

Übung 11 – Lösungen

Aufgabe 25: Ladungsträgerdichten im Leitungsband von Halbleitern

a) Es gilt für die Leitfähigkeit: $\sigma = n e \mu$ und $\sigma = \frac{1}{\rho}$, d. h. $n = \frac{\sigma}{e \mu} = \frac{1}{e \mu \rho}$.

Also ergibt sich die größte Ladungsträgerdichte für die kleinsten Werte von Beweglichkeit und spezifischem Widerstand, die kleinste Dichte für die größten Werte:

$$n_{\min} = \frac{\sigma}{e \mu} = \frac{1}{e \mu \rho} = \frac{1}{1,6 \times 10^{-19} \times 10.000 \times 1.000 \text{ As cm}^2 \Omega \text{cm}} \frac{V_s}{1,6 \times 10^{-12} \text{ Vs cm}^3} = \frac{1}{1,6 \times 10^{-12}} \frac{V_s}{\text{Vs cm}^3}$$

$$= 6,25 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3};$$

$$n_{\max} = \frac{\sigma}{e \mu} = \frac{1}{e \mu \rho} = \frac{1}{1,6 \times 10^{-19} \times 500 \times 0,01 \text{ As cm}^2 \Omega \text{cm}} \frac{V_s}{8,0 \times 10^{-19} \text{ Vs cm}^3} = \frac{1}{8,0 \times 10^{-19}} \frac{V_s}{\text{Vs cm}^3}$$

$$= 1,25 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}.$$

Diese Ladungsträgerdichten ergeben die volle Leitfähigkeit; die gesuchte Dichte im Leitungsband ist dementsprechend jeweils die Hälfte davon.

b) Beide Wahrscheinlichkeiten (daß genau ein Platz im Valenzband nicht besetzt ist und daß genau ein Platz im Leitungsband besetzt ist) sind exakt gleich groß, denn wenn genau ein Elektron aus dem vollbesetzten Valenzband ins zuvor leere Leitungsband gebracht wird, befindet sich genau ein Elektron im Leitungsband, und genau ein Zustand im Valenzband ist nicht besetzt. Die Wahrscheinlichkeit für „ein Elektron im Leitungsband“ ist gegeben durch $f(E_L; E_F, T)$ (effektiv steht vor der Fermi-Verteilung noch ein Faktor 1 für die Zustandsdichte dieses einen Elektrons) und für „ein Elektron (!) im Valenzband“ entsprechend $f(E_V; E_F, T)$. Für das volle Valenzband ist die Besetzungswahrscheinlichkeit gleich 1, denn alle Zustände sind besetzt. Die Situation „ein Zustand im Valenzband ist nicht besetzt“ kann beschrieben werden durch „alle besetzt minus einer besetzt“, d. h. die zugehörige Wahrscheinlichkeit ist $1 - f(E_V; E_F, T)$. Damit können wir die Gleichheit der Wahrscheinlichkeit von „ein Elektron im Leitungsband“ und „ein Loch im Valenzband“ so ausdrücken:

$$f(E_L; E_F, T) = 1 - f(E_V; E_F, T)$$

Für ein gegebenes Material (d. h. für gegebenes E_L und E_V) ist dies eine Bestimmungsgleichung für E_F :

$$\frac{1}{\exp\left\{\frac{E_L - E_F}{k_B T}\right\} + 1} = 1 - \frac{1}{\exp\left\{\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right\} + 1}$$

mit $A = \frac{E_L - E_F}{k_B T}$ und $B = \frac{E_V - E_F}{k_B T}$: $\frac{1}{\exp(A) + 1} = 1 - \frac{1}{\exp(B) + 1}$

$$\frac{1}{\exp(A) + 1} + \frac{1}{\exp(B) + 1} = 1$$

$$\frac{\exp(A) + 1 + \exp(B) + 1}{[\exp(A) + 1] \cdot [\exp(B) + 1]} = 1$$

$$\exp(A) + 1 + \exp(B) + 1 = [\exp(A) + 1] \cdot [\exp(B) + 1]$$

$$\exp(A) + \exp(B) + 2 = \exp(A)\exp(B) + \exp(A) + \exp(B) + 1$$

$$1 = \exp(A)\exp(B)$$

$$\Rightarrow 1 = \exp\left\{\frac{E_L - E_F}{k_B T}\right\} \exp\left\{\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right\}$$

