

Häufig sind Halbleiter das Basismaterial aktiver elektronischer Bauelemente. Im Folgenden werden einige grundlegende Eigenschaften von Halbleitern behandelt. Für das Verständnis von Eigenschaften und Funktion von Bauelementen, die aus Halbleitermaterial aufgebaut sind, ist dieses Wissen unerlässlich. Es wird auch für den praktischen Einsatz von Halbleiter-Bauelementen benötigt, um die Konsequenzen geänderter Einsatz- oder Randbedingungen (z. B. einer Temperaturänderung) abschätzen zu können.

2.1 Halbleiter im Periodensystem der Elemente

Das Periodensystem der Elemente (ein Ausschnitt ist in Abb. 2.1 dargestellt) gliedert sich in sieben Perioden (Zeilen, = Anzahl der Schalen) und acht Hauptgruppen (Spalten, = Anzahl der Valenzelektronen). In den Gruppen sind Elemente mit gleichen chemischen Eigenschaften zusammengefasst, wobei die Atommasse in jeder Gruppe von oben nach unten zunimmt.

Man unterscheidet zwischen **Elementhalbleitern** und **Verbindungshalbleitern**.

Elementhalbleiter bestehen (bis auf Verschmutzungen) nur aus Atomen *eines* Elementes. Die Elementhalbleiter haben vier Valenzelektronen, sie kommen aus der vierten Hauptgruppe des periodischen Systems der Elemente, zu ihnen gehören *Germanium* (Ge) und *Silizium* (Si).

Silizium kommt im Quarzsand (SiO_2) als zweithäufigstes Element der Erdkruste vor. Zunächst wird aus dem Sand das Siliziumpulver gewonnen, welches durch ein spezielles Schmelzverfahren (Zonenschmelzen) und ein Ziehverfahren von Verunreinigungen befreit und in einen Kristall umgewandelt wird.

Technisch ist von Bedeutung, dass Silizium durch Verbindung mit Sauerstoff (Siliziumdioxid, SiO_2) einen hervorragenden Isolator bildet.

Zu den Elementhalbleitern gehört auch der Kohlenstoff (C), dessen Kristallisationsform „Diamant“ in reiner Form ein sehr guter Isolator ist, aber eigentlich einen Halbleiter

Abb. 2.1 Ausschnitt aus dem Periodensystem der Elemente

		Hauptgruppen				
		II	III	IV	V	VI
Periode	2	Be 4 10,81	B 5 10,82	C 6 12,01	N 7 14,00	O 8 15,99
	3	Mg 12 24,30	Al 13 26,97	Si 14 28,06	P 15 31,02	S 16 32,06
	4	Zn 30 65,39	Ga 31 69,72	Ge 32 72,6	As 33 74,91	Se 34 78,96
	5	Cd 48 112,41	In 49 114,76	Sn 50 118,7	Sb 51 121,76	Te 52 127,6
	6	Hg 80 200,59	Tl 81 204,3	Pb 82 207,2	Bi 83 208,9	Po 84 208,9

mit sehr großem Bandabstand darstellt. Man kann ihn durch gezielte „Verschmutzung“ leitend machen. In diesem Sinne ist Diamant ein Halbleiter mit einigen hervorragenden technischen Eigenschaften.

Verbindungshalbleiter umfassen chemische Verbindungen *zweier* Stoffe in einem Kristallgitter, die im Mittel vier Valenzelektronen besitzen. Verbindungshalbleiter bestehen jeweils aus Stoffen der III. und V. oder der II. und VI. Hauptgruppe des Periodensystems.

III-V-Halbleiter sind z. B. *Galliumarsenid* (GaAs), Indiumantimonid (InSb) oder Indiumphosphid (InP). Beispiele für II-VI-Halbleiter sind Zinkoxid (ZnO), Zinksulfid (ZnS), Zinkselenid (ZnSe) und Cadmiumsulfid (CdS).

Es gibt auch III-VI-Halbleiter, dies sind z. B. Galliumsulfid (GaS), Galliumtellurid (GaTe) und Indiumsulfid (InS). Weiterhin sind I-III-VI-Halbleiter beispielsweise Kupferindiumdiselenid (CuInSe_2) und Kupferindiumgalliumsulfid (CuInGaS_2).

Organische Halbleiter sind eine Gruppe neuer Halbleiter. Organische Materialien sind im Allgemeinen elektrisch isolierend. Moleküle oder Polymere können elektrisch leitend werden, wenn sie ein konjugiertes Bindungssystem besitzen, bestehend aus Doppelbindungen, Dreifachbindungen und aromatischen Ringen. Als erstes wurde dies bei Polyacetylen beobachtet. Polyacetylen ist ein lineares Polymer mit abwechselnder Doppelbindung und Einfachbindung ($\dots \text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C}-\text{C}\dots$). Wird diesem Kunststoff ein Donator wie etwa Chlor, Brom oder Iod angefügt (oxidative Dotierung), liegen zusätzliche Elektronen vor. Durch das Hinzufügen eines Atoms wie Natrium (reduktive Dotierung) erhält der Kunststoff einen Akzeptor. Durch diese chemische Änderung brechen die Doppelbindungen auf, und es entsteht ein durchgehendes Leitungsband. Das ursprünglich nicht leitende Polymer wird elektrisch leitend. Beispiele für organische Halbleiter sind *Tetracen* (Summenformel $\text{C}_{18}\text{H}_{12}$, besteht aus vier aneinander gereihten Benzolringen, die Verwendung erfolgt z. B. in elektrisch gepumpten organischen Halbleiter-Lasern) und *Pentacen* ($\text{C}_{22}\text{H}_{14}$, ein polyzyklischer aromatischer Kohlenwasserstoff mit fünf linear kondensierten Benzolringen, wird in organischen Feldeffekttransistoren verwendet).

2.2 Halbleiter zwischen Nichtleiter und Leiter

Der gerichtete Fluss elektrischer Ladungsträger wird als elektrischer Strom bezeichnet. In einem metallischen Leiter entspricht der elektrische Strom einer Bewegung von Elektronen in eine Vorzugsrichtung. Der elektrische Widerstand ist ein Maß dafür, wie stark ein leitfähiges Material den Stromdurchgang (den Stromfluss) behindert. Die Ursache dieser Behinderung sind Zusammenstöße der fließenden Elektronen mit ortsfesten, um ihre Ruhelage schwingenden Atomrümpfen (thermische Schwingungsbewegung der Atomrümpfe). Die Größe des elektrischen Widerstandes wird wesentlich von den Materialeigenschaften (der Materialart) bestimmt. Die Materialkonstante ρ wird als *spezifischer Widerstand* bezeichnet. Je nach Zahl der frei beweglichen Ladungsträger pro Stoffvolumen werden Werkstoffe der Elektrotechnik in Leiter, Halbleiter und Nichtleiter (Isolatoren) eingeteilt. Wie der Name sagt, liegen Halbleiter mit ihrer Leitfähigkeit bzw. dem zur Leitfähigkeit umgekehrt proportionalem spezifischen Widerstand zwischen den Leitern und den Nichtleitern (Abb. 2.2). Die Leitfähigkeit von Halbleitern ist größer als von Nichtleitern und geringer als von Leitern. Sehr bekannte Halbleiter sind Silizium und Germanium.

In keiner Stoffeigenschaft unterscheiden sich Materialien so stark wie in der elektrischen Leitfähigkeit. Zwischen der Leitfähigkeit eines guten metallischen Leiters und eines guten Isolators liegen 25 Zehnerpotenzen!

Metalle haben eine hohe Leitfähigkeit, die jedoch kaum steuerbar ist. Silizium ist heute der wichtigste Halbleiter, es weist im reinen (nicht gezielt verunreinigten) Kristallzustand bei tieferen Temperaturen eine Leitfähigkeit entsprechend eines guten Isolators auf und ist damit eigentlich nicht zur Realisierung elektronischer Bauelemente geeignet. Der Vorteil von Silizium ist, dass es technische Möglichkeiten gibt, seine Leitfähigkeit gezielt zu verändern.

Die Leitfähigkeit aus Silizium aufgebaute Strukturen ist

- stark temperaturabhängig, sie nimmt mit steigender Temperatur zu;
- kann in weiten Grenzen durch das Einbringen von Fremdatomen (**Dotieren**) aus einer anderen chemischen Hauptgruppe beeinflusst werden;

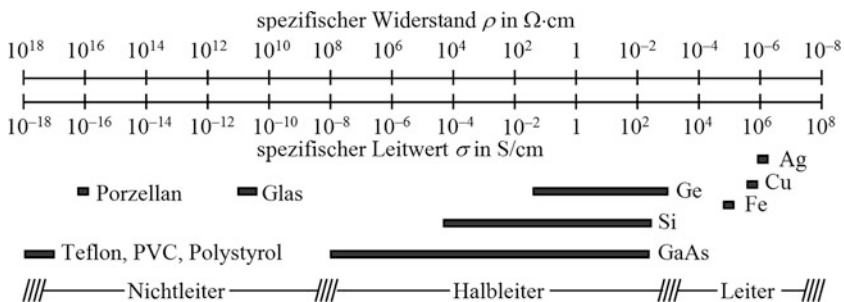


Abb. 2.2 Spezifischer Widerstand und spezifische Leitfähigkeit von Nichtleitern, Halbleitern und Leitern bei Zimmertemperatur

- ist auch während des Betriebs wunschgemäß einstellbar (z. B. durch eine Steuerspannung oder einen Steuerstrom).

2.3 Aufbau der Atome

Die elektrische Leitfähigkeit von Stoffen lässt sich mit ihren atomaren Strukturen erklären. Materie ist aus *Atomen* bzw. *Molekülen* aufgebaut. Moleküle bestehen aus einem Verbund von Atomen. Die Bausteine der Atome werden als *Elementarteilchen* bezeichnet, da sie lange Zeit als kleinste Teilchen ohne unterteilbaren Aufbau angesehen wurden. Elementarteilchen sind *Elektronen*, *Protonen* und *Neutronen*. Da ein Elektron ein Elementarteilchen ist, wird seine Ladung *Elementarladung* genannt. Ein Elektron trägt die negative Ladung $e = -1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ (Coulomb = As). Die Elementarladung ist die kleinste vorkommende Ladungsmenge. Einem Proton wird als Elementarteilchen die positive Elementarladung $e = +1,602\,177\,33 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ zugeordnet. Ein Neutron trägt keine elektrische Ladung. Der Atomkern besteht aus so genannten Nukleonen, den Protonen und den Neutronen, er ist somit immer positiv geladen. Um den Atomkern kreisen die Elektronen. Nach außen hin sind Atome (falls sie nicht ionisiert sind) elektrisch neutral. Sie bestehen aus genau so vielen positiven Protonen wie negativen Elektronen, die Ladungen neutralisieren sich. Die Anzahl der Neutronen kann unterschiedlich sein.

2.3.1 Bohr'sches Atommodell

Der Aufbau von Atomen kann mit unterschiedlichen Denkmodellen beschrieben werden. Wegen seiner Einfachheit wird häufig das *Bohr'sche Atommodell* verwendet. Dieses ist zwar veraltet, für viele Zwecke ist es aber ausreichend genau. Entsprechend diesem Atommodell besteht jedes Atom aus einem *Atomkern* und einer *Atomhülle*. Wie bereits erwähnt, besteht der Atomkern aus den Nukleonen (Protonen und Neutronen). In der Atomhülle befinden sich negativ geladene Elektronen, die sich auf definierten Kreisbahnen um den Atomkern herum bewegen. Elektronen mit gleichem Abstand vom Kern werden zu einer *Elektronenschale* zusammengefasst. Bei einem Atom sind maximal sieben Schalen mit unterschiedlichen Durchmessern möglich. Die Anzahl der Elektronen pro Schale ist begrenzt. Die Energie von Elektronen auf kernnahen Schalen ist niedriger als auf kernfernen Schalen.

Ein abgeschlossenes physikalisches System ist bestrebt, einen stabilen Zustand im Gleichgewicht und somit einen möglichst energiearmen Zustand anzunehmen. Dies gilt auch für Atome. Da Atome immer den energieärmsten Zustand minimaler freier Energie (genauer gesagt: minimaler freier Enthalpie) einnehmen wollen, werden die inneren Schalen zuerst mit Elektronen besetzt. Die Elektronen sind umso fester an das Atom gebunden, je näher sie am Kern sind.

Die äußerste Schale eines Atoms ist normalerweise nicht mit der maximal möglichen Anzahl von Elektronen aufgefüllt. Die Elektronen der äußersten Schale werden *Valenz-*

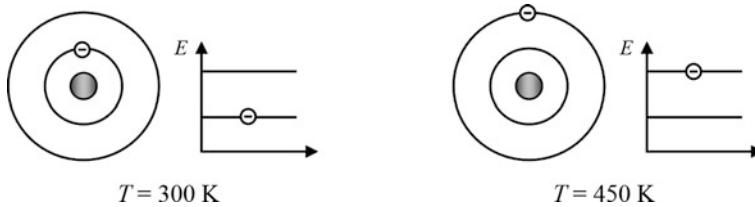


Abb. 2.3 Atom mit unterschiedlichen Energiezuständen

elektronen genannt. Diese Schale bestimmt das chemische und elektrische Verhalten eines Atoms. Maximal besetzte (*gesättigte*) Schalen zeigen die geringste chemische Aktivität. Die Bindung der Valenzelektronen an das Atom hängt ebenfalls von der Besetzung der Valenzschale ab. Je kleiner die Besetzung ist, desto schwächer ist die Bindung an das Atom.

