

## Kapitel 8

# Bändermodell

---

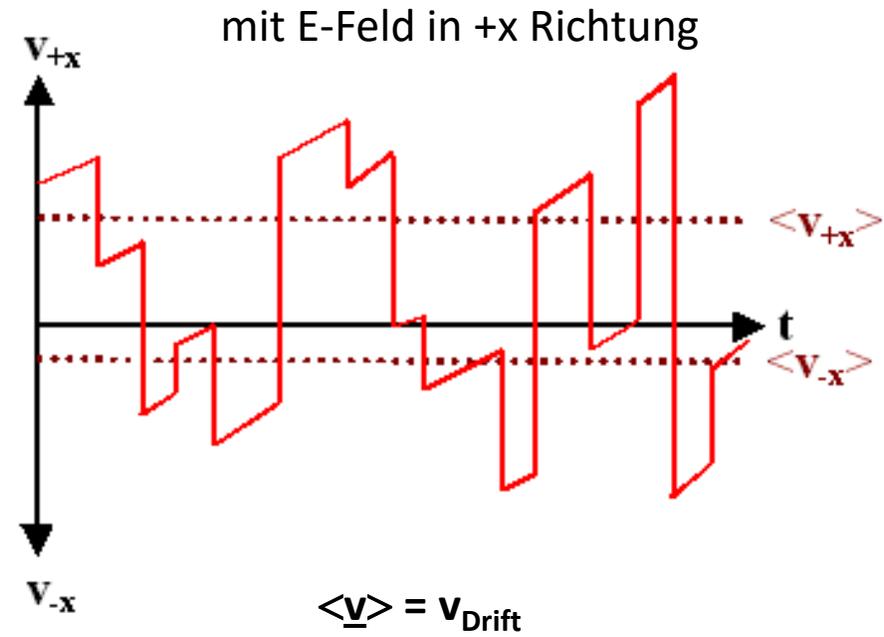
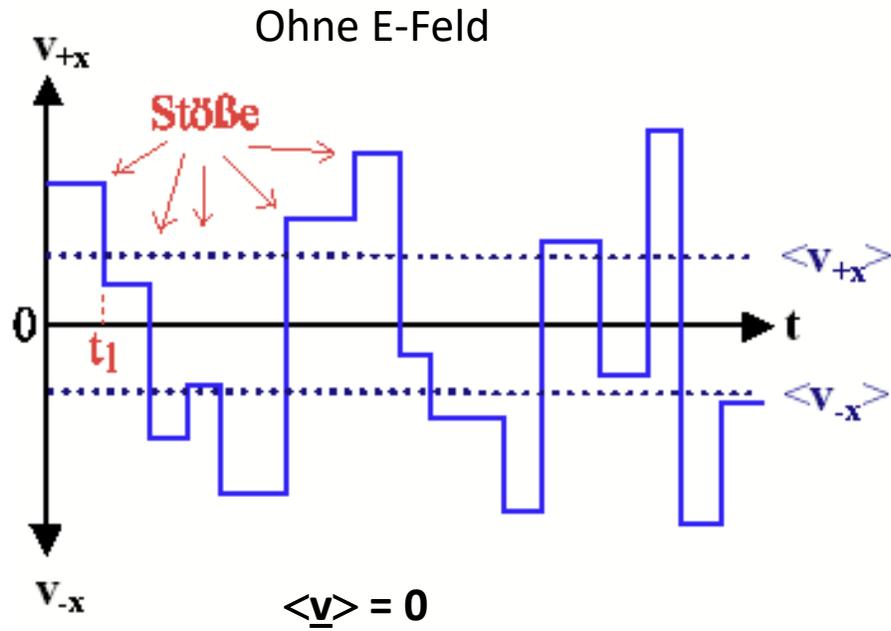
**Prof. Dr. Martin Ziegler**

Energy Materials and Devices

Institute for Materials Science, Kiel University

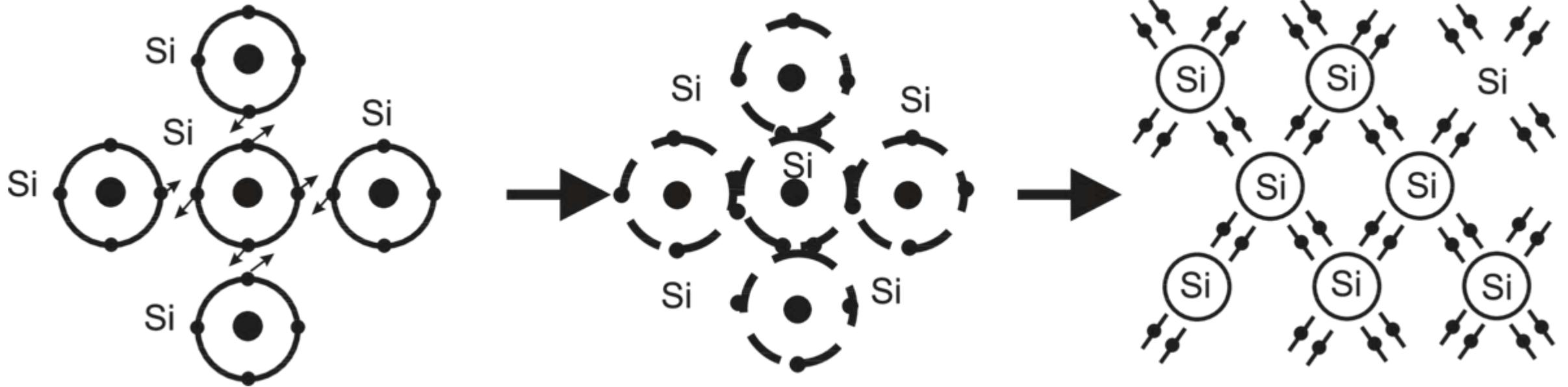
[mzi@tf.uni-kiel.de](mailto:mzi@tf.uni-kiel.de)

# 8.1 Leitfähigkeit, Ladungsträgerdichte und Beweglichkeit



## 8.1 Leitfähigkeit, Ladungsträgerdichte und Beweglichkeit

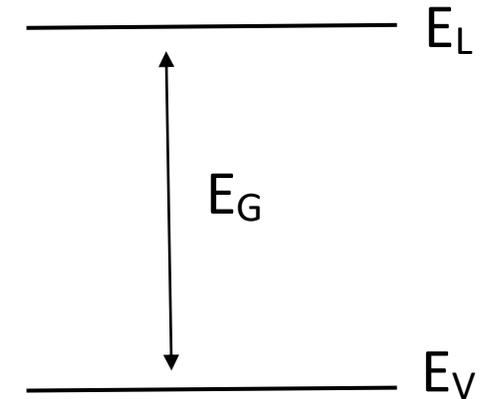
- Die **räumliche Struktur der kovalenten Bindung** wird gerne in eine zweidimensionale, abstrakte Darstellung (**'Bindungsmodell'**) überführt, um z. B. die elektrische Leitung zu veranschaulichen.



Reinhold Paul. Feldeffekttransistoren.. Vieweg+Teubner Verlag, 1989.

## 8.1 Leitfähigkeit, Ladungsträgerdichte und Beweglichkeit

- Neben der schematischen Darstellung der Elektronen im 2-dimensionalen Ortsraum des Halbleiters ist eine **Darstellung der Energieverhältnisse** somit praktischer.
- Elektronen sind auf **Energieniveaus** verteilt:
  - **Valenzband**  $E_V$ : Rumpfelektronen und Bindungselektronen
  - **Leitungsband**  $E_L$ : Freie Elektronen und Löcher (aufgebrochene Bindungen)
  - **Bandlücke**  $E_G$ : Energiedifferenz zwischen freien Elektronen und Löchern (Silizium  $E_G = 1,1$  eV)
- Die freien Elektronen werden nun **Leitungselektronen** genannt, gebundene **Valenzelektronen**.
- Die Energiedifferenz zwischen Leitungselektronen und Löchern ist also mindestens gleich dem Bandabstand – dies entspricht der Bindungsenergie im Kristall.



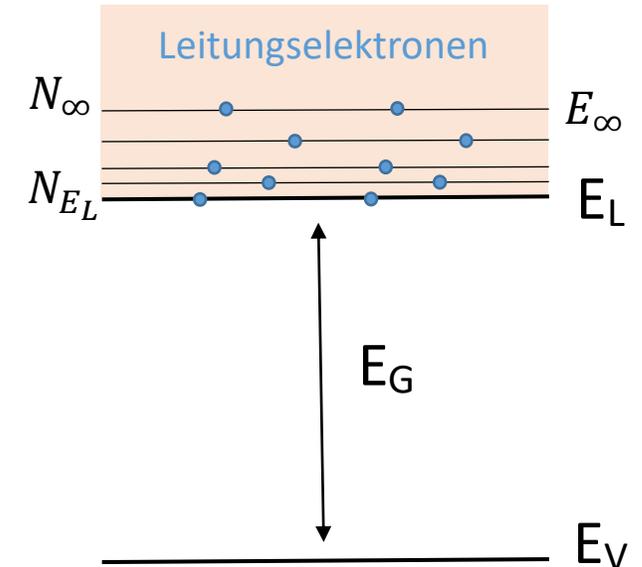
## 8.1 Leitfähigkeit, Ladungsträgerdichte und Beweglichkeit

- In dem zuvor betrachtenden Energiebänder Modell interessiert uns also alle jene Elektronen, die eine Energie größer gleich der bandkante des Leitungsbands haben, da diese die Leitungselektronen (freien Elektronen) sind und zum Ladungstransport beitragen.

- Damit müssen wir “abzählen” oder besser gleich integrieren über die **Elektronen N im Leitungsband**, d.h.

$$n \propto \int_{E_L}^{\infty} N dN$$

- Nun wird es leider etwas kompliziertere und Elektronen muss man über die Quantentheorie beschreiben.
- Aber ohne dies hier nun wirklich zu tun, verwenden wir hier zwei wichtige **Eigenschaften der Quantentheorie**:
  1. Elektronen sind in **quantisierten Zuständen Z**.
  2. Elektronen sind Fermionen, d.h. **pro Zustand können nur zwei Elektronen gleichzeitig sein**.
- Damit lässt sich eine extrem wichtige Größe definieren, die **Zustandsdichte**:
  - Die Zustandsdichte gibt somit an, wie viele Zustände (Energieniveaus) pro Energieintervall in einem Halbleiter (Festkörper) existieren.



$$D_n(E) = \frac{1}{V} \frac{N_{\infty} - N_{E_L}}{E_{\infty} - E_L} = \frac{1}{V} \frac{dN}{dE}$$

## 8.1 Leitfähigkeit, Ladungsträgerdichte und Beweglichkeit

- Damit setzen wir unsere Formel für die Zustandsdichte in unsere Integralgleichung für die Ladungsträgerdichte ein und erhalten :

$$n \propto \int_{E_L}^{\infty} D_n(E) dE$$

- $D_n$  zu bestimmen ist in sich wieder ein Problem für sich und wir wollen hier nicht näher darauf eingehen. Aber für **Silizium** gilt die folgende Abhängigkeit:

$$D(E) \propto \sqrt{E - E_L} \quad (\text{entsprechend für Löcher})$$

- Damit nimmt die Zustandsdichte  $D(E)$  für freie Elektronen im Leitungsband mit der Wurzel aus dem Abstand der Energie zur Bandkante zu. Das bedeutet, umso höher die Energie um so dichter (umso mehr) Zustände – aber das würde dann auch bedeuten umso mehr Elektronen? Dies passt aber nicht mit unserem einfachen Bild das nur ganz wenige Elektronen die Energie haben die Bindungen aufzubrechen, also wo kommen dann diese vielen Elektronen her.
- Hier liegt der nächste Stolperstein. Die Anzahl der Elektronen ist beschränkt, z. B. für Silizium haben wir  $10^{-10}$  Leitungselektronen / $\text{cm}^3$ . Hier fehlt uns also noch eine wichtige Information, die uns sagt wo (in welchen der Energiezuständen) die Elektronen sitzen. Dies beschreibt die **Verteilungsfunktion der Elektronen bei einer Temperatur  $T$** :

$$f_n(E, T) = \frac{1}{1 + \exp \frac{E - E_F}{kT}}$$

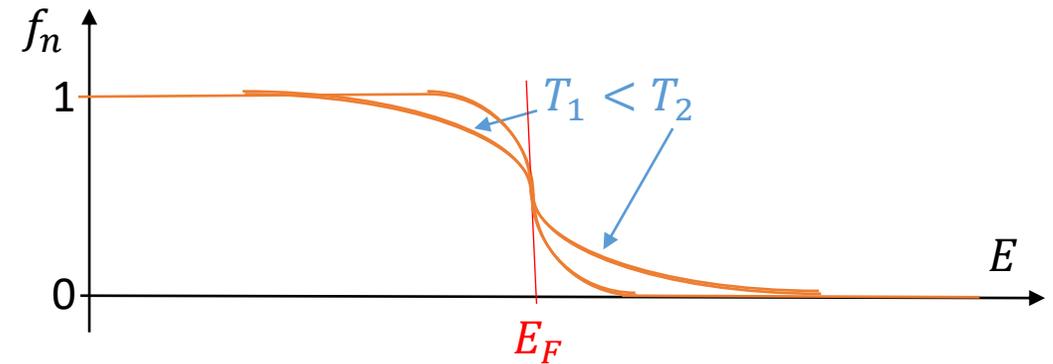
Fermi-Dirac Verteilung

# 8.1 Leitfähigkeit, Ladungsträgerdichte und Beweglichkeit

• Diese Funktion müssen wir uns etwas genauer betrachten:

- Dies ist eine Energie-Verteilung für Elektronen (**Fermi-Energieverteilung**), die besagt das die Anzahl der Elektronen mit zunehmender Energie abnimmt (nun das entspricht nun eher unseren Erwartungen)
- Mit zunehmender Temperatur gibt es mehr Elektronen mit höherer Energie (auch das entspricht unseren Erwartungen).
- Die Energie, bei der die Wahrscheinlichkeit den Wert 50 % erreicht, wird als **Fermienergie  $E_F$**  bezeichnet.

