

durch Elektronen mit einem \vec{k} der entsprechenden Richtung besetzt werden. Dies ist z. B. in Abb. 1.37 für die unterste Energielücke für k_{100} der Fall, die durch Wellenfunktionen in k_{111} -Richtung geschlossen werden.

1.27 Reduziertes Bandschema

VEREINFACHTE
DARSTELLUNG

Aufgrund der Periodizität gibt es im reziproken Gitter keine ausgezeichneten Punkte. Die Wahl eines bestimmten Gitterpunktes erfolgt willkürlich. Die von einem gewählten Ursprung ausgehend ermittelten Ergebnisse, z. B. die Lage einer Brillouin-Zone, müssen auch (für andere Elektronen) um einen beliebigen anderen reziproken Gitterpunkt als Ursprung gelten.

Basierend auf dieser Überlegung läßt sich eine gegenüber Abb. 1.37 reduzierte Darstellung der Dispersionskurven erzielen. Dabei stellt man sich vor, daß sich ausgehend von dem nächsten benachbarten Gitterpunkt als Ursprung wieder die gleiche Dispersionskurve ergibt, ebenso von dem darauffolgenden und allen weiteren Gitterpunkten. Die Ursprünge der Dispersionskurven sind dann jeweils um einen reziproken Gittervektor der betrachteten Richtung von \vec{k} entfernt. Im Beispiel in Abb. 1.37 befinden sich also die Ursprünge in der \vec{k}_{100} -Richtung im Abstand G_{100} und in der \vec{k}_{111} -Richtung im Abstand G_{111} .

Abb. 1.38 zeigt die Überlagerung der einzelnen Dispersionskurven mit den Ursprüngen im Abstand der Gittervektoren. Es ergeben sich periodisch fortgesetzte Energiebänder.

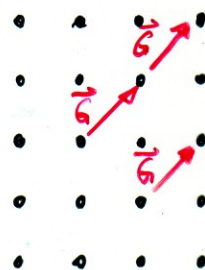
Aus der Darstellung kann man sehen, daß sich innerhalb des reduzierten Bereichs im Abstand der Länge eines halben reziproken Gittervektors der jeweiligen Richtung ($\frac{1}{2}G_{100}$, $\frac{1}{2}G_{111}$) sämtliche Verläufe der Energiebänder wiederfinden.

Man verwendet daher häufig die sogenannte reduzierte Darstellung, bei der die außerhalb liegenden Verläufe um einen reziproken Gittervektor verschoben werden, so daß sie im reduzierten Bereich liegen. Die reduzierte Darstellung für Abb. 1.37 bzw. Abb. 1.38 ist in Abb. 1.39 links nochmals zur Verdeutlichung gezeigt.

Auf der rechten Seite ist das zu den Verläufen gehörende Bändermodell angegeben. Es besitzt eine Energielücke W_g im Bereich der nicht überlappenden Verläufe. Ist das obere Band ohne zusätzliche Anregung noch unbesetzt, so stellt es das Leitungsband dar. Das darunter liegende Band ist das Valenzband.

Welcher Bragg. Bed.
 $\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}_{hkl}$

Reziprokes Gitter



Gitter ist periodisch



Keine ausgezeichneten Punkte



Jeder Gitterpunkt ist Ursprung (einer Parabel)



Auf k_{hkl} -Achse: Ursprünge im Abstand G_{hkl}



Überlagerung von Dispersionskurven (Parabeln)



REDUZIERTE DARSTELLUNG

Die realen Bandverläufe sind natürlich viel komplizierter als die hier mit der vereinfachten Annahme Bragg-reflektierter freier Elektronen hergeleiteten Kurven.

Um sie genauer zu bestimmen, müßte die Schrödingergleichung für den gesamten Kristall gelöst oder mit aufwendigen Verfahren und Annahmen Näherungslösungen erarbeitet werden.

Die für unser Verständnis der Bauelemente wichtigen Aussagen bleiben jedoch qualitativ die gleichen und können daher auf dem einfachen Stand der hier gebrachten Herleitung belassen werden.

Eine Erweiterung ist jedoch anzubringen, die auch in aufwendigeren Lösungen notwendig ist. Sie betrifft die Lage der Minima und Maxima der jeweiligen Bänder. Diese liegen sich in unserem einfachen Modell immer bei gleichen Werten der k -Vektoren auf der Grenze der Brillouin-Zone gegenüber (vgl. Abb. 1.39).

Abb. 1.40 zeigt demgegenüber die realen Verläufe der einzelnen Bänder für **Si**, **Ge** und **GaAs**. Hier ist zu erkennen, daß sich Maxima und Minima nicht immer an den Grenzen der Brillouin-Zone ergeben.

Als eine wichtige Eigenschaft ist zu sehen, daß sich außer bei **GaAs**

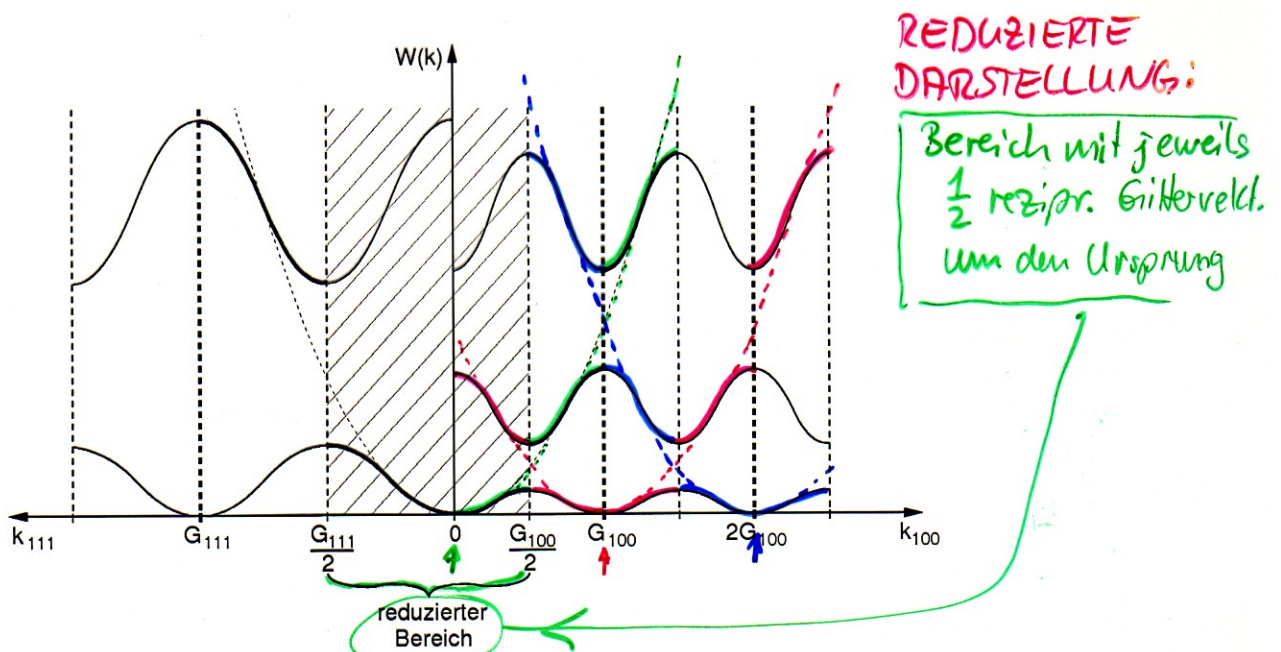


Abb. 1.38: Überlagerung der Dispersionskurven von \vec{k} -Vektoren mit Ursprung an den einzelnen reziproken Gitterpunkten in der jeweiligen Richtung von \vec{k} .

