- Münzen: der Einsatz von Au, Ag, Pt ist sehr teuer; Ni dagegen kann Allergie erzeugen;
- bei chemischen Prozessen: Pt als Katalysator; Stabilität und Reaktivität der einzelnen Metalle ist wesentlich; Na, K, Hg und dgl. müssen damit für die meisten Anwendungen ausgeschlossen werden (Korrosion).
- Mechanische Eigenschaften: reine Elemente sind oftmals zu weich; Legierungen weisen aber höhere elektrische Widerstände auf.
- Thermische Eigenschaften: Temperaturkoeffizienten des elektrischen Widerstandes, der thermischen Ausdehnung, etc. müssen beachtet werden; oberhalb von 1000°C kaum einsetzbar.
- Kompatibilität mit anderen Materialien: beim Schweißen, Löten, Thermospannungen und dgl.

Anforderungen an metallisch leitende Verbindungen auf IC's

erforderliche Eigenschaften	Erfordernisse <u>NICHT</u> erfüllt von
sehr gute Leitfähigkeit hohe eutektische Temperatur mit Si geringe Diffusion in Si geringe Oxidationsrate, stabile Oxyde hoher Schmelzpunkt Minimale Wechselwirkung mit Si Substraten Minimale Wechselwirkung mit poly Si Keine Wechselwirkung mit SiO ₂ Chemische Stabilität Leichte Strukturierbarkeit Resistenz gegen Elektromigration und vieles andere	allen außer Ag, Cu Au, Pd, Al, Mg Cu, Ni, Li Mg, Fe, Cu, Ag Al, Mg, Cu Pt, Pd, Rh, V, Ni, Mo, Cr Pt, Pd, Rh, V, Ni, Mo, Cr Hf, Zr, Ti, Ta, Nb, V, Mg, Al Fe, Co, Ni, Cu, Mg, Al Pt, Pd, Ni, Co, Au Al, Cu ...

trotzdem: **Aluminium** (mit div. Legierungen)

Das klassische Elektronengas

metallische Bindung -> Elektronen von Metallen fast frei beweglich;
keine WW mit Atomrümpfen; keine WW untereinander

$$\tau = l/v$$

τ .. freie Flugzeit (Relaxationszeit); l ... mittlere freie Weglänge; v .. Elektronengeschwindigkeit

$$\dot{v} = -eE/m$$

Beschleunigung im elektrischen Feld E

$$v = -eE\tau/m,$$

Zusatzgeschwindigkeit im elektrischen Feld E

$$v_d = -(1/2)eE\tau/m$$

mittlere Zusatzgeschwindigkeit

$$\mu = \frac{1}{2} \frac{e\tau}{m}$$

**Beweglichkeit der Ladungsträger :=
Geschwindigkeit pro Feld**

$$\sigma = en\mu = \frac{1}{2} \frac{e^2 n \tau}{m}$$

elektrische Leitfähigkeit (feldunabhängig)

Thermische Leitfähigkeit

thermodynamisches Modell des einatomigen Gases

$$\lambda = \frac{1}{2} n v l k_B$$

λ ... thermische Leitfähigkeit; n .. Teilchenzahl,
 k_B .. Boltzmannkonstante

Wiedemann-Franz Gesetz:

$$\frac{\lambda}{\sigma} = \frac{m k_B v^2}{e^2} = \frac{3 k_B^2}{e^2} T$$

nur Konstante!

**thermische – und elektrische Leitfähigkeit
durch gleiche Mechanismen bewirkt!**

Größe beider Koeffizienten abhängig von freier Weglänge; diese beruht

- auf Einlagerung von Fremdatomen,
- auf Abweichungen vom idealen Gitterbau: Kristallitgrenzen, Dislokationen, mechanische Verformungen, usw.,
- auf thermische Gitterschwingungen, die ebenfalls momentane Abweichungen von den idealen Abständen zwischen Gitterteilchen bedingen.

Rumpfionen und freie Elektronen haben nur geringe Bedeutung als Streuzentrum wegen:

- * **periodischem Potential im Kristall**
- * **Pauli Verbot**

daher: Leitfähigkeit groß bei tiefer Temperatur und sehr reinen Metallen

Hinweis: ideale Leitfähigkeit (ohne Streuprozesse) ist keine Supraleitung

Streuung von Elektronen an geladenen Teilchen

Annahme: $Ze^2/r \sim 3/2k_B T$

Dichte der geladenen Teilchen N , Ladung Ze , Stoßparameter p
 $p = 2a$ minimaler Abstand des Elektrons vom Streuzentrum

$$E_{pot} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r}$$

Potential der Ladung Ze im Abstand r

mit $E = 3/2 k_B T \sim E_{pot}$ folgt mit

$$p_{kr} = 2a = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 E}$$

sofort

$$p_{kr} = \frac{2Ze^2}{12\pi\epsilon\epsilon_0 k_B T}$$

Streuungswirkungsquerschnitt

$$A = \pi p_{kr}^2 \quad \text{freie Weglänge } l = 1/(NA)$$

$$\tau = \frac{l}{v} = \frac{1}{NA} \frac{1}{\sqrt{3k_B T/m}}$$

freie Flugdauer, „Relaxationszeit“

elektrische Leitfähigkeit mit $mv^2/2 = (3/2)k_B T$ folgt

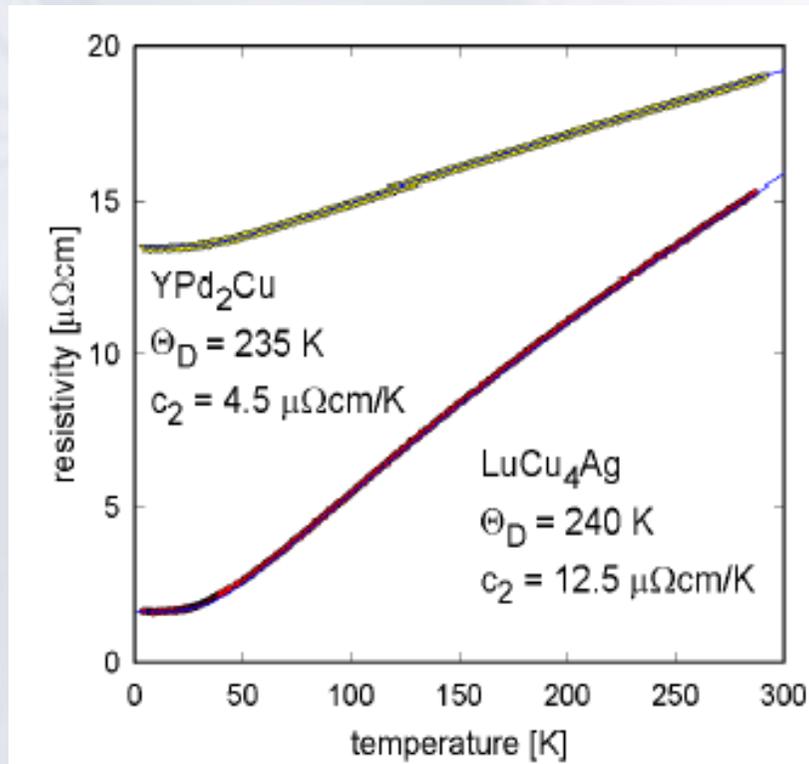
$$\sigma = \frac{1}{2} \frac{e^2}{m} n \tau = \frac{18\pi}{\sqrt{3}} \frac{\epsilon^2 \epsilon_0^2 k_B^{3/2} T^{3/2} n}{m^{1/2} Z^2 e^2 N}$$

$$\sigma \sim T^{3/2}$$

selten zu beobachten!

$$\sigma \sim T^{-3/2}$$

manchmal für Metalle



gemessene Temperaturabhängigkeit einfacher intermetallischer Verbindungen

durchgezogene Linie: least squares fit, **Bloch-Grüneisen Modell**

$$T \ll \Theta_D \quad \rho \sim T^5$$

$$T \gg \Theta_D \quad \rho \sim T$$

Das Fermi-Gas - Ausgangspunkt: Heisenberg Unschärfe

Kristall, Kantenlänge L ; **Ortsunschärfe** $\Delta x = L$;
minimale Impulsunschärfe $\Delta p = h/L$

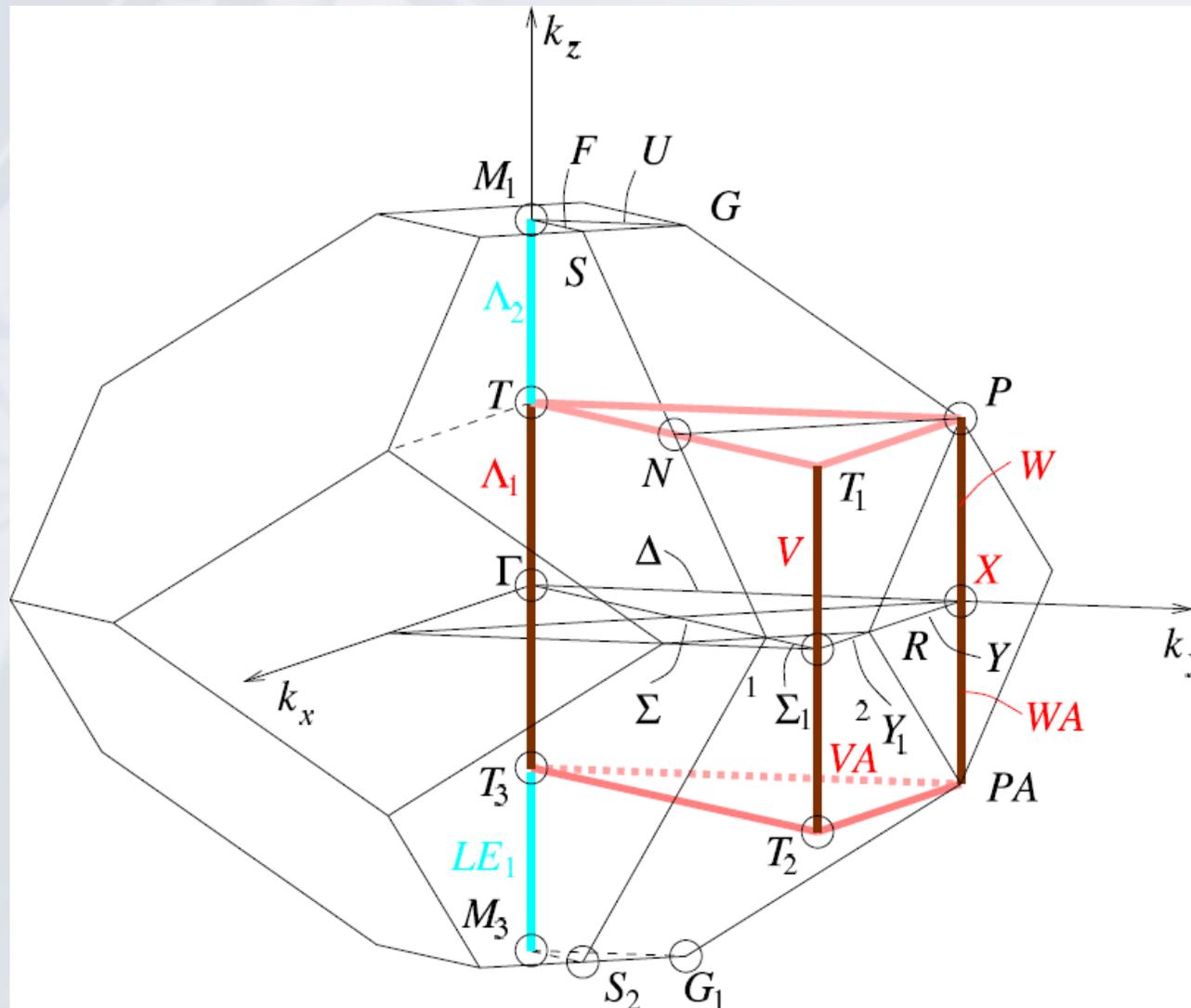
*jedes Elektron beansprucht Impulsintervall Δp für sich;
zusätzlich: **Spin auf und Spin ab.***

mögliche Werte des Impulsvektors \mathbf{p} : Abstand h/L voneinander

jeder Elektronenzustand hat also **Volumen** h^3/L^3 ; solche Zelle
nimmt max. 2 Elektronen auf (**Spin auf und Spin ab**).