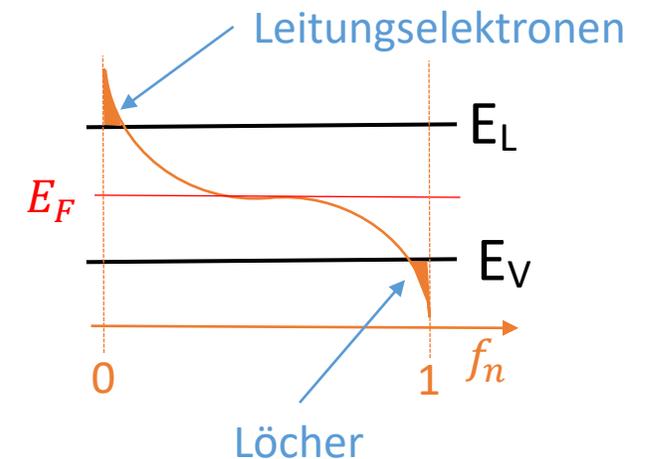
$$f_n(E, T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}$$



• Zeichnen wir nun  $f_n$  in unser Energieschema des Bänder Modells ein, so lässt sich sofort ablesen **welche der Elektronen im Kristall als Leitungselektronen vorhanden sind**:

- Formal lässt sich somit lässt sich dies auch in der Integralformel für die **Ladungsträgerkonzentration** schreiben:

$$n = \int_{E_L}^{\infty} f_n(E, T) D_n(E) dE$$



## 8.1 Leitfähigkeit, Ladungsträgerdichte und Beweglichkeit

- Diese Integral lässt sich natürlich berechnen, was ich mir aber für die weitere Vorlesungen aufheben mag und ihnen heute nur direkt die Lösung geben mag:

$$n = \int_{E_L}^{\infty} f_n(E, T) D_n(E) dE$$

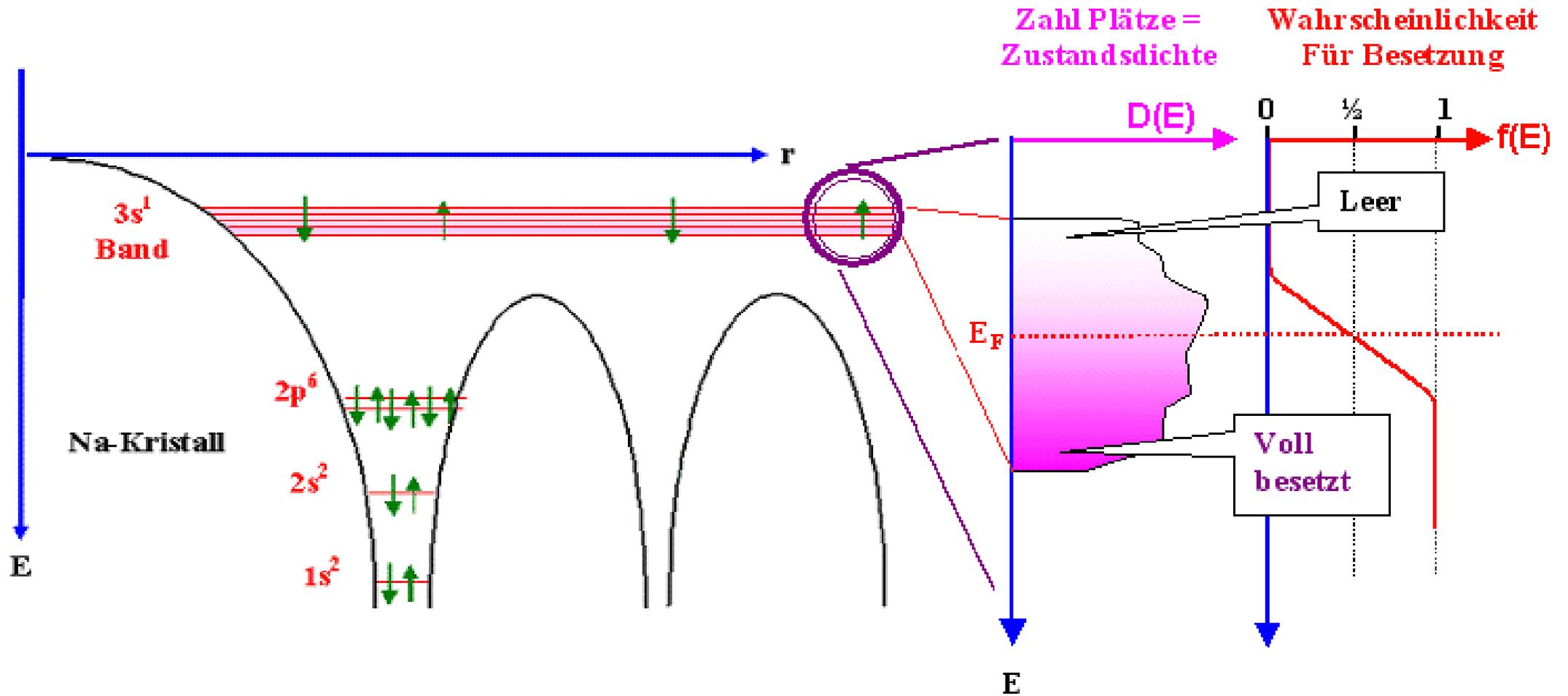
- Für Elektronen gilt:

$$n = c \cdot T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_L - E_F}{kT}\right) \quad \text{effektive Zustandsdichte: } c \cdot T^{3/2} = N_L \quad (= 2.8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \text{ für Si})$$

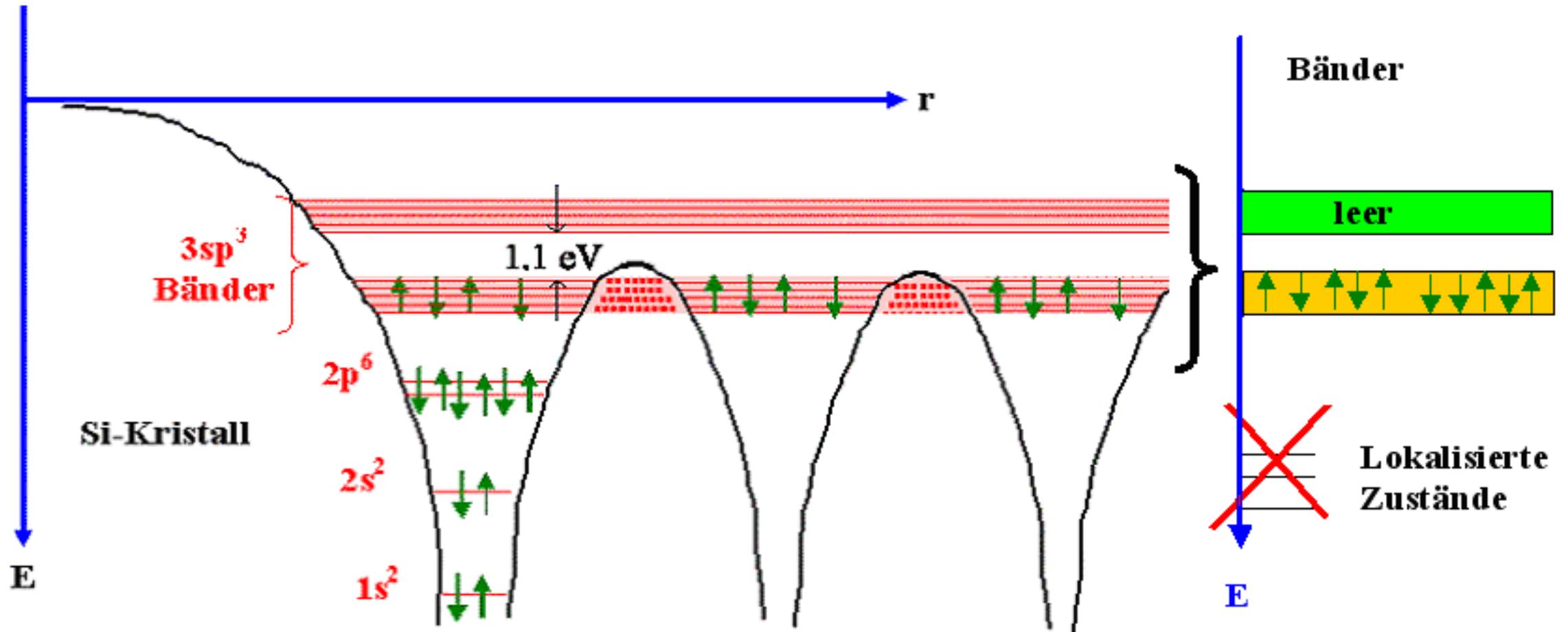
- Für Löcher gilt:

$$p = \alpha \cdot T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right) \quad \text{effektive Zustandsdichte: } \alpha \cdot T^{3/2} = N_V \quad (= 1.04 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \text{ for Si})$$

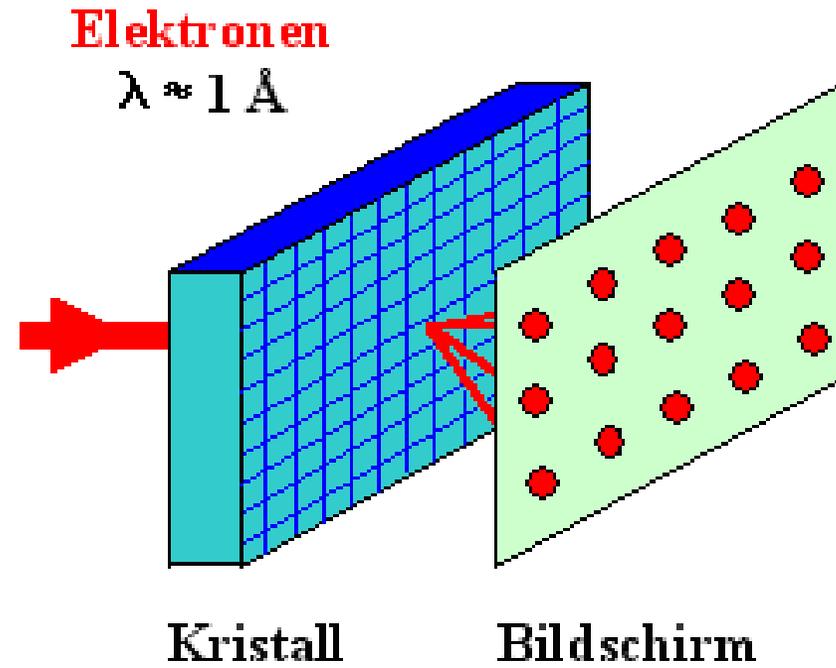
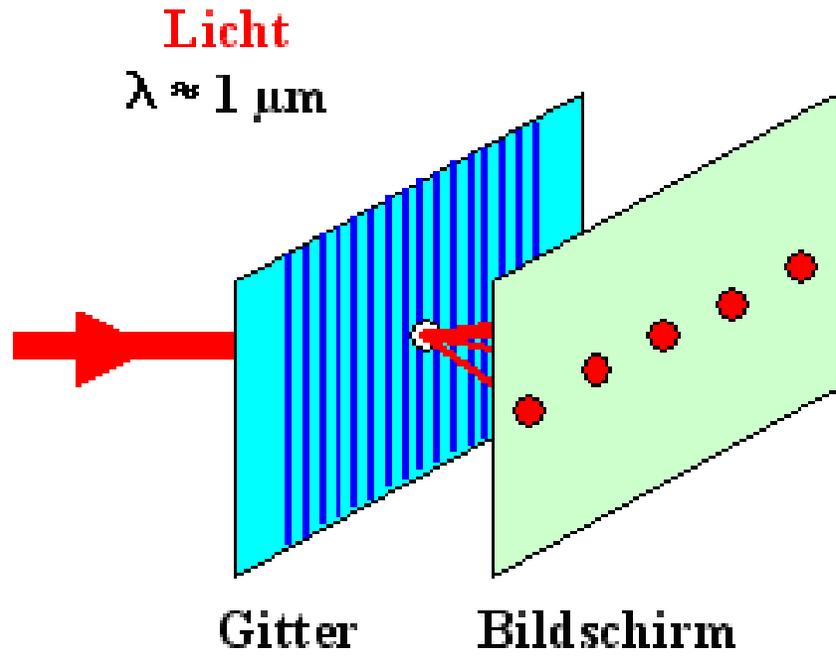
# 8.1 Leitfähigkeit, Ladungsträgerdichte und Beweglichkeit