enthält alle Bandverläufe der jeweiligen Richtung

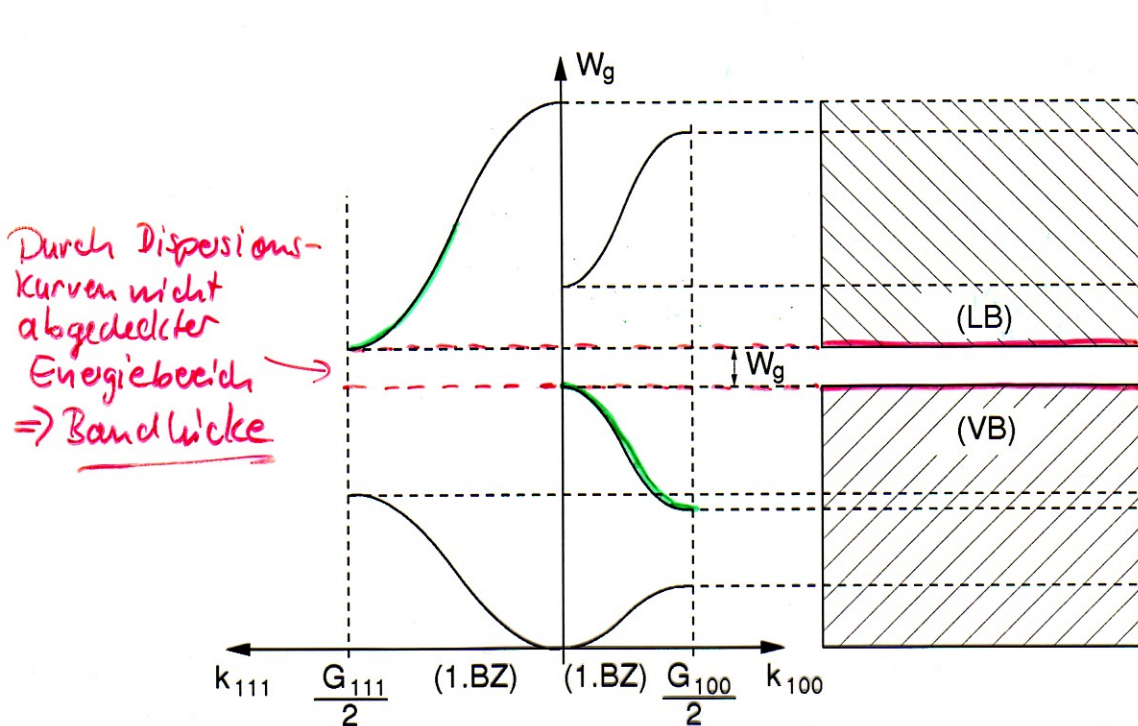


Abb. 1.39: Links: Reduziertes Dispersionsdiagramm. Rechts: Vereinfachtes Bändermodell mit einer Energielücke W_g aufgrund des mit Vektoren in \vec{k}_{111} - und \vec{k}_{100} -Richtung nicht zu schließenden Bereichs W_g .

Unser einfaches Modell

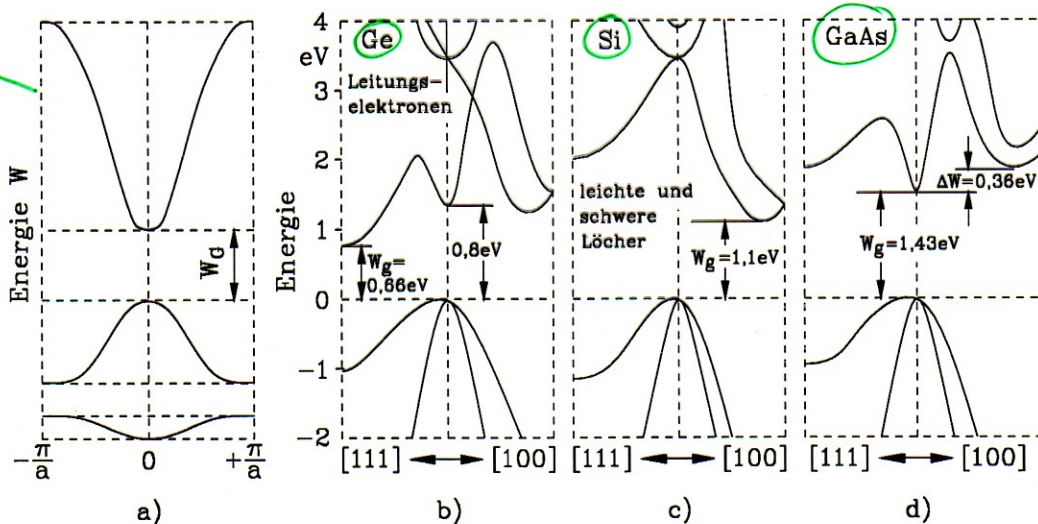


Abb. 1.40: Skizzierte reale Bandverläufe und Energielücke für Si, Ge und GaAs. Ganz links ist nochmals der bisher besprochene vereinfachte Verlauf dargestellt.

- Wichtige Eigenschaften:
- 1) zwei Valenzbandverläufe (unterschiedliche Krümmung)
 - 2) LB-Minimum und VB-Maximum:
 - bei Si u. Ge bei unterschiedlichen \vec{k}
 - bei GaAs ~ bei gleichem $\vec{k} \Rightarrow$ direkter HL

das Minimum des Leitungsbandes und das Maximum des Valenzbandes nicht gegenüberliegen, d. h. sie liegen nicht bei dem gleichen Wellenvektor. Diese Halbleiter nennt man indirekte Halbleiter. **GaAs** dagegen wird als direkter Halbleiter bezeichnet. Diese Unterscheidung ist wichtig, wenn es um die Fähigkeit eines Halbleitermaterials geht, Licht zu emittieren. Diese Fähigkeit besitzen nur direkte Halbleiter, weswegen **GaAs** zur Herstellung von Leuchtdioden verwendet wird. Wir kommen später im Kapitel „Direkte Rekombination“ darauf zurück.

Abb. 1.40 zeigt eine weitere Besonderheit in der Art des Maximums des Valenzbandes. Dieses wird durch die Maxima von zwei Bändern gebildet, die jedoch eine unterschiedliche Krümmung besitzen. Wie wir später sehen werden, besteht ein direkter Zusammenhang der Krümmung der $W(\vec{k})$ -Kurve mit der Masse der Ladungsträger.

Wir haben in den letzten Kapiteln mit Hilfe des Modells freier Elektronen mit Streuung an der Gitterstruktur ein genaueres Verständnis für die Ursache und den Verlauf der Bandstruktur in Halbleitern erlangt. Das angewendete Modell stellt eine andere Betrachtungsweise dar als die eingangs verwendete Vorstellung sich aufspaltender Energieniveaus bei der Bildung von Kristallen. Letztendlich liefern beide Vorstellungen ausgehend von ihrer Betrachtungsweise eine Beschreibung des gleichen Festkörpers und führen zu den gleichen Resultaten. So sind z. B. die sich aus Abb. 1.18 ergebenden Energiebänder mit der Energielücke W_g identisch mit denen in Abb. 1.18. Der Vorteil des Modells freier Elektronen ist, daß es gerade die freien Ladungsträger sind, die die für uns wichtigen Eigenschaften von Halbleitern bestimmen.

1.28 Unschärferelation, Phasengeschwindigkeit, Gruppengeschwindigkeit

1.28.1 Unschärferelation

Wir betrachten das Elektron in seiner Darstellung als Wellenfunktion. Abb. 1.41 zeigt eine Wellenfunktion, die sich aus der Überlagerung mehrerer Wellenfunktionen ψ_n mit unterschiedlichen Frequenzen ergibt.