Punktgitter NICHT „verwandt“ mit Kristallgitter
(würde auch für homogene Substanz gelten
und 3-dim. Potentialtopf gelten).

**Aus diesen „Punkten“ wird die Brillouinzone konstruiert,
so wie Wigner-Seitz Zelle des realen Gitters**



Brillouinzone

**tetragonale
Gitterstruktur**

$a = b \neq c$

$c/a > 1$

N Elektronen brauchen $N/2$ Zellen; **Volumen** $(1/2)Nh^3/L^3$

Kugelvolumen mit **Fermi Impuls** p_F als Radius, d.h.

$$(1/2)Nh^3/L^3 = 4\pi p_F^3/3$$

daraus folgt

$$p_F = h(3N/(8\pi L^3))^{1/3}$$

und mit $n = N/L^3$

$$p_F = h \left(\frac{3}{8\pi} n \right)^{1/3}$$

Fermienergie

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{8\pi} n \right)^{2/3}$$

wenn $E_F \gg k_B T$:
**entartetes
 Elektronengas
 oder Fermigas**

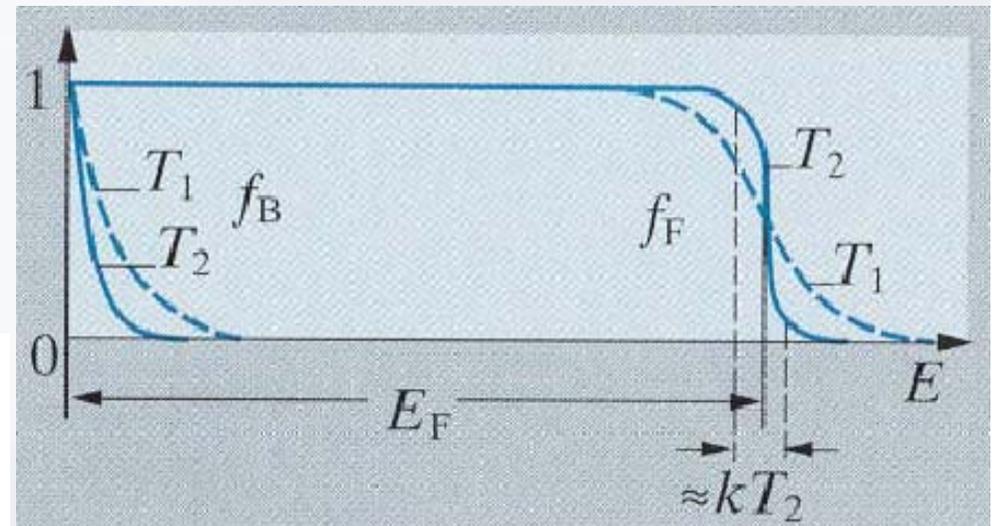
aus E_F wird n bestimmt; dn/dE bilden -> **Zustandsdichte**

$$dn = 4\pi \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} dE$$

Modell des freien Elektronengases: viele phys. Größen nur abhängig von N und V ; $N(E) \sim E^{(1/2)}$

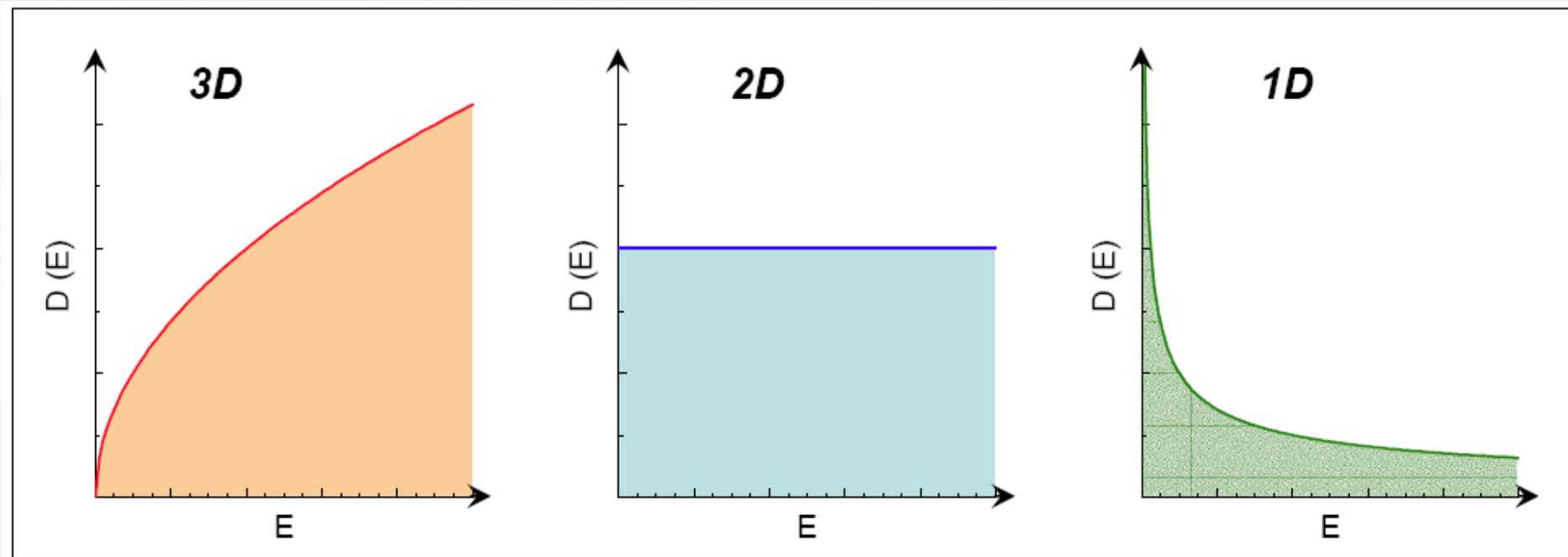
Bei $T = 0$ sind alle Zustände bis $E = E_F$ mit **Wahrscheinlichkeit 1** besetzt; für $T > 0$ gilt:

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E - E_F)/(k_B T)] + 1}$$



Fermi – Dirac Verteilungsfunktion für Fermionen (halbzahliger Spin)

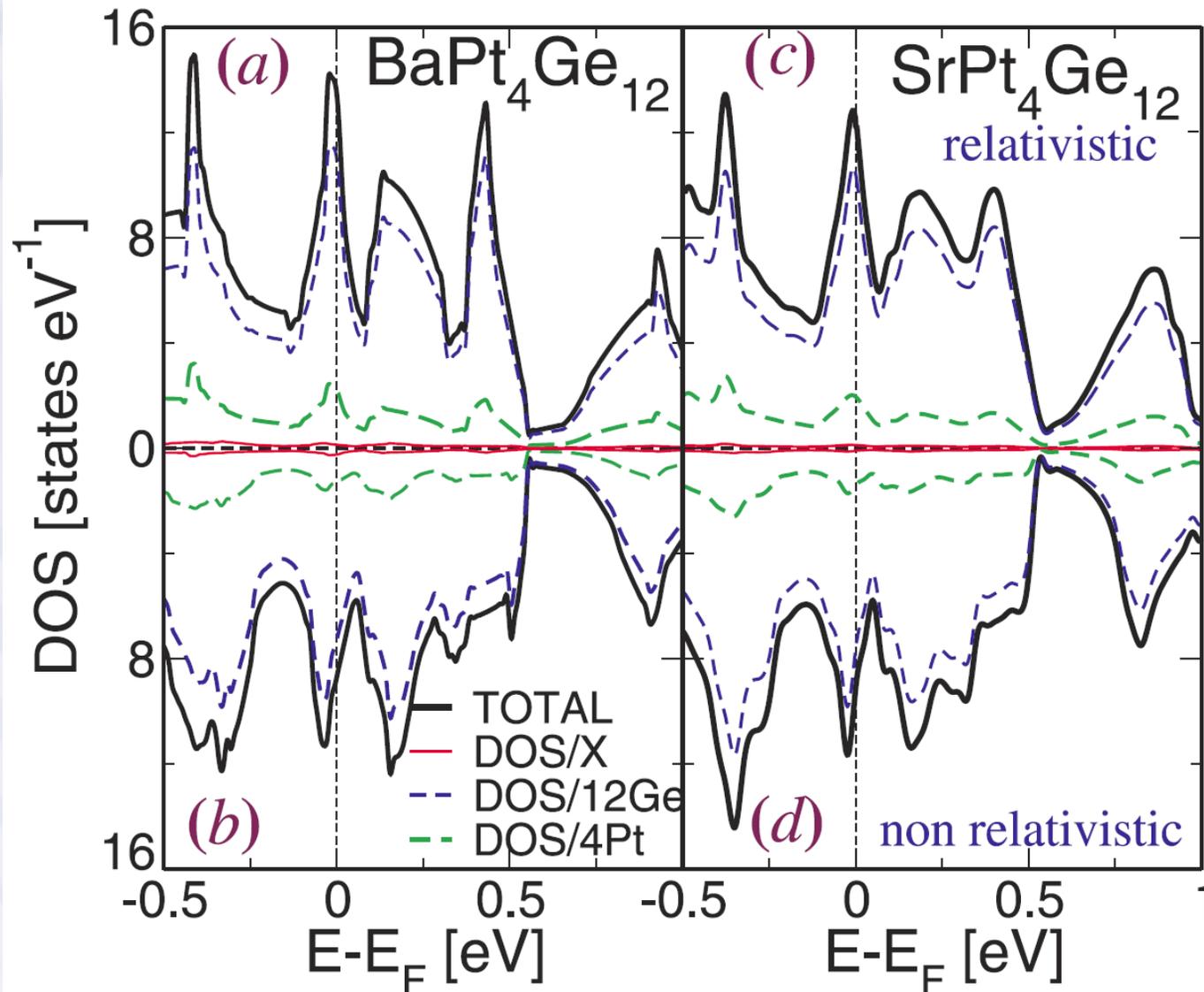
Zustandsdichte für das Modell des freien Elektronengases für verschieden dimensionale Systeme



$$D(E) \sim \sqrt{E}$$

$$D(E) \sim \text{const.}$$

$$D(E) \sim 1/\sqrt{E}$$

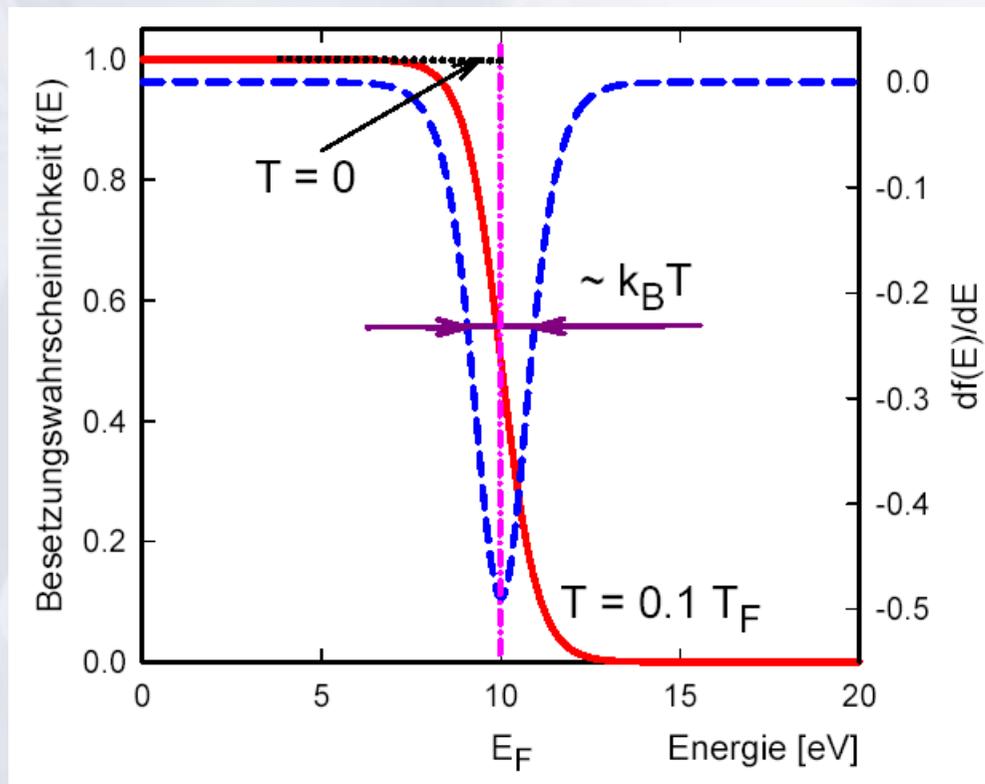


Elektronische Zustandsdichte ($T = 0$) Ge-basierter Skutterudite

nichtentartetes Elektronengas:

ALLE Teilchen haben mittlere Energie, um $k_B T$ größer als bei $T = 0$.