## 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur

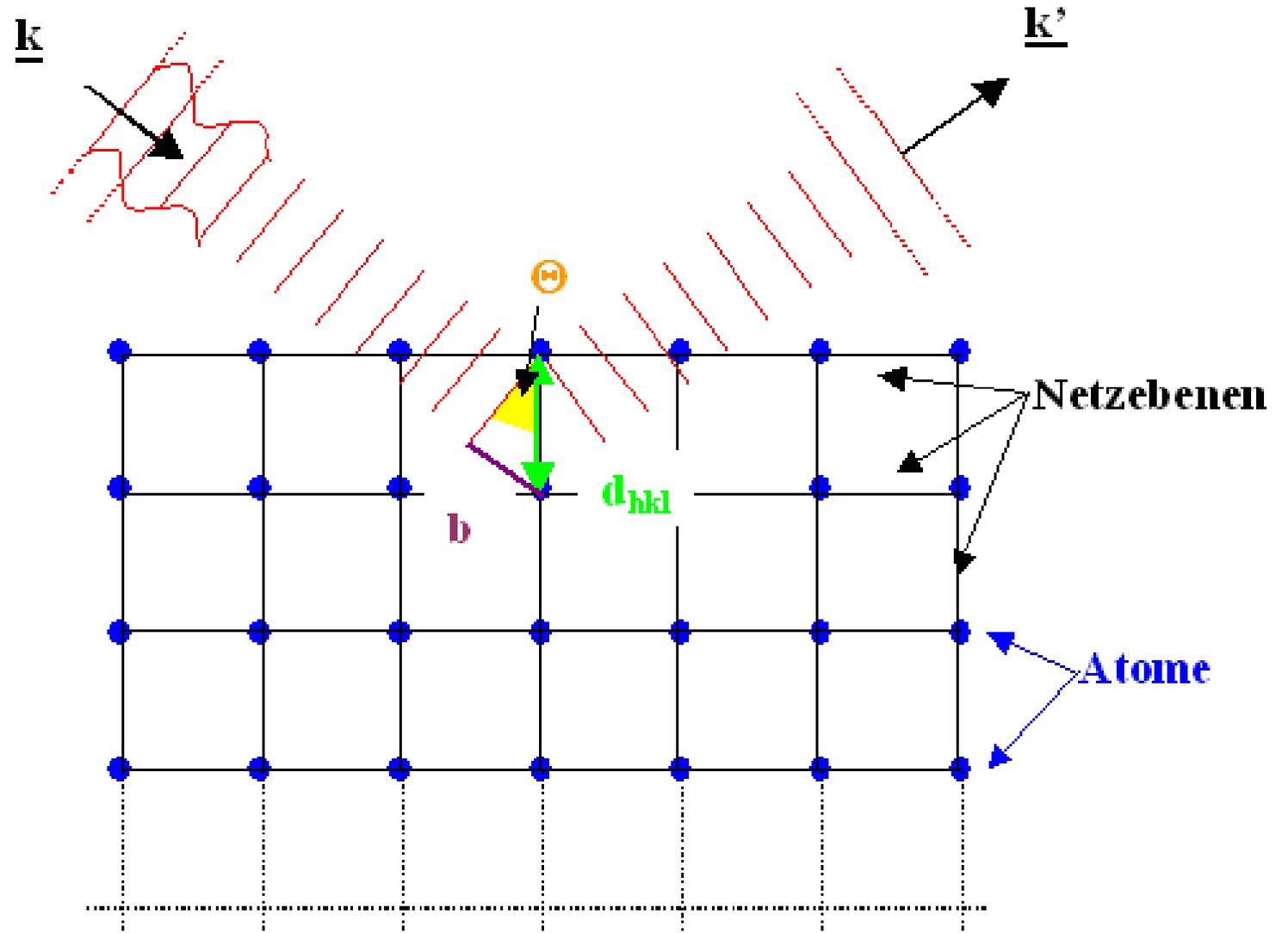


## 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur

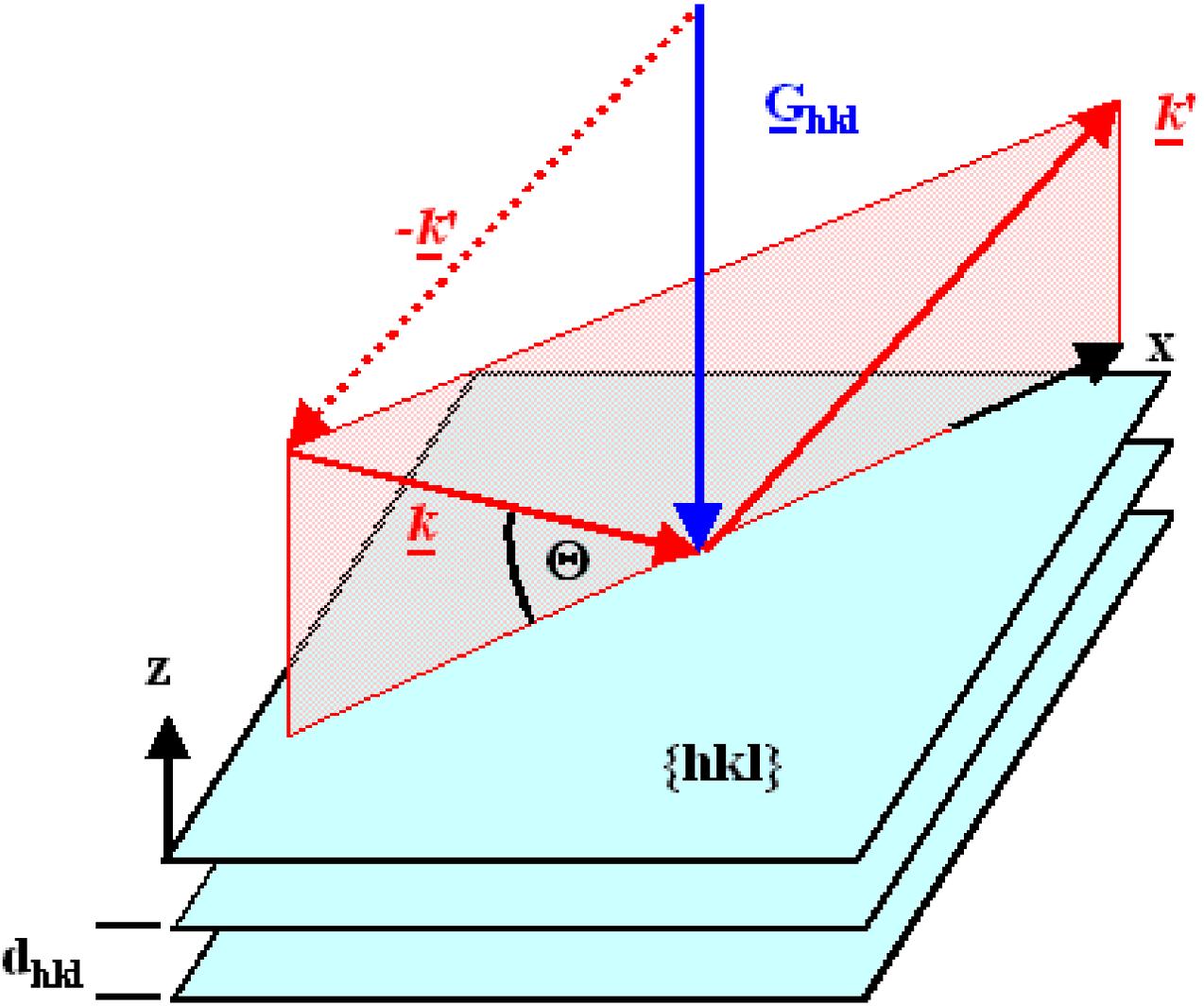


## 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur

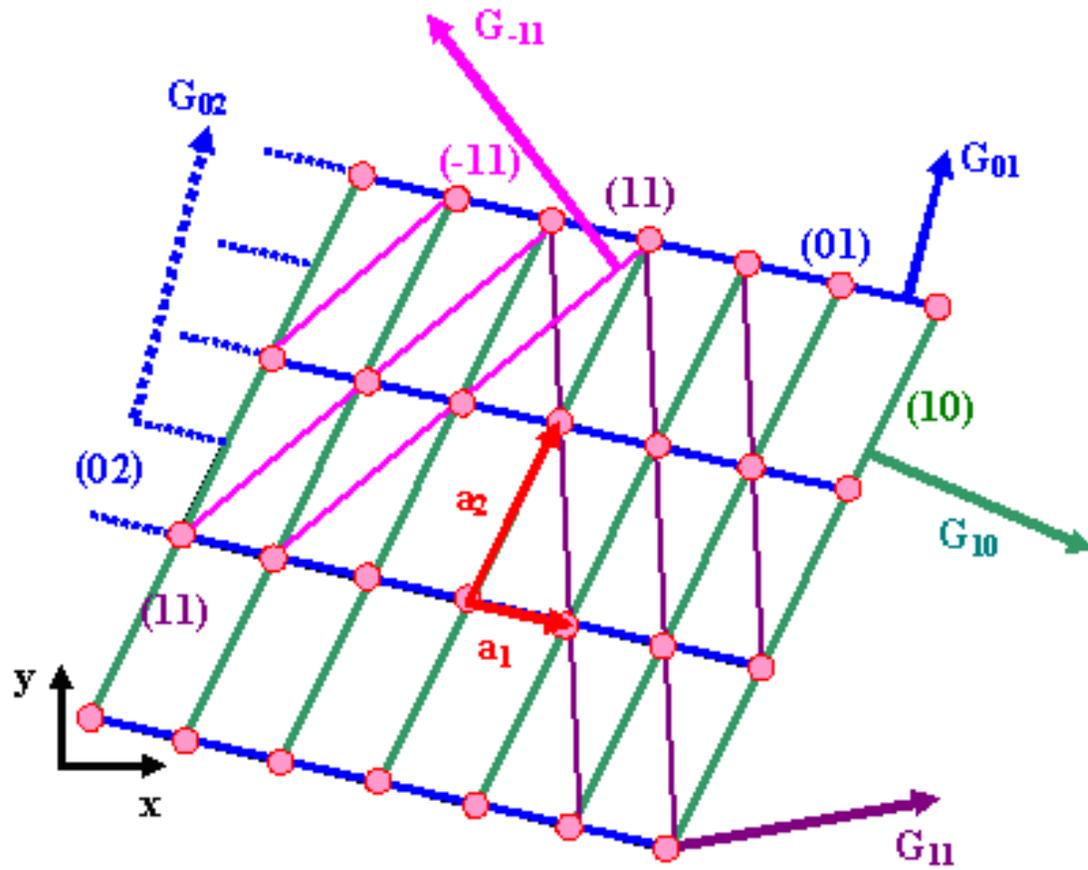
Bragg-Bedingung erfüllt:  
Sekundärwelle aufgrund  
konstruktiver Interferenz



