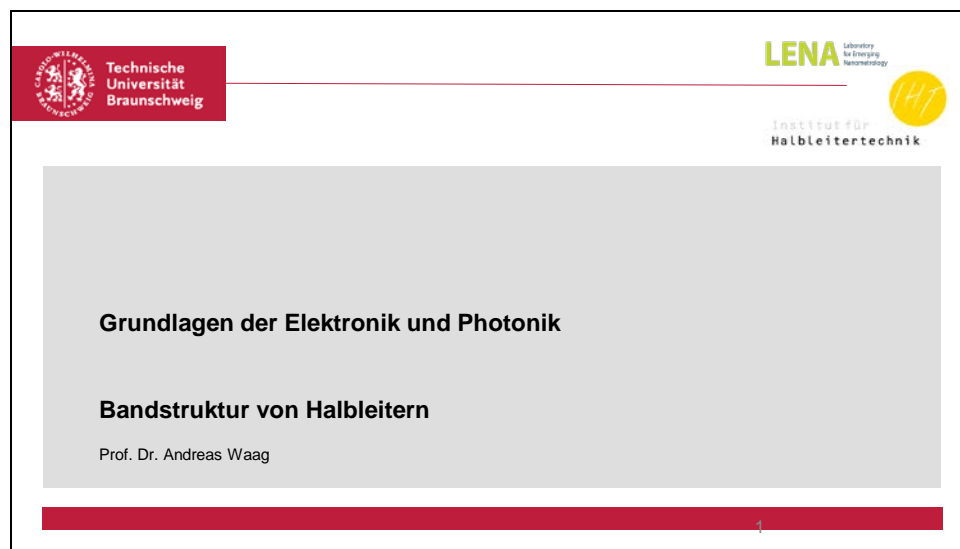


Folie 1



The slide features a header with logos and text. On the left is the logo of Technische Universität Braunschweig. On the right is the LENA logo (Laboratory for Energy Nanotechnology) and the logo of the Institut für Halbleitertechnik (PH). The main content area is a grey rectangle containing the title and author information.

Technische Universität Braunschweig

LENA Laboratory for Energy Nanotechnology

Institut für Halbleitertechnik

Grundlagen der Elektronik und Photonik

Bandstruktur von Halbleitern

Prof. Dr. Andreas Waag

1

Online Kurs zu Grundlagen der Elektronik und Photonik – Die Bandstruktur von Halbleitern.

Bänderschema von Halbleitern

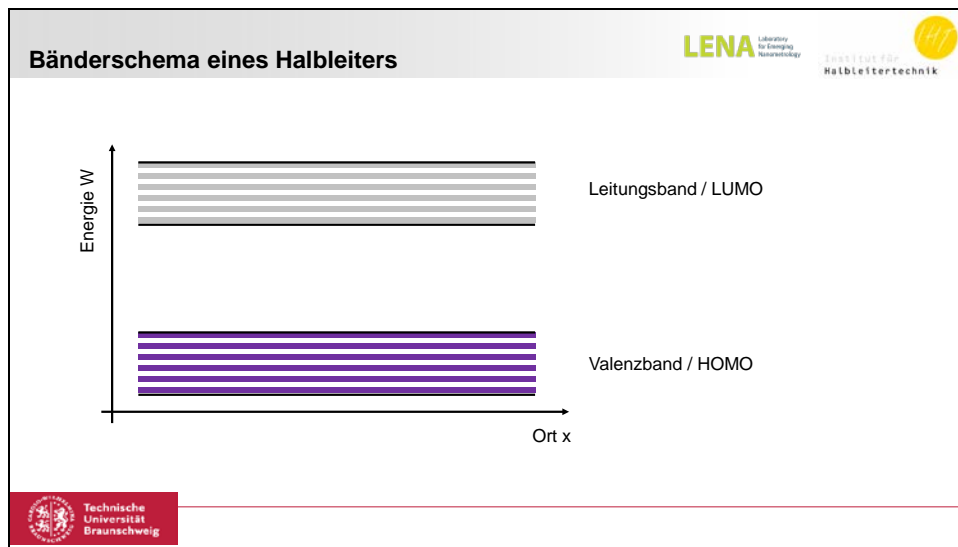
Die Inhalte dieses Clips entsprechen Level 3