Jede der Wellenfunktionen ψ_n beschreibt eine zeitabhängige, sich im Raum ausbreitende Welle. Wir betrachten willkürlich und ohne Einschränkung der

GaAs:
direkter Halbleiter
emittiert Licht
↓
LED (Leuchtdiode)

Begriffe definieren
(Handwerkszeug)

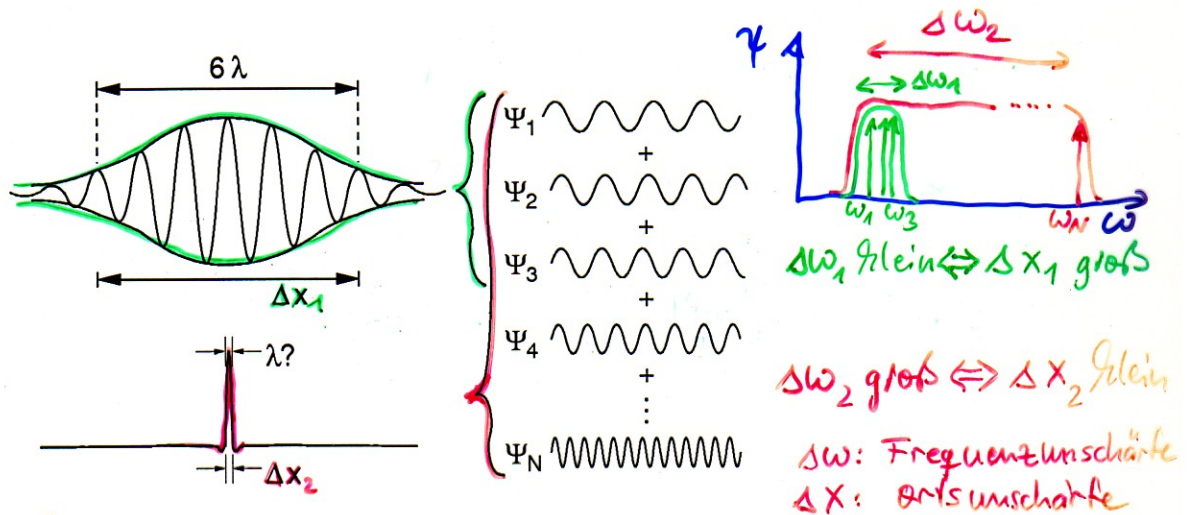


Abb. 1.41: Überlagerung von monofrequenten Wellenfunktionen zu einer Wellenfunktion ψ mit örtlich lokalisierter Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi|^2$. Je mehr Schwingungen pro Frequenzintervall bis zu $\omega \rightarrow \infty$ hinzukommen, umso kleiner wird die örtliche Lokalisation Δx .

allgemeinen Aussage eine Ausbreitung in x -Richtung. Die Wellengleichung nach Gl. (1.30) lautet allgemein

$e^{j(\omega t + \vec{k} \cdot \vec{r})} \cos(\omega t + \vec{k} \cdot \vec{r}) = \frac{1}{2} [e^{j(\omega t + \vec{k} \cdot \vec{r})} + e^{-j(\omega t + \vec{k} \cdot \vec{r})}]$

$\psi_n = \cos(\omega_n t - k_n x)$

Wellengleichung (reell) (1.114)

Durch die Überlagerung einer Anzahl N dieser Wellengleichungen entsteht die in Abb. 1.41 rechts gezeigte Wellengruppe

$$\psi = \sum_{n=1}^N \psi_n$$

Überlagerung der Wellen mit $\omega_1, \dots, \omega_N$ (1.115)

Sie besitzt je nach der Größe von N eine örtliche Ausdehnung ihres Maximums von Δx . Das ist i.e. der Bereich, in dem wir das Elektron erwarten. Er ist in dem oberen Beispiel mit $N = 3$ aufgrund der vielen (6) Schwingungszyklen in der Wellengruppe relativ groß. Jedoch ermöglichen es die vielen in Δx enthaltenen Wellenzyklen auch, die Wellenlänge genau zu bestimmen.

Wird N erhöht, werden mehr Schwingungen aus einem größer werdenden Frequenzbereich überlagert. Dadurch verringert sich die Breite Δx der Ortsunsicherheit. Im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ geht $\Delta x \rightarrow 0$.

Demgegenüber erhöht sich die Unsicherheit bei der Bestimmung der Wellenlänge mit dem größer werdenden Frequenzbereich, da $\Delta \omega$ abnimmt (vgl. Abb. 1.41 unten).

$\Delta x \rightarrow 0$
für
 $\Delta \omega \rightarrow \infty$

(Ort nur genau bestimmbar wenn ∞ breites Spektrum)

Über die de Broglie-Wellenlänge nach Gl. (1.3) ist der Wellenlänge ein Impuls $p = \frac{h}{\lambda}$ und damit auch eine Impulsunsicherheit (man sagt auch Unschärfe oder Unbestimmtheit) Δp zugeordnet. Mit Δp ergibt sich die Heisenbergsche Unschärferelation in ihrer bekannten Formulierung

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq h \quad (1.116)$$

Heisenbergsche Unschärferelation

Allgemeine Formulierung in:

Unschärferelation

Setzt man für $\Delta p = \frac{h}{\Delta \lambda} = \hbar \Delta k$, erhält man eine Formulierung für die Unbestimmtheit der Wellenfunktion

$$\Delta p = \frac{h}{\Delta \lambda}, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k} \Rightarrow$$

$$\Delta k \cdot \Delta x \geq 2\pi \quad (1.117)$$

Alternative Darstellung

(1.117)

Darin ist Δk der Bereich (Bandbreite) der Wellenvektoren $k_1 \dots k_N$, die nach Gl. (1.115) überlagert werden.

$\hat{=}$ Bandbreite der überlagerten Vektoren im k -Raum

1.28.2 Phasengeschwindigkeit

Wir betrachten eine der Wellenfunktionen nach Gl. (1.114) und fragen, in welcher Zeit Δt eine bestimmte Phase φ den Weg Δx (Δx hat hier keinen Zusammenhang mit der Ortsunsicherheit des vorangegangenen Kapitels) zurückgelegt hat.

allgemein $\cos(\omega t - kx)$

Zu Beginn sei der Einfachheit halber $t = 0$, dann ist die Phase (Argument des cos) an der Stelle x_1

$$\varphi = -kx_1 \quad (1.118)$$

a) $t=0, x=x_1$

An der Stelle $x_1 + \Delta x$ müssen wir eine Zeit Δt warten, bis diese Phase φ erscheint. Es gilt daher

$$\varphi \text{ soll gleich sein: } \varphi = -kx_1 = \omega \Delta t - k(x_1 + \Delta x) \quad (1.119)$$

b) $x = x_1 + \Delta x$
 $t = \Delta t$

und daraus folgt durch Umstellen

$$\omega \Delta t = k \Delta x \quad (1.120)$$

$$v_p := \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\omega}{k} \quad (1.121)$$

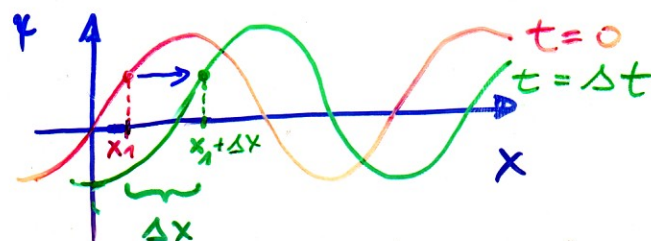
PHASEN-
GESCHWIN-
DIGKEIT

$$v_p = \frac{c^2}{v} > c$$

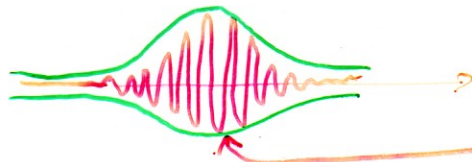
die Phasengeschwindigkeit v_p .

Zu beachten ist, daß die Phasengeschwindigkeit der de Broglie-Welle wegen Gl. (1.8) immer größer als die Lichtgeschwindigkeit ist.