$$= \exp\left\{\frac{E_L - E_F + E_V - E_F}{k_B T}\right\}$$

$$\Rightarrow E_L - E_F + E_V - E_F = 0 \quad \text{bzw.} \quad E_L + E_V = 2E_F \quad \Rightarrow \quad E_F = \frac{E_L + E_V}{2}$$

Somit liegt die Fermi-Energie genau in der Mitte zwischen Leitungs- und Valenzbandkante.

c) Die Ladungsträgerdichte n_e^L im Leitungsband ist gegeben durch

$$n_e^L = N_{\text{eff}} \times f(E_L; E_F, T),$$

mit der konstanten effektiven Zustandsdichte N_{eff} und der Fermi-Verteilung $f(E_L; E_F, T)$. Aus dieser Formel lässt sich dann wie folgt die Größe der Bandlücke bestimmen:

$$n_e^L = N_{\text{eff}} \frac{1}{\exp\left\{\frac{E_L - E_F}{k_B T}\right\} + 1}$$

$$\left(\exp\left\{\frac{E_L - E_F}{k_B T}\right\} + 1\right) n_e^L = N_{\text{eff}}$$

$$\exp\left\{\frac{E_L - E_F}{k_B T}\right\} = \frac{N_{\text{eff}}}{n_e^L} - 1$$

$$\frac{E_L - E_F}{k_B T} = \ln\left(\frac{N_{\text{eff}}}{n_e^L} - 1\right)$$

$$E_L - E_F = k_B T \ln\left(\frac{N_{\text{eff}}}{n_e^L} - 1\right)$$

mit $E_L = E_G / 2$ und $E_F = 0$:

$$\frac{E_G}{2} = k_B T \ln\left(\frac{N_{\text{eff}}}{n_e^L} - 1\right) \quad \text{bzw.} \quad E_G = 2k_B T \ln\left(\frac{N_{\text{eff}}}{n_e^L} - 1\right).$$

Weil also für fest vorgegebene Werte von N_{eff} und n_e^L die erforderliche Größe der Bandlücke linear von der Temperatur abhängt, genügt es, zuerst die Werte für $T = 100 \text{ K}$ zu berechnen:

$$\text{Für } n_{\min}: E_G = 2 \times 8,62 \times 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}} \times 100 \text{ K} \times \ln \left(\frac{2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}}{6,25 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}} - 1 \right) = 298 \text{ meV}$$

$$\text{Für } n_{\max}: E_G = 2 \times 8,62 \times 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}} \times 100 \text{ K} \times \ln \left(\frac{2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}}{1,25 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}} - 1 \right) = 46,7 \text{ meV}$$

Diese Ergebnisse beziehen sich auf die gesamte Ladungsdichte; im Leitungsband befindet sich aber nur die Hälfte, daher sind die endgültigen Ergebnisse etwas größer. Für $n_{\min}$ erhält man $E_G = 310 \text{ meV}$, und für $n_{\max}$ erhält man $E_G = 59,2 \text{ meV}$.

Die Werte liegen in einem realistischen Bereich. Wie zu erwarten, müsste die Bandlücke zum Erreichen der größten Ladungsträgerkonzentration am kleinsten sein und umgekehrt. Die zu $T = 300 \text{ K}$ und $T = 500 \text{ K}$ gehörenden Bandlücken sind um einen Faktor 3 bzw. 5 größer.

$$\text{Für die Boltzmann-Näherung gilt: } f(E_L; E_F, T) \approx \exp \left\{ -\frac{E_L - E_F}{k_B T} \right\}.$$