Ein Elektron auf einer zulässigen Bahn hat also stets einen bestimmten Wert an potenzieller Energie gegenüber dem Kern. Dieser Energiewert kann sich durch Aufnahme oder Abgabe von Energie ändern, dann ergibt sich auch eine andere Bahn mit einem anderen Abstand vom Kern. Elektronen können also zwischen den erlaubten Energieniveaus hin- und herspringen. Bei hoher Energiezufuhr kann ein Elektron den Atomverband sogar verlassen, das Atom ist dann ionisiert. Für jedes Elektron im Verbund eines Atoms sind aber nur bestimmte diskrete Energiewerte zulässig.

Kernnahe Schalen bedeuten niedrige, kernferne Schalen hohe Energie der Elektronen.

Abbildung 2.3 zeigt in einer stark vereinfachten Darstellung ein Atom mit dem Atomkern in der Mitte und mit einem Elektron. Bei niedriger Temperatur (z. B. $T = 300 \text{ K}$) ist das Atom in einem energetisch niedrigen Zustand. In dem dargestellten Atommodell befindet sich das Elektron auf der inneren Schale. Durch Erhöhen der Temperatur auf z. B. $T = 450 \text{ K}$ gelangt das Elektron auf eine weiter außen liegende Schale. Dies entspricht einem angeregten Energiezustand. Trägt man die möglichen Energiewerte E , die das Atom annehmen kann, in einem einfachen Diagramm auf, so ergeben sich mehrere diskrete Zustände (Energienlinien), deren Anzahl und Abstände für das Atom charakteristisch sind.

Eine Elektronenschale kann maximal folgende Anzahl von Elektronen aufnehmen:

$$N_{\max} = 2 \cdot n^2 \quad (2.1)$$

Die so genannte Hauptquantenzahl n wird vom Atomkern ausgehend nach außen gezählt und durchläuft die Werte $n = 1, 2, 3, \dots$

Anstelle der Kennzeichnung der Elektronenschalen durch die Hauptquantenzahlen wird häufig eine Benennung mit den Buchstaben K, L, M, N, O, P, Q verwendet.

Die jeweils äußerste Schale eines neutralen Atoms kann maximal acht Elektronen enthalten. Atome mit maximal aufgefüllten äußersten Elektronenschalen (Valenzelektronenschalen) sind stabil und chemisch inaktiv, sie gehen keine chemischen Verbindungen

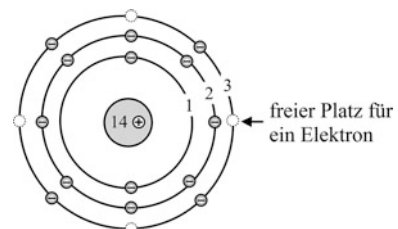
ein. Dieser Zustand liegt z. B. bei Edelgasen vor (Ausnahmen sind z. B. die Elemente H, He, Li), der mit acht Elektronen auf der äußersten Schale dementsprechend als *Edelgas-konfiguration* bezeichnet wird. Alle Atome besitzen das Bestreben, Edelgaskonfiguration zu erreichen, d. h. acht Elektronen auf der äußersten Schale zu haben.

Die Valenzelektronen bestimmen das chemische Verhalten eines Stoffes. Sie stellen die Verbindung zu benachbarten Atomen her. Von den verschiedenen Elektronenschalen tritt stets nur die äußerste direkt mit der Umwelt in Wechselwirkung, z. B. durch die Fähigkeit, mit anderen Atomen eine chemische Bindung einzugehen. Ein Beispiel für ein Atommodell mit mehreren Schalen zeigt Abb. 2.4. Dargestellt ist ein elektrisch neutrales Siliziumatom mit 14 Protonen im Kern und 14 Elektronen auf den Schalen. Alle Atome der Hauptgruppe IV im Periodensystem (siehe Abb. 2.1) besitzen wie Silizium vier Valenzelektronen. In Abb. 2.4 sind auf der äußersten Schale vier „freie“ Elektronenplätze angedeutet. Ein solches Atom erreicht einen energetisch günstigeren Zustand, wenn es sich mit anderen Atomen so verbindet, dass die Atome die Elektronen auf den äußersten Schalen gemeinsam nutzen. Jedes Atom besitzt dann mit acht Elektronen auf der äußersten Schale einen stabilen Zustand.

Bei Leitern ist die äußerste Elektronenschale meist mit ein bis drei Valenzelektronen besetzt. Der Aufbau von Metallen kann amorph oder kristallin sein. Technisch wichtige Metalle besitzen ein Kristallgitter mit sehr dicht aneinander gedrängten Atomen. Bei Metallen können sich bei Zimmertemperatur durch Zufuhr von Wärme Valenzelektronen von Atomen lösen, die Metallatome werden ionisiert. Es entsteht ein Raumgitter aus ortsfesten positiven Metallionen, in dem sich frei bewegliche Elektronen befinden („freie“ Elektronen oder „Leitungselektronen“), die zu einem Ladungsfluss (also einem elektrischen Strom) beitragen können. Da jedes Metallatom mindestens ein Elektron als freies Elektron abgibt, enthalten metallische Leiter viele frei bewegliche Ladungsträger, sie leiten daher elektrischen Strom sehr gut. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von einem „Elektronengas“. Dies ist zwar ein sehr einfaches Modell für Elektronen in einem Festkörper, mit ihm kann aber die Leitfähigkeit von Metallen anschaulich erklärt werden.

Die Menge der freien Ladungsträger pro Volumeneinheit wird durch die *Ladungsträgerdichte* angegeben. In Metallen ist die Dichte freier Elektronen ungefähr gleich der Anzahl vorhandener Atome und beträgt ca. $n \approx 10^{23} \text{ cm}^{-3}$.

Abb. 2.4 Zweidimensionales Atommodell für Silizium



2.3.2 Elektronenpaarbindung, Kristallgitter

Ist die äußerste Elektronenschale eines Atoms nicht maximal besetzt (liegt keine Edelgas-konfiguration vor), so zeigt das Atom chemische Aktivität. Solche Einzelatome streben danach, sich zu energetisch günstigen Einheiten zu verbinden. Es existieren primäre und sekundäre Bindungstypen. Primäre Bindungstypen sind die *Ionenbindung*, die *Elektronenpaarbindung* und die *metallische Bindung*, sie basieren auf Ladungsaustausch, es sind starke Bindungen. Sekundäre Bindungstypen sind die *Van-der-Waals-Bindung* und die *Wasserstoffbrückenbindung*, sie beruhen auf einer Dipolwechselwirkung, es sind schwache Bindungen.

In der Halbleitertechnik spielt die Elektronenpaarbindung (*Atombindung*, *kovalente Bindung*, *homöopolare Bindung*) eine sehr wichtige Rolle.

Bei der Elektronenpaarbindung „teilen“ Atome ihre Valenzelektronen mit Nachbaratomen. Je ein Elektron des einen Atoms vereinigt sich mit einem Elektron des anderen Atoms in einer Weise, dass beide Elektronen statistisch betrachtet zu beiden Elektronenhüllen gehören. Zwischen zwei Atomen befinden sich dann Elektronenpaare, welche beiden Atomen gleichzeitig zuzuordnen sind. Anders gesagt: Die äußersten, nicht gesättigten Elektronenschalen zweier Atome verschmelzen zu einer gemeinsamen, gesättigten Elektronenwolke mit Edelgaskonfiguration. Eine Bindung zwischen den Atomen lässt sich somit durch die Ausbildung eines gemeinsamen Elektronenpaares erreichen, wobei beide Atome je ein Elektron für die Bindung zur Verfügung stellen. Die Valenzelektronen „paaren“ sich mit je einem Elektron eines Nachbaratoms und umkreisen als Paar den eigenen Kern *und* den Kern des Nachbaratoms (Beispiel siehe Abb. 2.5).

Die Elektronenpaarbindung tritt auf, wenn sich durch die geometrische Anordnung einiger Atome die Edelgaskonfiguration für alle beteiligten Atome ergibt. Nichtmetallen fehlen Elektronen in der äußersten Schale. Elemente der IV. Hauptgruppe des Periodensystems bilden nicht nur untereinander, sondern auch in Verbindung mit anderen Atomsorten ausschließlich kovalente Bindungen. Eine wesentliche Eigenschaft der kovalenten

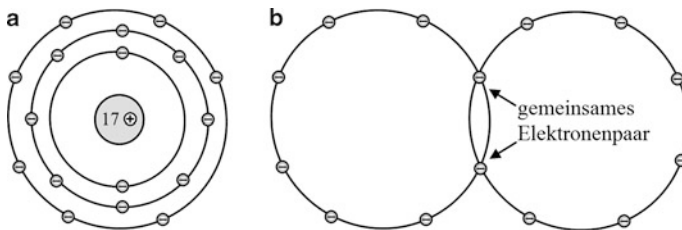


Abb. 2.5 Die Elektronenpaarbindung am Beispiel von Chlor. Das Element Chlor kommt immer als zweiatomiges Molekül vor. Die beiden Chloratome sind durch ein gemeinsames Elektronenpaar miteinander verbunden. So erfolgt die Vervollständigung des Elektronenoktetts auf der äußersten Schale. Einzelnes Chloratom (a), zweiatomiges Molekül (b), bei dem nur die äußersten Schalen gezeichnet sind

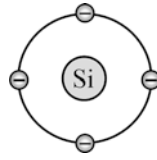


Abb. 2.6 Si-Atom, dessen Darstellung auf das Wesentliche beschränkt ist

Bindung ist ihre ausgeprägte Richtungsabhängigkeit, die beim Aufbau von Kristallstrukturen entscheidend ist (z. B. tetraedrische Diamantstruktur).

Die Elektronenpaarbindung ist bei reinen Halbleitern (ohne Fremdatome) sehr fest. Das Aufbrechen einer solchen Bindung, um ein freies Elektron zu erhalten, ist nur schwer möglich. Reines Silizium (mit Elektronenpaarbindungen, wie nachfolgend gezeigt wird) ist daher bei tiefen Temperaturen ein sehr schlechter Leiter.

Silizium und Germanium sind 4-wertige Elemente, bei ihnen sind die äußersten Elektronenschalen mit vier Valenzelektronen besetzt. Ein Si- oder Ge-Atom kann einfacher als in Abb. 2.4 dargestellt werden, wenn nur die äußerste Elektronenschale mit ihren vier Elektronen gezeichnet und der Rest des Atoms in der Mitte nur angedeutet wird. Abb. 2.6 zeigt eine solche Darstellung, die sich auf den grundsätzlichen Aufbau des Atoms beschränkt. Die Atome im Verbund des Kristallgitters sind auf diese Weise übersichtlicher darstellbar.

In einem Siliziumkristall teilt sich ein Siliziumatom jeweils ein Elektronenpaar mit vier Nachbaratomen (Abb. 2.7). Durch diese vier kovalenten Bindungen sind die äußersten Schalen aller Atome im Kristallverbund auf acht Elektronen „aufgefüllt“ und besitzen

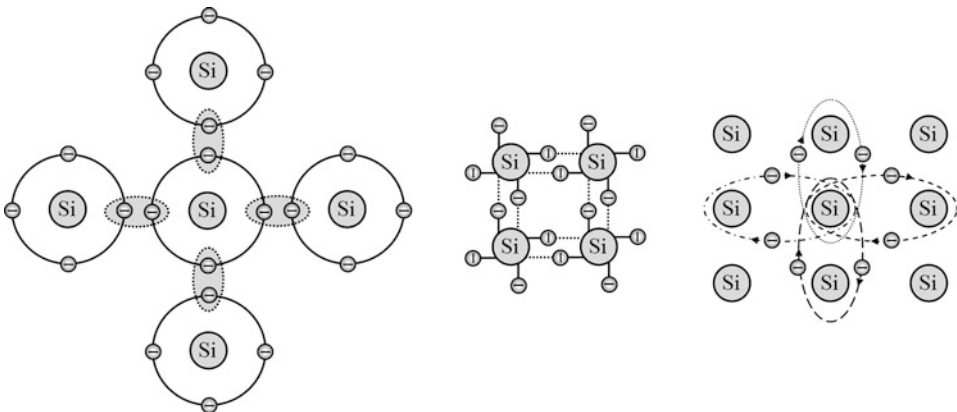


Abb. 2.7 Drei unterschiedliche (gleichbedeutende) Arten einer zweidimensionalen, schematischen Darstellung der Bindung der Atome in einem Ausschnitt eines Si-Halbleiterkristalls bei der Temperatur $T = 0\text{ K}$. Jedes Atom hat vier Elektronenpaarbindungen. Jeder Kern wird von vier Elektronenpaaren umkreist. Jedes Elektronenpaar umkreist zwei Kerne