Für die Geschwindigkeit des Elektrons, das wegen des Maximums von $|\psi|^2$ innerhalb des Bereichs Δx der Wellengruppe lokalisiert ist (vgl. Abb. 1.41), ist die Geschwindigkeit der Wellengruppe maßgeblich. Diese Gruppengeschwindigkeit betrachten wir im nächsten Kapitel.



$$v_p := \frac{\Delta x}{\Delta t}$$



Elektron wird bei $|A|^2 = \max$ erwartet

1.28.3 Gruppengeschwindigkeit

Elektron bewegt sich "mit" der Gruppe

Wir betrachten die Überlagerung von zwei Wellenfunktionen im Sinne von Gl. (1.115) ($N = 2$). Wir nehmen an, die beiden unterscheiden sich in Frequenz bzw. Wellenvektor um $\pm\Delta\omega$ bzw. $\pm\Delta k$ von ihren Mittelwerten ω und x . Die Wellenfunktionen lauten dann:

Herleitung:
zwei Schwingungen (Gruppe) mit $\pm\Delta\omega, \pm\Delta k$

$$\psi_1 = \cos((\omega + \Delta\omega)t - (k + \Delta k)x) \quad (1.122)$$

$$\psi_2 = \cos((\omega - \Delta\omega)t - (k - \Delta k)x) \quad (1.123)$$

Die Überlagerung $\psi_1 + \psi_2$ lässt sich mittels Additionstheorem umformen zu

Überlagerung

$$\psi_1 + \psi_2 = 2 \cos(\omega t - kx) \cos(\Delta\omega t - \Delta kx) \quad (1.124)$$

Der erste cos-Term beschreibt eine bekannte Wellenfunktion mit der Phasengeschwindigkeit nach Gl. (1.121). Der zweite cos-Term beschreibt eine Hüllkurve, ähnlich der gestrichelten Umhüllenden der Gruppe in Abb. 1.41 oben links. Analog zur Herleitung der Phasengeschwindigkeit lässt sich die Geschwindigkeit v_{gr} der Hüllkurve der Gruppe anhand des Arguments der zweiten cos-Funktion bestimmen.

Umhüllende:

$$v = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$$

bekannt:
 $v_p = \frac{\omega}{k}$
(Phasengeschw.)

$$v = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} \quad (1.125)$$

Gruppen-Geschwindigkeit

das für kleine Änderungen Δk und $\Delta\omega$ übergeht in die Gruppengeschwindigkeit

$$v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} \quad (1.126)$$

$\Delta\omega \rightarrow d\omega$
 $\Delta k \rightarrow dk$

Dies ist die Geschwindigkeit, mit der sich das Elektron bewegt.

Für beliebige Richtungen von \vec{k} im Dreidimensionalen geht Gl. (1.126) über in

$$\vec{v}_{gr} = \text{grad}_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \quad (1.127)$$

3-Dim

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$$

↓

$$\Delta x \cdot \Delta k = \Delta\omega \Delta t$$

(Unschärfe-Relation)

1.29 Konzept der effektiven Masse

Reale Bandverläufe haben eine kompliziertere Struktur, die von dem einfachen parabelförmigen Verlauf des freien Elektronengases abweicht (vgl. Abb. 1.37 und 1.40).

In den meisten Fällen¹⁰ genügt die Betrachtung der Verläufe an den Bandkanten, die die Energielücke bilden, da diese Bereiche den Stromfluß in einem

¹⁰Wir betrachten hier z.B. nicht die Möglichkeit, daß zwischen den verschiedenen, in Leitungs- und Valenzband enthaltenen Bändern mit Nebenminima und -maxima Wechselwirkungen auftreten können (Interband- bzw. Intra-Bandstreuungen).

Bandverläufe sind kompliziert!

Wunsch: möchte mit freiem Elektronen Modell weiterarbeiten

Idee: ändere Elektronenmasse $m_e \rightarrow m_e^*(k)$ so daß Elektronen

Kapitel 1: Festkörperphysik für Elektroniker wie freies Elektron. 73 mit Masse $m_e^*(k)$ behandelt werden kann.

Halbleiter maßgeblich bestimmen (vgl. Kap. 1.15). Wir betrachten daher in Abb. 1.40 die Dispersionskurven an der Oberkante (Maximum) des Valenzbandes und an der Unterkante (Minimum) des Leitungsbandes.

Um eine Näherung der Bandverläufe im Bereich dieser Punkte zu erhalten, können wir die Kurven in den Punkten als Taylorreihe entwickeln. Wir beschränken uns hier der Einfachheit halber auf den zweidimensionalen Fall, also die Reihenentwicklung in eine bestimmte kristallographische Richtung. Mit k_0 als dem Betrag des Wellenvektors im Minimum/Maximum der Dispersionskurve des Leitungs-/Valenzbandes in der betrachteten Richtung, ergibt sich als Taylorentwicklung um k_0

$$W(k) = W_{V,C} + \Delta k \left. \frac{dW(k)}{dk} \right|_{k_0} + \frac{\Delta k^2}{2} \left. \frac{d^2W(k)}{dk^2} \right|_{k_0} + \dots \quad (1.128)$$

Darin ist $\Delta k = k - k_0$ die Abweichung des Wellenvektors gegenüber dem k_0 im Minimum/Maximum und $W_{V,C}$ alternativ die Energie des Leitungsband-Minimums W_C oder des Valenzband-Maximums W_V .

Wir brechen die Entwicklung nach dem quadratischen Glied ab, nähern also den tatsächlichen Verlauf durch eine Parabel an. Abb. 1.42 zeigt an einem hypothetischen Bandverlauf die Näherung für Leitungs- und Valenzband.

Da wir beide Bänder um ihren Extremwert entwickeln, gilt

$$\left. \frac{dW(k)}{dk} \right|_{k_0} = 0, \quad (1.129)$$

und Gl. (1.128) vereinfacht sich zu

$$W(k) = W_{V,C} + \frac{\Delta k^2}{2} \left. \frac{d^2W(k)}{dk^2} \right|_{k_0} \quad (1.130)$$

Bevor wir anhand dieser Beziehung eine Näherung für Elektronen an den Bandkanten herleiten, betrachten wir die Aussage von Gl. (1.129). Aus ihr geht hervor, daß die Energie eines Elektrons an der Bandkante nicht vom Wellenvektor abhängt. Dies hat eine unmittelbare Auswirkung auf die Geschwindigkeit des Elektrons:

Für die Geschwindigkeit v_e eines Elektrons können wir nach Gl. (1.126) die Gruppengeschwindigkeit

$$v_e = v_{gr} = \frac{d\omega}{dk} \quad (1.131)$$

Vorgehensweise

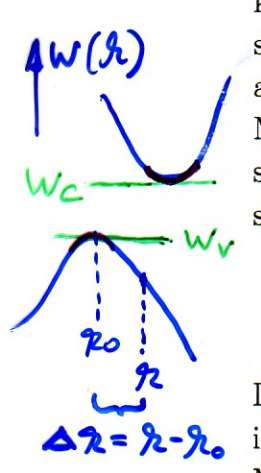
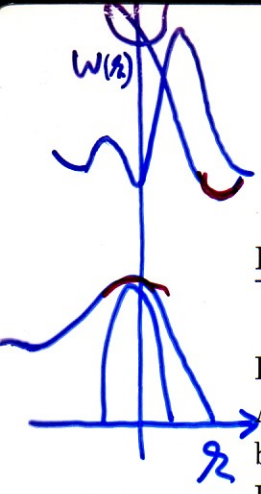
- 1) Betrachte nur Bandkanten
- 2) Entwickle $W(k)$ an den Bandkanten (Extremwerte)

Taylorreihe

- 3) Hier: Vereinfachung Eindimensional (eine bestimmte kristallograph. Richtung)