Im entarteten (Fermi) Gas gilt Energieerhöhung nur für Teilchen um E_F !
 Generell: Ensemble von Teilchen im Potentialtopf und Pauliprinzip ist **entartet wenn $E_F \gg k_B T$**



Zu physikalischen Eigenschaften tragen demnach nur $k_B T/E_F$ Elektronen bei!

d.h. spezifische Wärme oder Paulisuszeptibilität ist **WESENTLICH** kleiner, als es der Teilchenzahl entspricht

Metalloptik

Elektromagnetische Welle (z.B. eine Lichtwelle) dringt üblicherweise NICHT in Metalle ein: Absorption

Merke: hohe Absorption bewirkt hohe Reflexion (vgl. Physik II)

Grenzfrequenz der Reflexion
= Langemuir Frequenz
= Plasma Frequenz

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon\epsilon_0 m}}$$

$\omega > \omega_0$: Metalle werden transparent

$\omega < \omega_0$: Metalle absorbieren

$$\check{n} = n' + i\kappa \longrightarrow \epsilon$$

$$n = 10^{28} \text{ bzw. } 10^{29} \text{ m}^{-3}$$

→

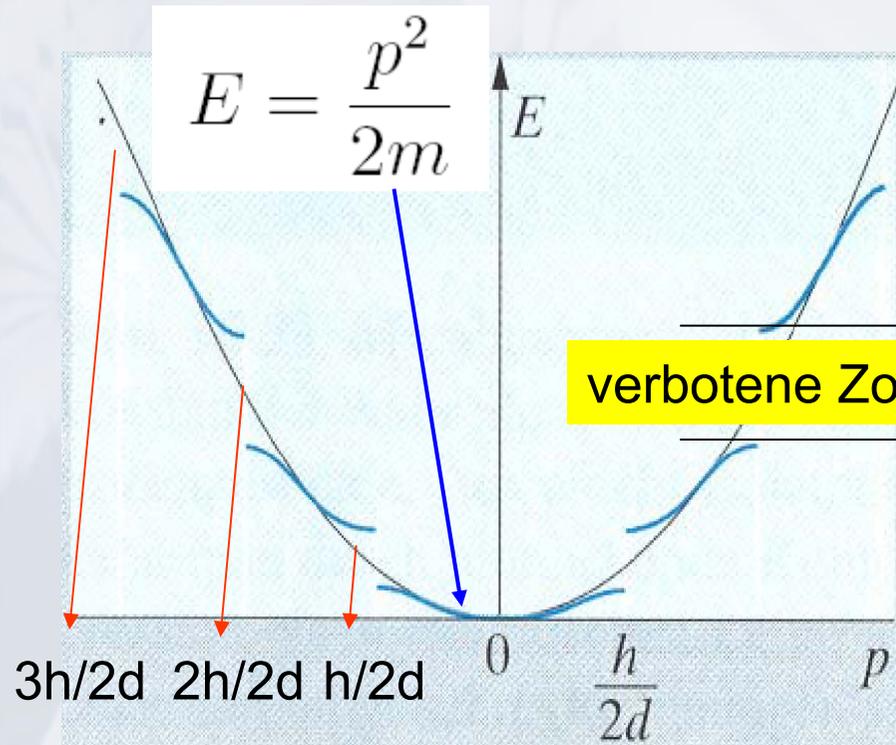
$$\hbar\omega_0 = 3.5 \text{ bzw. } 11.1 \text{ eV}$$

$$\lambda = 340 \text{ bzw. } 110 \text{ nm}$$

Gold: Langemuirfrequenz im Sichtbaren (violett) → **goldgelbe Farbe**

Energiebänder

Wechselwirkung der Elektronen mit den Rumpfionen modifiziert Bewegung der Ladungsträger (für bestimmte Teilchen-Impulse).



Welle ψ Energie E Impuls p

Frequenz $\omega = E/\hbar$

Wellenlänge $\lambda = h/p$

Ausbreitungsvektor $k = p/\hbar$

Erfüllt Welle **Bragg-Bedingung**

→ **stehende Welle; (Phase = π)**

senkrechter Einfall, Netzebenenabstand d :

$$\Delta\varphi = k\Delta s \rightarrow \pi = \frac{2\pi}{\lambda}d \rightarrow \lambda = 2d$$

$$k = \frac{n\pi}{d} \quad \text{oder} \quad p = \frac{n\pi\hbar}{d}$$

freie Elektronen: $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ $E = p^2 / (2m)$

kritische k Vektoren enden auf Brillouin Zonengrenze; z.B. $k = \pi/d$

stehende Wellen mit: $\psi \sim \sin(\pi x/d)$ und $\psi \sim \cos(\pi x/d)$

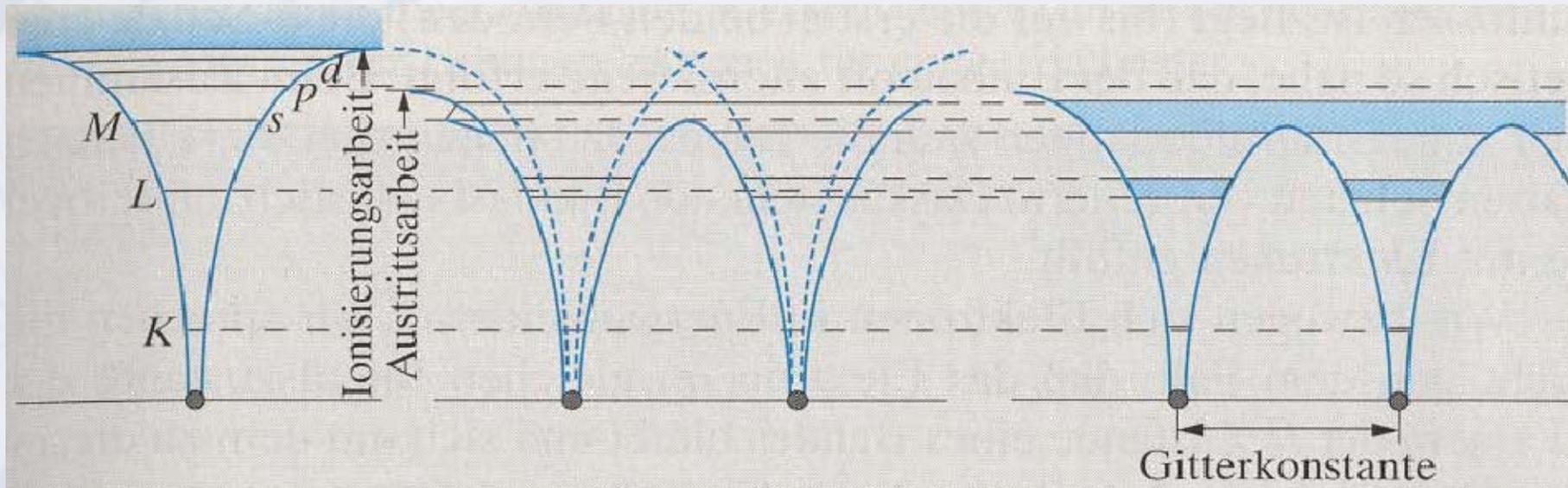
Für **cos-Welle** ist ψ^2 (=Aufenthaltswahrscheinlichkeit) **am Ionenort maximal** ($x = 0, d, 2d \dots$) für sin-Welle ist ψ^2 Null, dazwischen max.;
Konsequenz: potentielle Energie für **cos ψ^2 minimal** („+/- Anziehung“)

Der im freien Elektronengas eindeutig bestimmte E-Wert zu $p = \pi\hbar/d$ spaltet auf; die **Parabel wird „aufgeschnitten“**

Breite der erlaubten Energiebänder: einige eV
Breite der verbotenen Zonen: einige eV

„**Bandstruktur**“ abhängig von Kristallsymmetrie und Ausbreitungsrichtung der Elektronenwelle

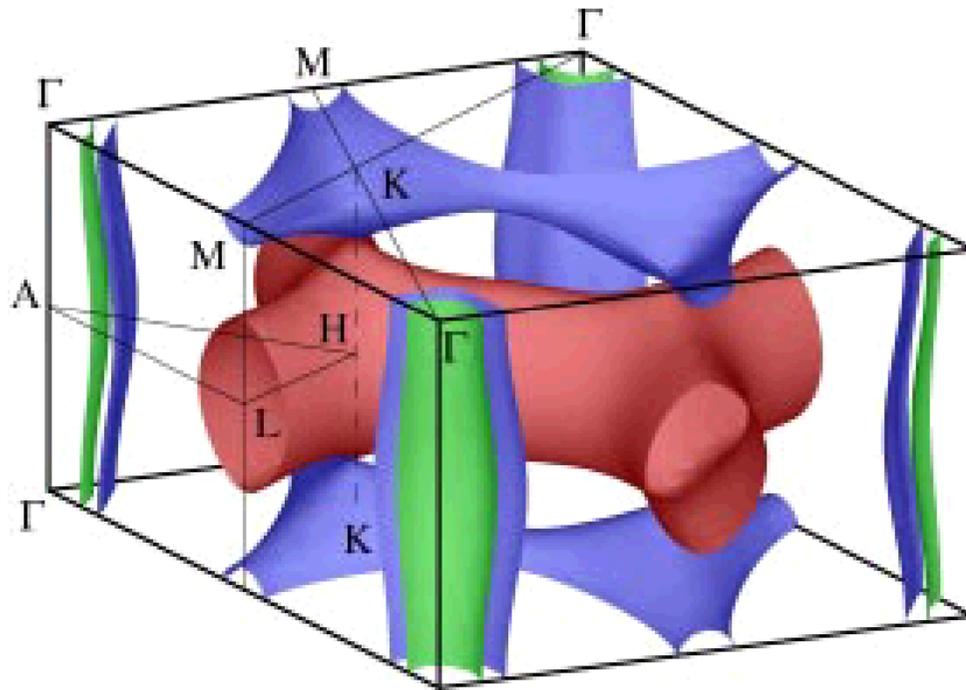
Aus Einzelelektronenzuständen im isolierten Atom mit genau definierten Energien werden **im Festkörper „Bänder“**, die eine **„elektronische Bandstruktur“** bilden.



Nähern sich Atome einander (Kondensation zum Festkörper) wird die **Aufenthaltsdauer** der Elektronen (durch Tunneln) an einem bestimmten Atom **endlich**. Scharfe Zustände verbreitern sich, $\Delta E \sim h/\tau$

Tunnelwahrscheinlichkeit nimmt für innere „Schalen“ ab; sie bleiben lokalisiert!

Jedes Einzelband enthält ebensoviele Elektronenzustände wie die N Bausteine, die das Gitter bilden, d.h., i.A. N Elektronenzustände!



Berechnete Fermiflächen von **MgB₂**

Supraleiter, $T_c = 41$ K

Modell des freien Elektronengases führt zu sphärischen Fermiflächen!