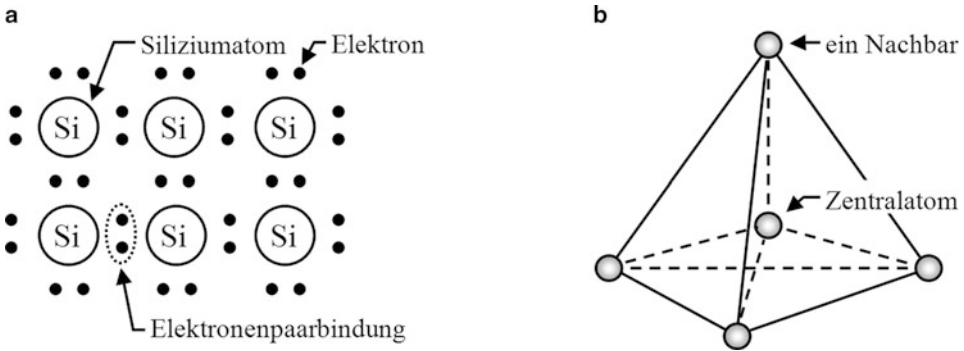


Abb. 2.8 Kristallgitter von Silizium vereinfacht in einer Ebene dargestellt (a), als Tetraeder mit Zentralatom und vier gebundenen Nachbaratomen (b)

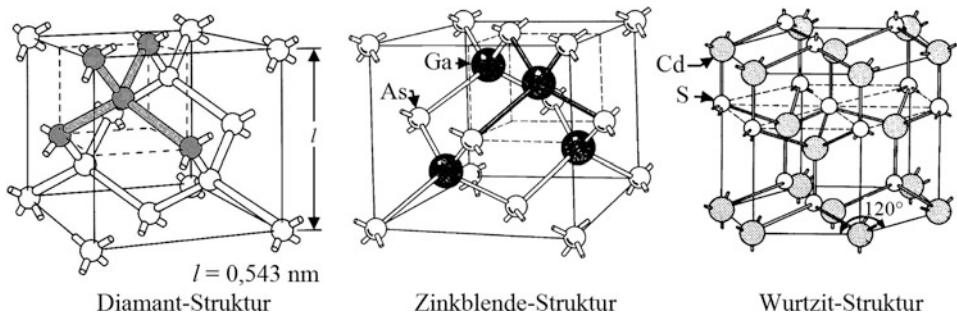


Abb. 2.9 Räumliche Darstellung verschiedener Kristallstrukturen

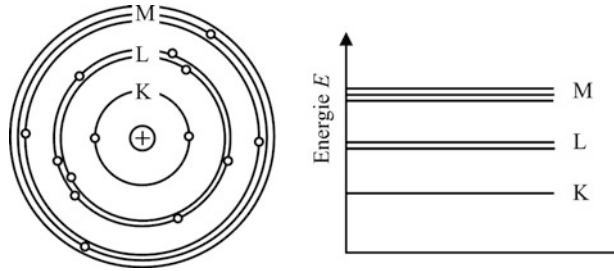
somit Edelgaskonfiguration. Die vier Silizium-Nachbaratome, die sich mit einem Siliziumatom binden, bilden einen Tetraeder mit einem Zentralatom in der Mitte und vier gebundenen Atomen in den Ecken des Tetraeders (Abb. 2.8).

Die Kristallstruktur von regelmäßig aufgebauten Festkörpern kann unterschiedlich sein. Die Elementhalbleiter Si, Ge und C haben ein Kristallgitter von Atomen eines Elementes, welches als Diamant-Struktur (Abb. 2.9 links) bezeichnet wird. Das Kristallgitter von z. B. GaAs, GaP und InP (Verbindungshalbleiter) weist die Zinkblende-Struktur (Abb. 2.9 Mitte) auf, ZnSe und CdSe dagegen besitzen die Wurtzit-Struktur (Abb. 2.9 rechts). In der Regel bilden auch Metalle und viele Mineralien und Salze die Struktur von Kristallgittern. Neben solchen „kristallinen“ Stoffen gibt es auch amorphe Materialien (z. B. viele Kunststoffe, Glas), die einen unregelmäßigen Aufbau besitzen.

2.3.3 Schalenmodell und Wechselwirkung

Für das Einzelatom (Abb. 2.10) gibt es nach der Quantentheorie von Planck nur ganz bestimmte „Schalen“ (K, L, M, ...), in denen sich die Elektronen aufhalten können, diese

Abb. 2.10 Schalenmodell und diskrete (einzelne) Energieniveaus der Elektronen bei einem Einzelatom (Silizium)



sind wiederum in Unterschalen unterteilt. Jeder dieser Schalen ist ein Energieniveau zugeordnet. Das Energieniveau ist umso höher, je größer der Abstand des Elektrons vom Atomkern ist.

Nähern sich zwei gleiche Atome soweit einander an, dass sie elektrisch miteinander wechselwirken (Molekülbildung), so kommt es zu einer Überlappung der Energiezustände der Elektronen. Wegen eines „Ausschlussprinzips“ der Quantentheorie, des so genannten Pauli-Prinzips, ist es nicht erlaubt, dass zwei Elektronen genau denselben Energiezustand einnehmen. Daher müssen sich die überlappenden Energiezustände leicht energetisch verschieben. Die ursprünglich gleichen Energieniveaus spalten sich auf, es entstehen jeweils zwei gegenseitig etwas versetzte Energieniveaus, die von den Elektronen besetzt werden können. Die Anzahl der erlaubten Energieniveaus verdoppelt sich.

Zwei einzelne Atome können also miteinander in Wechselwirkung gebracht werden, indem man den Abstand zwischen ihnen verringert. Ist der Abstand zwischen beiden Atomen hinreichend groß, so stehen diese nicht miteinander in Wechselwirkung. Die möglichen Energiewerte, die die beiden Atome annehmen können, liegen auf der gleichen Höhe wie bei einem einzelnen Atom. Bringt man die beiden Atome näher zusammen, so überlappen sich die Elektronenbahnen und beide Atome treten miteinander in Wechselwirkung (Abb. 2.11). Dies bewirkt – ähnlich wie bei gekoppelten Resonatoren – eine

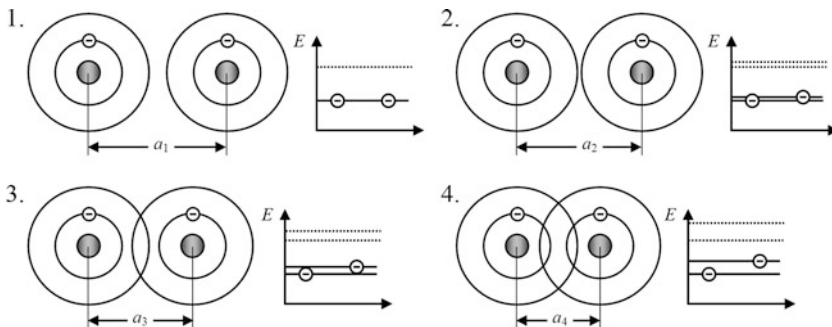


Abb. 2.11 Wechselwirkung zwischen zwei Atomen und Auswirkung auf deren Energiewerte

Aufspaltung der möglichen Energieniveaus, die umso stärker ist, je größer die Kopplung, d. h. je geringer der Abstand zwischen den beiden Atomen ist.

2.3.4 Bändermodell und Fermi-Statistik

Bei n Atomen müssen sich die Energiezustände jeweils n -fach aufspalten. In einem Festkörper befindet sich aufgrund der Kristallstruktur eine sehr große Anzahl von Atomen (etwa 10^{23} Atome/cm³) in Wechselwirkung. Entsprechende diskrete Energiezustände der Elektronen von Einzelatomen spalten sich in einem Festkörper in sehr viele energetisch eng benachbarte Energiezustände (Unterniveaus) auf. Im Kristall ist jedes Energieniveau des Einzelatoms in so viele Niveaus aufgespalten, wie Atome im Kristall vorhanden sind. Diese aufgefächerten, sehr dicht beieinander liegenden Energielinien werden zu *quasi-kontinuierlichen Energiebereichen* mit erlaubten Energiezuständen der Elektronen, den **Energiebändern** des Bändermodells zusammengefasst (Abb. 2.12).

Die Breite jedes Bandes ist durch den Atomabstand im Kristallgitter definiert und scharf begrenzt. Die tiefer gelegenen Niveaus, die den inneren Elektronenschalen des Einzelatoms entsprechen, stören sich gegenseitig nur wenig, so dass hier die Aufspaltung gering ist. Die Elektronen in den äußeren Schalen, die als Valenzelektronen für das chemische Verhalten des Atoms verantwortlich sind, treten stärker in Wechselwirkung, es erfolgt somit eine Aufspaltung der Energieniveaus in breitere Bänder.

Wie im Einzelatom verbotene Energiebereiche existieren, so gibt es auch zwischen den einzelnen Energiebändern energetisch verbotene Bereiche (Energilücken), in denen sich keine Energieniveaus befinden, die von einem Elektron angenommen werden können. Diese Bereiche werden als **verbotene Zone (Bandlücke, bandgap)** bezeichnet.

Das höchste Energieband, das mit Elektronen besetzt ist, nennt man das **Valenzband**. Das Valenzband umfasst die Energiezustände der fest im Kristallgitter verankerten Elektronen, welche an der chemischen Bindung beteiligt sind. Sie können sich im elektrischen Feld nicht bewegen. Bei den meisten Stoffen ist das Valenzband ganz mit Elektronen gefüllt, da Stoffe bei chemischen Bindungen die Edelgaskonfiguration anstreben (eine voll besetzte äußere Schale des Schalenmodells).

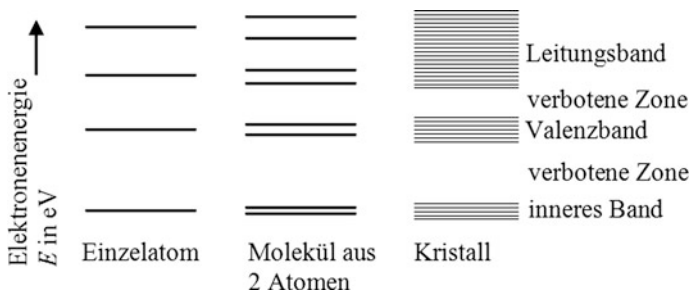


Abb. 2.12 Energiezustände von Elektronen bei Einzelatom, Molekül und Festkörperkristall

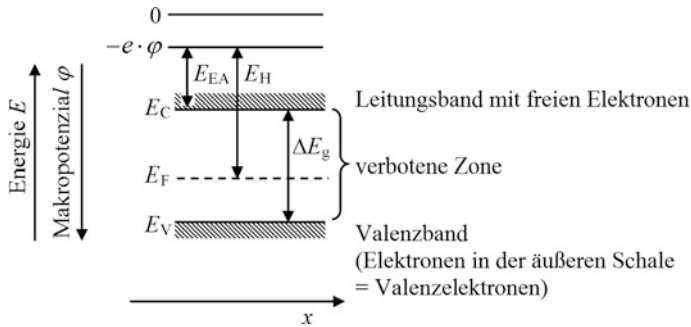


Abb. 2.13 Bänderdiagramm (Banddiagramm)

Das unbesetzte oder teilweise besetzte Band oberhalb des Valenzbandes, in dem die Elektronen sich frei bewegen können, heißt **Leitungsband** oder Leitband. Elektronen, die diesen Energiezustand aufweisen, können sich im Kristall frei¹ bewegen. Im Leitungsband sind die Energiezustände der frei beweglichen Leitungselektronen zusammengefasst, die Träger des elektrischen Stromes sind. Für das elektrische Verhalten (für den Leitungsvorgang) sind nur das Valenzband, das Leitungsband und der Abstand dazwischen von Bedeutung.

Das Leitungsband ist vom Valenzband im Allgemeinen durch eine verbotene Energiezone mit dem Energieabstand ΔE_g getrennt. Die Größe des Energieabstandes ΔE_g ist abhängig von der Art des Werkstoffes. Einem Elektron muss mindestens die Energie ΔE_g zugeführt werden (dies erfolgt oft durch Erwärmung des Werkstoffes), damit es vom obersten Rand E_V des Valenzbandes zum untersten Rand E_C des Leitungsbandes gehoben werden kann.

Das **Banddiagramm** (Abb. 2.13) ist eine Darstellung der Energie über dem Ort x , wobei nur die Bandkanten berücksichtigt werden. Die Energie der Elektronen ist

$$E(x) = -e \cdot \varphi(x) \quad (2.2)$$

Für die Energie und das Potenzial ergeben sich entgegengesetzte Orientierungen.

Dem freien Elektron entsprechen dabei die Energie bzw. das Potenzial null. Die Energie $-e \cdot \varphi$ mit Vakuum-Level (auch *Makropotenzial* genannt) des elektrischen Potentials φ wird, sofern dieses konstant ist, zur Vereinfachung meist null gesetzt. Es wird vorausgesetzt, dass keine Dipolladungen auftreten, somit ist das Makropotenzial stetig.

¹ Diese Elektronen werden häufig als „quasifrei“ bezeichnet, weil sie zwar wie freie Elektronen im Innern des Kristalls wandern können, andererseits aber nicht quantitativ dieselben Eigenschaften wie freie (d. h. kräftefreie) Elektronen haben. Da sie sich im Potenzialfeld der Gitterbausteine bewegen, werden durch die hohen atomaren elektrischen Felder erhebliche Kräfte auf sie ausgeübt.