- 4) Lineares Glied = 0 da in Extremwert entwickelt

- 5) Entwicklung nur bis zum quadratischen Glied



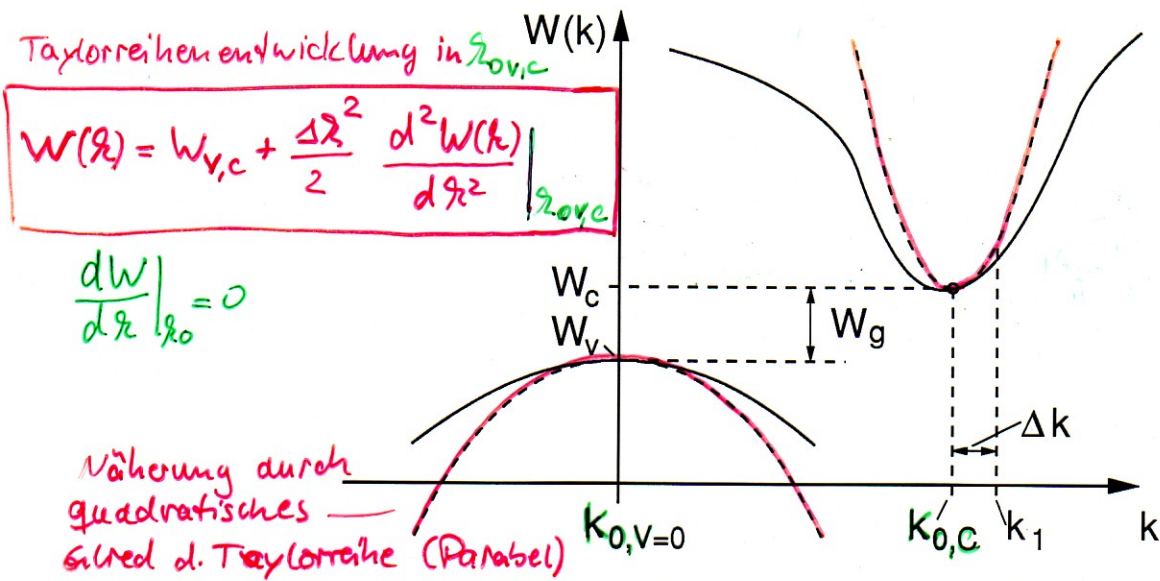


Abb. 1.42: Approximation von Maximum des Valenzbandes bzw. Minimum des Leitungsbandes durch eine Taylorreihenentwicklung zweiter Ordnung. Den Wert der Approximation an der Stelle k_1 in Gl. (1.128) erhält man z. B. für $\Delta k = k_1 - k_{0,c}$. Da für das Maximum des Valenzbandes $k_{0,v} = 0$ gilt, ist für die Reihenentwicklung des Valenzbandverlaufs in diesem Beispiel $\Delta k = k$.

Einschub:
was bedeutet $\frac{dW}{dk} = 0$?

setzen. Mit der Energie des Elektrons nach Gl. (1.5), $W = h \cdot f$ läßt sich die (Kreis-)Frequenz der Elektronenwelle angeben

$$W = h \cdot f \Rightarrow W = \hbar \omega \rightarrow \omega = \frac{W}{\hbar}, \quad (1.132)$$

wodurch sich aus Gl. (1.131) die allgemeingültige Beziehung

$$v_e = \frac{1}{\hbar} \frac{dW}{dk} \quad (1.133)$$

ergibt.

Da an den Bandkanten ($k = k_{0,v}, k_{0,c}$) aber die Energie des Elektrons nicht vom Wellenvektor abhängt, ist die Geschwindigkeit der Elektronen an den Bandkanten gleich Null.

Dieses Ergebnis geht auch anschaulich aus der zuvor zur Entstehung der Bandlücken verwendeten Erklärung der Bragg-Reflektion an den Grenzen der Brillouin-Zone hervor: Wir betrachten an der Bandkante Elektronen mit einem Wellen-Vektor k_0 , der der Bedingung für Bragg-Reflektion genügt.

Bandkante: Bragg-Reflektion
 \Rightarrow stehende Welle $\leftarrow \rightleftharpoons \rightarrow$
 ($v_e = 0$)

Geschwindigkeit d. Elektrons:
 $v_e = v_{gr} = \frac{d\omega}{dk}$

$$\omega = \frac{W}{\hbar}$$

$$v_e = \frac{d}{dk} \frac{W}{\hbar}$$

Berechnung der Elektronengeschwindigkeit aus dem Dispersionsdiag.

Bandkante:

$$\frac{dW}{dk} = 0$$

\Downarrow
 $v_e = 0$
 an den Bandkanten

Die Wellenfunktion für Bragg-reflektierte Wellen ist aber eine stehende Welle (vgl. Abb. 1.36). D.h. die Elektronen sind an einem Ort lokalisiert und bewegen sich nicht.¹¹ Daher ist $v_e = 0$.

Wir wollen im folgenden eine Näherung herleiten, die es uns erlaubt, Elektronen im Bereich der Bandkanten von Leitungs- und Valenzband des Halbleiters genau wie Elektronen im freien Elektronengas zu behandeln. Dies gelingt uns, indem wir den Elektronen im Halbleiter eine effektive Masse m_e^* geben, durch die sie Eigenschaften wie Elektronen mit der Elektronenmasse m_e^* in einem freien Elektronengas besitzen. Wir vergleichen dazu die (mittlere) Geschwindigkeit eines Elektrons im Elektronengas mit der im Halbleiterkristall. Mit der Energie eines Elektrons in freien Elektronengas nach Gl. (1.77 b)

$$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (1.134)$$

ergibt sich aus Gl. (1.133) die Geschwindigkeit des Elektrons im freien Elektronengas (vgl. auch Gl. (1.77 d))

$$v_{e,0} = \frac{1}{\hbar} \frac{dW}{dk} \Rightarrow v_{e,0} = \frac{\hbar k}{m_e} = \frac{\hbar \cdot 2\pi}{m_e \lambda} \stackrel{(1.3)}{=} \frac{p}{m_e} = \frac{m_e \cdot v}{m_e} = v \quad (1.135)$$

Im zweiten Teil von Gl. (1.135) wurde über die de Broglie-Wellenlänge nach Gl. (1.3) der Übergang zur Teilcheneigenschaft hergestellt. Über den Impuls $m_e \cdot v$ ergibt sich die kinetische Geschwindigkeit v identisch zu $v_{e,0}$, die über die Gruppengeschwindigkeit der Wellenfunktion des Elektrons mit Gl. (1.131) hergeleitet wurde.

Wir berechnen zum Vergleich die Geschwindigkeit des Elektrons im Halbleiter. Dazu verwenden wir die Näherung des Bandverlaufs nach

¹¹Es sei hier nochmals darauf hingewiesen, daß es sich bei der Betrachtung um statistische Größen handelt. Genaugenommen ist nur die mittlere Geschwindigkeit der Elektronen mit der Energie $W(k_0)$ gleich Null.

6) Beobachte Dispersionskurve f. freie Elektronen

7) Berechne Geschwindigkeit der freien Elektronen

Schön: Übergang zur Teilcheneigenschaft ($p = \frac{h}{\lambda}$) ist konsistent bezgl. der Geschwindigkeit (= Gruppengeschwindigkeit)

Gl. (1.130). Durch Einsetzen in Gl. (1.133) ergibt sich

$$v_{e,krist} = \frac{1}{\hbar} \frac{dW}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \left(\underbrace{W_{V,C}}_{const.} + \frac{\Delta k^2}{2} \frac{d^2 W(k)}{dk^2} \right) \Big|_{k_0} \quad (1.136)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 W(k)}{dk^2} \Big|_{k_0} \frac{1}{2} \frac{d\Delta k^2}{dk} \quad (1.137)$$

$$= \frac{d}{dk} (k - k_0)^2 = 2\Delta k$$

$$v_{e,krist} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 W(k)}{dk^2} \Big|_{k_0} \Delta k = const. \cdot (k - k_0) \quad (1.138)$$

Legen wir den Ursprung der Wellenvektorskala an die Stelle des jeweiligen Minimums/Maximums des Leitungs- oder Valenzbandes, dann ist $k_0 = 0$ (z.B. ist dann $k_{0,C} = 0$ bei Betrachtung des Leitungsbandes in Abb. 1.42). Damit wird aus Gl. (1.138)

$$v_{e,krist} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 W(k)}{dk^2} \Big|_{k_0} k = \frac{\hbar k}{m_e^*} \quad (1.139)$$

Auf der rechten Seite wird durch Vergleich mit der Geschwindigkeit eines Elektrons im freien Elektronengas (Gl. (1.135)) die effektive Masse

$$\frac{1}{m_e^*} := \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 W(k)}{dk^2} \Big|_{k_0} \quad \text{EFFEKTIVE MASSE} \quad (1.140)$$

eines Elektrons im Kristall definiert. Die effektive Masse m_e^* beschreibt das Verhalten von Elektronen in den als parabelförmig angenommenen Extremwerten eines beliebigen Bandverlaufs so, als wären es freie Elektronen mit der Masse m_e^* . Die so definierte effektive Masse ist unabhängig von k , da für die Approximation des Bandverlaufs eine Parabel verwendet wurde, deren zweite Ableitung eine Konstante ergibt.