Berechnete Fermiflächen von **Borocarbidsupraleitern**

$T_c = 15$ K

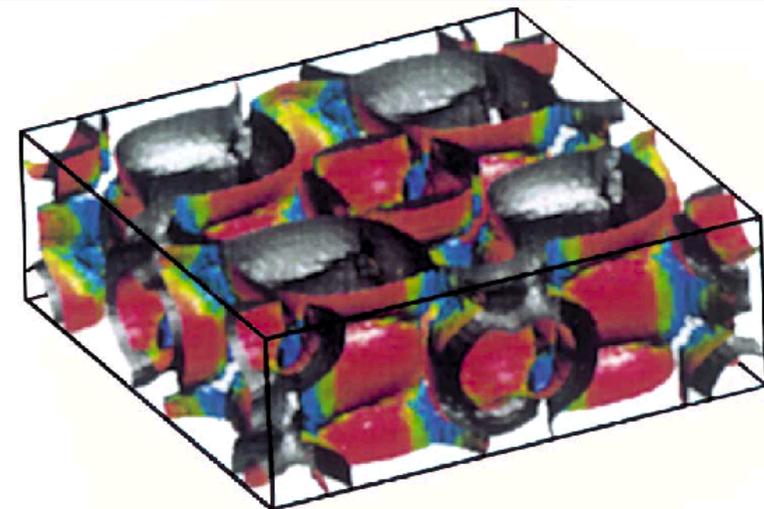
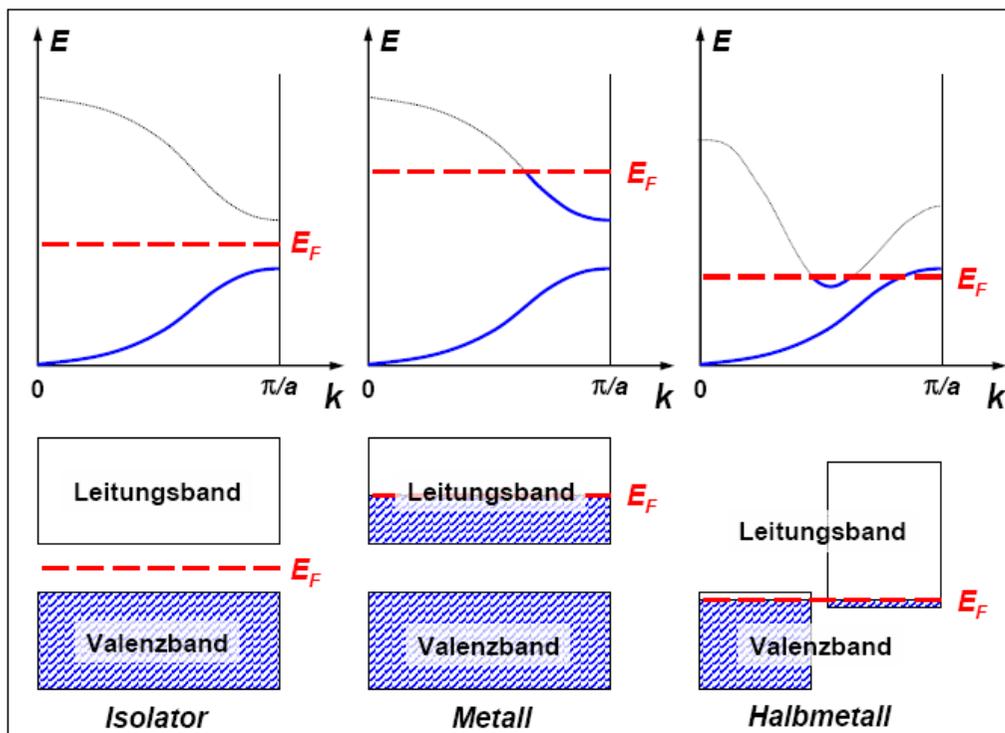


Fig. 7. The calculated large FS with the distribution of Fermi velocities in atomic units (see the colour ridge at the bottom, (blue = slow; red = fast)) for the superconducting YC(NiB)₂ (see Fig. 8).

Elektronen und Löcher

Füllung der Bänder im Festkörper hängt von Wertigkeit der Gitterbausteine sowie von der „Art“ der Bindung ab.

Kovalente Kristalle bilden i.A. vollständig gefüllte Bänder bis zur Fermienergie, darüber liegen leere Bänder, separiert durch eine verbotene Zone E_0 . Für Metalle sind die obersten Bänder nur teilweise gefüllt.



Für Erdalkali Metalle sollte Besetzung der s-Schale abgeschlossen sein (-> Isolator), aber alternierende Befüllung der d-Schale!

Metalle: $E_0 = 0$
 Halbleiter: $E_0 \dots$ klein
 Isolatoren: $E_0 \dots$ groß
 Halbmetall: Bandüberlappung;
 E_F in unvollständig gef. Band

Bewegung der Ladungsträger

Elektronen können sich nur dorthin bewegen, wo freie Zustände zu finden sind, d.h. nach „oben“ im Band.

Bewegung des Elektrons durch elektrisches Feld hängt von aktueller Lage des Teilchens im $E(k)$ Zustandsdiagramm ab!

Gruppengeschwindigkeit $v_g = \partial\omega/\partial k = \hbar^{-1}\partial E/\partial k$

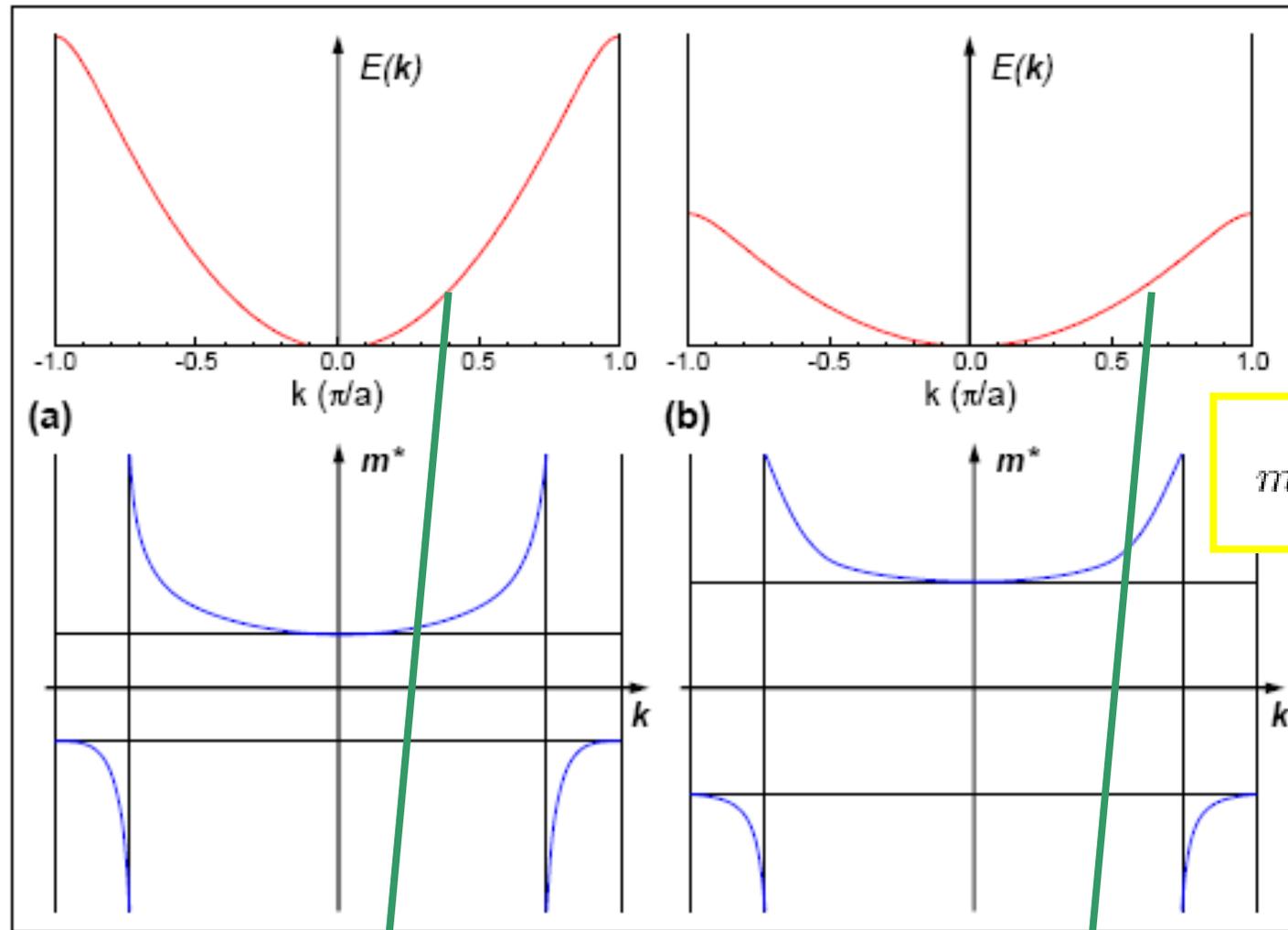
$$E = \hbar\omega$$

freies Elektron: $E = p^2/(2m) = \hbar^2 k^2/(2m) \longrightarrow v_g = p/m$

Kristallelektron: $\dot{v}_g = \hbar^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial E}{\partial k} = \hbar^{-1} \frac{\partial}{\partial k} \frac{\partial E}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial t} = \hbar^{-1} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \dot{k}$

Kraft: $F = \dot{p} = \hbar \dot{k} \longrightarrow \dot{v}_g = \hbar^{-2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} F = \frac{1}{m_{eff}} F$

effektive Masse: $m_{eff} = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1}$



$$m_{eff} = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial^2 k} \right)^{-1}$$

**a: starke Bandkrümmung:
Kleine effektive Masse**

**b: schwache Bandkrümmung:
große effektive Masse**

Effektive Masse regelt Reaktion des Kristallelektrons auf äußere Kraft (= el. Feld)

Für typische Bandbreiten ($\sim eV$) gilt: $m_{\text{eff}} = m_0$

Elektron kann sich nicht unabhängig von anderen Teilchen durch das Gitter bewegen; das GANZE Gitter reagiert auf das Feld.

Unterer Bandrand: Bandkrümmung $\partial^2 E / \partial k^2$ groß $\longrightarrow m_{\text{eff}} < m_0$

Bei etwas höheren Energien: ursprüngliche Parabel erhalten $\longrightarrow m_{\text{eff}} \sim m_0$

Wendpunkt in $E(k)$ $m_{\text{eff}} = \infty$

Oberer Bandrand: negative Krümmung $\longrightarrow m_{\text{eff}} \dots \text{NEGATIV !!!}$,

Elektronen werden GEGEN Krafrichtung beschleunigt.