E_C und E_V sind die **Bandkanten** des **Leitungs-** bzw. **Valenzbandes**. Ändern sich die Materialeigenschaften innerhalb eines Kristalls nicht, so verlaufen die Bandkanten parallel zueinander und parallel zum Makropotenzial.

E_F ist das sogenannte **Fermi-Niveau**. Das Fermi-Niveau ist als Energie definiert, bei der die Besetzungswahrscheinlichkeit eines Zustandes 50 % beträgt. Im thermodynamischen Gleichgewicht muss es stets waagrecht verlaufen, da es andernfalls sofort zu weiteren Ausgleichsvorgängen kommen würde.

Die **Elektronenaffinität** E_{EA} ist die Energiedifferenz zwischen dem Makropotenzial φ (Vakuumniveau, Vakuumenergie) und der Unterkante des Leitungsbandes E_C . Die Elektronenaffinität ist eine für jeden Halbleiter charakteristische Materialkonstante, es ist diejenige Arbeit, die ein Elektron verrichten muss, um vom Leitungsband ins Vakuum zu gelangen (Austrittsarbeit eines Elektrons von der Leitungsbandkante E_C zur Halbleiter-Oberfläche).

Durch Zufuhr von Wärmeenergie zum Kristallgitter nehmen Elektronen potenzielle Energie auf, können so vom Valenzband in das Leitungsband wechseln und dann zur Eigenleitung des Materials beitragen. Ein solches „quasi-freies“ Elektron gehört dann dem Festkörperverband insgesamt an und ist nicht mehr an ein bestimmtes Atom gebunden. Um das Elektron aus dem Kristallverbund ganz herauszulösen, ist nochmals eine hohe Energiemenge, die so genannte Austrittsarbeit, aufzuwenden.

In Metallen ist die **Austrittsarbeit** E_H die Energiedifferenz zwischen dem Makropotenzial φ und dem Fermi-Niveau E_F , es ist die Energie, die einem Elektron zugeführt werden muss, um dieses aus dem Leitungsband des Kristallverbunds heraus zu befördern und ins Vakuum zu bringen. Das Befördern eines Elektrons aus dem Metall heraus ins Vakuum ist so zu verstehen, dass das Elektron zu einem vom Metall unendlich weit entfernten Punkt gebracht wird, so dass keine Wechselwirkung mehr zwischen dem Elektron und dem Metall besteht. In der Regel wird die Austrittsarbeit in Elektronenvolt angegeben, es ist eine für das jeweilige Metall charakteristische Materialkonstante. Beispiele: Barium 2,52 eV, Aluminium 4,20 eV, Platin 5,66 eV.

Anmerkung Das Elektronenvolt ist eine sehr kleine Energieeinheit im atomaren Bereich, die in der Atomphysik und in der Halbleiterelektronik verwendet wird, da die vorkommenden Energien viel kleiner sind als 1 Joule. Ein Elektronenvolt (eV) ist die kinetische Energie, welche ein Elektron aufnimmt, wenn es die Potentialdifferenz $U = 1V$ durchläuft.

$$1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 1 \text{ V} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J} \quad (2.3)$$

In einem Halbleiter halten sich allerdings keine Ladungsträger auf dem Fermi-Niveau auf. Außerdem ist die Lage des Fermi-Niveaus und damit die Differenz zur Vakuumenergie von der Dotierung des Halbleiters abhängig und keine Materialkonstante.

Die Stärke des elektrischen Feldes ergibt sich aus dem Potenzialverlauf zu:

$$E(x) = -\frac{d\varphi}{dx} \quad (2.4)$$

Zur Veranschaulichung der Wirkung dieses Feldes auf Elektronen und Löcher² kann man sich bildlich vorstellen, dass Elektronen wie eine „schwere Masse“ an einer geneigten Leitungsbandkante „herunterrollen“ (entspricht einer Abnahme ihrer Energie), während Löcher wie „Luftblasen“ an einer geneigten Valenzbandkante „aufsteigen“.

Wie Gasmoleküle in der Lufthülle der Erde, so sind auch Elektronen über der Energie verteilt. Die energetische Verteilung von Elektronen gehorcht jedoch nicht einer Exponentialfunktion wie die Gasmoleküle, sondern der Fermi-Verteilung. Die Fermi-Funktion wird in der statistischen Mechanik abgeleitet, und man kann zeigen, dass sie für alle Elementarteilchen mit halbzahligen Drehimpuls (spin) gilt, insbesondere für Elektronen. Sie gilt allerdings nur im Fall des thermodynamischen Gleichgewichtes, im thermodynamischen Ungleichgewicht ist das Fermi-Niveau nicht definiert.

Ein **Festkörper**, z. B. ein Halbleiter, **befindet sich im thermodynamischen Gleichgewicht**, wenn er **überall dieselbe Temperatur** aufweist und **auch nicht anderweitig durch äußere Einwirkungen gestört wird**, wie z. B. durch Lichteinstrahlung oder Anlegen einer Spannung.

Die Anzahl besetzbarer Energiewerte im Valenzband und im Leitungsband ist begrenzt. Die energieabhängige Besetzungswahrscheinlichkeit $F_n(E)$ der Bänder mit Elektronen wird durch die Fermi-Dirac-Funktion (Fermi-Dirac-Verteilung) beschrieben. Die Fermi-Verteilungsfunktion beschreibt eine Art „Wunschvorstellung“ der Elektronen, sich in ungestörter Umgebung energetisch zu verteilen.

$$F_n(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}} \quad (2.5)$$

$k = 1,380658 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}} = 8,617386 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}} = \text{Boltzmann-Konstante}$,

$T = \text{Temperatur in Kelvin}$,

$E_F = \text{Fermi-Energie (Fermi-Niveau)}$,

$e = 2,71828$.

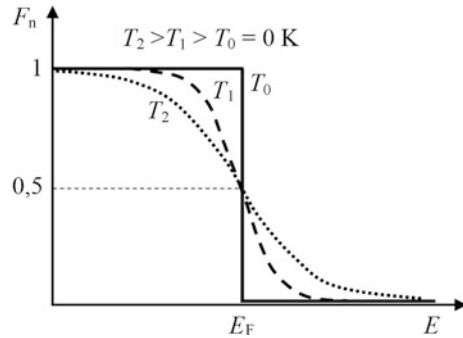
Wie in Abb. 2.14 gezeigt, ist die Besetzungswahrscheinlichkeit für Energien deutlich unterhalb des Fermi-Niveaus nahezu 1, beträgt exakt am Fermi-Niveau 0,5 und fällt dann weiter gegen null. Der Übergang würde für $T = 0$ sprunghaft erfolgen und wird mit steigender Temperatur immer weicher.

Die Fermi-Verteilung besagt, dass Elektronen mit einer gegen eins gehenden Wahrscheinlichkeit Energiewerte unterhalb des Fermi-Niveaus und mit einer gegen null gehenden Wahrscheinlichkeit Energiewerte oberhalb des Fermi-Niveaus annehmen. Die Breite des Bereichs, in dem die Wahrscheinlichkeit von eins nach null umschlägt, hängt von der Temperatur ab. Beim absoluten Nullpunkt ($T = 0 \text{ K}$) erfolgt der Umschlag abrupt.

Das Fermi-Niveau E_F ist keine Naturkonstante, die man mit einem Zahlenwert ein für alle Mal festlegen könnte, so wie beispielsweise die Boltzmann-Konstante. Allerdings ist das Fermi-Niveau in einem Festkörper (z. B. in einer Siliziumscheibe) oder in

² Löcher: siehe Abschn. 2.5.

Abb. 2.14 Fermi-Dirac-Funktion, Fermi-Verteilung der Elektronen



einem System von Festkörpern (z. B. in einem Metall-Halbleiterkontakt oder in einem pn-Übergang), die sich im thermodynamischen Gleichgewicht befinden, überall konstant, d. h., ortsunabhängig.

$T = 0 \text{ K}$: Alle Energie-Niveaus unterhalb E_F sind von Elektronen besetzt, alle Niveaus oberhalb E_F sind unbesetzt (Sprungfunktion bei E_F).

$T > 0 \text{ K}$: Der Übergang ist nicht mehr sprunghaft. Die Besetzungswahrscheinlichkeit bei E_F ist genau 50 %, d. h., ein Zustand der Energie $E = E_F$ ist mit der Wahrscheinlichkeit $1/2$ mit einem Elektron besetzt.

Die energetische Lage des Fermi-Niveaus innerhalb eines Festkörpers hängt von dessen Beschaffenheit ab, sie kann als Kriterium zur Klassifizierung von Festkörpern benutzt werden. Das Fermi-Niveau gestattet eine klare Unterscheidung zwischen Metallen, Halbleitern und Isolatoren. Jeder Festkörper aus einem bestimmten Material besitzt eine für ihn charakteristische Abfolge von erlaubten und verbotenen Bändern bestimmter Breiten und Zustandsdichten von Ladungsträgern. Die Bänder niedriger Energien werden zuerst mit einer Wahrscheinlichkeit ≈ 1 mit Elektronen aufgefüllt. Die Zahl der Elektronen pro Volumen ist in einem Festkörper begrenzt, und die höheren Energiebänder bleiben leer. Die Energie, bis zu der genügend Elektronen vorhanden sind, um Zustände aufzufüllen, sozusagen die „Füllstandslinie“, ist das Fermi-Niveau. In einem Metall wird diese Energie in einem erlaubten Band erreicht, bei Halbleitern und Isolatoren liegt sie in einem verbotenen Band. Mit anderen Worten, bei einem Metall ist das höchste mit Elektronen bevölkerte Energieband „halb“ gefüllt, bei Halbleitern und Isolatoren ist es fast voll.

Weshalb ist ein Metall ein guter Leiter? Um einen Strom zu führen, müssen die Elektronen im Band beweglich sein. Es müssen hinreichend viele freie Plätze im Band vorhanden sein, damit Elektronen, die im elektrischen Feld der angelegten Spannung beschleunigt werden, leicht zu einem noch unbesetzt gebliebenen Zustand geringfügig höherer Energie überwechseln können. Im Leitungsband eines Metalls sind die Voraussetzungen hierfür optimal, da unmittelbar oberhalb der „Füllstandslinie“, des Fermi-Niveaus, noch sehr viele unbesetzte Zustände zur Verfügung stehen. Elektronen können sich mühelos durch das Band bewegen.

Weshalb ist ein Isolator ein schlechter Leiter? Im Leitungsband des Isolators sind fast keine Elektronen vorhanden, die einen Strom führen könnten, und das Valenzband ist so dicht mit Elektronen vollgepackt, dass praktisch keine freien Plätze vorhanden sind, die es den Elektronen gestatten würden, sich im Valenzband zu bewegen.

Halbleiter nehmen eine Zwischenstellung ein. Ihr Bandabstand ist geringer als der von Isolatoren, und die Ausläufer der Fermi-Funktion bewirken, dass im Leitungsband einige Elektronen, im Valenzband einige freie Plätze vorhanden sind und mäßige Stromleitung in beiden Bändern stattfindet.

Prinzipiell kann die Lage des Fermi-Niveaus entweder durch Manipulation am Material selber geändert werden, z. B. durch gezielten Einbau von Verunreinigungsatomen (Dotieren) oder, im Nichtgleichgewicht, z. B. durch Anlegen einer äußeren Spannung (Diode, Transistor), durch Einprägen eines elektrischen Feldes (Feldeffekttransistor) oder durch Lichteinstrahlung (Fotowiderstand, Solarzelle).

Da die Besetzung durch ein Loch gleichbedeutend mit der Nichtbesetzung durch ein Elektron ist, ergibt sich für die Besetzungswahrscheinlichkeit der Löcher

$$F_p = 1 - F_n = \frac{1}{1 + e^{-\frac{E-E_F}{k \cdot T}}} \quad (2.6)$$

Für Energiewerte E in einiger Entfernung des Fermi-Niveaus E_F ist $|E - E_F| \gg k \cdot T$, die Besetzungswahrscheinlichkeiten sind dann

$$F_n \approx e^{-\frac{E-E_F}{k \cdot T}} \quad (2.7)$$

$$F_p \approx e^{\frac{E-E_F}{k \cdot T}} \quad (2.8)$$

Die Fermi-Dirac-Verteilung ist mit den Näherungen der Gl. 2.7 und 2.8 in die Boltzmann-Verteilung übergegangen. Mit der Boltzmann-Statistik lässt sich z. B. auch das Dichteverhältnis der Teilchen in der Atmosphäre an zwei Orten mit unterschiedlicher potenzieller Energie ausdrücken. Dabei wird allerdings davon ausgegangen, dass die Teilchen in so geringer Konzentration vorliegen, dass sie sich gegenseitig nicht beeinflussen. Dies ist in Halbleitern nicht generell der Fall.

Das **Fermi-Niveau** liegt bei einem **eigenleitenden** (nicht dotierten) Halbleiter **in der Mitte der verbotenen Zone**. (Dies ist nicht ganz exakt, da die effektive Masse von Elektronen und Löchern unterschiedlich ist.)

Bei einem **n-leitenden Halbleiter** liegt ein Elektronen-Überschuss im Leitungsband vor. Dadurch ist die 50%-Wahrscheinlichkeit, dass ein Zustand besetzt ist, nach oben verschoben, das **Fermi-Niveau liegt näher am Leitungsband**.