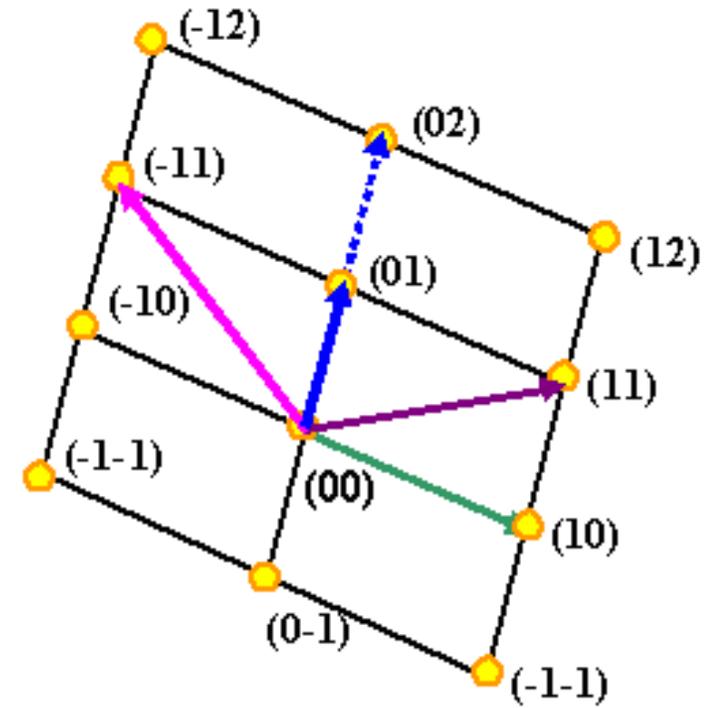
# 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur



## 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur

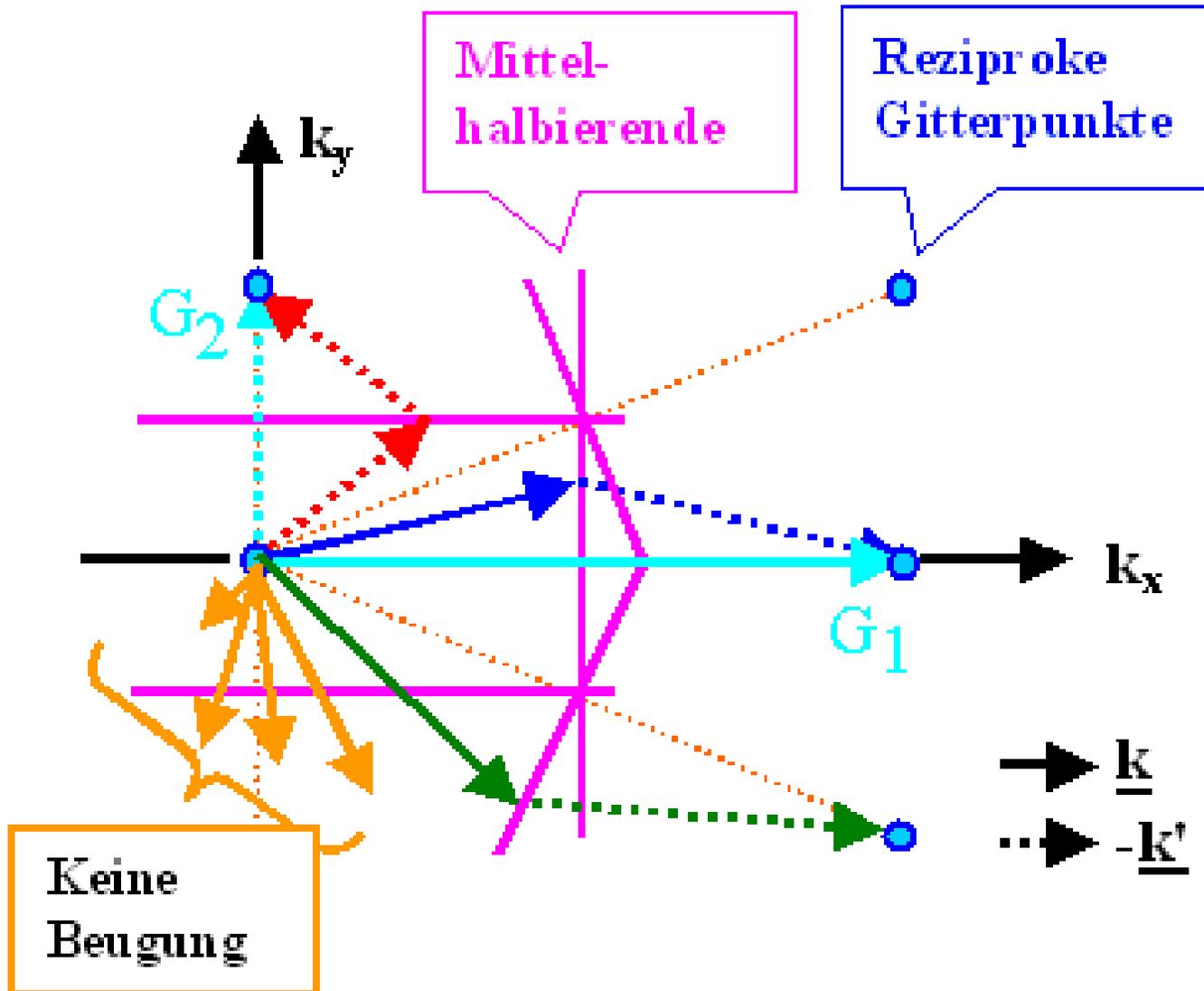


Raumgitter



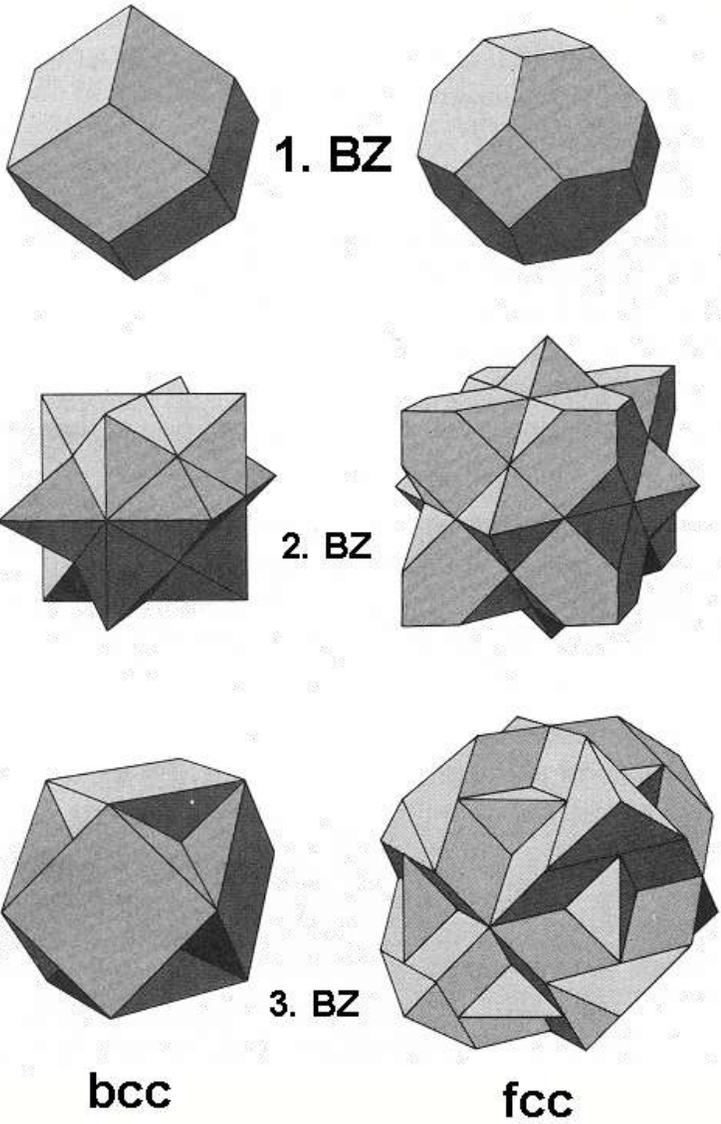
Reziprokes Gitter

## 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur

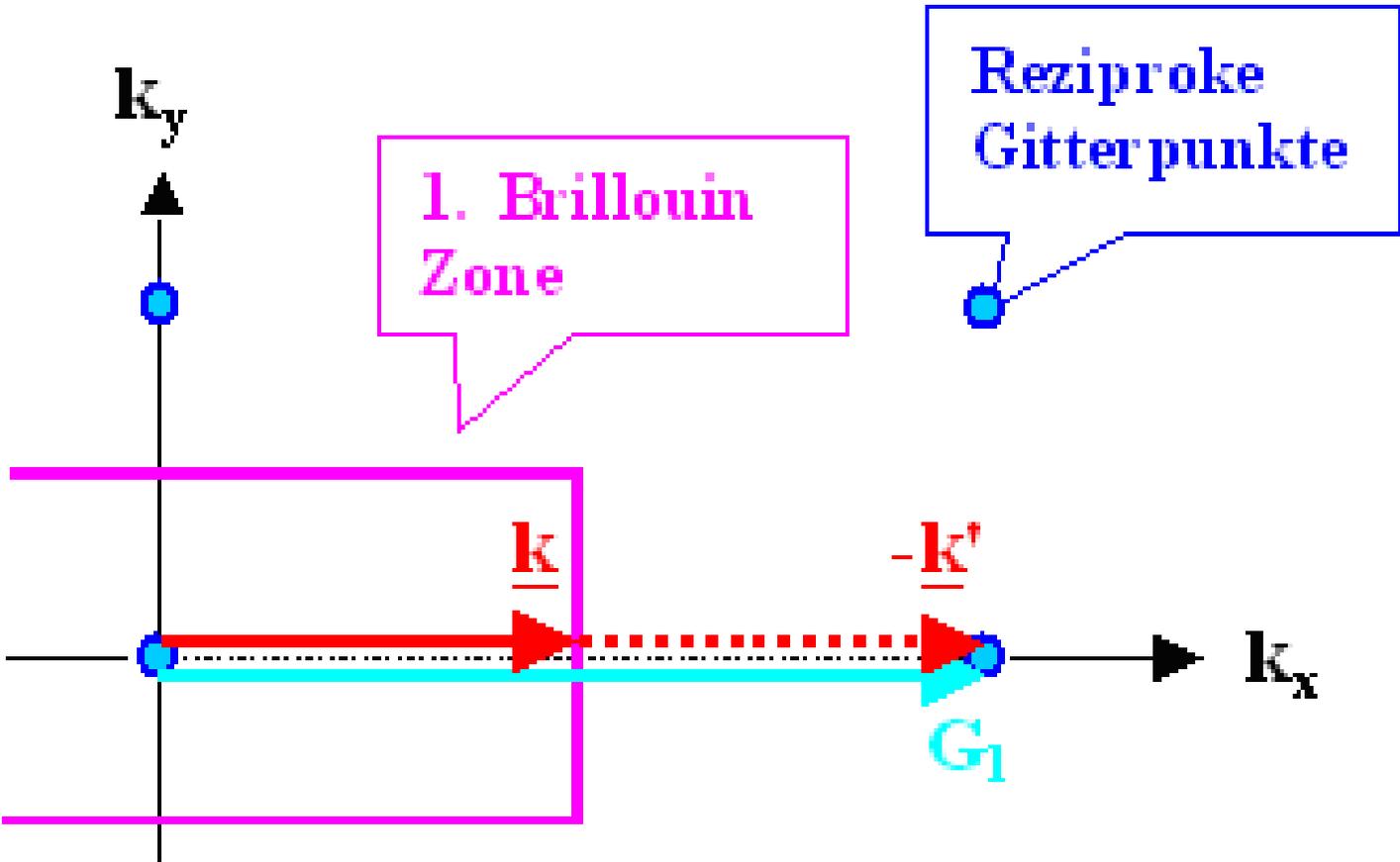


- Jeder  $\underline{k}$ -Vektor, der auf einer der rosafarbenen Mittelhalbierenden endet, einen gleich langen Wellenvektor  $\underline{k}'$  produzieren "darf", der die Bragg-Bedingung  $\underline{k} - \underline{k}' = \underline{G}$  erfüllen kann. Eingezeichnet sind der Einfachheit halber die  $-\underline{k}'$ -Vektoren.