Unbesetzte Zustände (fehlende Elektronen) am oberen Bandrand: LÖCHER;

entgegengesetztes Verhalten wie fehlendes Elektron

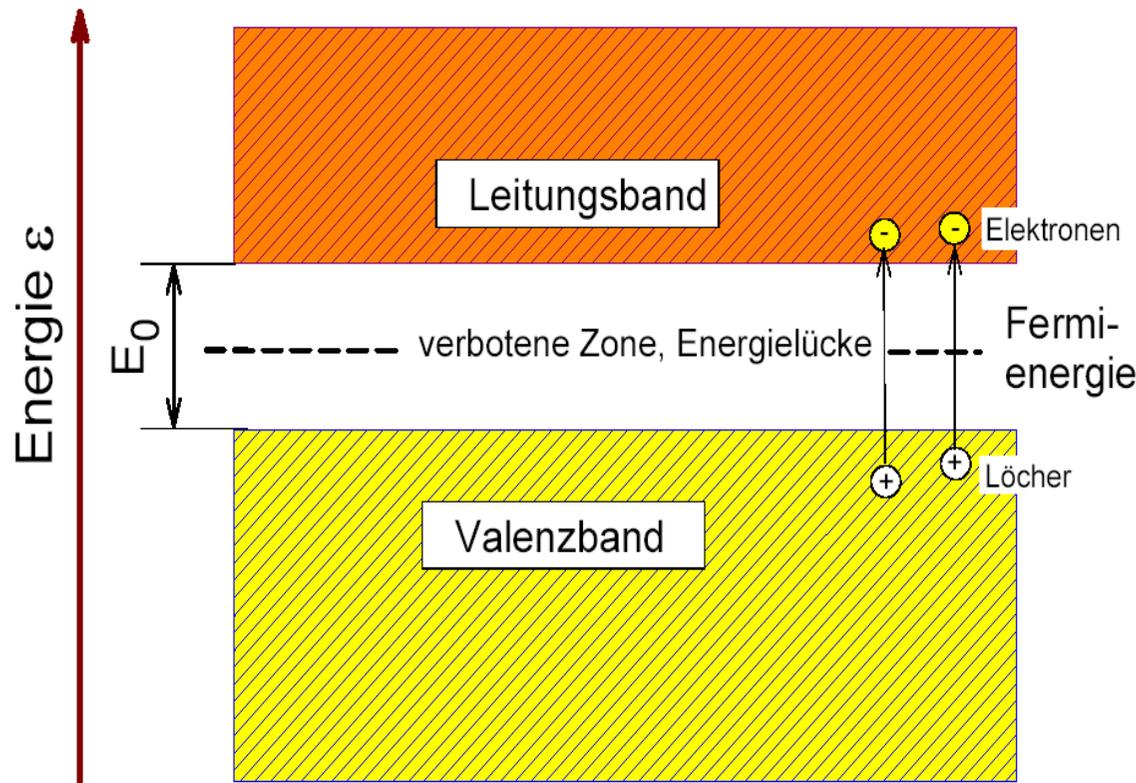
$$\partial^2 E / \partial k^2$$

wechselt Vorzeichen; Löcher am oberen Bandrand haben wieder positive Masse; **positiver Beitrag zum Strom**

Halbleiter

Reine Halbleiter: Si, Ge, Verbindungen aus einem p- und einem 8-p wertigem Element, z.B. GaAs, SiC, InP ...

Bändermodell: Valenzband (fest gebunde Elektronen) – Energielücke – Leitungsband (frei bewegliche Elektronen)



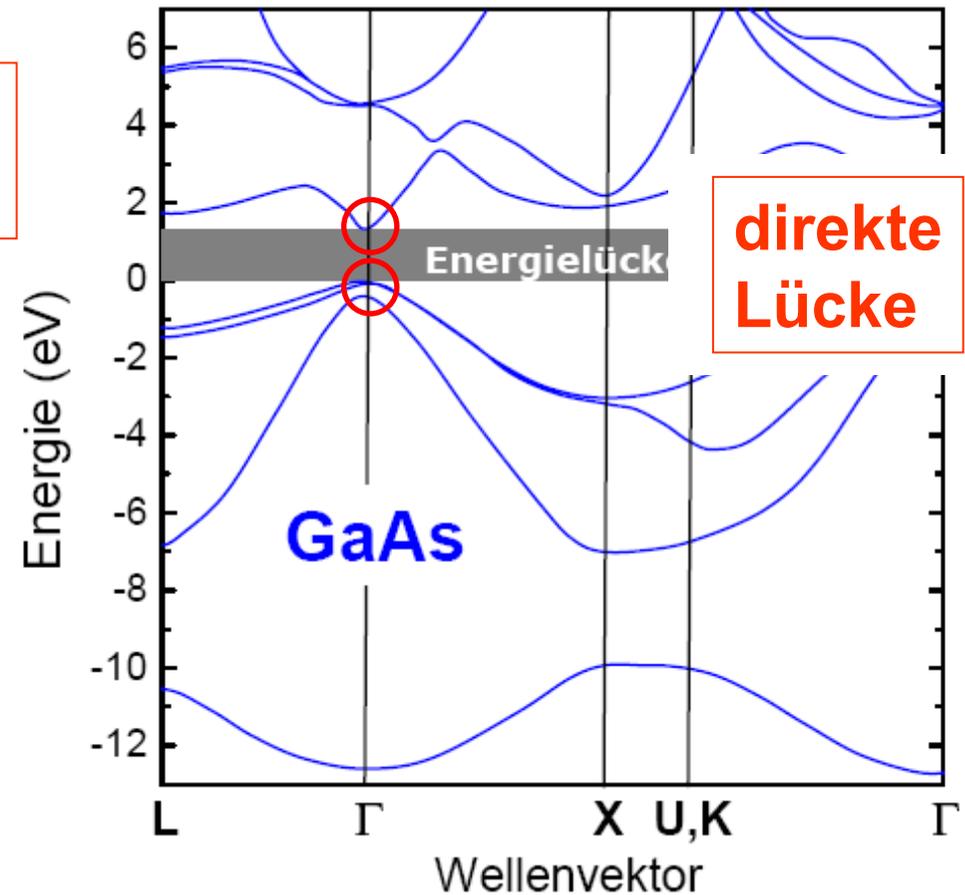
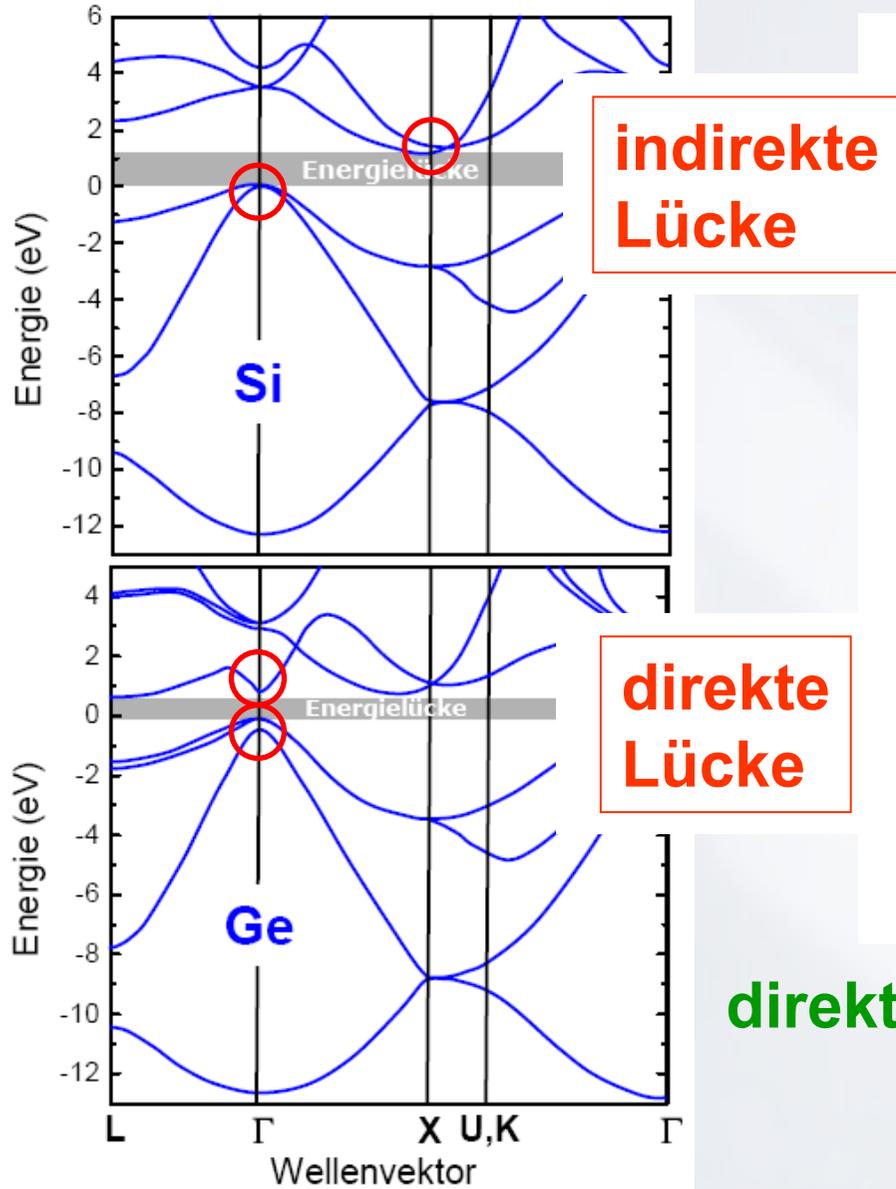
E_0 bestimmt elektrische und optische Eigenschaften des Materials.

Elektronen können thermisch oder optisch über die Energielücke gehoben werden.

Anregung und Rekombination: (n ... Elektronen pro m^3)

$$\dot{n} = \alpha - \beta n^2$$

Gleichgewicht: $n = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}}$



direkte Lücke: Halbleiterlaser-Dioden

J.R. Chelikowski und M.L. Cohen,
 Phys. Rev. **B 14**, 556 (1976)).

$$E_0 \gg k_B T: f(\epsilon) = \exp\left(-\frac{E_0/2 + \epsilon}{k_B T}\right)$$

Boltzmann-Verteilung; E_F in Mitte der verbotenen Zone. ϵ ... „Höhe“ über Leitungsbandrand

Zustandsdichte im Band:

$$dn = 4\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \epsilon^{1/2} d\epsilon$$

**Nur Bruchteil $f(\epsilon)$ besetzt;
Anzahldichte der Elektronen n**

$$n = \int_0^\infty f(\epsilon) dn = N \exp[-E_0/(2k_B T)]$$

mit
$$N = 2 \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} = 3 \cdot 10^{25} \text{m}^{-3} \quad \text{bei 300 K} \quad \text{f. } m = m_e$$

Valenzband hat ebenso viele Löcher!

$$n^2 = N^2 \exp[-E_0/(k_B T)]$$

unabhängig von E_F und unabhängig von Dotierung mit Elektronen und Löchern.

$$n \cdot p = N^2 \exp[-E_0/(k_B T)]$$

für n verschieden von p

Für $n = p$ (verunreinigungs-kompensierter HL)

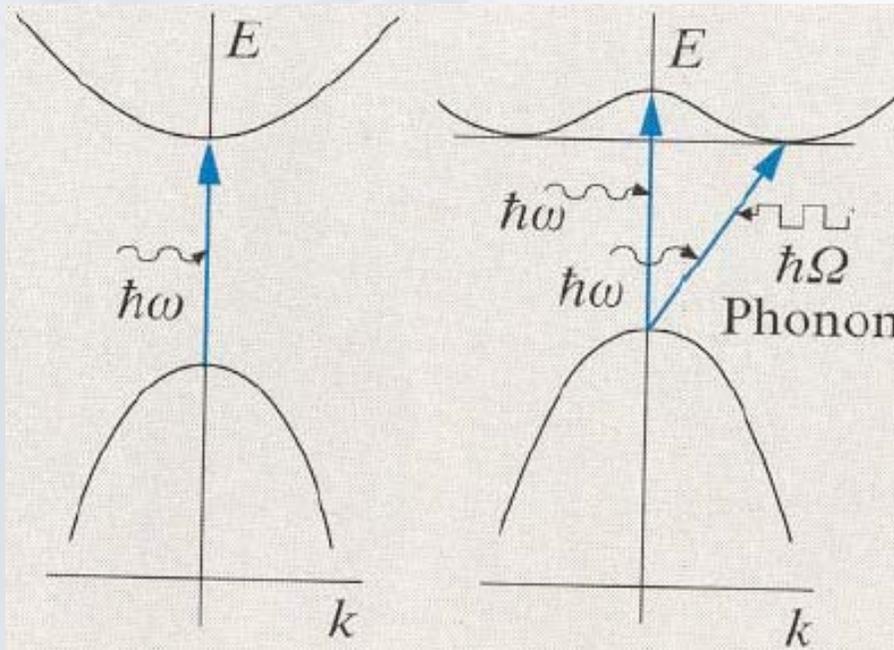
$$n = N \exp[-E_0/(2k_B T)]$$

$$\alpha = \beta N^2 \exp[-E_0/(k_B T)] \quad \left(\text{aus } n = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \right)$$

Für optische Anregung I gilt $\alpha \sim I$ und für $n = p$: $n \sim \sqrt{I}$

Leitfähigkeit: $\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p)$ mit $n = N \exp[-E_0/(2k_B T)]$

Breite der verbotenen Zone: **Grenzfrequenz der Absorption** $\omega_{gr} = E_0/\hbar$
 kleinere Frequenzen werden nicht absorbiert.