Bei einem **p-leitenden Halbleiter** liegt ein Löcher-Überschuss im Valenzband vor. Dadurch ist die 50%-Wahrscheinlichkeit, dass ein Zustand besetzt ist, nach unten verschoben, das **Fermi-Niveau liegt näher am Valenzband**.

In allen Fällen nehmen die beweglichen Ladungsträger vorzugsweise Energien in der Nähe der Bandkanten ein. Weiter im Inneren der Bänder finden sich kaum bewegliche Ladungsträger. Wie Sandkörnchen in einer Flüssigkeit zum Boden absinken, so halten sich

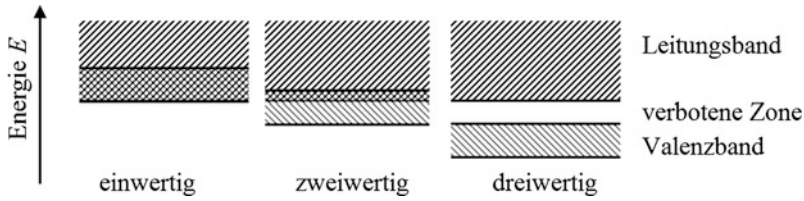


Abb. 2.15 Valenz- und Leitungsbander bei Metallen

die freien Elektronen vorzugsweise am unteren Ende des Leitungsbandes in der Nähe der Leitungsbandkante E_C auf. Wie Luftbläschen in einer Flüssigkeit zur Oberfläche aufsteigen, so halten sich die Löcher vorzugsweise am oberen Ende des Valenzbandes in der Nähe der Valenzbandkante E_V auf.

Metalle besitzen in der Regel ein bis drei Valenzelektronen in der äußeren Schale der Atomhülle. Die Anzahl dieser Valenzelektronen gibt die Wertigkeit des Atoms an. So ist z. B. das Kupferatom mit einem Valenzelektron ein einwertiges Atom. Bei Metallen kommt es vor, dass sich das Valenzband und das Leitungsband überlappen, wie dies in Abb. 2.15 dargestellt ist. Bei einwertigen Metallen liegt das Valenzband vollständig im Leitungsband und schließt mit dessen unterem Energieniveau ab. Dies bedeutet, dass sich ohne Energiezufuhr bei einer Temperatur von $T = 0$ K (absoluter Nullpunkt der Temperatur, -273 °C) bereits alle Valenzelektronen im Leitungsband befinden. Bei zweiwertigen Metallen überlappen sich das Valenzband und das Leitungsband teilweise, während sich bei dreiwertigen Metallen bereits eine verbotene Zone bildet.

Unabhängig von seiner Wertigkeit ist bei jedem Metallatom bei Raumtemperatur ($T = 290$ K) ein Valenzelektron in das Leitungsband gehoben. Da bei Metallen ca. 10^{23} Atome pro cm^3 existieren, können ca. 10^{23} frei bewegliche Elektronen pro cm^3 angenommen werden. Dies erklärt die gute elektrische Leitfähigkeit von Metallen, die proportional zu der Anzahl der freien Elektronen ist. Bei niedrigen Temperaturen leiten Metalle besonders gut, weil die Bewegung der Elektronen durch die bei höheren Temperaturen vorhandenen Eigenschwingungen der Atomkerne am wenigsten gestört werden.

Nichtmetallische Werkstoffe haben meist mehr als drei Valenzelektronen und einen relativ großen Abstand zwischen dem Valenzband und dem Leitungsband. Im Gegensatz zu Metallen befinden sich bei Nichtmetallen bei Raumtemperatur von $T = 290$ K nur wenige Elektronen im Leitungsband. Diese Werkstoffe besitzen somit nur eine schlechte elektrische Leitfähigkeit.

Bei **Halbleitern** ist das Valenzband voll besetzt. Bei $T = 0$ K befinden sich im Leitungsband keine freien Elektronen, der Halbleiter ist ein idealer Isolator. Der Abstand des Valenzbandes zum Leitungsband ist aber mit $\Delta E < 3$ eV gering, so dass bei höheren Temperaturen Elektronen in das Leitungsband gelangen können. Für Silizium beträgt die Energie zur Überwindung der Bandlücke $\Delta E_{g,\text{Si}} = 1,1$ eV. Bereits bei Zimmertemperatur zeigen Halbleiter eine merkliche Leitfähigkeit, wenn diese auch im Vergleich zu Metal-

len eher schlecht ist. Wird durch thermische Anregung ein Elektron aus dem Valenzband in das Leitungsband gehoben, so wird dies *Generation* genannt. Ein Elektron kann unter Abgabe von Energie aus dem Leitungsband in das Valenzband „herunterfallen“. Dies wird als *Rekombination* bezeichnet.

Die Elektron-Loch-Rekombination kann unter Abgabe von elektromagnetischer Rekombinationsstrahlung (*Photon*) und/oder unter der Abgabe eines Impulses an das Kristallgitter (*Phonon*) erfolgen.

Beim **Isolator** ist der Bandabstand mit $\Delta E > 3 \text{ eV}$ so groß, dass in der Regel keine messbare Eigenleitung unterhalb des Schmelzpunktes des Stoffes auftritt. Auch bei hohen Temperaturen können fast keine Elektronen in das Leitungsband gelangen.

2.4 Direkte und indirekte Halbleiter

Die bei der Rekombination von Elektron-Loch-Paaren in einem Halbleiterkristall frei werdende Energie kann entweder in Form von Licht abgestrahlt oder als Wärme freigesetzt werden. Welche der beiden Möglichkeiten auftritt hängt von der Bandstruktur des Halbleiters ab. In diesem Zusammenhang unterscheidet man *direkte* und *indirekte* Halbleiter, womit eigentlich die Art der Rekombination gemeint ist. Die beiden unterschiedlichen Arten der Rekombination (der Übergänge von Elektronen aus dem Leitungsband in das Valenzband) können durch eine Betrachtung der Bandstruktur im *Impulsraum* erläutert werden. Hierzu werden einige Grundlagen der Festkörperphysik benötigt.

2.4.1 Quanten und Wellen

Max Planck postulierte im Jahre 1900 in seiner Quantenhypothese, dass für eine Schwingung mit der Frequenz f nur diskrete Energiewerte möglich sind.

$$E_n = n \cdot h \cdot f \quad \text{mit } n = 1, 2, \dots \quad (2.9)$$

Die Konstante $h = 6,626\,0755 \cdot 10^{-34} \text{ Js (Ws}^2) = 4,135\,669 \text{ eV} \cdot \text{s}$ ist das *Planck'sche Wirkungsquantum*.

Die kleinste durch Licht transportierbare Energieportion wird als *Lichtquant* oder **Photon** bezeichnet. Auch die **Phononen**, die Energien der Gitterschwingungen der Atome eines Festkörpers, sind gequantelt.

Die kinetische Energie eines Photons ist

$$E = h \cdot f = m \cdot c^2 \quad (2.10)$$

c = Lichtgeschwindigkeit.

Der Impuls eines Photons ist

$$p = m \cdot c = \frac{h \cdot f}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (2.11)$$

mit $\lambda \cdot f = c$.

Die *Wellenzahl* k gibt an, wie viele Wellenlängen auf ein 2π -faches einer Längeneinheit passen.

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.12)$$

Zu beachten ist, dass k der Betrag des Wellenvektors ist, der in Richtung der Wellenausbreitung zeigt. Unter Verwendung dieser Definition ergibt sich als Impuls

$$p = \frac{h}{2\pi} \cdot k = \hbar \cdot k \quad (2.13)$$

Die Konstante h wird in vielen Gleichungen um den Faktor 2π vermindert benötigt, zur Vereinfachung wird die Konstante \hbar eingeführt.

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (2.14)$$

Mit ihr erhält man eine sehr ähnliche Darstellung der Energie eines Photons, wenn statt der Frequenz f die Kreisfrequenz ω verwendet wird.

$$E = h \cdot f = \hbar \cdot \omega \quad (2.15)$$

De Broglie setzte formal die aus der teilchen- und wellenmechanischen Betrachtung resultierenden Impulse gleich.

$$\underbrace{m \cdot v}_{\text{Teilchen}} = p = \hbar \cdot \underbrace{k}_{\text{Welle}} = \frac{h}{\lambda} \quad (2.16)$$

Daraus folgt die de-Broglie-Wellenlänge.

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} \quad (2.17)$$

Für die Energie ergibt die gleiche Betrachtung

$$\underbrace{\frac{1}{2} m \cdot v^2}_{\text{Teilchen}} = E = \hbar \cdot \underbrace{\omega}_{\text{Welle}} = h \cdot f \quad (2.18)$$

Jedem bewegten Teilchen kann somit eine Welle zugeordnet werden.

$$\Psi(x, t) = C \cdot e^{j(kx - \omega t)} \quad (2.19)$$

mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ und $\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi \cdot f$.

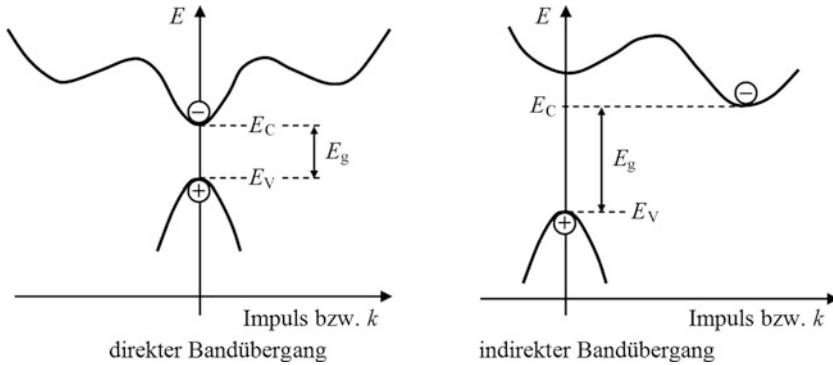


Abb. 2.16 E in Abhängigkeit von k bei direktem und indirektem Bandübergang

Dabei handelt es sich um ein mathematisches Modell, diese Welle wird nicht durch eine physikalische Größe repräsentiert.

Im Impulsraum wird die Abhängigkeit der Energie der Ladungsträger von k ersichtlich, die Ladungsträger werden außer mit ihrem Energieniveau im Bänderschema auch durch ihren Impuls bzw. durch die Wellenzahl k charakterisiert. Beim Bändermodell im Impulsraum sind die Werte von Leitungs- und Valenzbandkante nicht für jeden Impuls bzw. jedes k gleich, beide Bandkanten weisen Extremwerte auf. Von Bedeutung sind das kleinste Minimum E_C des Leitungsbandes und das größte Maximum E_V des Valenzbandes.

Liegen E_C und E_V beim gleichen k -Wert, so spricht man von einem *direkten Bandübergang* oder von einem Band-Band-Übergang (Abb. 2.16 links). Liegen E_C und E_V bei unterschiedlichen Werten von k , so wird dies als *indirekter Bandübergang* bezeichnet (Abb. 2.16 rechts). Der Abstand von E_C zu E_V ergibt die Breite der Bandlücke E_g .

2.4.2 Direkte Rekombination

Fällt ein Elektron aus seinem energetisch höheren Zustand im Leitungsband *direkt* in das Valenzband zurück, so werden gleichzeitig ein Elektron und ein Loch vernichtet und ein Photon erzeugt. In diesem Fall spricht man von direkter Rekombination (Abb. 2.17 links).

Bei den direkten Halbleitern findet bei der Rekombination ein unmittelbarer Übergang der Leitungselektronen in das Valenzband statt. Die freiwerdende Energie wird in Form eines Photons (Lichtquants) abgestrahlt. Bei einem direkten Halbleiter ist die Abstrahlung eines Photons nicht mit der Änderung eines Impulses (der durch $\frac{h \cdot k}{2\pi}$ gegeben ist) verbunden, da $\Delta k = 0$ ist.

Bei der direkten Rekombination ist die Wellenlänge (in μm) emittierter Photonen:

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{E_g} = \frac{1,24}{E_g} \quad (\text{Bandlücke } E_g \text{ in eV}). \quad (2.20)$$

Nur direkte Halbleiter eignen sich zur effektiven Strahlungserzeugung und als Material für optoelektronische Bauelemente, z. B. für Leuchtdioden (LEDs).

Direkte Halbleiter sind in der Regel Verbindungshalbleiter aus verschiedenen Hauptgruppen (III/V: GaAs, InP, GaN).

2.4.3 Indirekte Rekombination

Bei der indirekten Rekombination (Abb. 2.17 rechts) erfolgt der Übergang des Elektrons aus seinem energetisch höheren Zustand im Leitungsband in das Valenzband durch Wechselwirkung mit Phononen. Da diese die dabei frei werdende Energie nicht aufnehmen können, ist nur ein stufenweiser Übergang über Zwischenniveaus (*Haftstellen, traps*) im verbotenen Band möglich.

