

MUSTERLÖSUNG 9

In dieser Aufgabe wird eine Tabelle für den Bandabstand, die Beweglichkeit und die effektive Masse der Elemente der 4. Hauptgruppe des Periodensystems, also von C, Si, Ge, Sn gegeben. Dabei wird C in Form eines Diamants betrachtet. Die Aufgabe ist nun charakteristische Größen ~~wie folgt~~ für diese vier Elemente, die alle im Diamantgitter kristallisieren (siehe Übung 4), zu bestimmen und anhand dieser Größen einige Eigenschaften dieser Stoffe miteinander zu vergleichen. Für die Berechnungen geht man laut der Angabe von der Raumtemperatur $T=300\text{K}$ aus. Außerdem sind diese Stoffe intrinsisch, d.h. es liegt keine Dotierung vor.

→ Zunächst betrachten wir Sn. Da Sn bei $T=300\text{K}$ laut der Tabelle keinen Bandabstand hat, also $E_g=0$ gilt, hat es metallischen Charakter und ist damit bei der Raumtemperatur kein Halbleiter. Aus diesem Grund können wir die Formeln, die für Halbleiter gelten, hier nicht benutzen und rechnen die gefragte Größen für Sn nicht.
→ C, Si und Ge haben aber eine Bandlücke bei $T=300\text{K}$ und wir können deshalb die effektiven Massen der Elektronen und Löcher, die intrinsische Dichte und Leitfähigkeit berechnen.

- Effektive Masse:

• Für Kohlenstoff ist die effektive Masse der beiden Ladungsträgertypen, d.h. von Elektronen und Löchern (=Defektelektronen im Valenzband, die zur Leitfähigkeit beitragen), in der Tabelle direkt angegeben und wir brauchen deshalb diese nicht zu rechnen:

$$\underline{C}: \quad m_e^* = 0,2 m_0 = 0,2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \approx 1,82 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \quad , \quad m_h^* = 0,25 m_0 = 0,25 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \approx 2,275 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

→ Anmerkung: In der Tabelle werden alle effektive Massenangaben dimensionslos, bezogen auf die elementare Masse m_0 eines Elektrons gemacht. Deshalb soll man diese Werte mit $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ multiplizieren um auf die tatsächliche effektive Masse zu kommen.

• Si und Ge sind indirekte Halbleiter, d.h. das Maximum des Valenzbandes und das Minimum des Leitungsbandes liegen nicht übereinander, sondern bei verschiedenen k -Werten bei diesen Elementen. Solche Halbleiter besitzen ~~unterschiedliche~~ effektive Massen, die sich aus den longitudinalen (=parallelen) und transversalen (=senkrechten) effektiven Massen m_{ef}^*, m_{hf}^* und m_{et}^*, m_{ht}^* zusammensetzen (man schreibt auch $m_{e||}^*, m_{h||}^*$ für parallel und $m_{e\perp}^*, m_{h\perp}^*$ für senkrechte effektive Massen). Die Formeln um m_e^* und m_h^* aus diesen Größen zu bestimmen, stehen auch in der Angabe. Damit können wir für Si und Ge auch die effektiven Massen der Ladungsträger wie folgt berechnen:

$$\underline{Si}: \quad m_{ef}^* = 0,98 m_0, \quad m_{et}^* = 0,19 m_0, \quad m_{hf}^* = 0,16 m_0, \quad m_{ht}^* = 0,49 m_0 \quad (\text{aus Tabelle})$$

$$\boxed{m_e^* = (m_{ef}^* \cdot m_{et}^{*2})^{1/3} = (0,98 m_0 \cdot (0,19 m_0)^2)^{1/3} = (0,98 \cdot (0,19)^2 \cdot (9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg})^3)^{1/3} = 2,99 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}$$

$$\boxed{m_h^* = (m_{hf}^{*3/2} + m_{ht}^{*3/2})^{2/3} = ((0,16 m_0)^{3/2} + (0,49 m_0)^{3/2})^{2/3} = (m_0^{3/2} [(0,16)^{3/2} + (0,49)^{3/2}])^{2/3} = m_0 (0,16^{3/2} + 0,49^{3/2})^{2/3} \\ = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (0,16^{3/2} + 0,49^{3/2})^{2/3} = 4,66 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}$$