$E_0 > 3.1 \text{ eV}$... durchsichtig f. sicht. Licht
 $E_0 < 1.5 \text{ eV}$... sichtbares Licht wird absorbiert; HL metallisch glänzend.

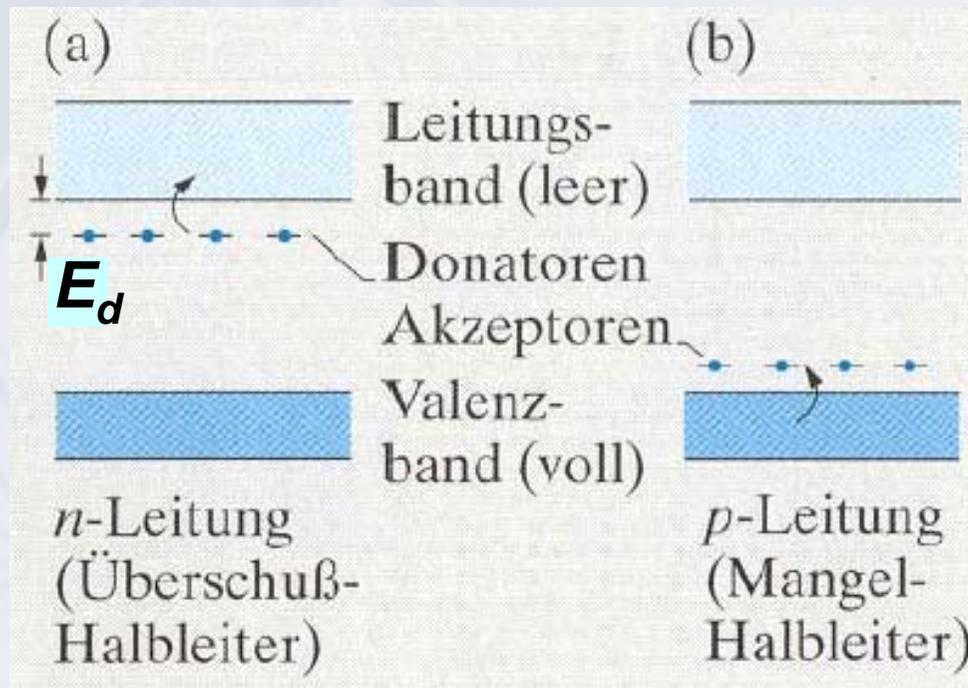
optische Anregung: **direkter Übergang** zwischen Bandkanten.

indirekter Übergang: optische Anregung plus Phononen (wenn Ränder der Bandkanten nicht bei gleichen k -Werten liegen).

gestörte Halbleiter:

Störungen des Idealgitters kann zu zusätzlichen Zuständen in der verbotenen Zone führen

- nichtstöchiometrische Zusammensetzung;
- Einbau von Fremdatomen anstelle der regulären Gitteratome (*Dotierung*);
- unbesetzte Gitterplätze; die entsprechenden Teilchen können von vornherein fehlen (Nichtstöchiometrie) oder sie können aus Gitterplätzen abwandern (Frenkel-Fehlstellen);
- Kristallitgrenzen und Grenzen des ganzen Kristalls;
- Versetzungen;
- unvollständige Ordnung des ganzen Gitters, das im Extremfall zum amorphen Halbleiter wird.



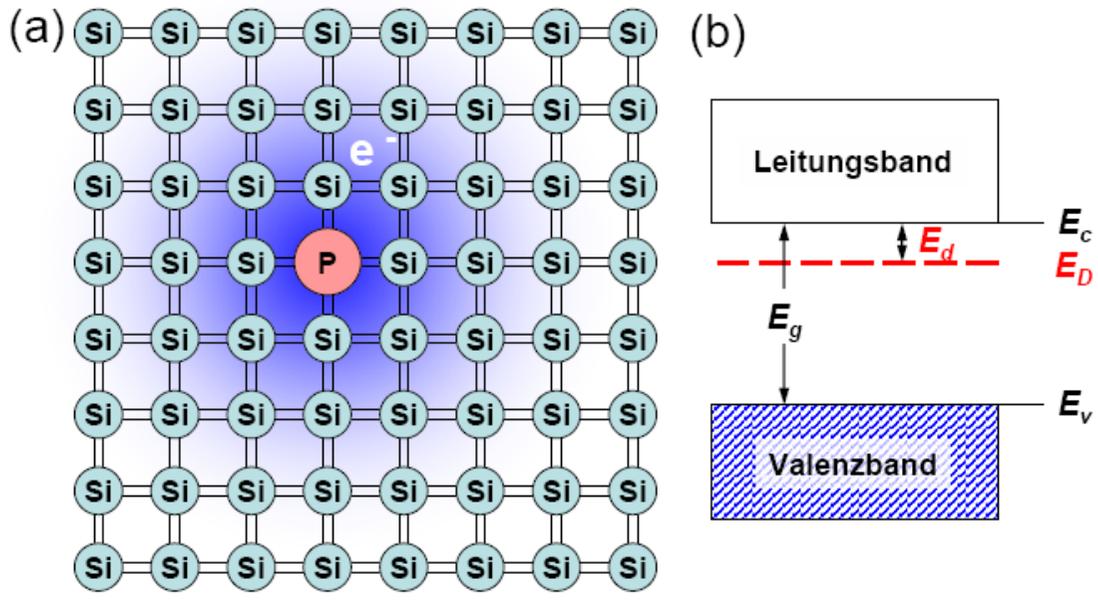
Einbau von Atomen mit „falscher“ Wertigkeit, z.B. **P** oder **In** in **Si**.

P stellt 5 Elektronen zur Verfügung, ist somit ein **DONATOR**.

In stellt 3 Elektronen zur Verfügung, ist somit ein **AKZEPTOR**.

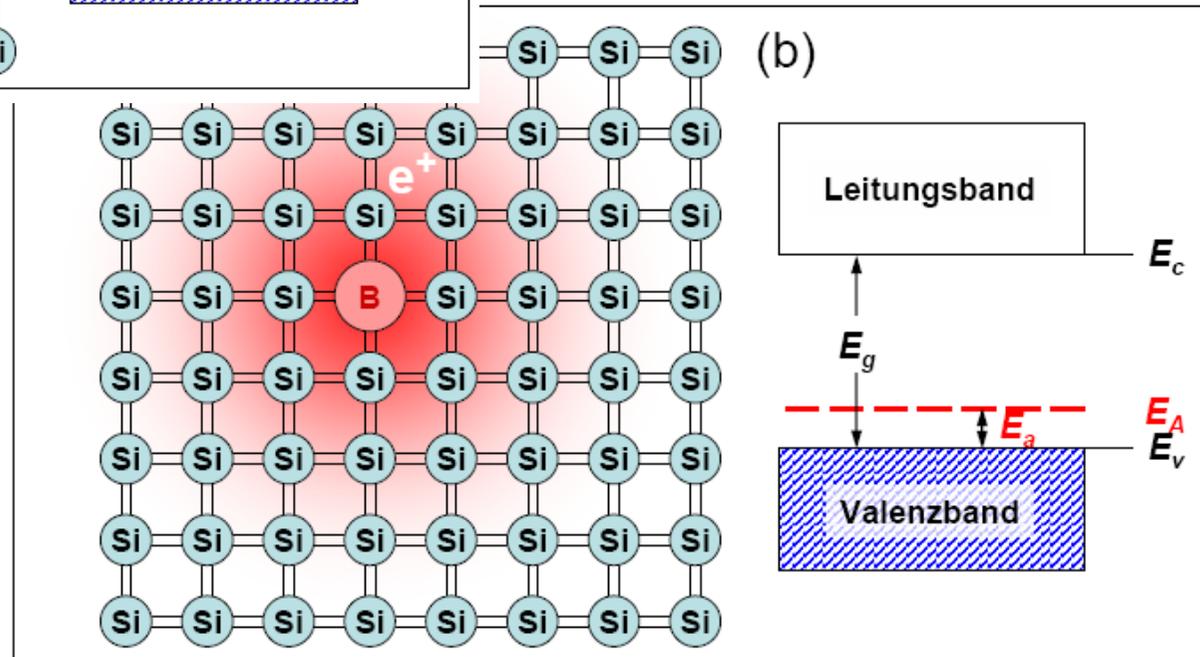
Überschusselektron lokalisiert bei P in der Nähe des Leitungsbandes; leichtere Anregung, **höhere Leitfähigkeit**; aber Material bleibt neutral. Ähnliches gilt für Löcher.

Neutraler Gitterhintergrund charakterisiert durch Dielektrizitätskonstante



n-dotierter Halbleiter

p-dotierter Halbleiter



pro m³: **D Donatoren** und **A Akzeptoren**,
n Leitungselektronen und **p** Valenzlöcher
d Donatoren besitzen noch ihre Elektronen
a Akzeptoren besitzen noch ihre Löcher

Ladungsbilanz: $n + (A - a) = p + (D - d)$ **System ist neutral!**

Ionisierte Donatoren bzw. Akzeptoren sind positiv bzw. negativ geladen.

keine Akzeptoren vorhanden: $n = \sqrt{ND} \exp[-E_d/(2k_B T)]$

E_d Abstand Donatorniveau - Leitungsbandrand

3 Gleichgewichte: Raten von Anregung und Rekombination in gestörten Halbleitern

Raten und Gleichgewichte	<u>Anregung</u>	<u>Rekombination</u>
Valenzband - Leitungsband	η	$= \beta np$
Donatoren - Leitungsband	γd	$= \alpha n(D - d)$
Akzeptoren - Leitungsband	δa	$= \epsilon p(A - a)$

Rechnung zeigt $\gamma/\alpha = N \exp[-E_d/(k_B T)]$ $\delta/\epsilon = P \exp[-E_a/(k_B T)]$

Annahme: $A \ll D$.

für T klein: fast alle Donatoren besetzt $\rightarrow d \approx D$.

n im Leitungsband zwingen Löcher ins Valenzband \rightarrow

Akzeptoren fast geleert: $a \ll A$, nach Tabelle $p = \delta a / (\epsilon A)$. Mit $p \ll D$

$$n + (A - a) = p + (D - d) \Rightarrow n + A = D - d = \gamma D / (\alpha n). \quad a \rightarrow 0, p \rightarrow 0$$

Für $n \ll A$ wird

$$A = \frac{\gamma D}{\alpha n} \rightarrow \underline{n} = \frac{\gamma D}{\alpha A} = \gamma D / (\alpha A) = \underline{N D A^{-1} \exp[-E_d / (k_B T)]},$$

für $n \gg A$

$$n^2 = \frac{\gamma D}{\alpha} \rightarrow \underline{n} = \sqrt{\gamma D / \alpha} = \underline{\sqrt{D} \sqrt{N} \exp[-E_d / (2k_B T)]}$$