Bei indirekten Halbleitern findet somit kein unmittelbarer Übergang von Elektronen aus dem Leitungsband in das Valenzband statt. Die Rekombination kann nur in Schritten über Energiezwischenniveaus in der verbotenen Zone, welche durch so genannte *Rekombinationszentren* gebildet werden, stattfinden. Rekombinationszentren können durch gezielt eingebrachte Fremdatome (Donatoren, Akzeptoren als so genannte *tiefe Störstellen* mit Störniveaus nahe der Mitte des verbotenen Bandes) oder durch Gitterstörungen (Kristalldefekte) gebildet werden.

Beim indirekten Bandübergang ist die Mitwirkung eines Phonons erforderlich, wobei sich die Energie der emittierten Strahlung um die Phononenenergie von der des Bandabstandes unterscheidet. Der geringe Impuls eines Phonons reicht nicht aus, die bei einem indirekten Bandübergang nötige Impulsänderung aufzubringen. Die Wahrscheinlichkeit für einen solchen Prozess ist zudem wesentlich geringer als für den einfachen direkten Rekombinationsprozess, da sowohl Photonen als auch Phononen am Ablauf beteiligt sind.

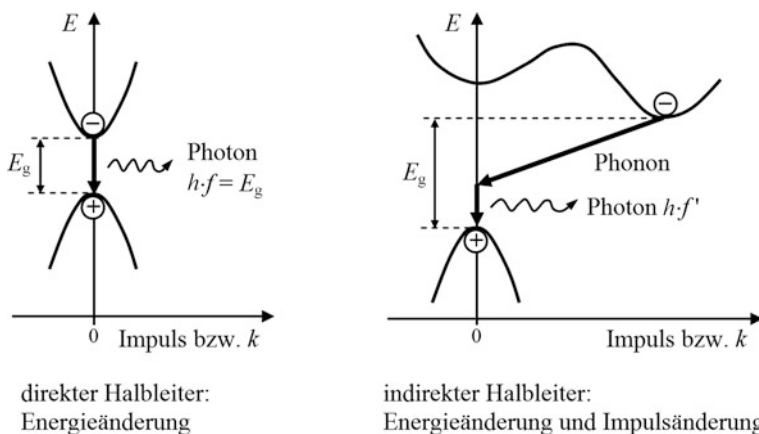


Abb. 2.17 $E(k)$ bei direkter und indirekter Rekombination

Bei der indirekten Rekombination wird nur ein sehr kleiner Teil der freiwerdenden Energie als Photonen abgestrahlt, der größte Teil wird in Gitterschwingungen (Phononen), d. h. in Wärme umgesetzt.

In der Regel sind Elementarhalbleiter (Si, Ge) und Verbindungshalbleiter aus der IV. Hauptgruppe indirekte Halbleiter.

Als Merkregel zu direkten und indirekten Halbleitern kann gelten:

GaAs: Die Diode leuchtet und wird warm (direkter Halbleiter).

Si: Die Diode leuchtet nicht und wird warm (indirekter Halbleiter).

2.5 Eigenleitung

In einem Halbleiter gibt es zwei grundlegend verschiedene Arten des elektrischen Leistungsverhaltens: Die Eigenleitung und die Störstellenleitung.

Die elektrische Leitung im *reinen* Halbleiterkristall nennt man *Eigenleitung* oder *Intrinsic*-Leitung.

Bei reinem Silizium befinden sich bei -273 °C alle Elektronen im Valenzband, sie dienen der Bindung zwischen den Atomen. Durch Energiezufuhr, z. B. durch ein elektrisches Feld, Wärme oder Licht, können Elektronen in das Leitungsband gehoben werden. Dabei werden Elektronen aus ihren Bindungen herausgelöst (dies ist der Vorgang der Generation) und können sich frei im Gitter bewegen. Jedes freie Elektron hinterlässt am Ort seiner ursprünglichen Gitterbindung einen unbesetzten Zustand, eine fehlende negative Ladung, die wie ein positiver Ladungsträger wirkt. Man bezeichnet die Stelle, an der ein Elektron fehlt, als **Defektelektron**, Elektronenfehlstelle, Elektronenlücke oder kurz als **Loch**. Es ist zweckmäßig, die Löcher wie virtuelle Teilchen mit einer positiven Ladung zu behandeln. **Löcher können sich frei bewegen und transportieren Ladung.** Mit der Entstehung eines freien Elektrons ist immer die Entstehung eines Loches verbunden, die Zahl der Löcher und die Zahl der freien Elektronen ist daher gleich groß. Nach außen hin ist der Kristall elektrisch neutral.

Auf ihrer Bewegung durch den Kristall können Elektronen in die Nähe von Löchern kommen, aufgrund der unterschiedlichen Ladungen werden sie angezogen und die Elektronen füllen die Elektronenlücken wieder auf (Vorgang der Rekombination). Es kann auch vorkommen, dass ein Elektron aus seiner Paarbindung durch ein benachbartes Loch gerissen wird. In diesem Fall verschwindet dieses Loch. Durch das Aufreißen der Paarbindung entsteht aber beim Nachbaratom ein neues Loch.

Bei jeder Temperatur halten sich die Bildung von Elektron-Loch-Paaren und die Rekombination die Waage, der Prozess aus Generation und Rekombination ist im Gleichgewicht. Im thermodynamischen Gleichgewicht werden genau so viele Ladungsträger durch Rekombination vernichtet, wie durch Paarbildung erzeugt werden. Allerdings ist die Zahl der Elektron-Loch-Paare stark temperaturabhängig, die Zahl der durch Wärmezufuhr aufgebrochenen Bindungen und damit der beweglichen Ladungsträger steigt mit

der Temperatur. Die Leitfähigkeit des Halbleiterkristalls nimmt also – im Gegensatz zu den Metallen – mit der Temperatur zu.

2.5.1 Eigenleitungsdichte

Die Dichte freier Elektronen und Löcher in reinen, d. h. undotierten Halbleitern, nennt man intrinsische Ladungsträgerdichte, Inversionsdichte oder **Eigenleitungsdichte** n_i . Ein Eigenhalbleiter wird auch intrinsischer Halbleiter genannt.

Im reinen Si-Kristall gilt für den thermodynamischen Gleichgewichtszustand (bei gegebener Temperatur T):

$$p = n = n_i \quad (2.21)$$

p = Anzahl Löcher/cm³ (Löcherdichte),
 n = Anzahl Elektronen/cm³ (Elektronendichte),
 n_i = Eigenleitungsdichte.

Die Elektronendichte im Leitungsband ist gleich der Löcherdichte im Valenzband.

Nach dem **Massenwirkungsgesetz** (gilt auch für dotierte Halbleiter) ist das Produkt aus Elektronen- und Löcherdichte eine Materialkonstante.

Zwangsläufig erhält man aus Gl. 2.21:

$$p \cdot n = n_i^2 \quad (2.22)$$

Die Eigenleitungsdichte ist ein statistischer Mittelwert. Sie wird von der Kristalltemperatur T und der materialbedingten Generationsenergie E_g (Bandlücke) zum Aufbrechen der Bindung bestimmt. Bei Zimmertemperatur $T = 300$ K mit $kT = e \cdot U_T \approx 26$ meV sind die Eigenleitungsdichten gering ($U_T =$ Temperaturspannung).

In Abhängigkeit der Temperatur und der Bandlücke ist die Eigenleitungsdichte:

$$n_i(T) = \sqrt{N_C \cdot N_V} \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (2.23)$$

n_i = Eigenleitungsdichte,
 $E_g = E_C - E_V$ = Bandlücke (Bandabstand),
 T = Kristalltemperatur,
 E_C = untere Bandkante Leitungsband,
 E_V = obere Bandkante Valenzband,
 $k = 1,380\,658 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}} = 8,617\,386 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}}$ = Boltzmann-Konstante.

N_C und N_V in Gl. 2.23 sind die so genannten *effektiven Zustandsdichten* am Rand von Leitungs- bzw. Valenzband. Die effektive Zustandsdichte $N_{C,V}$ beschreibt die Dichte der besetzbaren Zustände innerhalb des Energieintervalls $\Delta E = kT$ von der Bandkante aus

gemessen. Sie liegt in der Größenordnung von 10^{19} cm^{-3} . In Tab. 2.1 sind Werte von N_C und N_V einiger Halbleitermaterialien enthalten.

Zu beachten ist, dass N_C und N_V in Gl. 2.23 wiederum temperaturabhängig sind.

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi \cdot m_n \cdot k \cdot T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.24)$$

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi \cdot m_p \cdot k \cdot T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.25)$$

In den Gln. 2.24 und 2.25 ist h jeweils das Planck'sche Wirkungsquantum. Die Größen m_n und m_p sind die *durchschnittlichen effektiven Massen* der Elektronen im Leitungsband und der Löcher im Valenzband des betrachteten Halbleitermaterials. Durch diese durchschnittlichen effektiven Massen ist die gesamte Wechselwirkung der Ladungsträger mit dem Kristallgitter berücksichtigt.

Tab. 2.1 Parameter wichtiger Halbleitermaterialien

	Si	Ge	GaAs
Gitterstruktur	Diamant	Diamant	Zinkblende
Ordnungszahl	14	32	–
Atomgewicht	28,06	72,6	144,63
Atome pro cm^3	$4,99 \cdot 10^{22}$	$4,42 \cdot 10^{22}$	$4,43 \cdot 10^{22}$
Bandabstand E_g bei 300 K	1,11 eV	0,67 eV	1,43 eV
Eigenleitungsträgerdichte n_i bei 300 K	$1,5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$	$2,3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$	$1,3 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-3}$
Effektive Zustandsdichte im Leitband N_C bei 300 K	$2,8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	$1,04 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	$4,3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
Effektive Zustandsdichte im Valenzband N_V bei 300 K	$1,04 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	$6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$7,0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Verhältnis effektiver Elektronenmasse m_n und Ruhemasse m_e	$m_n/m_e = 1,08$	$m_n/m_e = 0,56$	$m_n/m_e = 0,067$
Verhältnis effektiver Löchermasse m_p und Ruhemasse m_e	$m_p/m_e = 0,55$	$m_p/m_e = 0,29$	$m_p/m_e = 0,47$
Elektronenbeweglichkeit μ_n bei 300 K	$1350 \text{ cm}^2/(\text{V s})$	$3900 \text{ cm}^2/(\text{V s})$	$8500 \text{ cm}^2/(\text{V s})$
Löcherbeweglichkeit μ_p bei 300 K	$480 \text{ cm}^2/(\text{V s})$	$1900 \text{ cm}^2/(\text{V s})$	$450 \text{ cm}^2/(\text{V s})$
Diffusionskonstante für Elektronen D_n	35	101	221
Diffusionskonstante für Löcher D_p	12,5	49	12
Relative Dielektrizitätskonstante ϵ_r	11,8	16	10,9

Ein Elektron wird als frei bezeichnet, wenn es an keiner Bindung beteiligt und damit frei beweglich ist. Die *Ruhemasse des freien Elektrons* beträgt $m_e = 9,109\,389\,7 \cdot 10^{-31}$ kg.

Das Verhältnis von effektiver Elektronenmasse m_n (bzw. effektiver Löchermasse m_p) und Ruhemasse m_e ist ebenfalls in Tab. 2.1 enthalten. Somit sind für Si, Ge und GaAs alle Daten gegeben, um für eine bestimmte Temperatur zunächst die effektiven Zustandsdichten und dann die Eigenleitungsdichte (diese kann auch Abb. 2.18 entnommen werden) zu berechnen.

Beispiel 2.1

Berechnen Sie die Eigenleitungsdichte von Silizium bei $T = 700$ K.

Lösung:

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi \cdot m_n \cdot k \cdot T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} ; \quad N_V = 2 \left(\frac{2\pi \cdot m_p \cdot k \cdot T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

$$m_n = 1,08 \cdot m_e = 1,08 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 9,84 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$m_p = 0,55 \cdot m_e = 0,55 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 5,01 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$k = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}} = 8,62 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}} ;$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} ; \quad T = 700 \text{ K}$$

$$\Rightarrow N_C = 1,003 \cdot 10^{26} \frac{1}{\text{m}^3} = 10^{20} \frac{1}{\text{cm}^3} ;$$

$$N_V = 3,65 \cdot 10^{25} \frac{1}{\text{m}^3} = 3,65 \cdot 10^{19} \frac{1}{\text{cm}^3}$$

$$n_i(T) = \sqrt{N_C \cdot N_V} \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}} ; \quad E_g = 1,11 \text{ eV} ; \quad 2 \cdot k \cdot T = 0,121 \text{ eV}$$

$$n_i(T = 700 \text{ K}) = \sqrt{10^{20} \text{ cm}^{-3} \cdot 3,65 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}} \cdot e^{-\frac{1,11 \text{ eV}}{0,121 \text{ eV}}} ;$$

$$\underline{\underline{n_i = 6,3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}}}$$

Experimentelle Ergebnisse zeigen, dass der Bandabstand der meisten Halbleiter mit zunehmender Temperatur abnimmt.