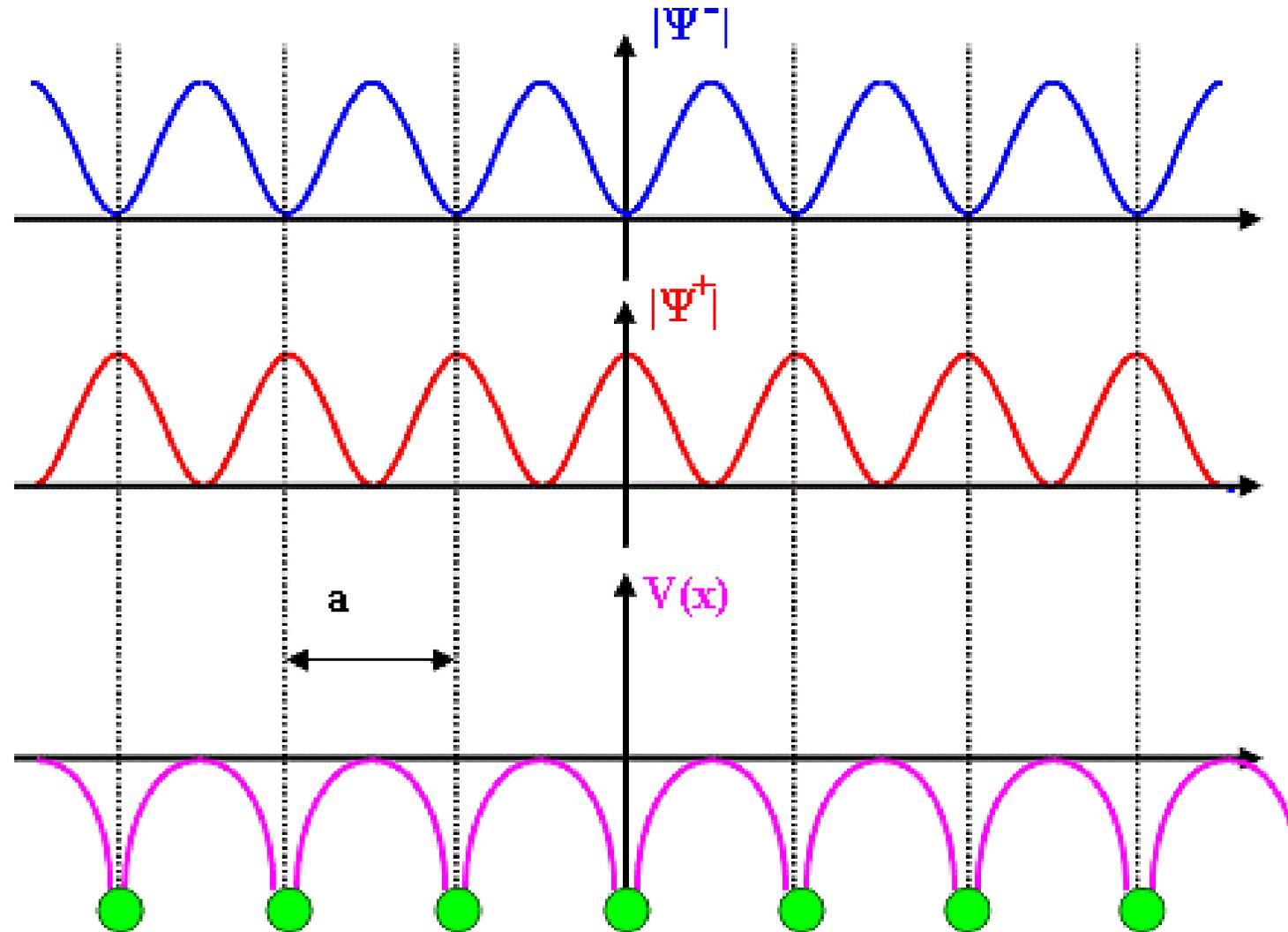
# 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur



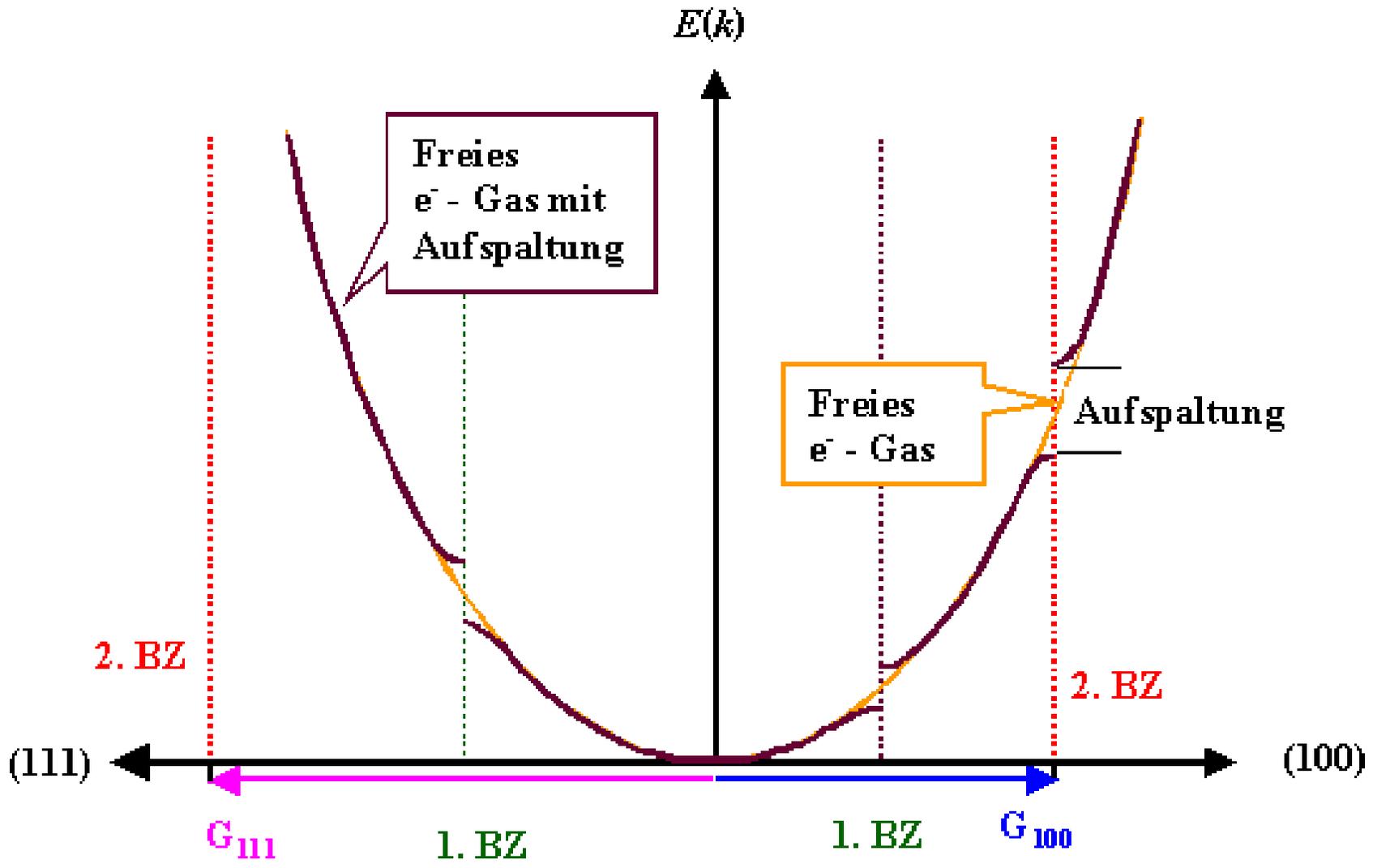
# 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur



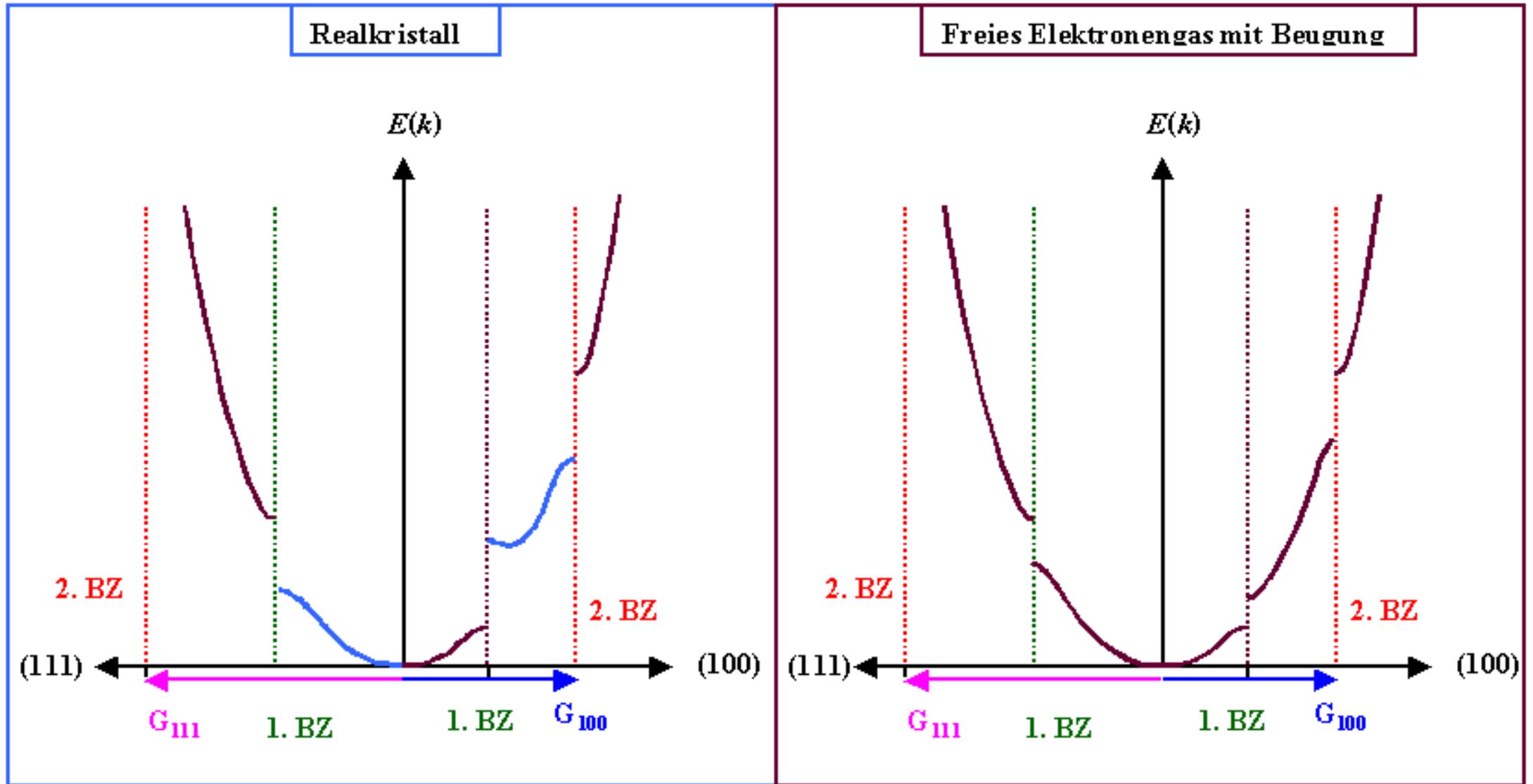
## 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur



