

Grundlagen Halbleiter

Die Dichte von Silizium beträgt $\rho = 2,336 \text{ g/cm}^3$. Die Atome haben im Kristallgitter einen Abstand von $a = 0,357 \text{ nm}$ zu ihren nächsten Nachbarn.

a) Wie viele Bindungselektronen befinden sich in einem Würfel der Kantenlänge 1 cm?

Lösung

Molgewicht = Molare Masse M

$$M = \frac{\text{Masse}}{\text{Stoffmenge}} = \frac{m}{n} = \frac{m}{N} \cdot N_A$$

Für Silizium: $M_{\text{Si}} = 28,085 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{M \cdot N}{N_A \cdot V}$$

Daraus ergibt sich die Anzahl der Atome zu

$$N = \frac{\rho \cdot N_A \cdot V}{M}$$

Mit 4 Bindungselektronen pro Atom:

$$\begin{aligned} N_{\text{el}} &= 4N = 4 \frac{\rho \cdot N_A \cdot V}{M} = 4 \frac{2,336 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}}}{28,085 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \\ &= 4 \cdot 5 \cdot 10^{22} = 2 \cdot 10^{23} \end{aligned}$$

$$\rho_{\text{el}} = \frac{N_{\text{el}}}{V} = \underline{\underline{2 \cdot 10^{23} \frac{\text{e}^-}{\text{cm}^3}}}$$

b) Schätzen Sie ab, bis zu welcher Energie die Zustände der Elektronen im Grundzustand aufgefüllt sind (Fermi-Energie).

Lösung

s. Vorlesung: "Modell des fast freien Elektrons", daraus ergibt sich die Fermi-Energie zu

$$\begin{aligned}
 E_F &= \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(3\pi^2 \frac{N_{el}}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \\
 &= \frac{\hbar^2 c^2}{2m_e c^2} (3\pi^2 \rho_{el})^{\frac{2}{3}} \\
 &= \frac{(197 \text{ eVnm})^2}{2 \cdot 511 \text{ keV}} (3\pi^2 \cdot 2 \cdot 10^{23})^{\frac{2}{3}} \frac{1}{(10^{-2})^2 \text{ m}^2} \\
 &= 12,4 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

Zusatzbemerkung: Herleitung der Fermi-Energie:

Annahme: Die Elektronen befinden sich in einem Kasten der Kantenlänge L

Elektronen im Kasten der Länge L haben Impuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ bzw. Energie $E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$ mit

$k_{x,y,z} = \frac{2\pi}{\lambda_{x,y,z}}$. Die Energiewerte sind quantisiert mit $\lambda = \frac{2L}{n}$ (stehende Wellen im Kasten mit

Knoten am Rand des Kastens). Damit erhält man für jedes n einen Quantenzustand mit der Energie

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad n_{x,y,z} \in N,$$

wobei jeder Zustand mit 2 Elektronen besetzt werden kann. Für den "Grundzustand" werden alle vorhandenen Elektronen aufgefüllt, bis $N_e = n_{\max}$. Die besetzten Elektronenzustände

bilden somit eine "Kugel" im Vektorraum $(\vec{k}_x, \vec{k}_y, \vec{k}_z)$ mit dem Volumen $V_{\text{kugel}} = \frac{4}{3} k_{\max}^3 \pi$.

Ein Zustand benötigt das Volumen

$$V_{\min} = k_{\min}^3 = \left(\frac{2\pi}{\lambda_{\max}} \right)^3 = \left(\frac{2\pi}{2L} \right)^3 = \left(\frac{\pi}{L} \right)^3.$$

Das Verhältnis des besetzten Kugelvolumens zum Volumen, das ein Zustand benötigt, ergibt somit die Anzahl der gesamten Elektronen (bis auf den Faktor 2, da ein Zustand mit 2 Elektronen besetzt wird). Dabei ist nur 1/8 des Kugelvolumens zu berücksichtigen, da nur positive ganze Zahlen für n eingesetzt werden, also

$$N_e = 2 \cdot \frac{\frac{1}{8} V_{\text{kugel}}}{V_{\min}} = 2 \cdot \frac{\frac{1}{8} \left(\frac{4}{3} k_{\max}^3 \pi \right)}{\left(\frac{\pi}{L} \right)^3} = \frac{1}{3} \frac{k_{\max}^3 L^3}{\pi^2} \quad \text{und damit} \quad k_{\max} = \left(\frac{3\pi^2 N_e}{L^3} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Dies ist der Wellenvektor des Zustandes mit dem größten n . Dieser hat die Energie

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_{\max}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{3\pi^2 N_e}{L^3} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 \rho_e)^{\frac{2}{3}}$$

mit der Dichte ρ_e der Elektronen.

c) Schätzen Sie die niedrigste Energie ab, bei der eine Aufspaltung des Energiebandes auftritt (Bandlücke).