- 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

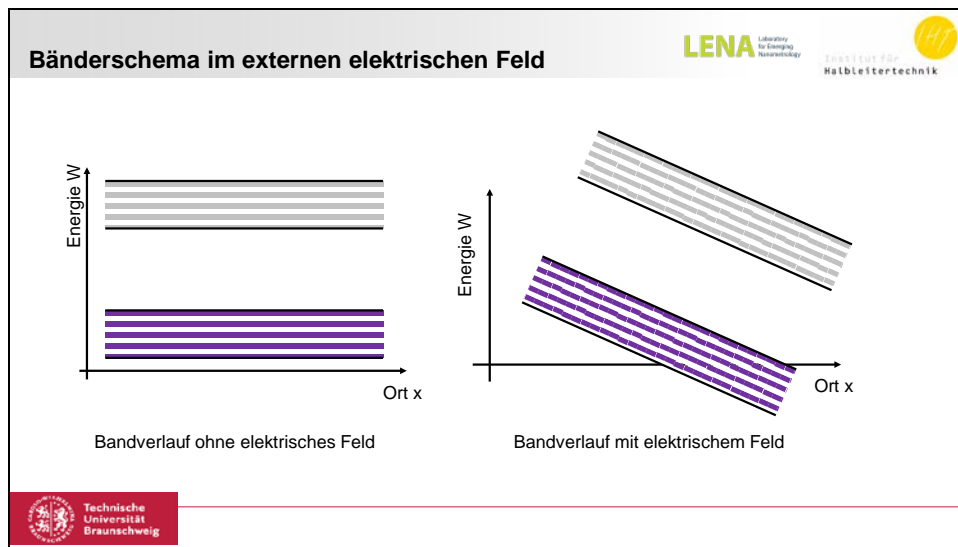
LENA Laboratory for Energy Nanotechnology
Institut für Halbleitertechnik

Technische Universität Braunschweig

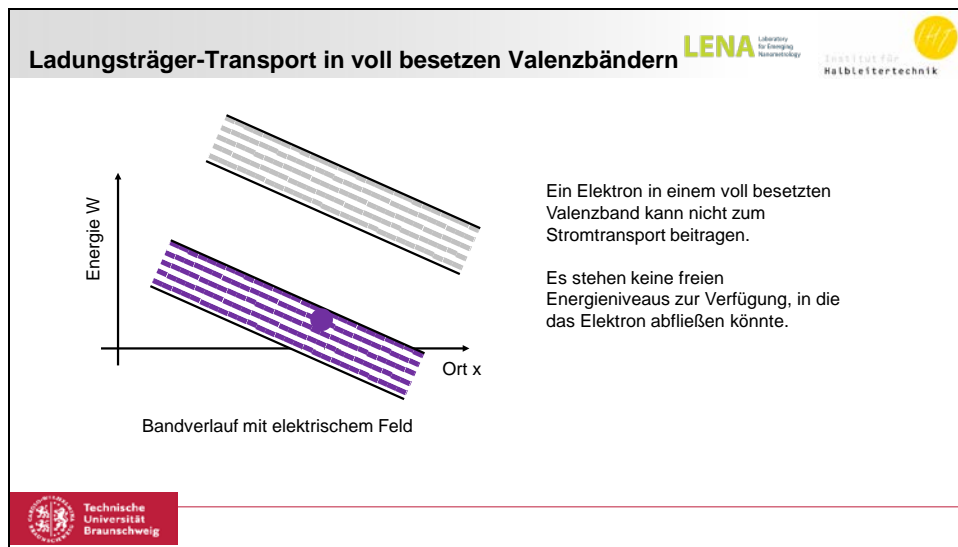
Dieser Clip behandelt die Bandstruktur von Halbleitern auf Level 3 – dem Zielniveau dieser Vorlesung.



Im Bänderschema, das hier als bekannt vorausgesetzt wird, werden alle verfügbaren Energieniveaus für Elektronen in einem Halbleiter aufgetragen. Im Bänderschema gibt die y-Achse die Energie an, auf der x-Achse ist der Ort aufgetragen. Um Stromtransport in Halbleiterbauelementen wie z.B. in Transistoren oder LEDs beschreiben zu können, muss man erst einmal verstehen, wie sich Elektronen in diesen Energiebändern überhaupt bewegen können. Nur wenn Elektronen einem von außen angelegten elektrischen Feld folgen können entsteht ein Strom. Nur: wie gut können Elektronen einem elektrischen Feld folgen? Und was unterscheidet einen Halbleiter von einem Metall und einem Isolator?