Aus Gl. (1.140) lassen sich einige wichtige Eigenschaften der effektiven Masse herleiten:

- Da die zweite Ableitung einer Kurve ein Maß für deren Krümmung ist, besagt Gl. (1.140), daß die effektive Masse umso kleiner ist, je stärker die Dispersionskurve $W(k)$ gekrümmt ist. An der Bandkante verläuft die Kurve flach mit einer horizontalen Tangente, wodurch die effektive Masse der Elektronen unendlich wird.
- Minima haben eine positive zweite Ableitung, Maxima einen negativen Wert. Daher gilt zwischen der effektiven Masse eines Elektrons an

8) Berechne zum Vergleich Elektronengeschwindigkeit im Kristall (verwende Taylorreihenentwickl.)

9) Setze $k_0 = 0$ in den Nullpunkt

10) vergleiche mit $v_e = \frac{\hbar k}{m_e}$ für freie Elektronen

$$m_e^* \neq f(k)$$

da $W \sim \eta^2$ und $\frac{1}{m_e^*} \sim \frac{d^2 W}{d\eta^2} = const.$

Eigenschaften

$$1) m_e^* \sim \frac{1}{\text{Krümmung}}$$

$m_e^* \rightarrow \infty$ bei horizontalem Bandverlauf

VB

LB

$$\frac{1}{m_e^*} := \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 W(\mathcal{R})}{d\mathcal{R}^2} \Big|_{\mathcal{R}_0}$$

→ LB: Minimum $\frac{d^2 W}{d\mathcal{R}^2} > 0$
 → VB: Maximum $\frac{d^2 W}{d\mathcal{R}^2} < 0$

der Bandkante des Leitungsbandes und des Valenzbandes bei gleichem Betrag der Krümmung

$$m_{e,C}^* = -m_{e,V}^*$$

bei gleicher Krümmung (1.141)

2) Elektron hat in LB: $m_e^* > 0$
 VB: $m_e^* < 0$

3. Aus der Definitionsgleichung der effektiven Masse in Gl. (1.139) ergibt sich unmittelbar der Impuls.

$$v_{e,krist} = \frac{\hbar \mathcal{R}}{m_e^*} \Rightarrow$$

$$m_e^* v_{e,krist} = \hbar k$$

3) Kristallimpuls $\hbar k_{krist}$

eines Elektrons im Kristall an den quadratisch genäherten Verläufen von Leitungsband und Valenzband. Er wird zur Unterscheidung zu dem eines freien Elektrons mit „Quasi-Impuls“ oder Kristallimpuls bezeichnet.

4. Für ein freies Elektron mit der (effektiven) Masse m_e^* brauchen die inneren Kräfte des Kristalls nicht berücksichtigt werden, da ihre Wirkung in der effektiven Masse erfaßt ist. Daher können direkt die Beziehungen der Newtonschen Mechanik angewendet werden. So gilt z. B. bei einem von außen an den Kristall angelegten elektrischen Feld \vec{E} für die Kraft auf ein Elektron

4) Durch $m_e \rightarrow m_e^*$ freies Elektron
 Keine Kristallkräfte?
 ↓
 Newtonsche Mechanik anwendbar

$$\vec{F} = -e\vec{E} \quad (1.143)$$

Dadurch erfährt das Elektron eine Beschleunigung $\frac{d\vec{v}_e}{dt}$ entsprechend

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a} :$$

$$\vec{F} = m_e^* \frac{d\vec{v}_e}{dt} = -e\vec{E} \quad (1.144)$$

Bewegungsgleichung

Gl. (1.144) beschreibt eine Bewegungsgleichung für Elektronen im Kristall aufgrund eines z. B. von außen angelegtes Feldes.

Wir haben bisher eine beliebige, aber bestimmte Richtung von k im Zweidimensionalen betrachtet. Dabei sind die Richtung der Geschwindigkeit und die Richtung des Wellenvektors identisch.

Im Dreidimensionalen erfolgt die Richtungsableitung durch Bildung des Gradienten im \vec{k} -Raum und aus Gl. (1.133) wird

$$\vec{v}_e = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} W(\vec{k}) \quad (1.145)$$

Einschub: Besonderheit im 3-Dim. (Masse-Tensor)

3-Dim: $\vec{v}_e = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} W(\vec{k})$, (1-Dim: $v_e = \frac{1}{\hbar} \frac{dW}{dk}$)

Die Beschleunigung, die ein Elektron erfährt, ist damit

Beschleunigung:

$$\frac{d\vec{v}_e}{dt} = \text{grad}_{\vec{k}}(\vec{v}_e) \frac{d\vec{k}}{dt} = \text{grad}_{\vec{k}}(\vec{v}_e) \frac{\vec{F}}{\hbar} \quad (1.146)$$

$$\vec{v}_e = \vec{v}_e(\vec{k}) \quad \Rightarrow \quad = \frac{1}{\hbar^2} \text{grad}_{\vec{k}}(\text{grad}_{\vec{k}} W(\vec{k})) \frac{\vec{F}}{\hbar} \quad (1.147)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \Delta_{\vec{k}}(W(\vec{k})) \frac{\vec{F}}{\hbar} \quad (1.148)$$

$$\frac{d\vec{v}_e}{dt} = \frac{1}{[m_e^*(\vec{k})]} \vec{F} \quad (1.149)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{k}}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \frac{d\vec{p}}{dt} \\ &= \frac{m}{\hbar} \frac{d\vec{v}}{dt} \\ &= \frac{m \cdot \vec{a}}{\hbar} \\ &= \frac{\vec{F}}{\hbar} \end{aligned}$$

mit

$$\frac{1}{[m_e^*(\vec{k})]} = \frac{1}{\hbar^2} \Delta_{\vec{k}}(W(\vec{k})) = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 W}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_z^2} \end{pmatrix} \quad (1.150)$$

Masse Tensor⁻¹
(symmetrisch)

Die effektive Masse des Elektrons im Dreidimensionalen ist also ein Tensor. Dies hat zur Folge, daß z. B. in Gl. (1.149) die Beschleunigung eines Elektrons im Halbleiterkristall nicht in Richtung einer äußeren Kraft \vec{F} erfolgen muß. Für bestimmte Werte von \vec{k} entartet der effektive Masse-Tensor zum Skalar.

↓
Hauptachsen-Transformation
↓
Inversion

Da der Tensor in Gl. (1.150) symmetrisch ist, läßt sich eine Hauptachsentransformation durchführen, wodurch nur die Elemente der Hauptdiagonalen ungleich Null sind. Durch Inversion ergibt sich daraus der Tensor der effektiven Masse

$$[m_e^*] = \begin{bmatrix} m_{e,1}^* & 0 & 0 \\ 0 & m_{e,2}^* & 0 \\ 0 & 0 & m_{e,3}^* \end{bmatrix} \quad (1.151)$$

eff. Masse Tensor

Aus diesem Tensor läßt sich für makroskopische Betrachtungen ein Skalar bilden. Das Bildungsgesetz, also die Kombination und Wichtung der einzelnen Komponenten des Tensors hängt von der betrachteten Größe ab.