Die nur schwache Abhängigkeit der effektiven Massen m_n und m_p von der Temperatur wird bei der Berechnung der Eigenleitungsdichte n_i (bzw. der effektiven Zustandsdichten $N_{C,V}$) meist vernachlässigt. Auch die Temperaturabhängigkeit des Bandabstandes E_g wird bei der Bestimmung von n_i bei kleinen Temperaturen oft vernachlässigt, bei hohen Temperaturen kann dies aber zu großen Fehlern führen. Die Abhängigkeit des Bandabstandes

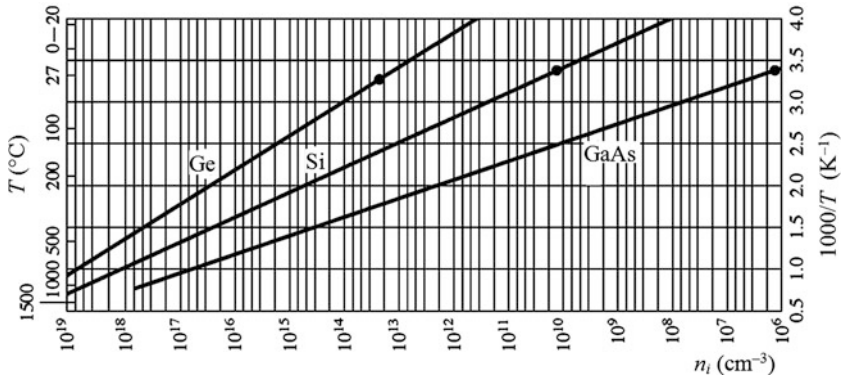


Abb. 2.18 Temperaturabhängigkeit der Eigenleitungsträgerdichte von Ge, Si und GaAs

Tab. 2.2 Parameter nach Gl. 2.26 für Ge, Si und GaAs

Material	$E_{g,0}$ (eV)	α (eVK $^{-2}$)	β (K)
GaAs	1,52	$5,41 \cdot 10^{-4}$	204
Si	1,17	$4,73 \cdot 10^{-4}$	636
Ge	0,74	$4,44 \cdot 10^{-4}$	235

von der Temperatur kann näherungsweise durch nachfolgende Formel beschrieben werden.

$$E_g(T) = E_{g,0} - \frac{\alpha \cdot T^2}{T + \beta} \quad (2.26)$$

Die Parameter α und β sind in Tab. 2.2 enthalten.

2.5.2 Ladungsträgerlebensdauer

Freie Ladungsträger besitzen zwischen Generation und Rekombination eine mittlere Lebensdauer τ von einigen Mikrosekunden. Dieser Wert wird entscheidend von der Qualität der kristallinen Struktur des Halbleiters (Anzahl der Gitterbaufehler), der Stärke der Dotierung und der Verunreinigung des Materials beeinflusst. Je größer die Verunreinigung des Halbleiters ist, desto kürzer ist die Lebensdauer. Auf Grund der Braun'schen Bewegung legen die Ladungsträger während ihrer Lebensdauer τ eine mittlere Wegstrecke L im μm -Bereich, die sogenannte *Diffusionslänge* zurück. Die Diffusionslänge ist ein Maß dafür, wie weit sich ein Ladungsträger im Halbleiter im Mittel bewegen kann, bevor er rekombiniert.

$$L_{n,p} = \sqrt{D_{n,p} \cdot \tau_{n,p}} \quad (2.27)$$

$D_{n,p}$ = Diffusionskonstante der Elektronen, Löcher.

Anmerkung Ein Strom in einem Halbleiter aufgrund eines elektrischen Feldes (einer angelegten Spannung) wird **Driftstrom** oder **Feldstrom** genannt. Ist die Ursache für den Strom eine ortsabhängige Konzentration der Ladungsträger, so wird der Strom als **Diffusionsstrom** bezeichnet.

2.5.3 Beweglichkeit

Die Driftbeweglichkeit $\mu_{n,p}$ der Elektronen- und Löcher ist temperaturabhängig. Die Beweglichkeit μ_p der Löcher ist kleiner als die Beweglichkeit μ_n der Elektronen.

Silizium

$$\mu_n(T) \approx 1300 \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{-\frac{3}{2}} \frac{\text{cm}^2}{\text{V s}} \quad (2.28)$$

$$\mu_p(T) \approx 500 \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{-\frac{3}{2}} \frac{\text{cm}^2}{\text{V s}} \quad (2.29)$$

Germanium

$$\mu_n(T) \approx 3800 \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{-\frac{3}{2}} \frac{\text{cm}^2}{\text{V s}} \quad (2.30)$$

$$\mu_p(T) \approx 1800 \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{-\frac{3}{2}} \frac{\text{cm}^2}{\text{V s}} \quad (2.31)$$

In den Gl. 2.28, 2.29, 2.30 und 2.31 ist jeweils $T_0 = 300 \text{ K}$.

Diffusionskonstante und Beweglichkeit sind über die *Einstein-Beziehung* miteinander verknüpft.

$$D_{n,p} = \frac{kT}{e} \cdot \mu_{n,p} = U_T \cdot \mu_{n,p} \quad (2.32)$$

$U_T =$ Temperaturspannung

Im elektrischen Feld erhalten die Ladungsträger im Halbleiter eine mittlere Geschwindigkeit:

$$\bar{v} = \mu_{n,p} \cdot E \quad (2.33)$$

Der ungeordneten thermischen Bewegung überlagert sich eine vorzugsweise Komponente in Feldrichtung. Insgesamt ist die Bewegung nicht beschleunigt, sie wird durch die Stöße mit den Gitterbausteinen auf einen konstanten mittleren Wert begrenzt.

Die *spezifische Leitfähigkeit* eines Halbleiters, bei dem sowohl Elektronen als auch Löcher zur Leitfähigkeit beitragen, ist:

$$\sigma = |e| \cdot (\mu_n \cdot n + \mu_p \cdot p) \quad (2.34)$$

Beim intrinsischen Halbleiter mit $p = n = n_i$ gilt:

$$\sigma_i = |e| \cdot n_i \cdot (\mu_n + \mu_p) \quad (2.35)$$

2.6 Störstellenleitung

Ausreichend chemisch reine und als Einkristalle hergestellte Halbleiter-Materialien sind bei Raumtemperatur schlechte Leiter und meistens auch keine guten Isolatoren, Halbleiter sind in ihrer reinen Form nur von geringem Nutzen.

2.6.1 Dotieren

Von großer technischer Bedeutung ist die gezielte, sehr schwache „Verunreinigung“ von Halbleitern. Durch den Einbau kleinster Mengen von Fremdatomen in das Kristallgitter kann die Leitfähigkeit des reinen Halbleiters erheblich vergrößert und gezielt eingestellt werden. Dieses Hinzufügen geringer Anteile von Atomen anderer chemischer Elemente wird *Dotieren* genannt, es erhöht deutlich die Konzentration an Ladungsträgern (Elektronen oder Löcher) im Halbleiter. „Gezielt“ erfolgt das Dotieren hinsichtlich Reinheit, spezifiziertem Element, Konzentration und Verteilung im Halbleiter.

Die Fremdatome heißen „Störatome“, sie bewirken eine *Störleitung* oder *extrinsische* Leitung. Störatome müssen in das Wirtsgitter eingebaut werden, um elektrisch wirksam zu werden. Der Einbau in die Gittermatrix heißt *substitutionell*. Ein Einbau auf einen Zwischengitterplatz wird als *interstitiell* bezeichnet, er verursacht Gitterfehler, ist elektrisch unwirksam und ist daher unerwünscht.

Das Dotieren wird technisch durch *Diffusion* (gebräuchlichstes Verfahren), durch *Epitaxie* oder durch *Ionenimplantation* vorgenommen.

Die *Diffusion* ist ein thermisch bedingter Ausgleichsvorgang, es erfolgt ein Austausch von Si-Atomen gegen Atome des Dotierstoffes im Kristallgitter des Substrats (Grundmaterials).

Die *Epitaxie* beruht auf der Neubildung einer Schicht mit der gewünschten Dotierung auf dem Substrat, es ist ein chemischer Prozess (mit überlagerter, unerwünschter Diffusion).

Die *Ionenimplantation* ist ein physikalisches Verfahren, es erfolgt der Beschuss eines Substrats mit ionisierten Dotieratomen mit Hilfe eines Teilchenbeschleunigers, wobei eine anschließende thermische Aktivierung erforderlich ist. Die Ionenimplantation ist auf eine oberflächennahe Dotierung beschränkt.

Für Halbleiter aus vierwertigen Elementen wie Silizium oder Germanium werden zur Dotierung drei- bzw. fünfwertige Elemente verwendet. Dreiwertige Elemente sind z. B. Aluminium (Al), Bor (B), Indium (In) und Gallium (Ga). Beispiele für fünfwertige Elemente sind Phosphor (P), Arsen (As) und Antimon (Sb).

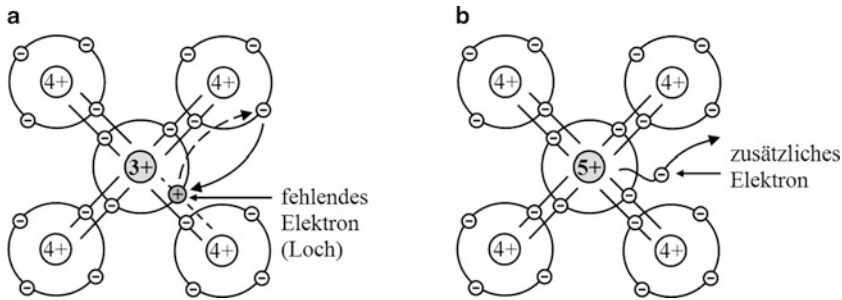


Abb. 2.19 Vierwertiger Elementhalbleiter mit Akzeptor- bzw. p-Dotierung (a) und Donator- bzw. n-Dotierung (b)

Ein dreiwertiges Element stellt pro Dotierungsatom ein Valenzelektron zu wenig für die kovalente Bindung im Kristall zur Verfügung (Abb. 2.19a). In diese Bindungslücke kann ein Elektron aus einer kovalenten Bindung eines Si-Atoms nachrücken, wenn das Elektron durch geringe Energiezufuhr aus einer Bindung herausgelöst wird. Dadurch entsteht an der Stelle ein Loch, wo vorher das Elektron war. Das Loch kann als frei beweglicher positiver Ladungsträger zum Stromfluss beitragen. Dreiwertige Stoffe, die als Störatome im Kristall eine „Löcherleitung“ erzeugen, werden als *Akzeptoren* bezeichnet, weil sie versuchen, ein Elektron aufzunehmen. Mit Akzeptoren dotierte Halbleiter, in denen der Stromtransport bevorzugt durch Löcher getragen wird, nennt man *p-Halbleiter*.

► Die **Dichte der Akzeptoren** wird als n_A bezeichnet.

Ein fünfwertiges Element stellt pro Dotierungsatom im Kristallgitter ein Elektron zu viel zur Verfügung, welches für die kovalente Bindung „überflüssig“ ist (Abb. 2.19b). Das Elektron kann mit geringem Energieaufwand von seinem Atom getrennt werden und steht dann als frei beweglicher negativer Ladungsträger für einen Stromfluss zur Verfügung. Fünfwertige Stoffe, die als Störatome im Kristall eine Elektronenleitung erzeugen, werden als *Donatoren* (Spender-Atome) bezeichnet, weil sie versuchen, ein überschüssiges Elektron abzugeben. Mit Donatoren dotierte Halbleiter, in denen der Stromtransport durch freie Elektronen vorherrscht, nennt man *n-Halbleiter*.

► Die **Dichte der Donatoren** wird als n_D bezeichnet.

III-V-Halbleiter benötigen als Akzeptoren zweiwertige Elemente, z. B. Magnesium (Mg). Es besteht auch die Möglichkeit, III-V-Halbleiter mit vierwertigen Stoffen zu dotieren. Sie werden bevorzugt als Donatoren auf den Plätzen dreiwertiger Atome oder als Akzeptoren auf den Plätzen fünfwertiger Atome eingebaut.

Die Ladungsträger, die durch die Dotierung im Halbleiter vorhanden sind, bezeichnet man als *Majoritätsträger* (mehrheitlich vorhandene Ladungsträger), die freien Ladungsträger mit entgegengesetztem Vorzeichen sind die *Minoritätsträger*. Für den n-Halbleiter

sind die Elektronen die Majoritätsträger und die Löcher die Minoritätsträger. Für den p-Halbleiter sind die Löcher die Majoritätsträger und die Elektronen die Minoritätsträger.

Die Konzentration der p- bzw. der n-Ladungsträger kann durch die Konzentration der Akzeptoren bzw. Donatoren in weiten Grenzen eingestellt werden. Die Leitfähigkeit des Halbleiters wird umso höher, je stärker der Dotierungsgrad ist. Dieser liegt üblicherweise zwischen 10^{12} und 10^{16} Fremdatomen je cm^3 . Auf ein dotierendes Fremdatom kommen somit in der Regel 10^6 bis 10^{10} Atome des Halbleiters. Wichtig ist stets, dass die Konzentration der Fremdatome sehr gering bleibt. Mit n^+ oder p^+ werden *sehr stark dotierte Gebiete* gekennzeichnet. Halbleiter mit extrem hoher Dotierung werden als *entartete Halbleiter* bezeichnet, sie besitzen ein metallähnliches Verhalten.

Bei dotierten Halbleitern entstehen, wie bei reinen Halbleitern, dauernd zusätzliche Ladungspaare. Die Eigenleitfähigkeit wird jedoch durch die Störstellen-Leitfähigkeit meist weit übertroffen.