Eine extern angelegte Spannung erzeugt eine Potentialdifferenz entlang der x-Achse, also entlang der Ortskoordinate. Dies entspricht einem Gradienten der Energie. Elektronen würden nun – zumindest prinzipiell – gerne diesem Energiegradienten folgen. Wie Wassertropfen auch würden Elektronen von einem energetisch höheren Niveau in ein energetisch niedrigeres Niveau abfließen. Anschaulich würde sich deshalb ein Elektronenstrom von links nach rechts ergeben. Hier stößt der Vergleich mit einem klassischen System „Wasser“ aber an seine Grenzen. Wir müssen die Situation genauer betrachten.





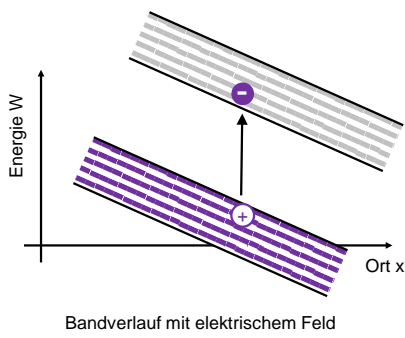
Ein Elektron würde gerne in Richtung niedrigerer Energie – in unserem Beispiel nach rechts - abfließen. Wir erinnern uns aber hier an die Besetzung der Bänder in Halbleitern. Ein Halbleiter zeichnet sich dadurch aus, dass es ein letztes voll besetztes Band gibt (das Valenzband, oder das HOMO) und ein völlig leeres Band – das Leitungsband oder das LUMO). Elektronen für den Ladungstransport stehen also nur im Valenzband (oder allen darunter liegenden Bändern, die hier allerdings nicht gezeigt sind) zur Verfügung.

Ein Elektron in einem voll besetzten Valenzband kann aber nicht zum Stromtransport beitragen. Der Grund hierfür liegt darin, dass ein Elektron, das sich nach rechts bewegen möchte, auf ein freies Energieniveau weiter rechts angewiesen ist. Gibt es weiter rechts kein freies Energieniveau, dann kann das Elektron sich auch nicht da hin bewegen.

Freie Energieniveaus sind in einem voll besetzten Valenzband jedoch Mangelware. Ohne freie Energieniveaus kann es keinen Stromfluss geben, obwohl sehr viele Elektronen im Valenzband vorhanden sind, und obwohl eine äußere Spannung angelegt ist, die zu einem Gradienten der Energie führt. Ein Halbleiter in dieser Situation kann keinen Strom tragen, er ist isoliert elektrisch.

Löcher und Elektronen




Bandverlauf mit elektrischem Feld

Die Anregung eines einzigen Elektrons in Leitungsband erzeugt zwei Ladungsträger.

Das Elektron im Leitungsband ist negativ geladen.

Das Loch im Valenzband ist positiv geladen.