Lösung

Die Elektronen werden quantenmechanisch als Wellen im Festkörper betrachtet und durch die Wellenfunktion Ψ beschrieben. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen ergibt sich aus dem Quadrat der Amplitude der Wellenfunktion zu $|\Psi|^2$. Im veranschaulichten 1-dim Fall ist der Realteil der Wellenfunktion eine einfache Sinus-Welle, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Psi|^2$ hat also \sin^2 -Form. Wenn die Maxima von $|\Psi|^2$ mit dem Minima des Gitterpotentials (= Mitte zwischen den Atomen) zusammenfällt, erhält man einen energetisch günstigen Zustand und es ergibt sich eine Verschiebung der Energie der Zustände. Die längste Wellenlänge, bei der dies das erste Mal der Fall ist, hat die Länge $\lambda = 2a$ (s. Abbildung 1). Für den Wellenvektor k ergibt sich damit:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{2a} = \frac{\pi}{a}$$

Die Elektronen/Zustände mit diesem Wellenvektor haben den Impuls $\hbar k$ bzw. die Energie

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 c^2}{2m_e c^2} \cdot \frac{\pi^2}{a^2} \\ &= \frac{(197 \text{ eVnm})^2}{2 \cdot 511 \text{ keV}} \frac{\pi^2}{(0,543 \text{ nm})^2} \\ &= 1,27 \text{ eV} \end{aligned}$$

Hinweis: Dies ist NICHT die Energie, bei der sich die Aufspaltung (das Band) zwischen den Valenz- und Leitungselektronen ergibt, sondern die niedrigste Energie, bei der die Elektronenzustände aufspalten.

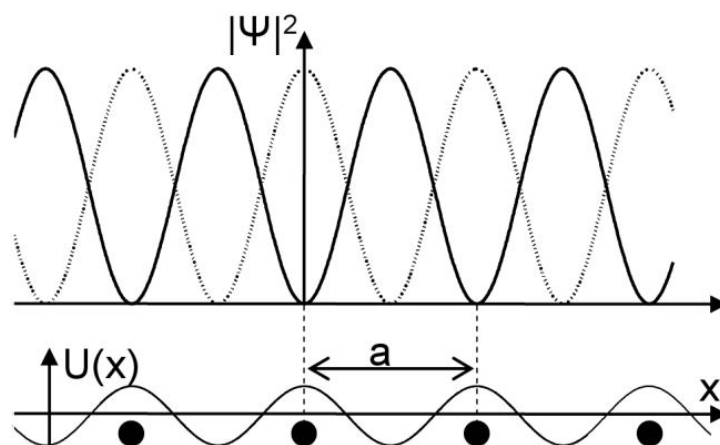


Abbildung 1: Schematische Erklärung der Bandlücke, aus [Jens Karsten Garleff, "Quasi-eindimensionale elektronische Zustände auf der Si(111)-2x1-Oberfläche"]

d) Wodurch zeichnen sich Materialien als Isolator, Halbleiter oder Metall aus?

Lösung

Sie unterscheiden sich durch die Lage der Energie des Leitungsbandes E_L und der Energie des Valenzbandes E_V in Bezug auf die Fermi-Energie E_F (maximale Energie der besetzten Zustände, bzw. genau gesagt, die Energie des höchsten besetzten Zustandes im Grundzustand).

Beim Metall überlappen sich die Bänder, oder die Fermi-Energie liegt im Leitungsband (oder auch im Valenzband, dies ist dann eben als Leitungsband zu bezeichnen). D.h. die Zustände im Leitungsband sind besetzt, es gibt genug Elektronen, die zur Leitung beitragen.

Beim Halbleiter liegt die Fermi-Energie in der Bandlücke. Das Valenzband ist vollständig besetzt, das Leitungsband komplett unbesetzt. Die Energielücke ist aber so gering, dass Elektronen u.U. schon aufgrund der Temperaturbewegung ins Leitungsband gelangen können. Man spricht von einem Isolator, wenn die Lücke so groß ist, dass "normalerweise" kein Elektron ins Leitungsband gelangen kann. Der Übergang von Halbleiter zu Isolator ist aber schwammig, d.h. auch Isolatoren können bei genügend hohen Temperaturen leitend werden bzw. durch Dotierung zu Halbleitern (z.B. auch der beste Isolator Diamant).