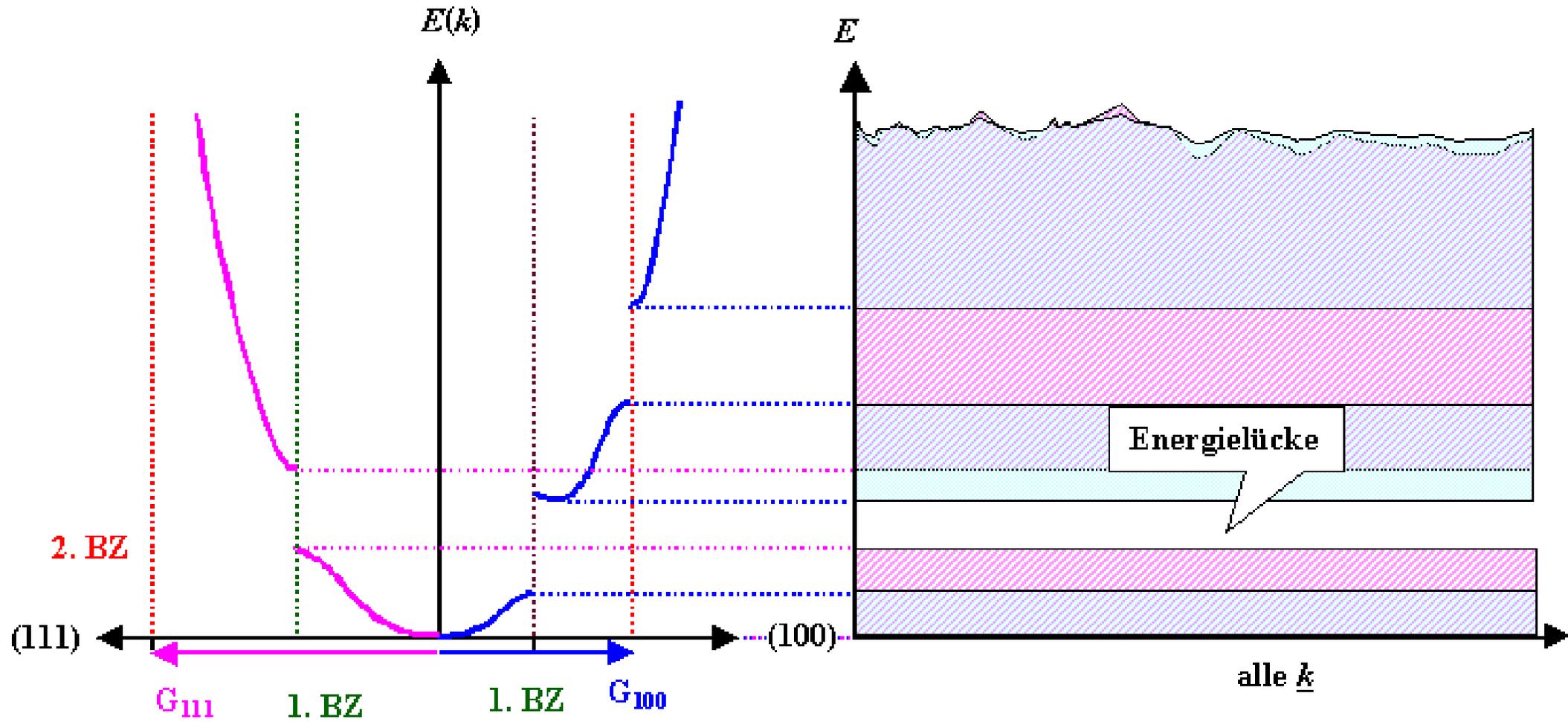
# 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur



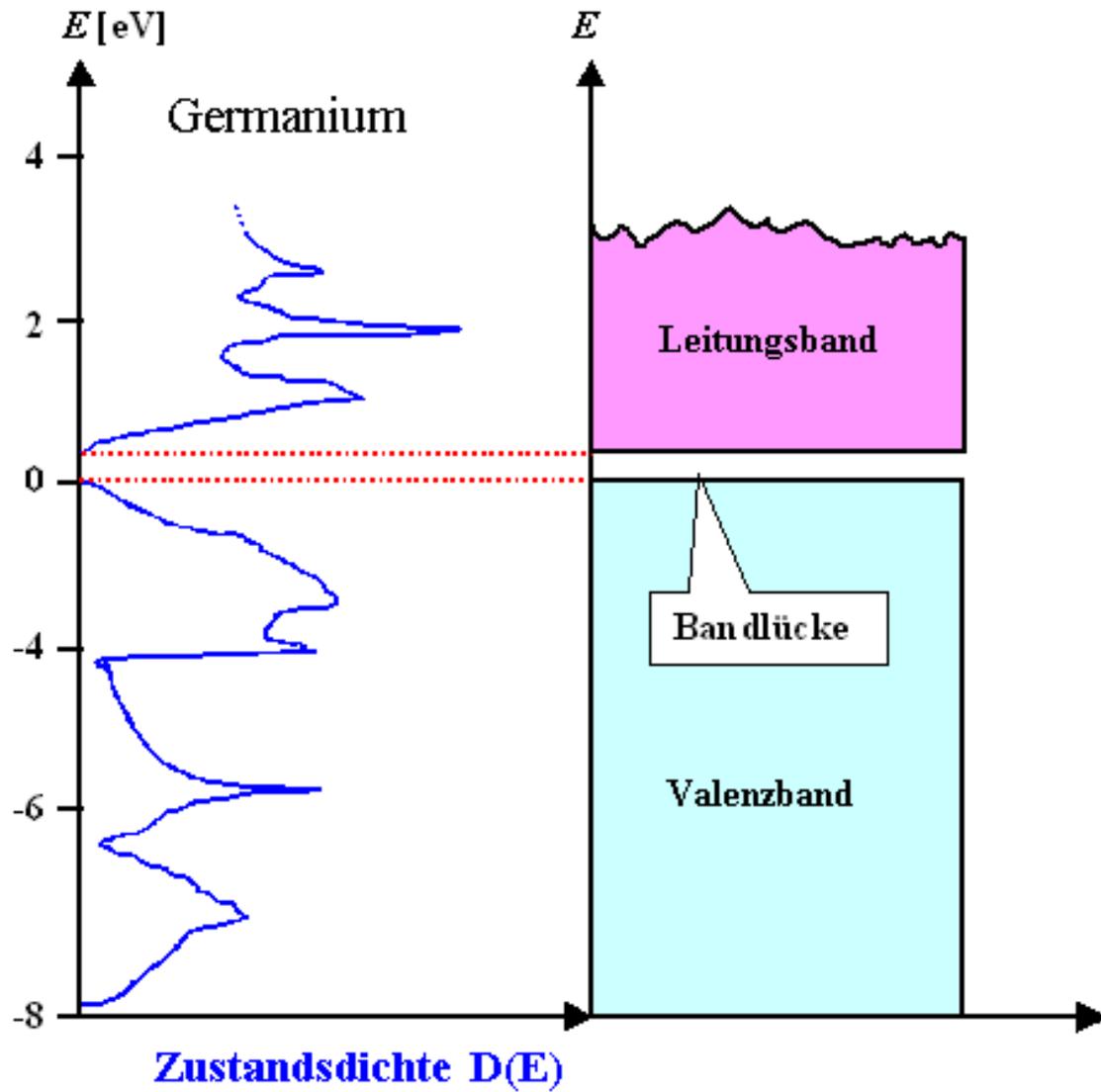
## 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur



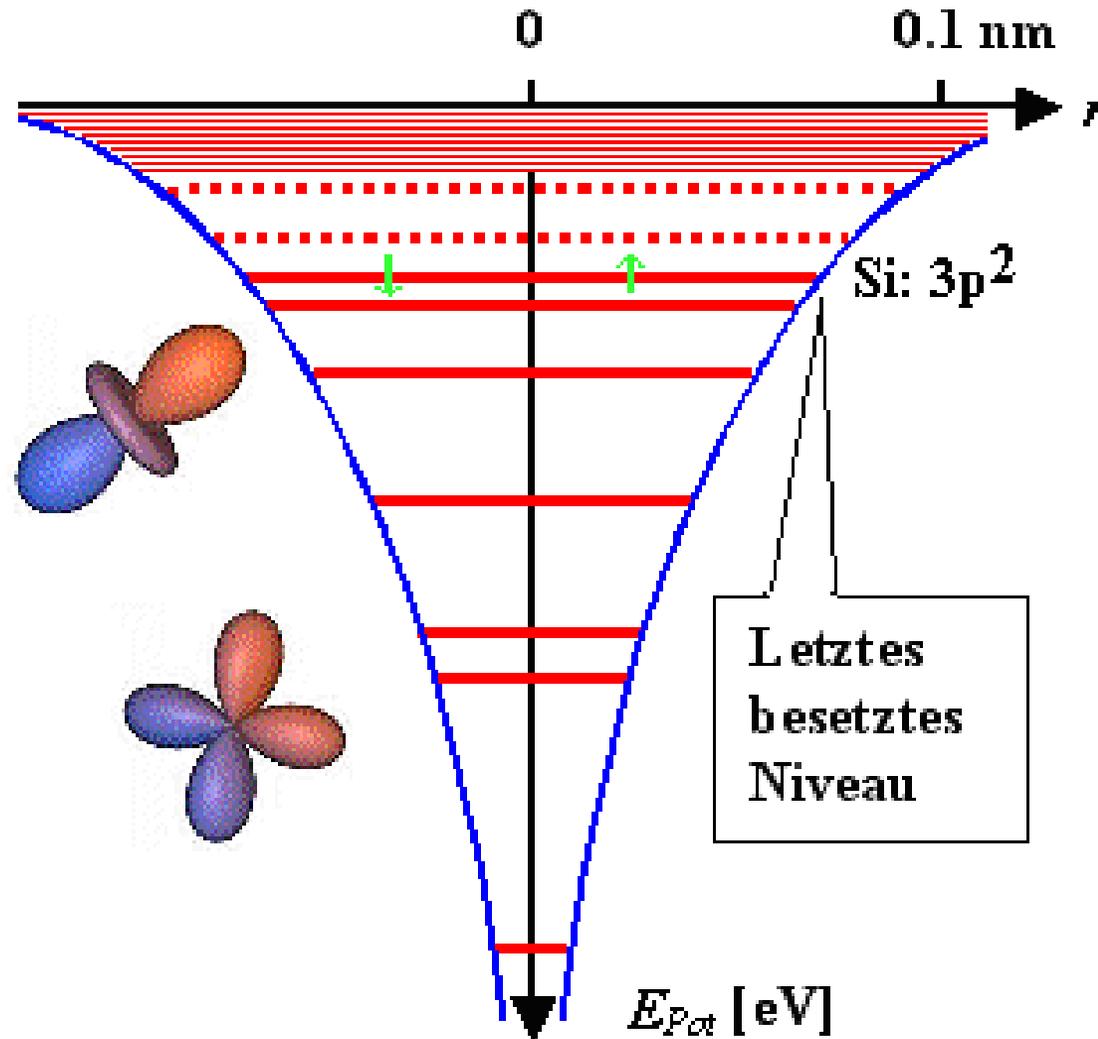
## 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur



## 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur



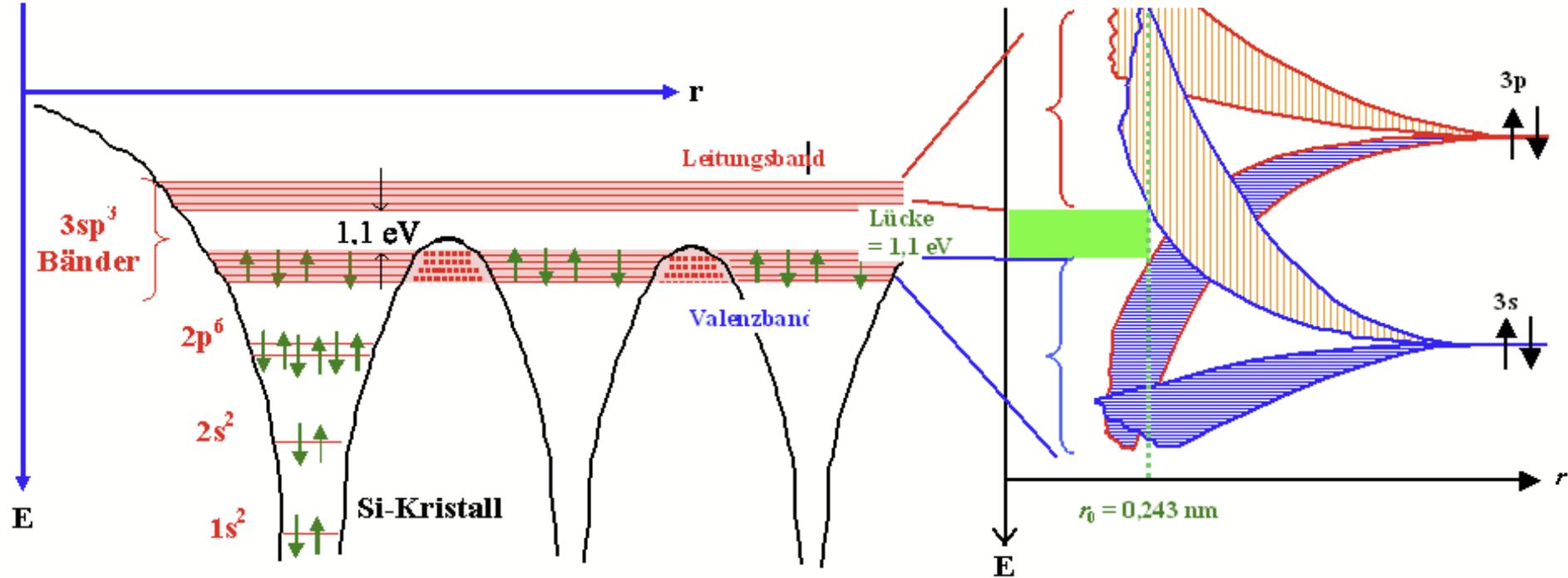
## 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur