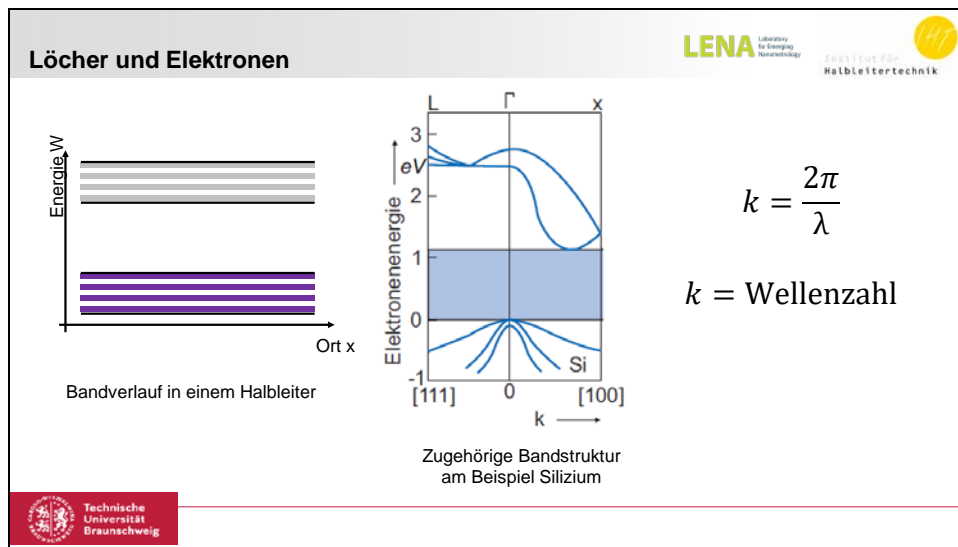


Technische
Universität
Braunschweig

Für den Stromtransport müssen erst frei bewegliche Ladungsträger zur Verfügung stehen, die es aber nur geben kann, wenn auch freie Energieniveaus vorhanden sind. Elektronen im fast vollständig unbesetzten Leitungsband hätten viele freie Energieniveaus zur Verfügung, deshalb können sich Elektronen im Leitungsband auch bewegen. Daher auch der Name „Leitungsband“.

Auch in einem undotierten Halbleiter entstehen freie Elektronen, und zwar durch thermische Anregung. Hierzu ist eine thermische Energie notwendig, die mindestens der Bandlücke entspricht.

Ein Elektron, dass vom Valenzband in das Leitungsband angeregt wird, hinterlässt ein positiv geladenes Loch im Valenzband. Sowohl das Elektron als auch das Loch können nun dem elektrischen Feld folgen und zum Strom beitragen. Dabei bewegt sich das Elektron in Richtung niedrigerer Energie, also in unserem Bild nach rechts. Das Loch bewegt sich ebenfalls in Richtung niedrigerer Energie, dies bedeutet für Löcher allerdings „nach oben“ in der Energieskala der Elektronen: Elektronen fallen nach unten, und Löcher „blubbern“ quasi als Luftbladen „nach oben“. Das Loch bewegt sich demnach in unserem Beispiel links.



In beiden Fällen folgt die Bewegung von Elektronen und Löchern durch das Kristallgitter quantenmechanischen Regeln, die korrekte physikalische Beschreibung ist sehr schwierig. Die Elektronen (oder Loch-) Wellenfunktion bewegt sich durch das periodische Potential, das aus Atomkernen und allen anderen Elektronen gebildet wird. Die Bewegung durch ein periodische Potential kann quantenmechanisch berechnet werden, was allerdings Fortgeschrittenen-Kursen in Quantenmechanik vorbehalten ist.

Die Bandstruktur ist ebenfalls das Ergebnis einer quantenmechanischen Rechnung und ist die Summe aller Energieniveaus, die einem Elektron im Halbleiter zu r Verfügung stehen. Anders als beim Bänderschema, wo auf der x-Achse der Ort aufgetragen ist, werden in der Bandstruktur die Energieniveaus gegen einen Parameter k aufgetragen. k ist der Wellenvektor. k ist indirekt verbunden mit der Geschwindigkeit eines Teilchens. Dies bedarf einer weiteren Erläuterung.

Für Teilchen könnte man sich die Bandstruktur als Zusammenhang zwischen Geschwindigkeit und Energie des Elektrons bzw. Lochs vorstellen. Elektronen und Löcher werden allerdings durch ihre Wellenfunktion beschrieben, wo der Begriff Geschwindigkeit problematisch ist. In der Graphik rechts steht deshalb auf der x-Achse nicht die Geschwindigkeit, sondern die Wellenzahl k . $k = 2\pi / \lambda$. λ ist die Wellenlänge. Wie hängen die Wellenzahl k und die Geschwindigkeit eines Teilchens zusammen? Gibt es überhaupt einen Zusammenhang? Das Zusammenbringen von Wellen- und Teilchenvorstellung ist nicht ganz einfach. Dies muss nun folgenden genauer betrachtet werden. Auch ohne stringente Berechnung der Bandstruktur kann und muss man doch deren Bedeutung verstehen.