↓
 \vec{F} und \vec{a} müssen nicht mehr die gleiche Richtung haben

Für Leitfähigkeitsuntersuchungen ist wegen $\vec{J} = -en\vec{v}_e$ eine skalare Masse zu bestimmen, die zu einer guten Näherung für den Mittelwert der Geschwindigkeit \vec{v}_e der Elektronen führt. Wir nennen diese Masse Leitfähigkeitsmasse m_{ec}^* . Sie ist in Tabelle 1.3 für wichtige Halbleitermaterialien angegeben.

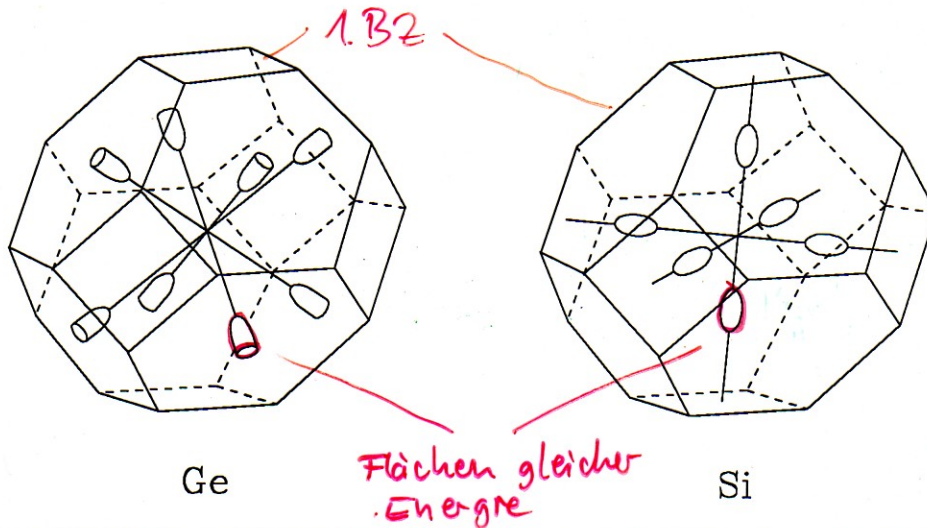
↓
Makroskopische Betrachtung:
Bilde effekt. Masse Skalar

Für die Bestimmung der Zustandsdichte ist zu berücksichtigen, daß sich anstelle der Kugel des freien Elektronengases für Flächen gleicher Energie die

z. B. für Leitfähigkeitsuntersuchungen:

$\vec{J} = -en\vec{v}_e$: Bestimme skalare Masse so, daß \vec{v}_e gut angenähert wird.
⇒ Leitfähigkeitsmasse m_{ec}^*

(durch Kombination und Wichtung der Tensormasse.)



Beobachte Zustandsdichte:
eff. Zustandsdichte - Masse m_{ed}^*
 so zu wählen, daß Berechnung über freie Elektronen mit m_{ed}^* gleiche Zustandsdichte wie i.d. Flächen gleicher Energie im Kristall.

Abb. 1.43: Flächen gleicher Energie in der ersten Brillouin-Zone für Ge und Si. Es handelt sich bei den Flächen um Rotations-Ellipsoide, die bei Ge nur jeweils zur Hälfte in der ersten Brillouin-Zone liegen.

in Abb. 1.43 gezeigten Rotationsellipsoide bilden. Daher muß die effektive Masse zur Berechnung der Zustandsdichte so gewählt werden, daß die sich damit ergebende Zustandsdichte bei Berechnung als freies Elektronengas mit der der Ellipsoiden übereinstimmt. Der hieraus berechnete effektive Masse-Skalar heißt Zustandsdichte-Masse m_{ed}^* . Sie ist ebenfalls in Tab. 1.3 angegeben.

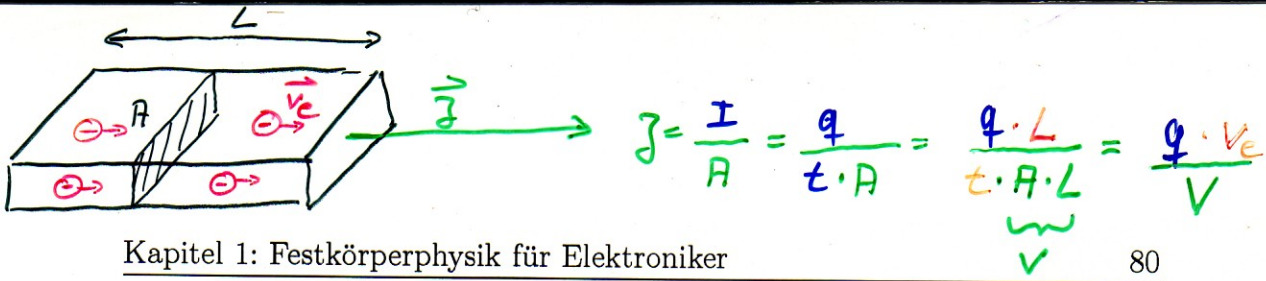
Bei den Berechnungen der effektiven Massen von Ge, Si, GaAs ist auch die Entartung des Valenzbandes zu berücksichtigen. In Abb. 1.40 ist zu sehen, daß die an der Bandoberkante überlappenden Bänder unterschiedliche Krümmungen und damit auch unterschiedliche Massen aufweisen.

Im nächsten Kapitel werden wir den Begriff „Löcher“ für die an der Oberkante des Valenzbandes zur Stromleitung beitragenden Ladungsträger einführen. Bei Löchern in einem Valenzband mit geringer Krümmung spricht man daher von „schweren Löchern“. Im Band mit der starken Krümmung tragen „leichte Löcher“ zur Stromleitung bei.

Entartung an der VB-OK:
 „Schwere“ und „Leichte“ Löcher

1.30 Elektronen und Löcher

Halbleiter zeichnen sich dadurch aus, daß für $T = 0$ das Valenzband voll besetzt und das Leitungsband leer ist. Bereits in Kap. 1.15 wurde festgestellt, daß ein voll besetztes Band keinen Strom leiten kann, da alle Energieniveaus



besetzt sind. Die gleiche Aussage gewinnt man aus der Betrachtung aller \vec{k} -Vektoren in einer Brillouin-Zone. Sind alle Zustände besetzt, gibt es zu jedem Elektron mit einer Wellenfunktion $\psi(\vec{k})$ aufgrund der geometrischen Symmetrie auch eines mit $\psi(-\vec{k})$. D.h. zu jedem Elektron existiert ein Partner, dessen Richtung genau entgegengesetzt ist, so daß im Mittel kein Stromfluß zustande kommt.

Das Ziel bei der Realisierung von Halbleiterbauelementen besteht darin, Elektronen aus dem Valenzband zu entfernen, um so einen Stromfluß zu ermöglichen. Wie sie entfernt werden und wohin, wird später noch ausführlich diskutiert.