$$\underline{Ge}: \quad m_{ef}^* = 1,64 m_0, \quad m_{et}^* = 0,08 m_0, \quad m_{hf}^* = 0,04 m_0, \quad m_{ht}^* = 0,28 m_0$$

$$\boxed{m_e^* = (m_{ef}^* \cdot m_{et}^{*2})^{1/3} = (1,64 m_0 \cdot (0,08 m_0)^2)^{1/3} = (1,64 \cdot 0,08^2 \cdot m_0^3)^{1/3} = (1,64 \cdot 0,08^2)^{1/3} m_0 = (1,64 \cdot 0,08^2)^{1/3} \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 1,99 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}$$

$$\boxed{m_h^* = (m_{hf}^{*3/2} + m_{ht}^{*3/2})^{2/3} = (0,04^{3/2} \cdot m_0^{3/2} + 0,28^{3/2} \cdot m_0^{3/2})^{2/3} = (m_0^{3/2} [0,04^{3/2} + 0,28^{3/2}])^{2/3} = m_0 (0,04^{3/2} + 0,28^{3/2})^{2/3} \\ = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (0,04^{3/2} + 0,28^{3/2})^{2/3} = 2,64 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}$$

→ Anmerkungen: Wie man aus diesen Werten ablesen kann, sind effektive Massen immer niedriger als m_0 , m_e^* ist immer niedriger als m_h^* , da die Krümmung des Valenzbands in der Regel kleiner als die des Leitungsbandes ist, und für Elektronen ist $m_{e\perp}^*$ immer größer als m_{ef}^* und für Löcher andersum.

• Intrinsic carrier density: Mit der intrinsischen Dichte wird die Trägerdichte bei einem undotierten Halbleiter bei einer bestimmten Temperatur, die hier $T=300\text{K}$ ist, verstanden. Die intrinsische Elektronendichte wird mit n_i (allgemeine Elektronendichte ist n) und Löcherdichte mit p_i (allgemeine Löcherdichte ist p) bezeichnet. Diese Dichten werden allein mittels der thermischen Erregung gebildet, da es keine Dotierung vorhanden ist und können mithilfe der Elektronen- und Löcherzustandsdichten und Fermiverteilung, die die Besetzungswahrscheinlichkeit der Zustände angibt, berechnet werden. Wenn man die in vielen Fällen gültige Boltzmann-Näherung für Fermiverteilung benutzt, wird die Berechnung einfacher. Außerdem ^{herrscht} bei einem Halbleiter im thermodynamischen Gleichgewicht Ladungsneutralität und deshalb gilt bei intrinsischen Halbleitern $n_i = p_i$. Mithilfe der Neutralitätsbedingung kann man dann eine Formel für $n_i = p_i$ herleiten:

$$n = n_i = N_L^* e^{-\frac{E_L - E_F}{k_B T}}, \quad p = p_i = N_V^* e^{-\frac{E_F - E_V}{k_B T}} \Rightarrow n_i^2 = n_i p_i = p_i^2 = N_L^* N_V^* e^{-\frac{E_L - E_F + E_F - E_V}{k_B T}} = N_L^* N_V^* e^{-\frac{E_L - E_V = E_g}{k_B T}} \text{ (per Definition)}$$

$$\Rightarrow n_i = p_i = \sqrt{N_L^* N_V^*} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

Dabei bezeichnen N_L^* und N_V^* die an Bandkanten konzentrierten effektiven Zustandsdichten der Leitungs- und Valenzbänder. Diese können wie folgt berechnet werden:

$$N_L^* = 2M_L \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} = 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, \quad N_V^* = 2 \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$$

Da nicht anders gegeben, gehen wir davon aus, dass es nur ein äquivalentes Leitungsbandminimum gibt und deshalb $M=1$ gilt.