Zusammenhang zwischen Teilchen- und Welleneigenschaften
Impuls und Wellenlänge bei freien Teilchen

LENA Laboratory for Energy Nanotechnology

INSTITUT FÜR
Halbleitertechnik

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

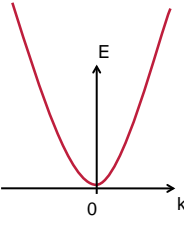
de Broglie Beziehung


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

k = Wellenzahl
 λ = Wellenlänge

$$W(p) = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m} \frac{1}{\lambda^2}$$

$$W(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$







Technische
Universität
Braunschweig

Zur Veranschaulichung betrachtet man zunächst den Zusammenhang zwischen dem Impuls p und der Wellenzahl k . Die zugehörige Gleichung hat der Physiker de Broglie aufgestellt. Erstmals wurden mit dieser Gleichung eine Teilcheneigenschaft (der Impuls) mit einer Welleneigenschaft (der Wellenlänge) kombiniert. Die damals noch theoretische Forderung von de Broglie war zunächst auch unter den Gründervätern der Quantenmechanik höchst umstritten. Kurze Zeit später konnten Interferenzexperimente allerdings die Wellennatur von Elektronen nachweisen und die de Broglie-Beziehung experimentell bestätigen. Seitdem ist klar: jedem Teilchen mit einem Impuls p kann auch eine Wellenlänge zugeordnet werden. Heute sind Interferenzexperimente sogar mit Atomen und Molekülen realisierbar.

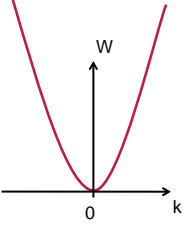
Der Zusammenhang zwischen Energie und Impuls ist aus der klassischen Mechanik bekannt: (Gleichung siehe Folie). Setzt man für den Impuls nun die de Broglie Beziehung (Gleichung) ein, und berücksichtigt man gleichzeitig, dass (Gleichung 3), so erhält man einen Zusammenhang zwischen Energie W und Wellenzahl k (Gleichung 4). Dieser „ W von k “ Zusammenhang könnte man als die Bandstruktur eines freien Teilchens bezeichnen. Wir betrachten diesen Zusammenhang nun genauer.

Effektive Masse bei parabelförmiger E(k)-Funktion

$$W(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Die Energie eines freien Teilchens hängt quadratisch von der Wellenzahl k ab.




$$\frac{\partial E}{\partial \hbar} = \frac{\hbar}{m} \cdot k$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \hbar^2} = \frac{\hbar}{m}$$

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

Die zweite Ableitung der E(k)-Funktion ist umgekehrt proportional zur Masse.



 k = Wellenzahl
 λ = Wellenlänge

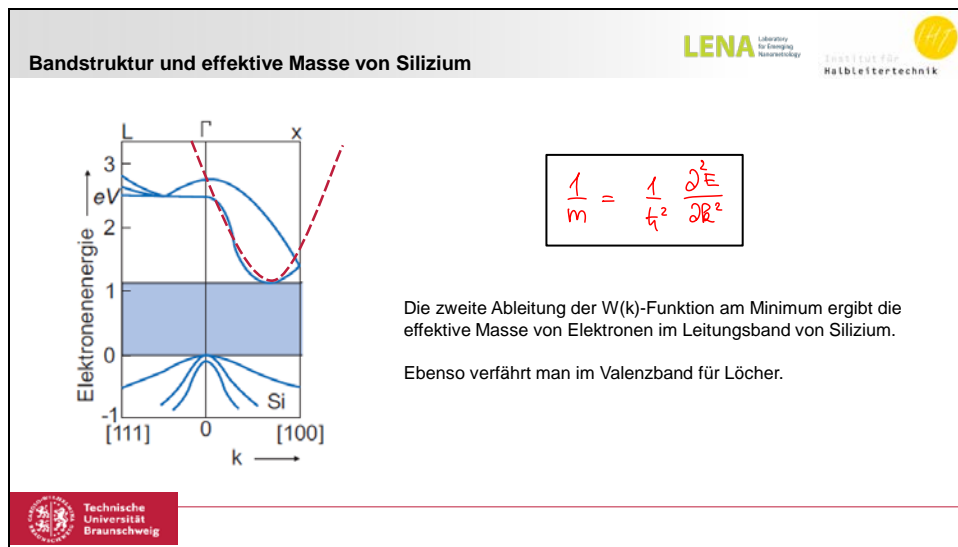
Ausgangspunkt ist der parabelförmige Verlauf der E(k) Funktion. (übrigens wird hier öfter E und W gleichbedeutend verwendet). Differenziert man die parabelförmige E(k) Funktion zweimal nach k, so ergibt sich nach einfacher Umformung ein Zusammenhang zwischen der Masse des Teilchens m und der zweiten Ableitung von E(k) nach k: (Gleichung)