Durch das Fehlen von Elektronen im Valenzband sind freie Zustände vorhanden. Die restlichen Elektronen des Valenzbandes können dann an einem Stromfluß teilnehmen, indem sie durch Aufnahme von Energie durch ein von „außen“ an den Halbleiter angelegtes elektrisches Feld diese Plätze besetzen. Die Stromdichte im Halbleiter aufgrund dieser Elektronen im Valenzband beträgt

$$\vec{j}_{VB} = \frac{1}{V} \sum_{\text{besetzte Zustände}} (-e)\vec{v}_e, \quad (1.152)$$

worin V das Volumen des Halbleiterkristalls ist, $-e$ die Ladung eines Elektrons und \vec{v}_e die mittlere Geschwindigkeit in dem jeweiligen Zustand ist. Diese Formulierung ist insofern unpraktisch, da wir über alle besetzten Zustände summieren müssen, wogegen wir zur Ermöglichung der Stromleitung unbesetzte Zustände geschaffen haben. Es fällt uns daher in der Regel leichter, Aussagen über die Anzahl der von uns geschaffenen unbesetzten Zustände zu machen. Dafür kann Gl. (1.152) umformuliert werden, indem die besetzten Zustände als Differenz aller Zustände minus nicht besetzte Zustände ausgedrückt wird.

$$\vec{j}_{VB} = \frac{1}{V} \sum_{\text{alle Zustände}} (-e)\vec{v}_e - \frac{1}{V} \sum_{\text{unbesetzte Zustände}} (-e)\vec{v}_e \quad (1.153)$$

Der erste Term kann nicht zum Stromfluß beitragen, da ein volles Band keinen Strom leitet. Daher vereinfacht sich Gl. (1.153) zu

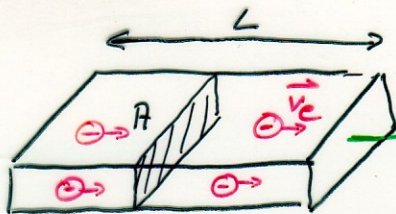
$$\vec{j}_{VB} = -\frac{1}{V} \sum_{\text{unbesetzte Zustände}} (-e)\vec{v}_e = \frac{1}{V} \sum_{\text{unbesetzte Zustände}} (+e)\vec{v}_e. \quad (1.154)$$

Betrachte:
 VB in dem "einige" Elektr. fehlen
 ↓
 freie Zustände (besetzbar)
 ↓
 äußeres Feld $\vec{E} \rightarrow \vec{F} \rightarrow \vec{v}_e$
 ↓
 Elektr. der besetzten Zustände können am Stromfluß teilnehmen
 ↓
 einfacher: betrachte unbesetzte Zustände

LÖCHER

Stromfluß in einem teilbesetzten Band entsteht durch positiv (+e) geladene Teilchen die auf den unbesetzten Zuständen sitzen

Interpretation:



$$j = \frac{I}{A} = \frac{q}{t \cdot A} = \frac{q \cdot L}{t \cdot A \cdot L} = \frac{q \cdot v_e}{V}$$

besetzt sind. Die gleiche Aussage gewinnt man aus der Betrachtung aller \vec{k} -Vektoren in einer Brillouin-Zone. Sind alle Zustände besetzt, gibt es zu jedem Elektron mit einer Wellenfunktion $\psi(\vec{k})$ aufgrund der geometrischen Symmetrie auch eines mit $\psi(-\vec{k})$. D.h. zu jedem Elektron existiert ein Partner, dessen Richtung genau entgegengesetzt ist, so daß im Mittel kein Stromfluß zustande kommt.

Das Ziel bei der Realisierung von Halbleiterbauelementen besteht darin, Elektronen aus dem Valenzband zu entfernen, um so einen Stromfluß zu ermöglichen. Wie sie entfernt werden und wohin, wird später noch ausführlich diskutiert.

Durch das Fehlen von Elektronen im Valenzband sind freie Zustände vorhanden. Die restlichen Elektronen des Valenzbandes können dann an einem Stromfluß teilnehmen, indem sie durch Aufnahme von Energie durch ein von „außen“ an den Halbleiter angelegtes elektrisches Feld diese Plätze besetzen. Die Stromdichte im Halbleiter aufgrund dieser Elektronen im Valenzband beträgt

$$\vec{J}_{VB} = \frac{1}{V} \sum_{\text{besetzte Zustände}} (-e) \vec{v}_e, \quad (1.152)$$

worin V das Volumen des Halbleiterkristalls ist, $-e$ die Ladung eines Elektrons und \vec{v}_e die mittlere Geschwindigkeit in dem jeweiligen Zustand ist. Diese Formulierung ist insofern unpraktisch, da wir über alle besetzten Zustände summieren müssen, wogegen wir zur Ermöglichung der Stromleitung unbesetzte Zustände geschaffen haben. Es fällt uns daher in der Regel leichter, Aussagen über die Anzahl der von uns geschaffenen unbesetzten Zustände zu machen. Dafür kann Gl. (1.152) umformuliert werden, indem die besetzten Zustände als Differenz aller Zustände minus nicht besetzte Zustände ausgedrückt wird.

$$\vec{J}_{VB} = \frac{1}{V} \sum_{\text{alle Zustände}} (-e) \vec{v}_e - \frac{1}{V} \sum_{\text{unbesetzte Zustände}} (-e) \vec{v}_e \quad (1.153)$$

Der erste Term kann nicht zum Stromfluß beitragen, da ein volles Band keinen Strom leitet. Daher vereinfacht sich Gl. (1.153) zu

$$\vec{J}_{VB} = -\frac{1}{V} \sum_{\text{unbesetzte Zustände}} (-e) \vec{v}_e = \frac{1}{V} \sum_{\text{unbesetzte Zustände}} (+e) \vec{v}_e. \quad (1.154)$$

LÖCHER

Stromfluß in einem teilbesetzten Band entsteht durch positiv (+e) geladene Teilchen die auf den unbesetzten Zuständen sitzen

Betrachte:
 VB in dem "einige" Electr. fehlen
 ↓
 freie Zustände (besetzbar)
 ↓
 äußeres Feld $\vec{E} \rightarrow \vec{F} \rightarrow \vec{v}_e$
 ↓
 Electr. der besetzten Zustände können am Stromfluß teilnehmen
 ↓
 einfacher: betrachte unbesetzte Zustände

Interpretation:

Diese Beziehung kann so interpretiert werden, daß der Stromfluß in einem teilbesetzten Band durch positiv geladene Teilchen (+e) entsteht, die auf den (von Elektronen) unbesetzten Zuständen sitzen. Wir nennen diese Teilchen Löcher¹² und werden sie im Folgenden immer dann verwenden, wenn wir im physikalischen Sinn (in der Realität) fehlende Elektronen meinen.

Nach Gl. (1.154) besitzt ein Loch die gleiche Geschwindigkeit wie ein Elektron, das dem zugehörigen unbesetzten Zustand zugeordnet ist. Dies bedeutet, daß sich das Loch im Ortsraum genauso bewegt, wie ein Elektron, das sich auf dem Zustand des Loches befindet.

Wir können daher für die Bewegungsgleichung eines Lochs mit Gl. (1.144) schreiben

Löcher-Masse m_h^* \rightarrow $m_h^* \cdot \frac{d\vec{v}_e}{dt} = +e\vec{E}$ *Bewegungsgl. für Löcher* (1.155)

$\vec{j}_{VB} = \frac{1}{V} \sum +e \vec{v}_e$
 Löcher haben die gleiche Geschwindigkeit wie ein Elektron (in diesem Zustand!)

Darin haben wir mit m_h^* formal eine effektive Löcher-Masse eingeführt. Für ein Elektron in diesem Zustand gilt entsprechend

$m_e^* \cdot \frac{d\vec{v}_e}{dt} = -e\vec{E}$ *Beweg.gl. für Elektronen* (1.156)

woraus durch Vergleich direkt folgt, daß

$m_h^* = -m_e^*$ (1.157)

für die effektive Masse eines Lochs gelten muß.

Die effektiven Massen von **Si**, **Ge** und **GaAs** sind in Tab. 1.3 bezogen auf die Masse eines freien Elektrons angegeben.

	Ge	Si	GaAs
<u>Zustandsdichte-Masse</u>			
Elektron $\frac{m_{ed}^*}{m_e}$	0,55	1,08	0,067
Loch $\frac{m_{hd}^*}{m_e}$	0,37	0,811	0,45
<u>Leitfähigkeits-Masse</u>			
Elektron $\frac{m_{ec}^*}{m_e}$	0,12	0,26	0,067
Loch $\frac{m_{hc}^*}{m_e}$	0,21	0,386	0,34

Effektive skalare Massen (für die weiteren Berechnungen)

Tabelle 1.3: Effektive Massen für Elektronen und Löcher in Ge, Si, GaAs.

¹²Häufig wird auch der Begriff des „Defektelektrons“ verwendet.