Übergang bei **(von $n \ll A$ zu $n \gg A$)**

$$\gamma D / (\alpha A) = N D A^{-1} \exp[-E_d / (k_B T)] = \sqrt{D} \sqrt{N} \exp[-E_d / (2k_B T)]$$

nach T auflösen ergibt Übergangstemperatur

$$n + (A - a) = p + (D - d) \quad T = \frac{E_d}{k_B \ln(N D / A^2)}$$

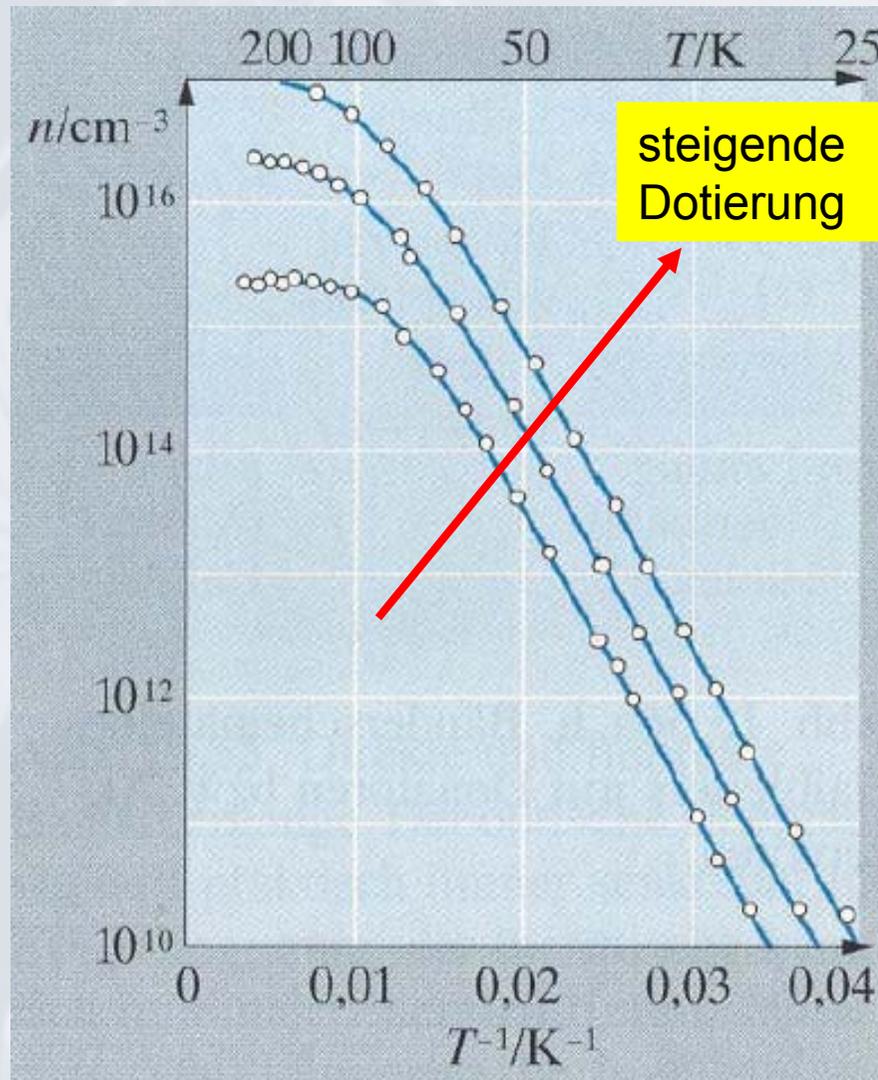
höhere Temperaturen: $d \ll D$, bei $n \gg A$:

erreicht $D - d = n$ Wert D für $T = E_d / k_B \cdot \ln(N / D)$.

Von dort ab $n = D$: Alle Donatorenelektronen sind im Leitungsband.

Steigt T, wird d immer kleiner und schließlich: $n = D$

Abbildung auf nächster Seite zeigt Kurven dieses Typs für verschiedene As Konzentrationen.

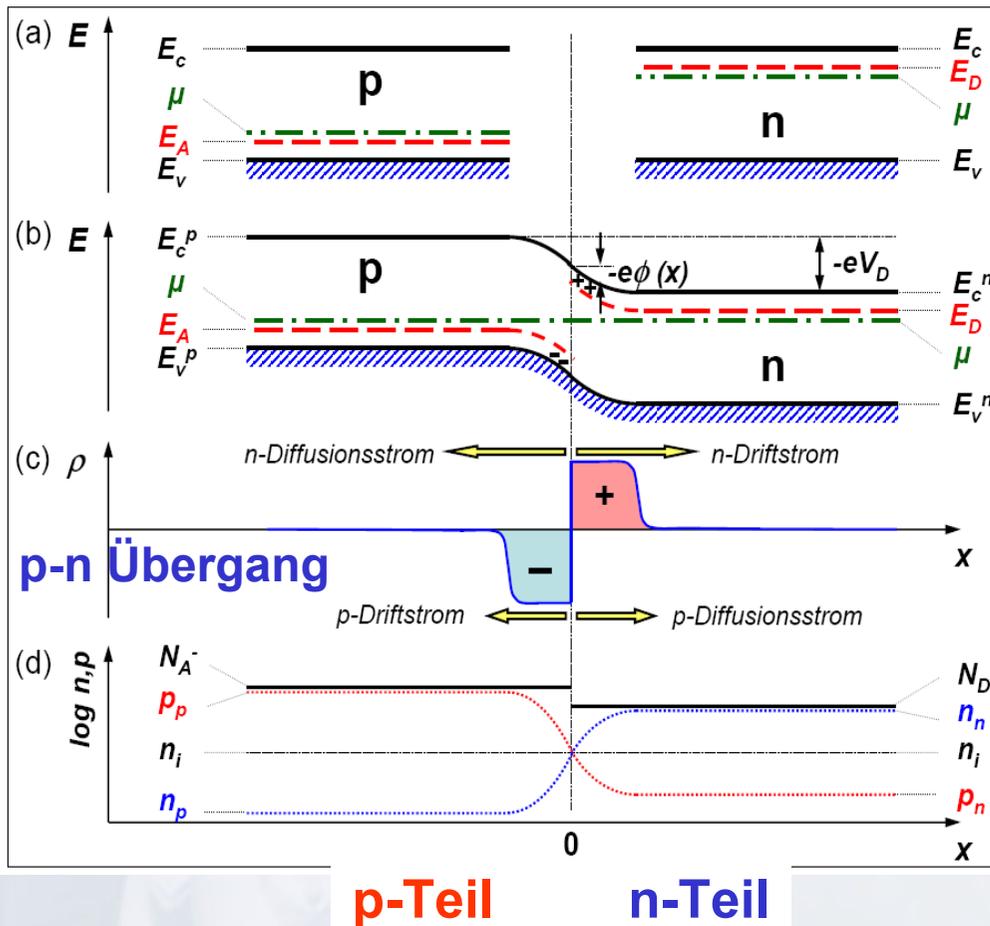


Arrheniusplot:
Leitungselektronen-
konzentration vs. $1/T$

Halbleiterelektronik

Einfache p – n Übergänge in verschiedenen Kombinationen; unterschiedlich starke Dotationen können neue Phänomene wie Tunneln bewirken.

Vielzahl physikalischer Größen umwandelbar in elektrische Spannungen



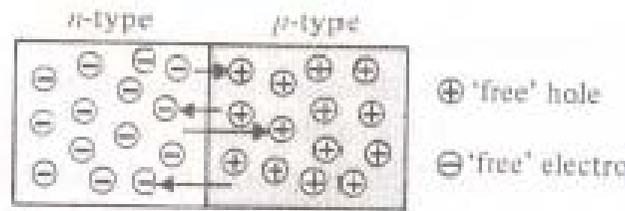
Einbau von **Elektronen** hebt **Fermienergie** $E_F = \mu$ an; Einbau von **Akzeptoren** senkt **Fermienergie** $E_F = \mu$ ab.

Konstanz der **Fermienergie** im Gesamtsystem führt zur **Bandverbiegung** \implies starkes elektr. Feld.

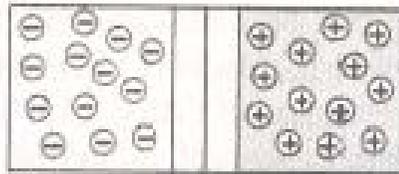
Elektronen werden aus n-Schicht und Löcher aus p-Schicht getrieben (durch **Diffusion**).

dynamisches Gleichgewicht aus **Diffusionsstrom** und **Leistungsstrom** (= **Driftstrom** oder **Feldstrom**) (durch aufgebautes elektrische Feld).

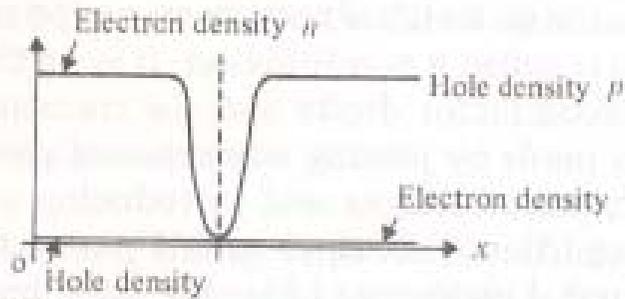
p-Teil **n-Teil**



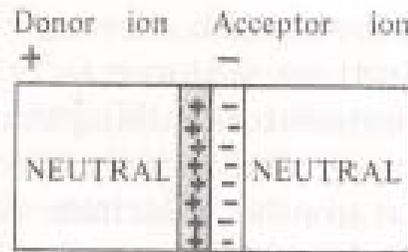
(a)



(b)



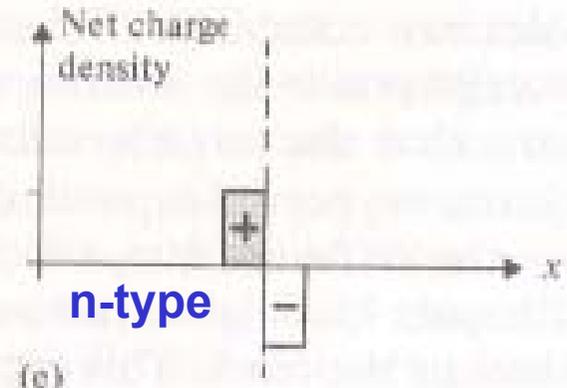
(c)



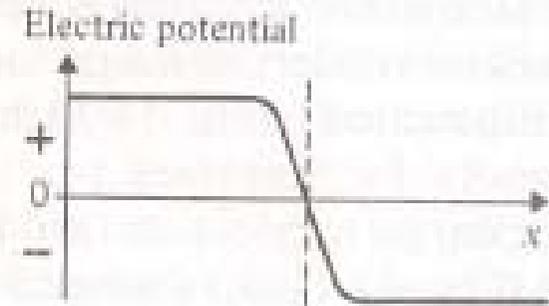
(d)

Spannung die durch das el. Feld aufgebaut wird, gleicht der Arbeit, ein weiteres Elektron über die Schicht zu bringen [in Abb. (f)]. Gibt auch die potentielle Energieverteilung für positive Einheitsladung.

