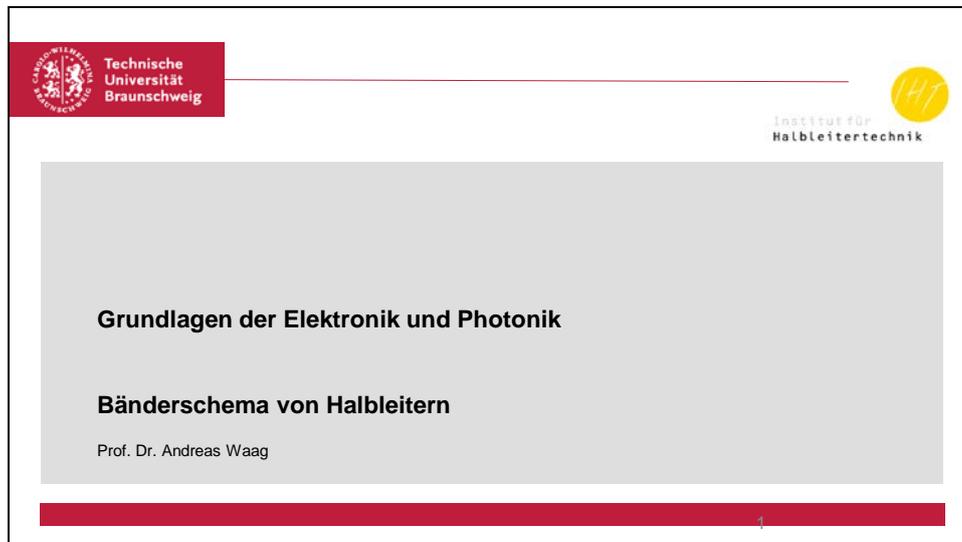


Grundlagen der Elektronik und Photonik

Bänderschema Level 2



The slide features a header with two logos: the Technische Universität Braunschweig logo on the left and the Institut für Halbleitertechnik logo on the right. The main content area is a light gray rectangle containing the title and author information. A red bar at the bottom contains the page number 1.

Technische Universität Braunschweig

Institut für Halbleitertechnik

Grundlagen der Elektronik und Photonik

Bänderschema von Halbleitern

Prof. Dr. Andreas Waag

1

Bänderschema von Halbleiter

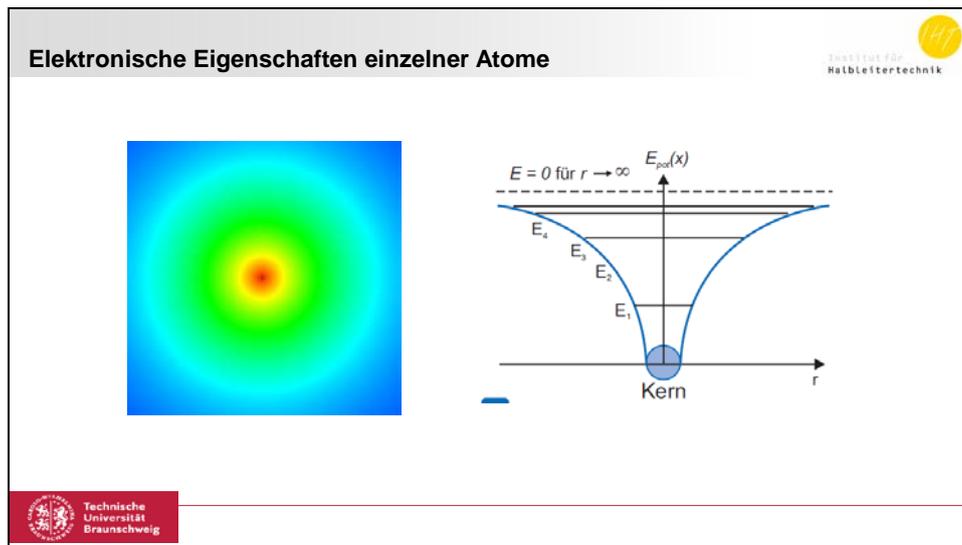
Bänderschema von Halbleitern

Die Inhalte dieses Clips entsprechen Level 2

- Level 1 Basiswissen Phase 1 (teilweise noch Schulwissen)
- **Level 2 Basiswissen Phase 2 (Eingangskurse Bachelor)**
- Level 3 Ziel-Niveau „Grundlagen der Elektronik und Photonik“
- Level 4 vertiefendes Wissen (Eingangskurse Master)
- Level 5 Expertenwissen (Fortgeschrittenen-Kurse Master)
- Level 6+ Wissensgrenze