Somit läßt sich für diesen Fall ebenfalls die Größe der Bandlücke bestimmen:

$$n_e^L = N_{\text{eff}} \exp \left\{ -\frac{E_L - E_F}{k_B T} \right\}$$

$$\ln \left(\frac{n_e^L}{N_{\text{eff}}} \right) = -\frac{E_L - E_F}{k_B T}$$

$$k_B T \ln \left(\frac{n_e^L}{N_{\text{eff}}} \right) = -\frac{E_G}{2}$$

$$E_G = -2k_B T \ln \left(\frac{n_e^L}{N_{\text{eff}}} \right) = 2k_B T \ln \left(\frac{N_{\text{eff}}}{n_e^L} \right)$$

Bis auf die fehlende „-1“ ist das Ergebnis identisch zum vorherigen (entsprechend der Fermi-Verteilung). Wie zuvor werden nur Zahlenwerte für $T = 100 \text{ K}$ ermittelt:

$$\text{Für } n_{\min}: E_G = 2 \times 8,62 \times 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}} \times 100 \text{ K} \times \ln \left(\frac{2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}}{6,25 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}} \right) = 298 \text{ meV}$$

$$\text{Für } n_{\max}: E_G = 2 \times 8,62 \times 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}} \times 100 \text{ K} \times \ln \left(\frac{2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}}{1,25 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}} \right) = 47,8 \text{ meV}$$

Die mit der halben Ladungsträgerdichte ermittelten Werte lauten 310 meV und $59,7 \text{ meV}$. Die Ergebnisse für die Boltzmann-Näherung und die Lösung mit der Fermi-Verteilung unterscheiden sich für die große Bandlücke nicht, bei der kleinen tritt eine geringfügige Abweichung auf, weil die Vernachlässigung der „-1“ im Logarithmus nicht mehr gerechtfertigt ist.

Aufgabe 26: Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit

a) Mit wachsender Temperatur sinkt die Leitfähigkeit von Metallen leicht ab, während die Leitfähigkeit von undotierten Halbleitern und Isolatoren sehr stark ansteigt („sehr stark“: we-

gen der in der Abbildung benutzten logarithmischen Skala). Der im logarithmischen Maßstab nahezu lineare Anstieg der Leitfähigkeit von Isolatoren bedeutet in der Realität ein exponentielles Ansteigen ihrer Leitfähigkeit. Bei undotierten Halbleitern ist der Anstieg etwas schwächer als exponentiell, erstreckt sich aber auch über mehrere Größenordnungen.

b) Die Beweglichkeit μ ist definiert als Proportionalitätsfaktor zwischen der bei Vorliegen eines elektrischen Feldes E in einem Leiter resultierenden Driftgeschwindigkeit v_D und der Feldstärke E : $\mu = v_D / E$. Weil die Driftgeschwindigkeit um so größer ist, je größer die mittlere Zeit zwischen zwei Stoßprozessen ist, ist die Beweglichkeit ein Maß für diese Stoßzeit bzw. für die damit verbundene mittlere freie Weglänge.

c) Mit Hilfe der Formeln $\sigma = n e \mu$ und $\mu(T) \sim T^{-\alpha}$ kann man die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeitskurven folgendermaßen verstehen:

- Metalle: Hier hat man eine hohe und nahezu temperaturunabhängige Dichte n an Elektronen. Den abfallenden Kurvenverlauf von $\sigma(T)$ kann man mit der nach $\mu(T) \sim T^{-1}$ abnehmenden Beweglichkeit komplett verstehen.
- Isolatoren: Hier gilt zwar wegen $\mu(T) \sim T^{-1,5}$ ebenfalls, daß die Beweglichkeit mit steigender Temperatur abnimmt, aber dieser Effekt wird überkompensiert durch den offensichtlich exponentiellen Anstieg der Ladungsträgerdichte n mit der Temperatur, was den Anstieg von $\sigma(T)$ erklärt.
- Halbleiter (undotiert): Wiederum wird der Einfluß der Beweglichkeit durch den der Ladungsträgerdichte n überkompensiert, so daß $\sigma(T)$ steigt. Die Ladungsträgerdichte von Halbleitern ist bei gleicher Temperatur höher als für Isolatoren, was zur kleineren Leitfähigkeit der Isolatoren führt. Im Vergleich zu Metallen ist die Ladungsträgerdichte in Halbleitern geringer, was die höhere Leitfähigkeit der Metalle erklärt.