Dies ist wichtiger Zusammenhang: Die Masse eines Teilchens, die sich aus der W(k) Funktion ergibt, bestimmt letztlich, wie leicht das Teilchen beschleunigt werden kann, d.h. wie gut es sich bewegt. Dieses Ergebnis wird nun verallgemeinert.

Ist die W(k) Funktion z.B. aus einer quantenmechanischen Rechnung bekannt, so kann über die zweite Ableitung der Parameter „Masse“ des Ladungsträgers bestimmt werden. Die so berechnete Masse beschreibt die Krümmung des parabolischen Verlaufs der E(k) Funktion. Große Massen ergeben eine kleine Krümmung, kleine Massen ergeben eine große Krümmung.

Massen, die über die Krümmung der W(k) Funktion bestimmt werden, nennt man „effektive Massen“. Sie beschreiben, wie leicht oder schwer ein Teilchen bewegt werden kann, auch wenn es kein freies Teilchen ist, sondern sich z.B. durch ein periodisches Potential eines Kristalls bewegt.

Ein wichtiger Hinweis: die effektive Masse beschreibt, wie gut oder schlecht sich ein Ladungsträger durch ein periodisches Potential bewegt. Die effektive Masse hat nichts mit der Ruhemasse des Teilchens zu tun. Für Teilchen, die sich im freien Raum bewegen, bei denen also die Bewegung nicht durch zusätzliche Potentiale beeinflusst wird, ist die Ruhemasse auch gleich der effektiven Masse.



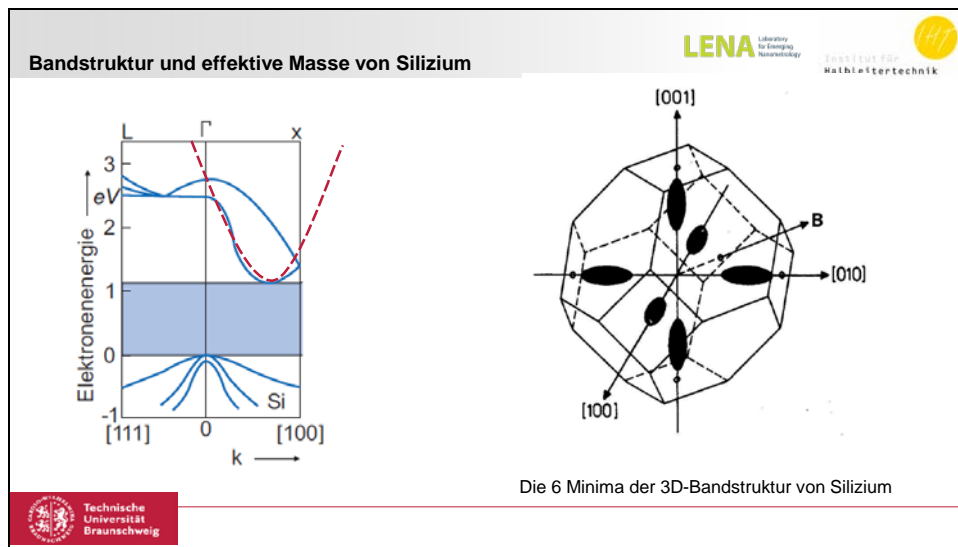
Betrachten wir die aus einer quantenmechanischen Rechnung hervorgegangene Bandstruktur von Silizium genauer. Gezeigt ist das Leitungsband oben und das Valenzband unten, für 2 unterschiedliche k -Richtungen im Kristall. Silizium besitzt ein Zinkblende Gitter, also ein kubisch flächenzentriertes Gitter. Die Richtung von k entlang $[100]$ ist die Richtung entlang einer Würfelkante, die Richtung von k entlang $[111]$ die Richtung entlang einer Raumdiagonale des Würfels. Da die Periodizität der Atome in diesen beiden Richtungen unterschiedlich ist, ist es auch nicht verwunderlich, dass die Ergebnisse für $W(k)$ unterschiedlich sind.