Technische Universität Braunschweig

Dieser Clip ist ein Clip der Ebene 2 – Basiswissen



Die elektronischen Eigenschaften von Halbleiter-Materialien ergeben sich aus den Eigenschaften der Atome, die den Halbleiter aufbauen. Betrachten wir deshalb zunächst die Eigenschaften einzelner Atome:

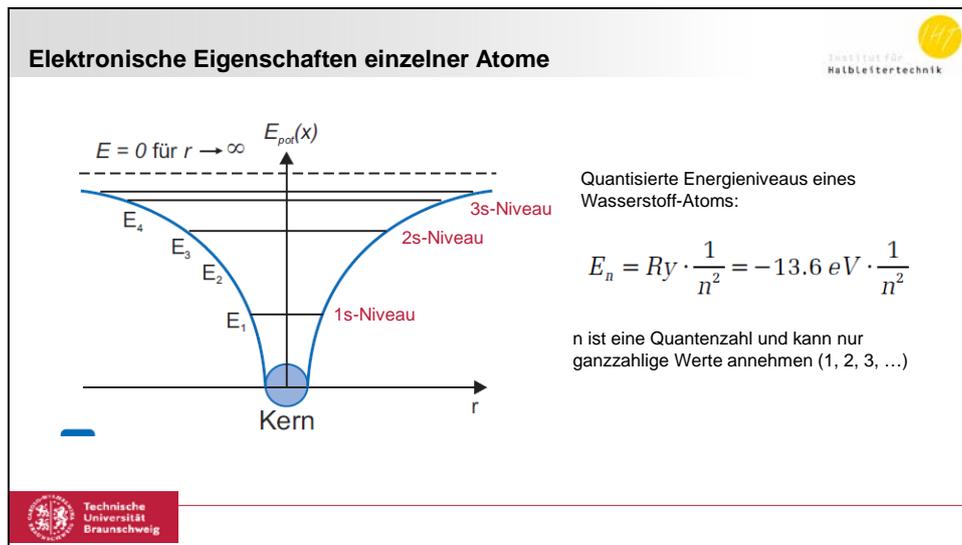
Bei einzelnen Atomen sind die Elektronen fest an den eigenen Atomkern gebunden. Die Elektronen besetzen bestimmte Energieniveaus im Atom. Diese Energieniveaus sind quantisiert. Sie ergeben sich aus der Lösung der quantenmechanischen Schrödinger-Gleichung.

Das einfachste Beispiel ist das eines Wasserstoff-Atoms. Dort befindet sich ein einziges Elektron, gebunden an den Kern, der aus einem einzigen Proton besteht. Dies hier ist die Darstellung eines Wasserstoff-Atoms. Wir erkennen das Proton im Kern, und die Verteilung der Elektronen-Wellenfunktion kugelsymmetrisch um den Kern herum.

Die Verteilung kann mathematisch durch eine Kugelwellenfunktion beschrieben werden. Darauf wird hier aber nicht genauer eingegangen.

Bitte beachten: das Elektron ist kein punktförmiges Teilchen, sondern wird durch eine im Raum verteilte Wellenfunktion beschrieben.

Das Potential, das das Elektron an das Proton bindet, ist das Coulomb-Potential. Das Coulomb-Potential ist ein $1/r$ Potential.