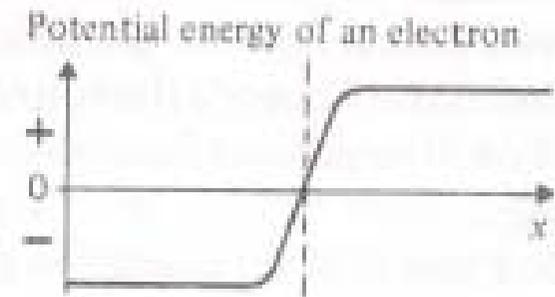
Da Elektronen negativ geladen sind, ist ihr pot. Energieverlauf umgekehrt [Abb. (g)]



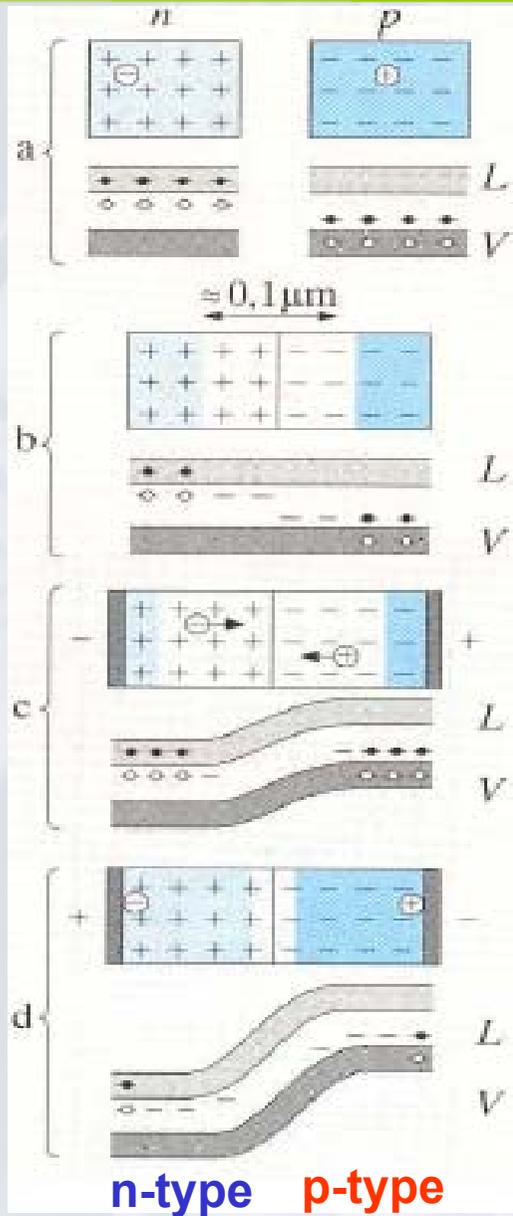
(e)



(f)



(g)



Verteilung der Ladungsträger im thermischen Gleichgewicht:

$$\frac{n_2}{n_1} = \exp\left(\frac{e \cdot U}{k_B T}\right)$$

Potentialstufe in der Übergangsschicht:

$$U_0 = \frac{k_B T}{e} \ln \frac{n_2}{n_1} = \frac{k_B T}{e} \ln \frac{p_1}{p_2}$$

Äußeres Feld verschiebt Verhältnis von Feldstromdichte j_{feld} und Diffusionstromdichte j_{diff} , wobei j_0 der feldfreie Gleichgewichtswert ist **(feldfrei: $j_{\text{feld}} = j_{\text{diff}} = j_0$)**

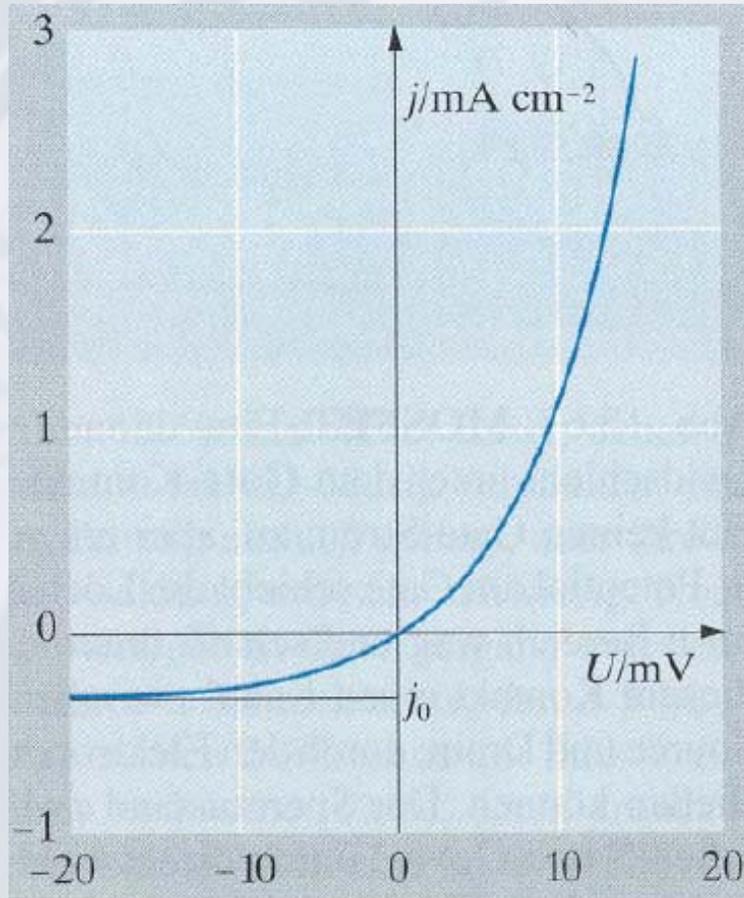
Wahrscheinlichkeit, über Potentialstufe zu gelangen:

$\exp[\pm eU/(k_B T)]$ Damit:

$$j_{\text{Feld}} = j_0 \exp[\pm eU/(k_B T)]$$

Konzentrationsverteilung bleibt konstant: $j_{\text{Diff}} = j_0$

Strom – Spannungskennlinie einer Diode



Kennlinie stark temperaturabhängig

Gesamtstrom in Flussrichtung
(Feld von p- zur n-Seite)

$$j = j_{Feld} - j_0 = j_0(\exp[eU/(k_B T)] - 1)$$

Gesamtstrom in Sperrichtung
(Feld von n- zur p-Seite)

$$j = j_0(\exp[-eU/(k_B T)] - 1)$$

$j_0 \sim 1 \text{ mA cm}^{-2}$ Sperrstrom

$U = 1 \text{ V}$ in Flussrichtung: j um 10^{17} größer

Beispiel: Leuchtdiode, LED

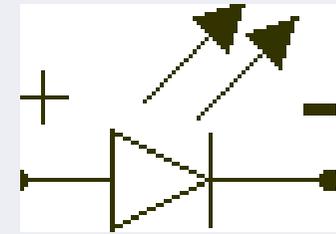
Vor- und Nachteile von LEDs

Effizienz der LEDs gegenüber Glühlampen ist höher und wird in den nächsten Jahren noch verbessert werden.

LEDs entwickeln im Vergleich zu Glühlampen kaum Wärme, die abgeführt werden muss.

Energie, die zum Herstellen von LEDs eingesetzt werden muss, relativ hoch. Lebensdauer Robustheit von LEDs ist den Glühlampen weit überlegen.

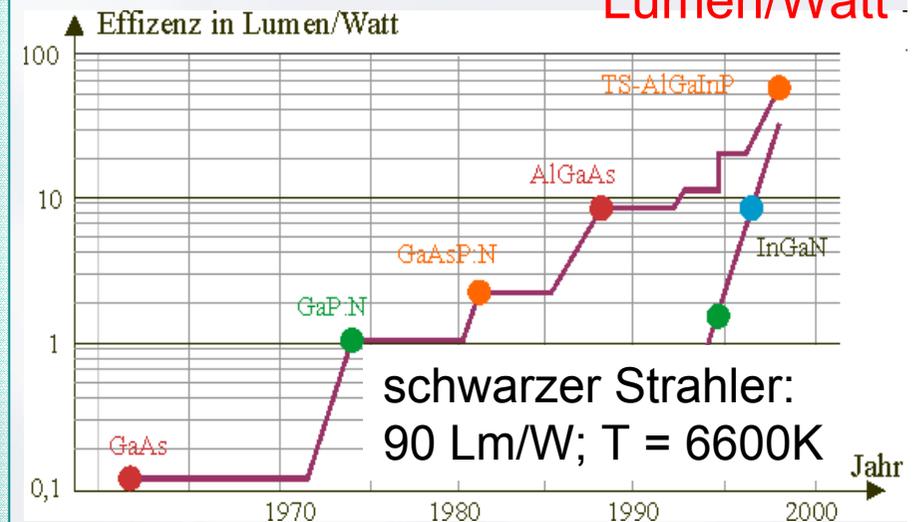
Betrieb der LEDs: nur Kleinspannungen,
„Farbeindruck“ von Weißlicht-LEDs
!!!?????



Rekombination von Elektronen Und Löchern bei Stromfluß;

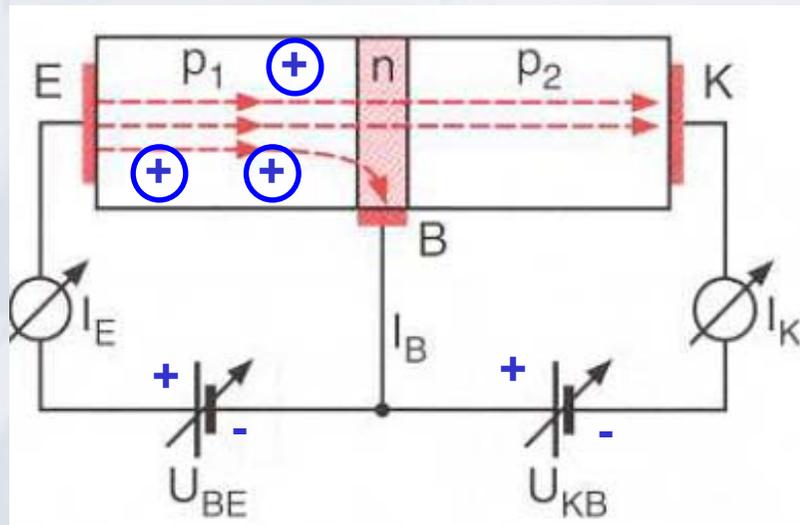
$$\text{Gap } \Delta E = h\nu; \lambda[\text{nm}] = 1240/\Delta E[\text{eV}]$$

2009: 160
Lumen/Watt



Transistor, 1947, Bardeen, Brattain, Shockley, Nobelpreis 1956

Prinzip: p-n-p oder n-p-n Übergänge

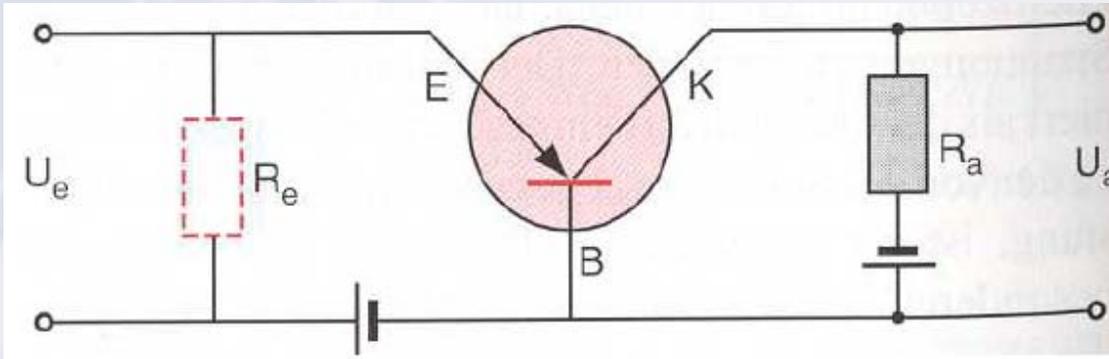


p_1 -n: Durchlassrichtung; Strom (Löcher und Elektronen) fließt von Emitter zu Basis; n- p_2 : Sperrrichtung; an K liegt negative Spannung (in Bezug auf E)

Löcher rekombinieren im n-Teil mit Elektronen: Basisstrom.

Ist n-Schicht dünn: Löcher gelangen in p_2 Teil und werden durch Spannung an K beschleunigt, bilden Kollektorstrom.

Stärke von I_K abhängig von Emitterstrom und Basisspannung. Ändert man bei fester Kollektor-Basisspannung den Emitterstrom, so ändert sich der Kollektorstrom entsprechend.



Basisschaltung

Eingangswiderstand klein
(Durchlassrichtung)
Ausgangswiderstand groß
(Sperrrichtung)

Eingangsspannung U_E \longrightarrow $I_E = U_e / R_e$

Ausgangsspannung U_a
am Ausgangswiderstand R_a

$$U_a = R_a I_K = R_a \beta I_E = \beta \frac{R_a}{R_e} U_e$$

Schaltungs-symbol	Basisschaltung	Kollektorschaltung	Emitterschaltung
Stromverstärkung bei Kurzschluß	0,90 – 0,99	20 – 100	20 – 100
Wechselstrom-Eingangswiderstand	50 – 100 Ω	1 – 10 k Ω	1 – 10 k Ω
Wechselstrom-Ausgangswiderstand	0,5 – 2 M Ω	10 – 100 Ω	50 – 200 k Ω