2.6.2 Störstellenleitung im Bändermodell

Das nicht an der Kristallbindung beteiligte Valenzelektron des Donators befindet sich auf einem Energieniveau E_D knapp unterhalb der Leitungsbandkante des Halbleiters (Abb. 2.20 links). Für dieses Valenzelektron gilt das Existenzverbot für die verbotene Zone des Halbleiters nicht, da es einer anderen Atomart angehört. Durch geringe Energiezufuhr ΔE_D kann das Valenzelektron des Donators in das Leitungsband des Halbleiters gehoben werden, dies ist bereits bei Zimmertemperatur der Fall. Nach Abgabe des Elektrons in das Leitungsband des Halbleiters bleibt der Donator als positives Ion zurück.

Das Energieniveau E_A , das ein Elektron erreichen muss, um das vom Akzeptor im Bindungsgefüge erzeugte Loch aufzufüllen, liegt nur wenig über der Valenzbandkante des Halbleiters (Abb. 2.20 rechts). Die Energie ΔE_A , mit der ein Valenzelektron des Halb-

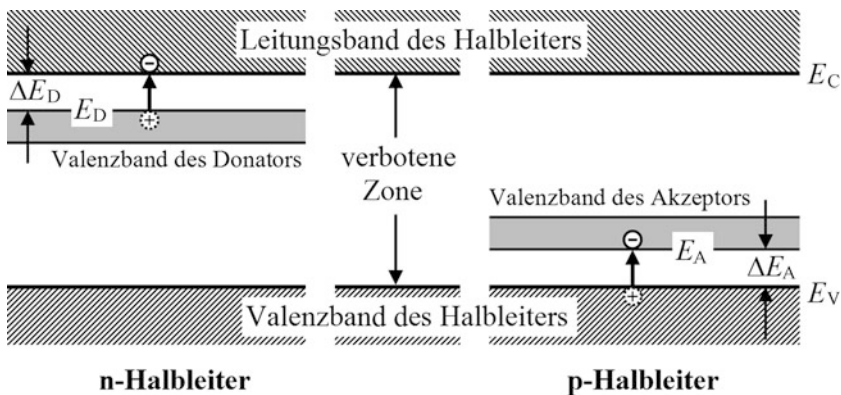


Abb. 2.20 Störstellenleitung mit Donator und Akzeptor im Bändermodell

Tab. 2.3 Bandabstand ΔE der Energieniveaus einiger Störstellenmaterialien bei Silizium

Akzeptor $\Delta E_D = E_C - E_D$		Donator $\Delta E_A = E_A - E_V$	
B	0,045 eV	P	0,044 eV
In	0,160 eV	As	0,049 eV
Al	0,057 eV	Sb	0,039 eV

leiters auf das zu besetzende Energieniveau des Akzeptors gebracht wird, steht schon bei Raumtemperatur zur Verfügung. Nach Auffüllen des Loches ist das Akzeptoratom negativ ionisiert, im Valenzband des Halbleiters entsteht ein Loch.

Auch wenn die für die Störstellenleitung erforderliche Energiezufuhr ΔE_D bzw. ΔE_A sehr klein ist (Werte in Tab. 2.3), eine gewisse Anregungsenergie ist stets notwendig. Deshalb ist der technisch nutzbare Temperaturbereich eines Halbleiters nach unten beschränkt.

2.6.3 Allgemeines zu dotierten Halbleitern

Im dotierten Halbleiter wird natürlich n oder p größer sein als im reinen Material. Durch Rekombination vermindert sich aber auch entsprechend die Zahl der jeweils „anderen“ Ladungsträger gegenüber dem Zustand im reinen Halbleiter.

Auch im dotierten Halbleitermaterial gilt: $p \cdot n = n_i^2$.

Da die Eigenleitungsdichte des Stoffes für eine bestimmte Temperatur bekannt ist, kann man bei Kenntnis von „ n “ auch stets „ p “ ausrechnen und umgekehrt.

Beispiel 2.2

Ein Si-Halbleiter ist mit einer Akzeptordichte von $n_A = 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ dotiert. Wie groß sind Löcherdichte p und Elektronendichte n bei Raumtemperatur?

Lösung:

Die Eigenleitungsdichte von Si ist bei Raumtemperatur (300 K) $n_i = 1,5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ (Tab. 2.1). Damit folgt: $p = n_A = 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; $n = \frac{n_i^2}{n_A} = \underline{\underline{7,5 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-3}}}$.

Dotierungen verhalten sich additiv. Wird ein Halbleiter zunächst p-dotiert und danach n-dotiert, so ergibt sich die resultierende Dotierung aus der Differenz der eingebrachten Dotierungen. Dies gilt nur, so lange die Dichte der Störatome noch klein gegenüber der Dichte der Atome insgesamt ist. Man kann also durchaus einen Halbleiter zunächst p-dotieren und danach eine n-Dotierung überlagern (oder umgekehrt). Dieser Vorgang wird bei der Fertigung realer Halbleiter-Schaltungen vielfältig genutzt.

Germanium hat eine hohe Beweglichkeit von Elektronen und Löchern und wäre daher prinzipiell für Bauelemente der Hochfrequenztechnik geeignet. Wegen des geringen

Bandabstandes spielt aber bereits bei Temperaturen um 100 °C die Eigenleitung eine Rolle, der technische Einsatz von Bauelementen auf der Basis von Germanium ist daher nach oben auf ca. 80 °C begrenzt. Das Oxid von Germanium ist außerdem mechanisch nicht stabil und deshalb als Isolator in integrierten Schaltungen unbrauchbar.

Bei **Silizium** hingegen weisen sowohl Elektronen als auch Löcher eine technisch brauchbare Beweglichkeit auf. Der Bandabstand erlaubt einen technisch nutzbaren Temperaturbereich bis etwa 120 bis 140 °C, welcher für viele Anwendungen ausreicht. Das Oxid (SiO_2) ist in integrierten Schaltungen sehr gut als Isolator geeignet. Mechanische Stabilität und Wärmeleitfähigkeit zur Wärmeabfuhr bei Leistungshalbleitern begünstigen zusätzlich die Verwendung von Silizium in Halbleiterbauelementen.

Für aktive optische Bauelemente sind weder Silizium noch Germanium brauchbar.

Gallium-Arsenid ist ein bevorzugtes Halbleitermaterial für Bauelemente der Mikrowellen-Technik. Die hohe Beweglichkeit der Elektronen bewirkt für n-dotiertes GaAs eine hohe Grenzfrequenz und gute Verstärkungen bei Feldeffekt-Transistoren. Wegen der geringen Beweglichkeit der Löcher wird p-dotiertes GaAs in Transistoren kaum verwendet. Von wesentlicher Bedeutung ist GaAs für aktive optische Bauelemente, also Leuchtdioden (infrarot) und Halbleiter-Laser.

2.6.4 Einfluss der Temperatur auf dotierte Halbleiter

Hinsichtlich der Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerkonzentration und damit auch der Leitfähigkeit werden drei Bereiche unterschieden (Abb. 2.21).

Bei $T = 0 \text{ K}$ sind sowohl p- als auch n-Halbleiter Isolatoren. Es existieren keine Elektronen im Leitungsband, die Elektronen besetzen die Niveaus des Valenzbandes (p-Halbleiter) bzw. die Donatorniveaus (n-Halbleiter).

In einem gewissen Temperaturbereich weisen dotierte Halbleiter eine deutlich höhere Leitfähigkeit als Reinkristalle auf. Da die Donator- und Akzeptorniveaus einen gewissen Abstand zu den Kanten von Leitungs- und Valenzband haben, ist zu ihrer Ionisierung eine Energiezufuhr von außen erforderlich. Die Störstellenleitung setzt bei niedrigen Temperaturen (um 100 K) abhängig von der Konzentration der Donatoren bzw. Akzeptoren ein. Bei Anstieg der Temperatur gelangen zunehmend Elektronen ins Leitungsband bzw. Löcher ins Valenzband. Die Zahl der Ladungsträger steigt exponentiell an. Da bei diesen niedrigen Temperaturen nicht alle Störstellenniveaus ionisiert sind, sprechen wir von dem Bereich der *Störstellenreserve*.

Eine Temperatur über 200 K reicht in der Regel aus, um alle Donatoren bzw. Akzeptoren zu ionisieren, alle Elektronen der Donatoren befinden sich dann im Leitungsband. Bei Raumtemperatur (300 K) sind alle Störstellenniveaus (alle Dotieratome) ionisiert und tragen zur Leitung bei. In diesem Falle ist $n = n_D$. Eine weitere Steigerung durch Temperaturzufuhr ist praktisch nicht möglich. Dieser Bereich wird daher *Störstellenerschöpfung* genannt.

Abb. 2.21 Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerdichte eines Halbleiters; $T_L \leq T \leq T_H$: Betriebstemperaturbereich für dotierte Halbleiterbauelemente

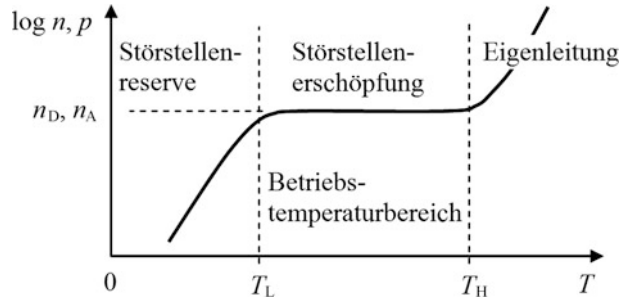
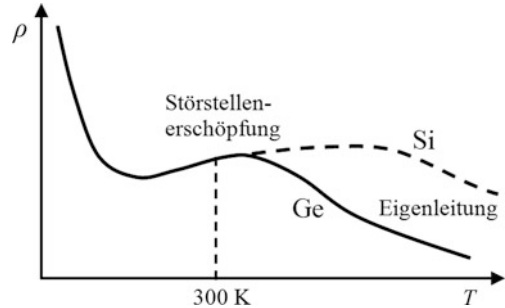


Abb. 2.22 Spezifischer Widerstand in Abhängigkeit der Temperatur



Wird die Temperatur weiter gesteigert, so macht sich zunehmend die Eigenleitung bemerkbar. Hier kommt es wieder zu einem exponentiellen Anstieg der Zahl der Ladungsträger. Der spezifische Widerstand nähert sich bei sehr hohen Temperaturen dem der Eigenleitung, da die thermische Bewegung mehr Elektronen und Defektelektronen freisetzt als die Donatoren zur Verfügung stellen. Es ist dann $n \approx n_i$. Dieser Bereich heißt *Eigenleitungsbereich*.

Zusammenfassung der Temperaturbereiche (die Übergänge sind dotierungsabhängig):

- Störstellenreserve bei tiefen Temperaturen,
- Störstellenerschöpfung bei mittleren Temperaturen (Raumtemperatur),
- Eigenleitung bei hohen Temperaturen.

Wird die Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstandes betrachtet (Abb. 2.22), so muss die Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit mit berücksichtigt werden. Diese hat aber nur im Bereich der Störstellenerschöpfung einen wesentlichen Einfluss, da hier die Ladungsträgerzahl nahezu temperaturunabhängig ist. Wegen der Abnahme der Beweglichkeit mit der Temperatur steigt in diesem Bereich der spezifische Widerstand in der Regel wieder leicht an.

Bei Si-Halbleitern tritt die Eigenleitung wegen des höheren Bandabstandes erst bei wesentlich höheren Temperaturen auf. Der Erschöpfungsbereich ist daher deutlich ausgeprägter. Dotierte Si-Halbleiter sind bis zu Temperaturen von etwa 170 °C einsetzbar, dotierte Ge-Halbleiter gehen dagegen bereits bei etwa 70 °C in die Eigenleitung über.

2.6.5 Auswirkung der Temperatur auf Halbleiterbauelemente

Das Wirkungsprinzip der Halbleiterbauelemente beruht auf der lokalen Modifikation der Halbleitereigenschaften durch Donatoren bzw. Akzeptoren. Durch die damit verknüpfte inhomogene Verteilung von Elektronen und Löchern werden in dem Halbleiter Potenzialbarrieren³ erzeugt, deren Höhe durch äußere Potenziale verändert und somit Ströme durch den Halbleiter gesteuert werden können. Diese Steuerfunktion geht verloren, wenn die Elektronendichte innerhalb des Halbleiters nicht mehr von der lokalen Donator- oder Akzeptordichte bestimmt wird, sondern von der von den Fremdatomen unabhängigen intrinsischen Ladungsträgerdichte. Oberhalb einer bestimmten, von dem Halbleitermaterial und der Substratdotierung abhängigen Betriebstemperatur sind Halbleiterbauelemente daher nicht mehr funktionstüchtig. Diese charakteristische Temperatur ist die *intrinsische Temperatur* T_i , bei der die intrinsische Ladungsträgerdichte gleich der Donatordichte ist.

³ Eine Potenzialbarriere (Potenzialdifferenz, Potenzienschwelle, Energiebarriere) entspricht einem elektrischen Feld, welches durch Ladungsträger gebildet wird, die sich (räumlich getrennt) gegenüber stehen, aber durch andere Ladungen, z. B. ortsfeste ionisierte Atomrümpfe mit gleicher Polarität, an einem aufeinander zu Wandern und einer Rekombination gehindert werden.