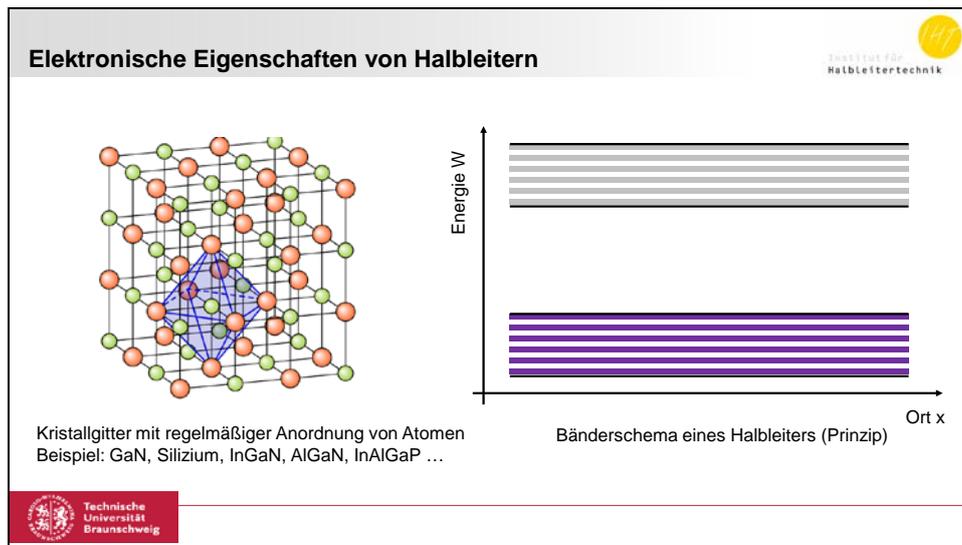


Löst man die Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoff Atom, so ergeben sich quantisierte Energieniveaus. Diese können durch eine einfache Gleichung beschrieben werden: (Gleichung).

n ist die Quantenzahl des Wasserstoff-Problems und kann ganzzahlige Werte von 1 bis unendlich annehmen. Für n=unendlich ist die Energie = Null, d.h. das Elektron ist überhaupt nicht mehr an den Kern gebunden.

Die Energiedifferenz zwischen n=1, dem Grundniveau, und n=unendlich nennt man Ionisierungsenergie. Die Ionisierungsenergie ist mindestens notwendig, wenn man ein Elektron aus dem Wasserstoff-Atom herauslösen will. Für das Wasserstoff-Atom beträgt die Ionisierungsenergie 13,6 eV. Dies ist ein historisch berühmter Wert, weil daran erstmalig die Richtigkeit der quantenmechanischen Beschreibung getestet werden konnte.

In unserer Gleichung ist die Energie negativ: der Nullwert entspricht einem Elektron, das nicht mehr an das Proton gebunden ist. Dementsprechend sind die Energien von gebundenen Zuständen niedriger, also negativ. Dies ist eine übliche Bezeichnungsweise.



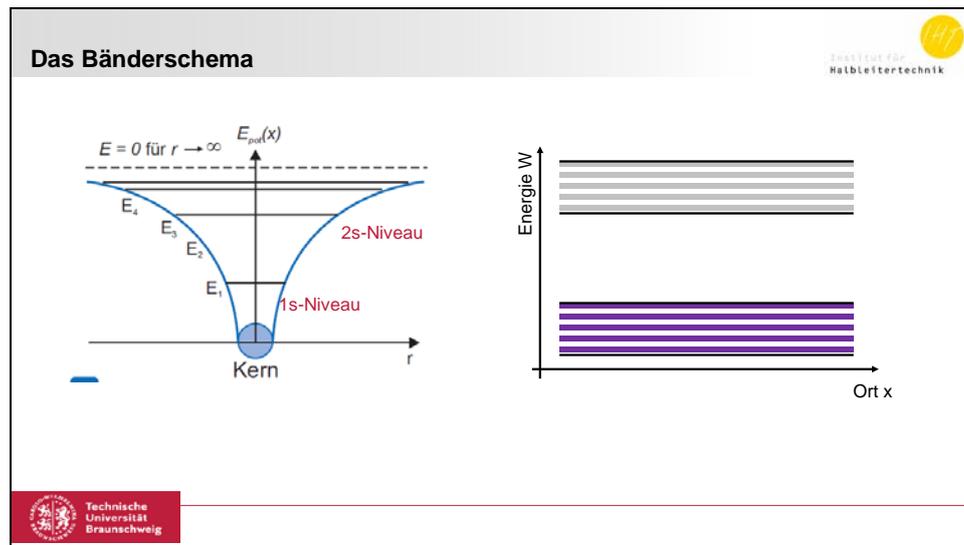
Halbleiter-Materialien bestehen aus einer regelmäßigen Anordnung von Atomen. Die regelmäßige Anordnung wird „kristallin“ genannt. Es liegt ein Halbleiter-Kristall vor. Bei einer regelmäßigen Anordnung von Atomen, also im Kristall, sind die Atome nicht mehr isoliert voneinander zu sehen, sondern sie überlappen. Genauer: die Elektronen-Wellenfunktionen benachbarter Atome überlappen und „spüren“ sich gegenseitig. Die Folge ist, dass die Wellenfunktion jedes Elektrons im Raum delokalisiert wird.