Damit lautet die Formel für $n_i = p_i$ in Abhängigkeit der in der Tabelle gegebenen Größen folgendermaßen:

~~$$n_i = p_i = \sqrt{2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \cdot 2 \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}} \cdot e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} = \left[4 \left(\frac{m_e^* m_h^* k_B^2 T^2}{4\pi^2 \hbar^4} \right)^{3/2} \right]^{1/2} \cdot e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} = 2 \cdot \left[m_e^* m_h^* \cdot \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^2 \right]^{3/4} \cdot e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

$$= 2 \cdot (m_e^* m_h^*)^{3/4} \cdot \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$~~

Mit dieser Formel können wir nun die intrinsischen Ladungsträgerdichten $n_i = p_i$ für C, Si und Ge berechnen:

• C:
$$n_i = p_i = 2 \cdot (1,82 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 2,275 \cdot 10^{-31} \text{ kg})^{3/4} \cdot \left(\frac{1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot 300 \text{ K}}{2\pi \cdot (1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Js})^2} \right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{5,47 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot 300 \text{ K}}} \approx 3,3 \cdot 10^{-22} \text{ kg}^{3/2} \left(\frac{1}{\text{Js}^2} \right)^{3/2} = 3,3 \cdot 10^{-22} \left(\frac{\text{kg}}{\text{Js}^2} \right)^{3/2}$$

$$= 3,3 \cdot 10^{-22} \left(\frac{\text{kg}}{\text{Js}^2} \right)^{3/2} = 3,3 \cdot 10^{-22} \text{ m}^{-3} = \boxed{3,3 \cdot 10^{-28} \text{ cm}^{-3}}$$

$E_g = 5,47 \text{ eV}$ für C bei $T=300\text{K}$ (siehe Tabelle)

→ Da diese Ladungsträgerdichte zu niedrig ist, leitet C in Form eines Diamants nicht. Deshalb ist C (Diamant) ein Isolator.

• Si:
$$n_i = p_i = 2 \cdot (2,99 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 4,66 \cdot 10^{-31} \text{ kg})^{3/4} \cdot \left(\frac{1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot 300 \text{ K}}{2\pi \cdot (1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Js})^2} \right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{1,12 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot 300 \text{ K}}} \approx 2,6 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3} = \boxed{2,6 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}}$$

$E_g = 1,12 \text{ eV}$ (Tabelle)

→ Man erkennt hier, dass intrinsische Trägerdichte bei Si eindeutig größer als bei dem Isolator C. Jedoch ist diese Dichte für eine gute Leitfähigkeit immer noch sehr gering, und deshalb leitet Si bei $T=300\text{K}$ intrinsisch nicht. Also ist Si weder ein Isolator noch ein Metall, es ist ein Halbleiter. Um diesen Halbleiter leitfähig zu machen dotiert man ihn und erhöht dabei mithilfe der Fremdatomen (Dotanden) die Ladungsträgerdichten und damit die elektrische Leitfähigkeit. Diese Überlegungen gelten analog auch für Ge, dessen intrinsische $n_i = p_i$, wie folgt berechnet wird:

• Ge:
$$n_i = p_i = 2 \cdot (1,99 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 2,64 \cdot 10^{-31} \text{ kg})^{3/4} \cdot \left(\frac{1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot 300 \text{ K}}{2\pi \cdot (1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Js})^2} \right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{0,66 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot 300 \text{ K}}} \approx 9,2 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3} = \boxed{9,2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}}$$

$E_g = 0,66 \text{ eV}$ (Tabelle)

→ Anmerkungen: • Ge hat noch eine größere intrinsische Trägerdichte, die aber immer noch zu gering für eine sinnvolle elektrische Leitfähigkeit ist. Deshalb ist Ge auch ein Halbleiter. Erst die Trägerdichten 10^{17} cm^{-3} und größer deuten auf elektrisch leitfähige Stoffe hin.

• Die Ladungsträgerdichten ergibt man meistens mit der Einheit cm^{-3} statt m^{-3} . Deshalb werden hier die entsprechenden ~~Werte~~ ^{Umrechnungen} gemacht.

• Die Tatsache, dass C ein Isolator^{ist} und Si, Ge Halbleiter sind, kann man auch aus den gegebenen Bandlücken in der Tabelle ablesen. Der Bandabstand von C ist 5,47 eV, was riesengroß ist und deshalb isoliert C. Dagegen besitzen Si und Ge Bandlücken um ~~1 eV~~ für Halbleiter übliche 1 eV. ~~Sn~~ Sn hat bei $T=300\text{K}$ keine Bandlücke und ist damit ein Metall.