Das Minimum im Leitungsband befindet sich an einer Stelle k ungleich Null.

Elektronen im Leitungsband werden sich fast immer an diesem Punkt aufhalten, da er energetisch am tiefsten liegt. An diesem Punkt kann die $W(k)$ Funktion durch eine Parabel angenähert werden. Es lässt sich durch die zweifache Ableitung daraus dann eine effektive Masse bestimmen. Dies ist die effektive Masse von Elektronen im Leitungsband von Silizium.

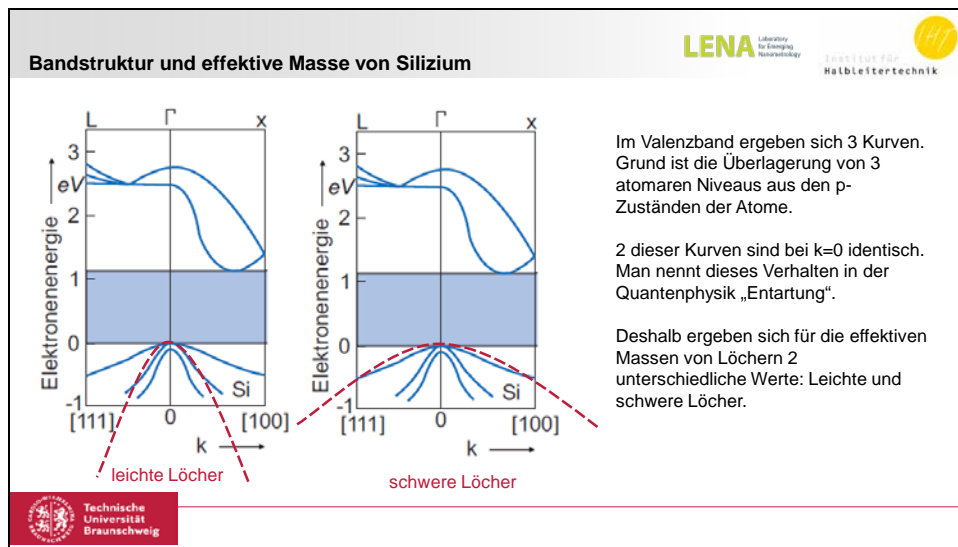
Im Valenzband verfährt man ebenso. Es ergeben sich die effektiven Massen von Löchern im Valenzband.

In einem kubischen System sind die 3 Richtungen entlang der 3 Würfelkanten alle gleichwertig. Deshalb gibt es 6 Minima in der 3-dimensionalen Bandstruktur von Silizium: bei $+k$ und $-k$ in den 3 Richtungen entlang der Würfelkanten.



Diese 6 Minima in der 3-dimensionalen Bandstruktur von Silizium können in einer 3D Darstellung gezeigt werden, wie hier in der Folie. Der energetisch tiefste Zustand für Elektronen – also die Unterkante des Leitungsbandes – befindet sich bei einem Wert k ungleich Null. Dies ist eigentlich merkwürdig, denn für ein freies Teilchen hatten wir den Wellenvektor k mit der Geschwindigkeit v zusammengebracht.

Hier müssen wir in der Interpretation sehr vorsichtig sein. Ein Zustand bei einem bestimmten k ungleich Null, z.B. in einem der Minima, bedeutet gerade nicht, dass sich das Elektron auch bewegt. In der Wellenbeschreibung eines Elektrons bewegt sich ein Elektron, wenn seine Gruppengeschwindigkeit ungleich Null ist. Die Gruppengeschwindigkeit eines Wellenpakets ist aber die zweite Ableitung der Energie nach k . Und an einem parabolischen Minimum ist diese Gruppengeschwindigkeit deshalb Null – das Elektron bewegt sich nicht. Dies ist eines der vielen Beispiele, dass man beim Übergang von der Teilchenbeschreibung zur Wellenbeschreibung sehr vorsichtig sein muss.