Delokalisierte Elektronen sind „verschmierte Elektronen“. Sie sind nicht mehr an ein Atom gebunden, sondern sind über einen größeren Bereich ausgedehnt (delokalisiert).

Tatsächlich geht die theoretische Beschreibung davon aus, dass die Elektronen-Wellenfunktion im gesamten Halbleiterkristall ausgedehnt ist. Das Elektron befindet sich also überall im Kristall gleichzeitig.

Dies hat auch etwas mit der Unschärferelation von Heisenberg zu tun. Darauf wird hier aber nicht genauer eingegangen.

Die zugehörigen Energieniveaus jedenfalls können deshalb als horizontale Linie in einem Energie-Ort-Diagramm eingezeichnet werden: die Summe aller horizontalen Linien ergibt das Bänderschema.



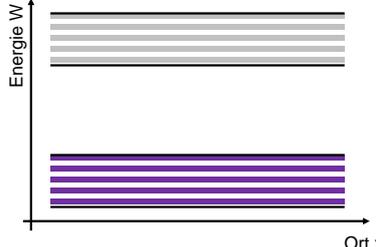
Hier ist das Bänderschema noch einmal vergrößert. Nach oben ist die Energie W aufgetragen, nach rechts der Ort x . Der Einfachheit halber beschränken wir uns hier auf nur eine Dimension, die x -Richtung. Tatsächlich müssten wir natürlich auch y - und z -Richtung berücksichtigen, was aber keine weiteren neuen Erkenntnisse bringen würde. Es gibt eine weitere Besonderheit im Vergleich zu den Energieniveaus einzelner Atome: Dort waren die Energieniveaus scharf quantisiert. Überlappen jedoch die Elektronen-Wellenfunktionen vieler Atome, wie das im Halbleiter-Kristall der Fall ist, dann verändern die vorher noch gleichen Energieniveaus in den Atomen ihre Position auf der Energieskala. Der Grund für diese Veränderung ist die Austauschwechselwirkung, auf die hier aber nicht genauer eingegangen wird. Die eigentlich identischen atomaren Energieniveaus überlappen und bilden eine Ansammlung von leicht unterschiedlichen Energieniveaus, die in „Bändern“ zusammengefasst werden können. Es gibt besetzte Bänder, bei denen die Energieniveaus mit Elektronen besetzt sind, und unbesetzte Bänder, bei denen sich keine Elektronen in den Energieniveaus befinden. Die Lücke zwischen den beiden Bändern nennt man Bandlücke (Energy Gap)