- intrinsische Leitfähigkeit: Die intrinsische Leitfähigkeit σ , ~~gibt~~ ^{an} wie gut ein Material elektrischen Strom leiten kann. Dabei wird wiederum das nicht dotierte Material betrachtet. Da wir jetzt die Elemente C, Si, Ge betrachten, sollen wir anders als bei Metalle den Beitrag von Elektronen, sowie den von Löchern berücksichtigen. Der Grund dafür ist, dass bei Halbleitern eine bipolare Leitfähigkeit vorhanden, d.h. dass die elektrische Leitfähigkeit ~~von zwei~~, bzw. auch der elektrische Strom von zwei ~~Spezies~~ Ladungsspezies, nämlich von Elektronen und Löchern gebildet wird. Die elektrische Stromdichte \vec{j} bei einem Halbleiter lautet deshalb:

$$\vec{j} = -n_e \cdot \vec{v}_n + p \cdot e \cdot \vec{v}_p \quad (\text{manchmal schreibt man } q \text{ statt } e \text{ und berücksichtigt das negative Vorzeichen des Elektronenterms})$$

(auch in q , deshalb lautet diese Formel dann $\vec{j} = nq\vec{v}_n + p q \vec{v}_p$)

Außerdem ist die elektrische Stromdichte \vec{j} durch das lokale Ohmsche Gesetz (bekannt aus EuM) mit der elektrischen Leitfähigkeit σ verknüpft:

$$\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E}$$

Obwohl nun ein Zusammenhang zwischen \vec{j} und σ für uns steht, kennen wir die Teilchengeschwindigkeiten \vec{v}_n, \vec{v}_p und das elektrische Feld \vec{E} nicht, deshalb sollen wir diese Größen eliminieren. Das gelingt uns mithilfe der Definition der Beweglichkeiten μ_n und μ_p :

$$\vec{v}_n = -\mu_n \vec{E}, \quad \vec{v}_p = \mu_p \vec{E}$$

Jetzt können wir diese in die Formel für \vec{j} einsetzen:

$$\vec{j} = -n_e \cdot (-\mu_n \vec{E}) + p \cdot e \cdot \mu_p \vec{E} = n e \mu_n \vec{E} + p e \mu_p \vec{E} = (n e \mu_n + p e \mu_p) \vec{E}$$

Da der Koeffizient des elektrischen Felds \vec{E} laut des lokalen Ohmschen Gesetzes der Leitfähigkeit σ entspricht, können wir nun σ in Abhängigkeit von in der Tabelle gegebenen oder vorher berechneten Größen ausdrücken. Die folgende Formel dient dazu und die werden wir für folgende Berechnungen benutzen:

$$\sigma = n_e e \mu_n + p e \mu_p = \overset{\text{intrinsische Leitf.}}{n_i e \mu_n} + p_i e \mu_p = n_i e (\mu_n + \mu_p)$$

• C: $\sigma = 3,3 \cdot 10^{-28} \text{ cm}^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot (1800 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} + 1200 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}) = 3,3 \cdot 10^{-28} \frac{1}{\text{cm}^3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot 3000 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \stackrel{1\text{s} = \frac{1\text{A}}{1\text{V}}}{=} 1,58 \cdot 10^{-43} \text{ Scm}^{-1}$

$= 1,58 \cdot 10^{-41} \text{ Sm}^{-1}$

→ Anhand der sehr geringen elektrischen Leitfähigkeit von C (Diamant), kann man hier wiederum merken, dass C ein Isolator ist.

• Si: $\sigma = 2,6 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot (1500 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} + 450 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}) = 2,6 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot 1950 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} = 8,11 \cdot 10^{-7} \text{ Scm}^{-1}$

$= 8,11 \cdot 10^{-5} \text{ Sm}^{-1}$

• Ge: $\sigma = 9,2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot (3900 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} + 1900 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}) = 9,2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot 5800 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} = 8,54 \cdot 10^{-3} \text{ Scm}^{-1} = 8,54 \cdot 10^{-1} \text{ Sm}^{-1}$

→ Man sieht, dass die elektrischen Leitfähigkeiten von Si und Ge relativ zu C sehr groß sind. Dagegen hat Cu, ein üblicher Leiterwerkstoff, als Metall eine Leitfähigkeit von $\sigma = 5,8 \cdot 10^7 \text{ Sm}^{-1}$, was wiederum viel größer als σ von Si und Ge. Deshalb sind Si und Ge weder Isolatoren noch Metalle, sie sind Halbleiter, und ~~in~~ intrinsisch schlecht leitend. Eine sinnvolle elektrische Leitfähigkeit erreicht man bei Halbleitern durch Dotierung.