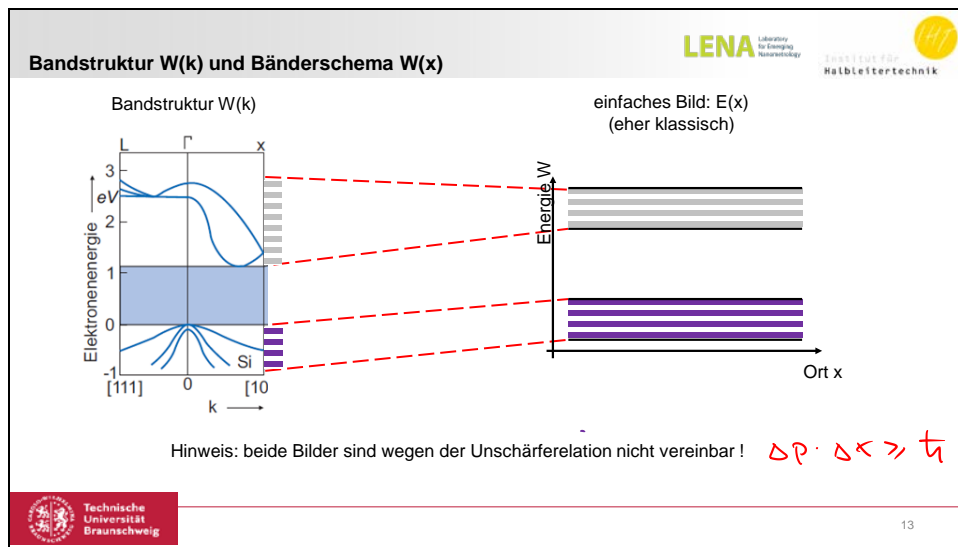


Noch ein etwas genauerer Blick auf das Valenzband: Im Valenzband ergeben sich 3 Kurven. Grund ist die Überlagerung von 3 atomaren Niveaus. Diese resultieren aus den p-Zuständen der Atome, die den Kristall aufbauen.

p-Zustände sind 3-fach entartet: Ein p-Zustand gehört zu einer Drehimpuls-Quantenzahl $l=1$, deshalb fächert dies immer auf in 3 Zustände mit einer magnetischen Quantenzahl $m = -1, 0, \text{ und } +1$.

2 dieser Kurven sind bei $k=0$ identisch. Man nennt dieses Verhalten in der Quantenphysik „Entartung“.

Deshalb ergeben sich für die effektiven Massen von Löchern 2 unterschiedliche Werte: beim höheren Wert für die Loch-Masse spricht man von „schweren Löchern“, der niedrigere Wert ergibt die Loch-Masse für „leichte Löcher“.



Das Konzept der effektiven Masse von Elektronen und Löchern in Halbleitern ermöglicht es, statt der komplexen Bandstruktur „quasifreie“ Elektronen und Löcher im Bänderschema zu betrachten, die sich so bewegen, als ob diese die effektive Masse m^* hätten. Dies stellt eine erhebliche Erleichterung bei der Beschreibung von elektronischem Transport durch Halbleiter (also Stromfluss) dar. Obwohl wir eigentlich ein quantenmechanisches Bild der Bewegung eines Wellenpakets bemühen müssten, können wir dies ersetzen durch das einfache Teilchenbild eines Elektron oder Lochs mit der Masse m^*

Hier sind noch einmal die beiden Bilder gegenüber gestellt: Die Bandstruktur $W(k)$ links, und das Bänderschema $W(x)$ rechts.

Beim Vergleich dieser beiden Sichtweisen ist Vorsicht geboten: Die Bandstruktur $W(k)$ entspringt einer quantenmechanischen Rechnung. Grundlage ist die Wellenvorstellung von Elektronen und Löchern. Das Bänderschema rechts entspringt einer eher klassischen Vorstellung von Elektronen als Teilchen an einem bestimmten Ort x .

Beide Bilder bzw. Vorstellung sind auf Grund der Heisenbergschen Unschärferelation unvereinbar: Ort x und Impuls p bzw. Wellenzahl k können nicht beide gleichzeitig scharf definiert sein.

Ist ein Elektron bezüglich seiner Energie scharf definiert – anders gesagt: befindet es sich in einem Energieniveau mit einer präzise festgelegten Energie – dann ist es im Ort beliebig unscharf. Dies ist der Grund, warum solche Zustände im Ort „ausgedehnt“ (extended) sind.