- Gezeigt sind die Energieniveaus der *Elektronen des Atoms* in einem Potentialtopf. Die Elektronen füllen "von unten her", d. h. von den tiefsten Energien her, die verfügbaren Zustände oder **Plätze** auf.
- Ein Energieniveau wird häufig *entartet* sein, es gibt dann doppelt so viel Plätze (Spin rauf / runter) wie der jeweilige Entartungsgrad angibt.
- Die Wellenfunktionen der Zustände haben eine typische Gestalt; sie codieren hier die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons. Im Schemabild sind zwei Beispiele für Wellenfunktionen gezeigt
- Auf irgendeinem Energieniveau ist dann das letzte Elektron untergebracht – im Schemabild sind das **2** durch grüne Pfeile symbolisierte Elektronen. Bei **Si** wäre das das  **$3p^2$** -Niveau, d. h., das Energieniveau, das zu den Quantenzahlen  $n = 3, l = 1 = s$  gehört, und auf dem **2** Elektronen sitzen. Diese beiden Elektronen sind in der Abbildung links (Suchbild!) schematisch durch die grünen Pfeile mit Spin rauf / runter dargestellt.

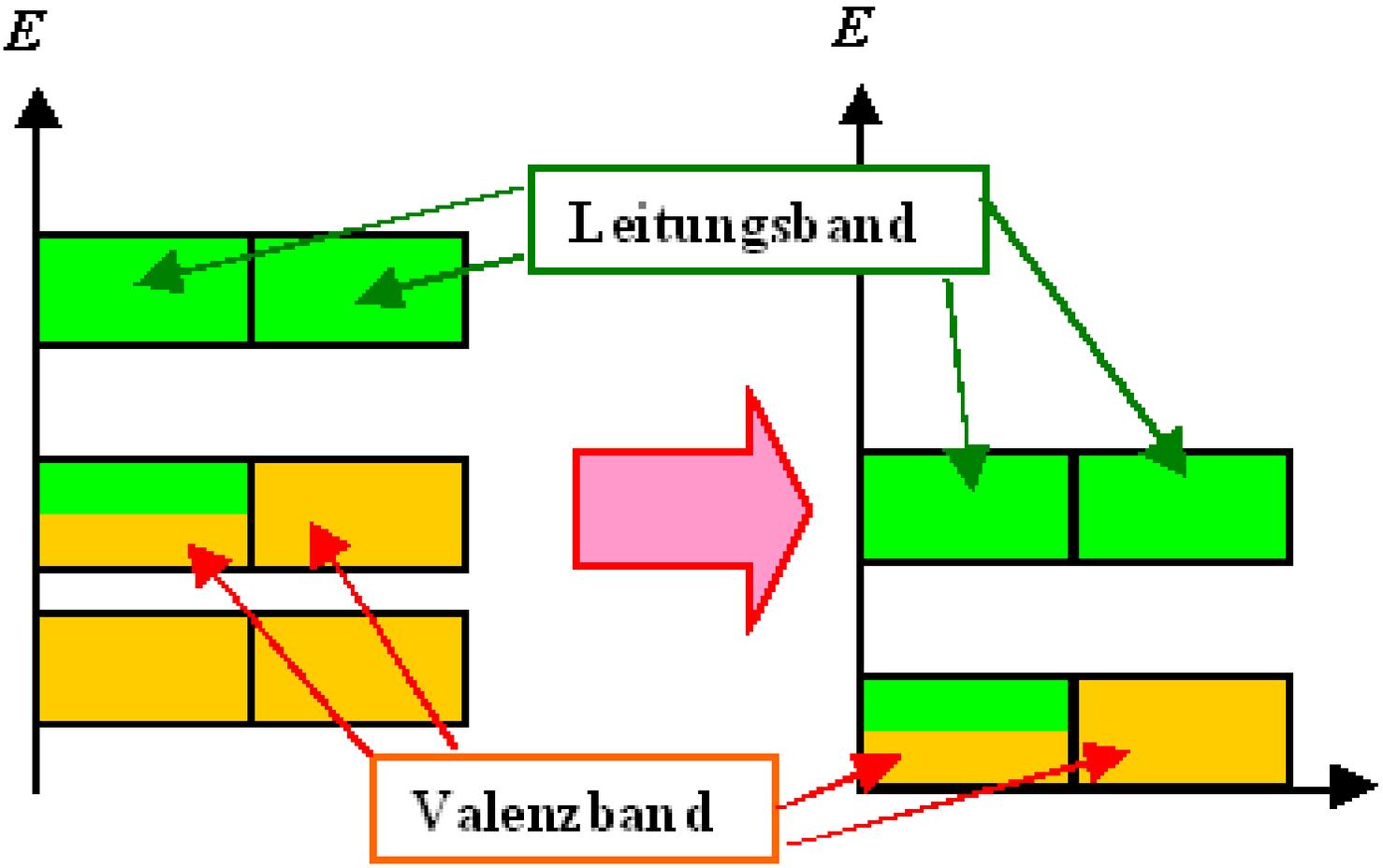
## 8.2 Elektronenwellen und Bandstruktur

- bilden einen **Silizium-Kristall**. Dazu nehmen wir viele Atompotentialtöpfe und überlagern sie im richtigen Bindungsabstand graphisch und rein qualitativ.

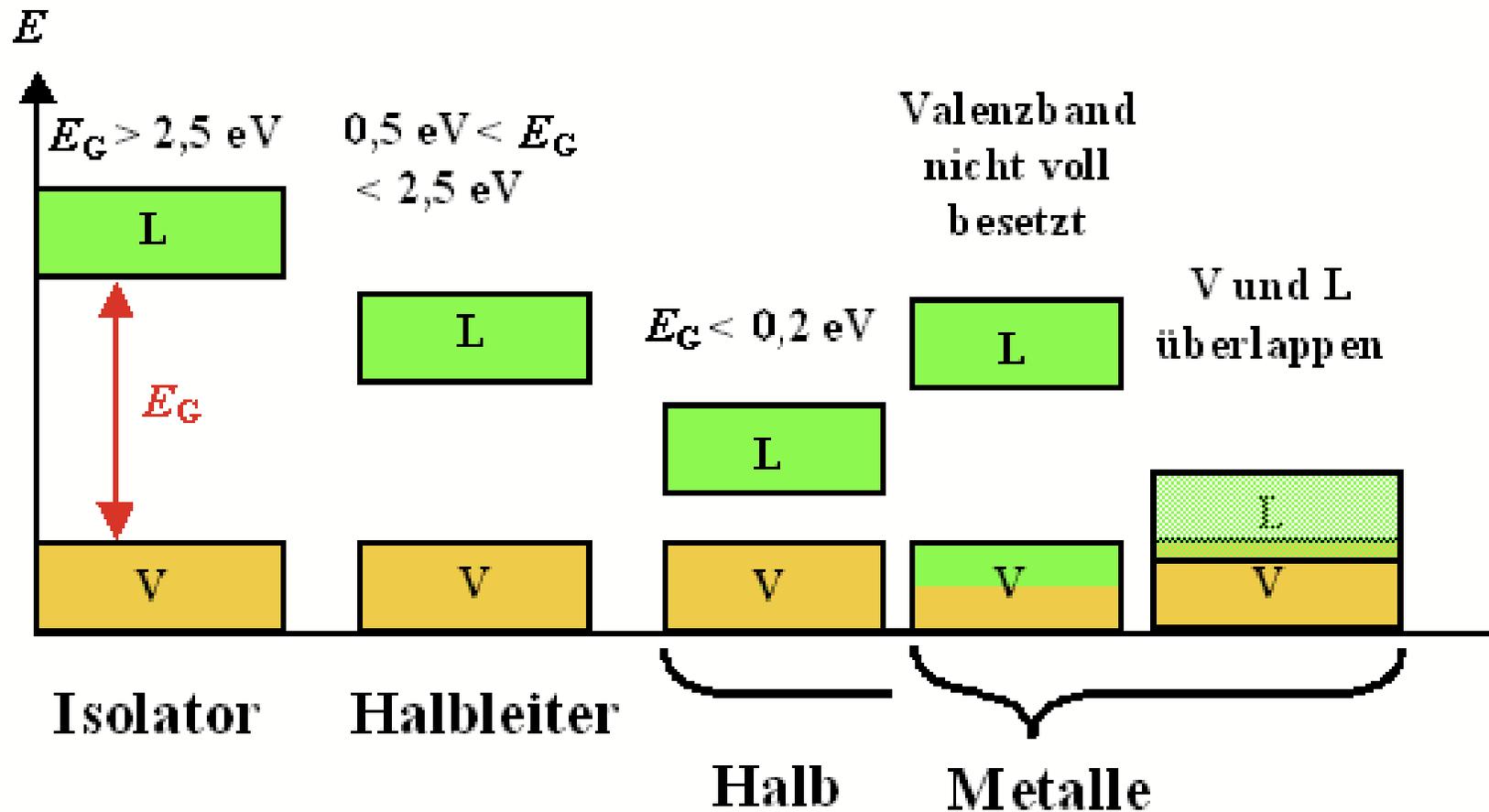


$$D(E) = \frac{1}{V_{\text{krist}}} \cdot \frac{N(E + \Delta E) - N(E)}{\Delta E} = \frac{1}{V_{\text{krist}}} \cdot \frac{dN(E)}{dE} = \frac{(2 \cdot m_e)^{3/2}}{2 \cdot \pi^2 \cdot \hbar^3} \cdot E^{1/2}$$

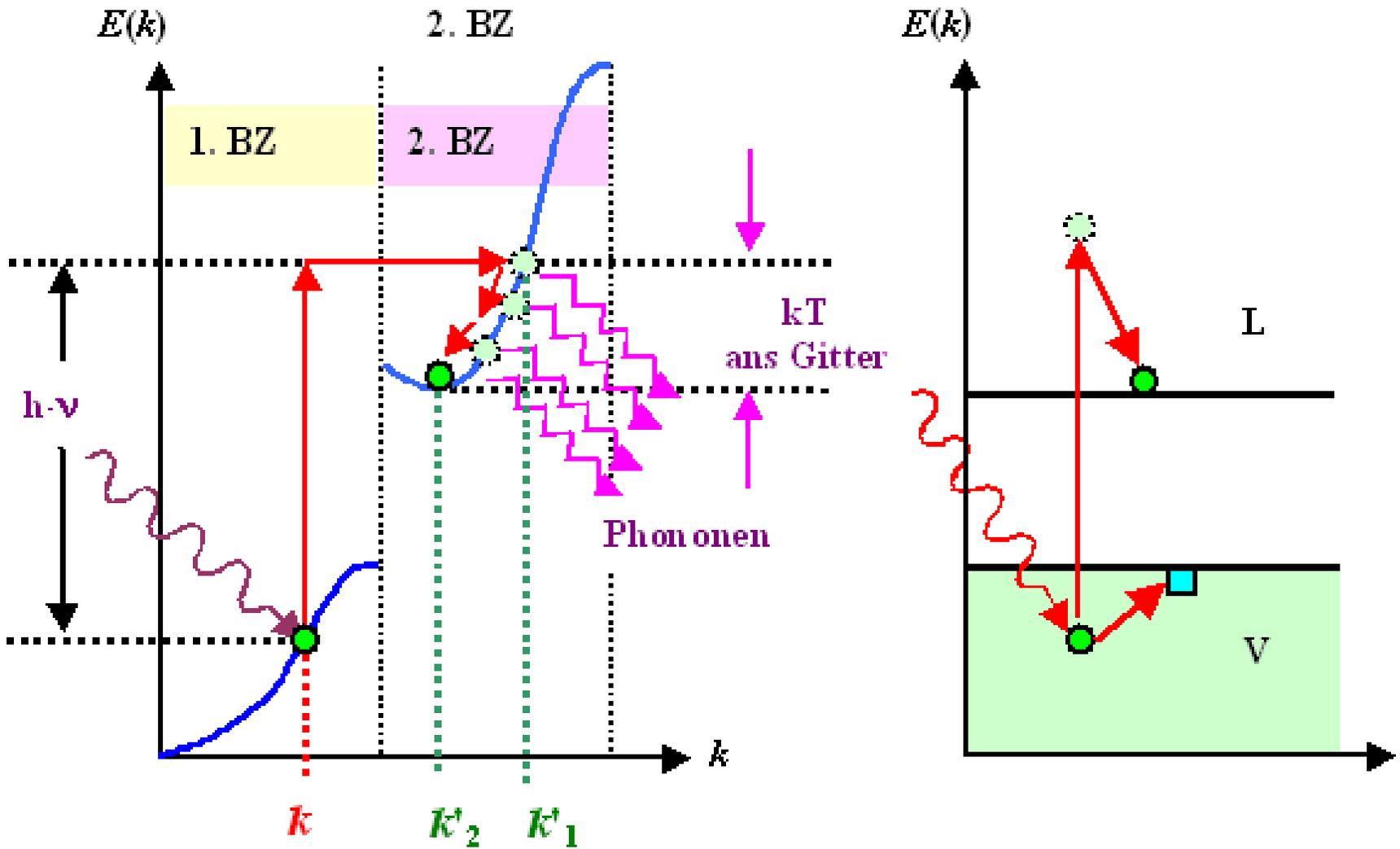
# 8.3 Bändermodell und Materialeigenschaften