Klassische Analogie: das Auffüllen eines Wassereimers



Institut für
Halbleitertechnik







Technische
Universität
Braunschweig

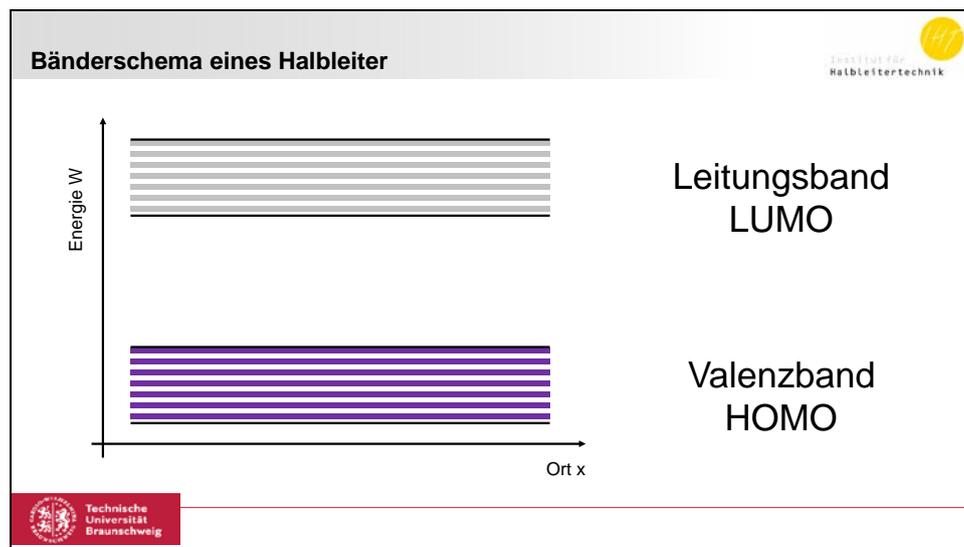
Wie werden die Energieniveaus in Halbleitern nun mit Elektronen befüllt? Welche Bänder sind besetzt, und welche unbesetzt? Hier hilft eine einfache Analogie zu einem klassischen Vorgang, den jeder gut kennt: Das Auffüllen eines Wassereimers. Füllen wir Wasser in einen Eimer, dann füllen wir die möglichen Energiezustände im Eimer von unten nach oben mit Wasser (also Wassertropfen) auf. Wenn schon ein Wassertropfen da ist, dann passt da kein zweiter hin. Je mehr Wassertropfen eingefüllt werden, desto höher steigt der Füllstand.

Dies ist sehr ähnlich zur Situation von Elektronen in einem Halbleiter: die Energieniveaus werden von unten nach oben mit Elektronen befüllt. Elektronen werden nämlich – wie Wassertropfen auch – am liebsten in den energetisch günstigsten Zustand (ganz unten) gehen. Ist dieser besetzt, dann müssen sie eben in den zweitgünstigsten usw.

Die Füllhöhe im Wassereimer entspricht dem höchsten noch besetzten Energieniveau. Diese Füllhöhe ist ein wichtiger Parameter, z.B. wenn es darum geht, ob zwischen zwei Behältern Wasser fließt. Gibt es keine Differenz in der Füllhöhe wird es auch keinen Wasserstrom zwischen zwei verbundenen Behältern geben.

Im Fall der Elektronen in Halbleitern nennt man diese höchste Energie, also quasi die Füllhöhe für Elektronen, „Fermi-Energie“. Die Fermi-Energie wird auf diesem Niveau aber nicht genauer besprochen. Sie spielt bei der Beschreibung von Elektronenstrom eine große Rolle. Schon jetzt können wir – ganz ohne Rechnung – intuitiv feststellen: ohne Differenz in den Fermi-Energien wird es keinen Elektronenstrom geben.

Betrachtet man diesen Zusammenhang quantitativ, dann wird man feststellen: der Elektronenstrom ist proportional zum Gradienten der Fermi-Energie. Dies bedarf aber einer detaillierteren Betrachtung.



Die Bänder werden wie besprochen von unten nach oben mit Elektronen befüllt. Je nachdem, wie viele Elektronen insgesamt zur Verfügung stehen, sind die Bänder „unten“ ganz voll, die Bänder „oben“ ganz leer.

Gibt es ein Band, das nur teilweise mit Elektronen gefüllt ist, so hat das Material metallische Eigenschaften. Es gibt immer bewegliche Elektronen.

Sind alle Bänder entweder ganz voll oder ganz leer, so hat das Material halbleitende Eigenschaften. Das oberste besetzte Band nennt man Valenzband, das unterste leere Band nennt man Leitungsband. Eine in der Chemie eher geläufige Bezeichnung ist LUMO für das „Lowest unoccupied molecular orbital“ und HOMO für das „highest occupied molecular orbital“.

Ein Kristall kann dabei als ein riesiges Molekül angesehen werden.

Noch ein Hinweis: die Energie ist die Energie für Elektronen. Für Elektronen gilt „oben ist die höhere Energie“ und „unten ist die niedrigere Energie“.