d) Die Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit kann wie folgt klassisch gedeutet werden: Entsprechend $\mu = e \tau / m$ ist die Beweglichkeit proportional zur Stoßzeit, wobei sowohl die Ladung e als auch die Masse m nicht von der Temperatur abhängen. Die Stoßzeit wiederum ergibt sich aus $\tau = l / v_{th}$, d. h. „freie Weglänge der Elektronen geteilt durch thermische Geschwindigkeit“; beide hängen von der Temperatur ab.

Zunächst wird die freie Weglänge l betrachtet, sie ist hier durch $l = (A_{eff} n_{Streu})^{-1}$ gegeben. Darin ist die Anzahldichte n_{Streu} der Streuzentren (= Gitteratome) praktisch unabhängig von der Temperatur. Zur Temperaturabhängigkeit von A_{eff} gelangt man wie folgt: Mit steigender Temperatur nimmt die thermische Energie $k_B T$ und damit auch die potentielle Energie der Gitterschwingungen linear mit der Temperatur zu. Bei einer harmonischen Schwingung ist die Kraft proportional zur Auslenkung und also die potentielle Energie proportional zum Quadrat der Auslenkung. Das bedeutet, daß der Wirkungsquerschnitt A_{eff} , der (weil er eine Fläche ist) ebenfalls proportional zum Quadrat der (Maximal-)Auslenkung eines Gitteratoms ist, ebenfalls linear mit der Temperatur zunimmt, d. h. A_{eff} ist proportional zu T . Damit ist die freie Weglänge l proportional zu T^{-1} .

Nun zur thermischen Geschwindigkeit v_{th} : Klassisch folgt für sie aus dem Gleichverteilungssatz eine Proportionalität zu $T^{0,5}$, weil für klassische Massenpunkte nur die kinetische Energie zu berücksichtigen ist, so daß man $\frac{1}{2} m v_{th}^2 = 3/2 k_B T$ und damit $v_{th} = \sqrt{3 k_B T / m}$ hat (zumindest in guter Näherung; vgl. Übungsblatt 10, Aufgabe 24). Damit ist die Beweglichkeit in der klassischen Beschreibung wegen $\mu \sim \tau = l / v_{th}$ insgesamt proportional zu $T^{-1} / T^{0,5} = T^{-1,5}$, q.e.d.

[Erläuterung/Wiederholung: Daß bei undotierten Halbleitern und Isolatoren der Gleichverteilungssatz verwendet werden darf, obwohl es auch hier um frei bewegliche Elektronen geht,

ergibt sich aus der geringen Zahl an freien Elektronen in diesen Materialien, denen sehr viele besetzbare Zustände zur Verfügung stehen (vgl. 7. Übungsblatt, Aufgabe 18). In diesem Fall ist das Pauli-Prinzip für die Besetzung der Zustände nicht maßgeblich, daher kann statt der Fermi- die Boltzmann-Verteilung verwendet werden. Das bedeutet aber, daß sich diese Elektronen wie klassische Teilchen beschreiben lassen, und also ist die Anwendung des Gleichverteilungssatzes hier unproblematisch möglich.]

e) Bei Metallen ist $\mu(T) \sim T^{-1}$. Zu dieser Abhängigkeit führen bereits allein die Gitterschwingungen; somit entfällt bei Metallen offenbar der Beitrag der thermischen Geschwindigkeit.

Diese Interpretation ist korrekt: Die freien Elektronen in Metallen sind ein Fermi-Gas (siehe 7. Übungsblatt, Aufgabe 18); mithin gilt für sie der Gleichverteilungssatz nicht. Statt dessen tragen nur Elektronen im Aufweichungsbereich der Fermiverteilung zur Leitfähigkeit bei, und weil die Lage der Fermi-Energie bei Metallen nicht von der Temperatur abhängt, ist auch die mittlere thermische Geschwindigkeit der freien Elektronen unabhängig von T .