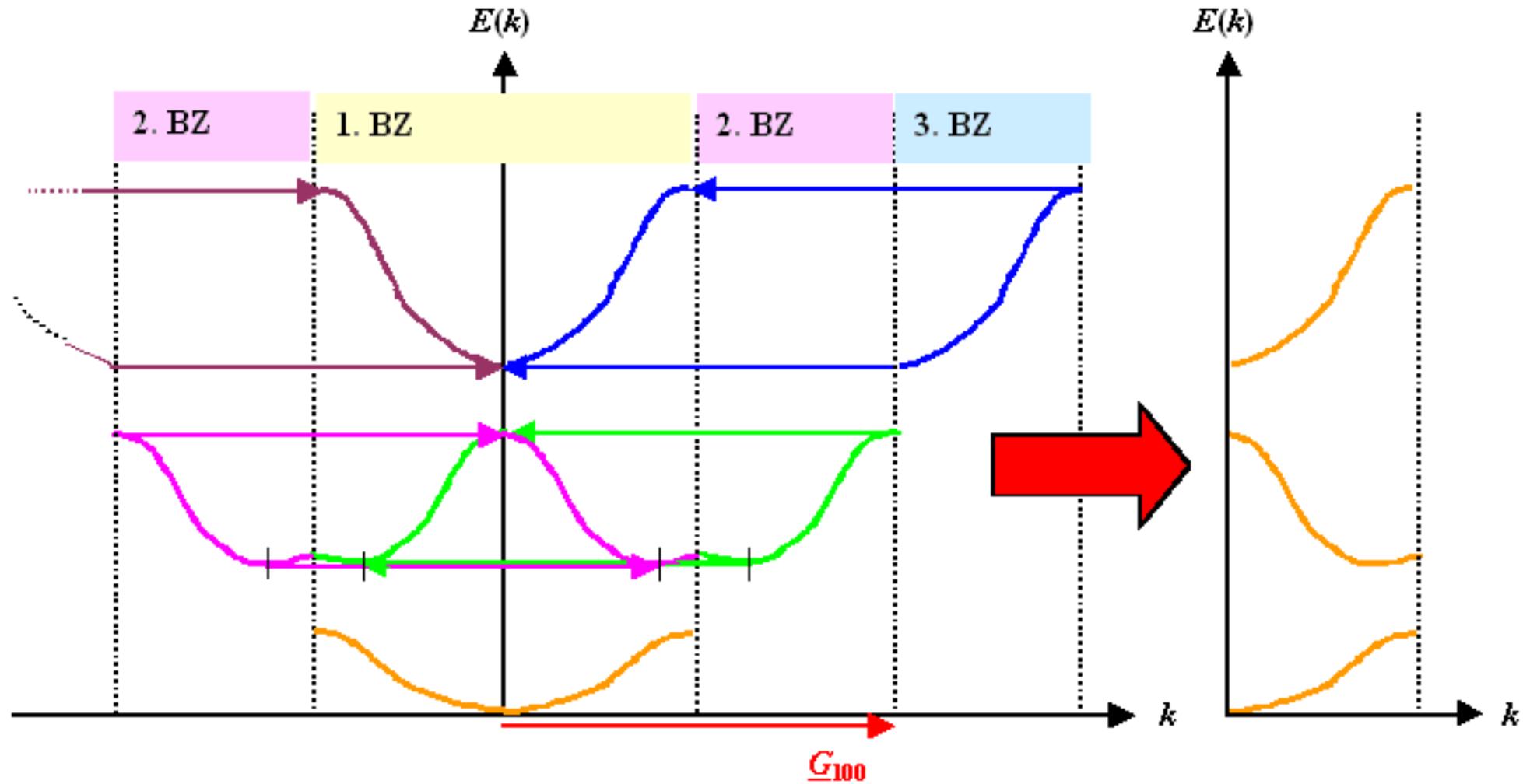
## 8.3 Bändermodell und Materialeigenschaften



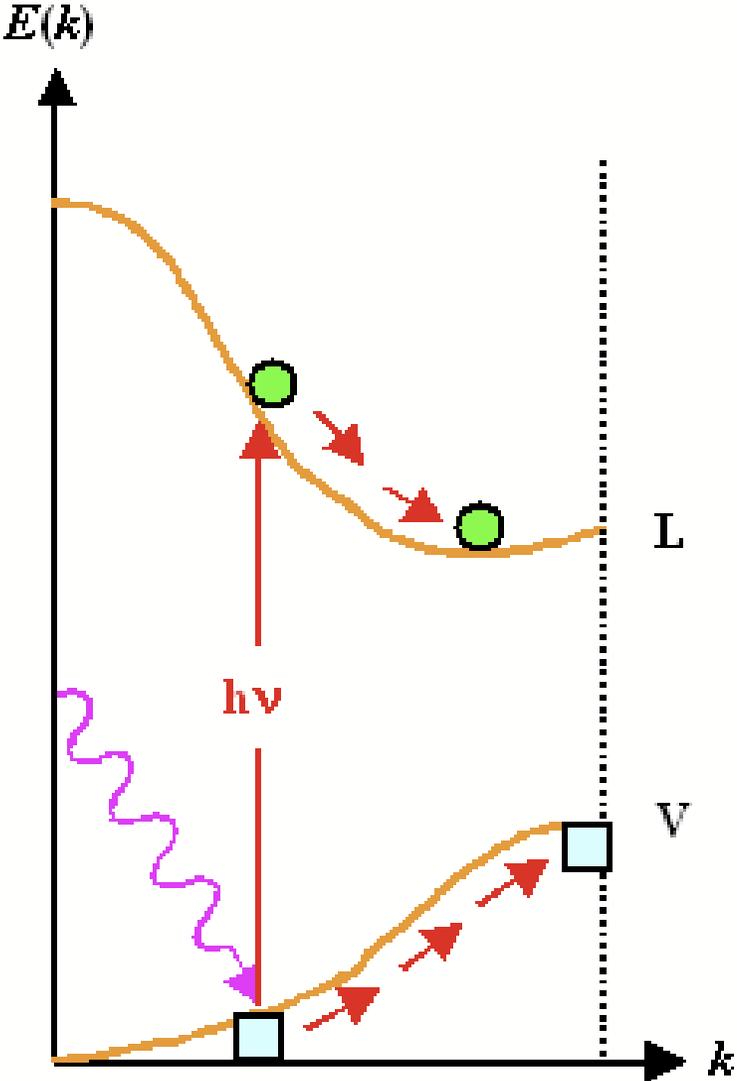
# 8.3 Bändermodell und Materialeigenschaften



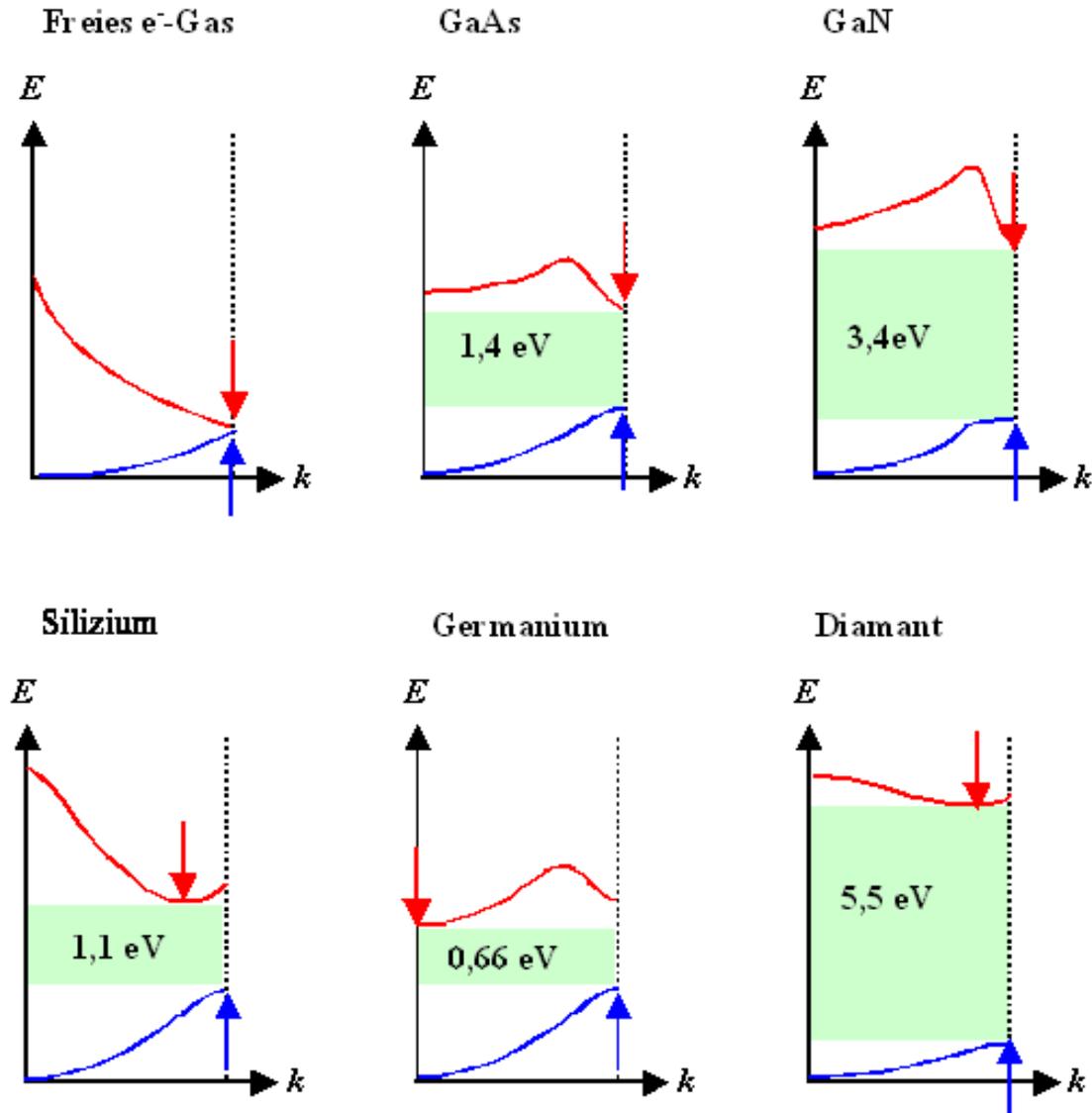
## 8.3 Bändermodell und Materialeigenschaften



# 8.3 Bändermodell und Materialeigenschaften



## 8.3 Bändermodell und Materialeigenschaften



## 8.3 Bändermodell und Materialeigenschaften

