

Die Frage ob ein FK metallisch od. isolierend ist, hängt von der Besetzung der vorhandenen Energiebänder ab. Wie man zeigen kann tragen vollst. besetzte Bänder nicht zur elektr. Leitfähigkeit bei. FK mit vollständig besetzten Bändern sind daher Isolatoren (was man im Bred des freien Elektronengases nicht verstehen kann).

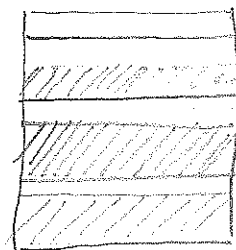
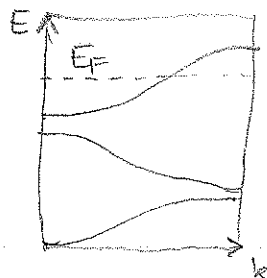
Bei N wechselwirkenden Atomen im Gitter findet man korrespondierend zu jedem elektronischen Zustand des "isolierten" Atoms ein Band mit N -Zuständen.

(Durch Wechselwirkung der Elektronen miteinander od. mit dem Gitter können Zustände noch erzeugt noch vernichtet werden).

Unter Berücksichtigung der Spinrichtungen entstehen also aus den s bzw. p -Zuständen isolierter Atome Bänder mit $2N$ bzw. $6N$ Zuständen.

(i) Alkali und Edelmetalle mit einatomiger Basis und einem Leitungs elektron pro Atom:

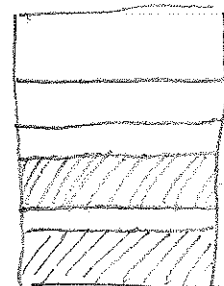
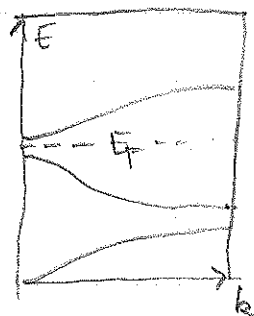
- Valenzbänder voll besetzt
- Leitungsband mit $2N$ Zuständen nur halb besetzt.



Metall

(ii) Isolatoren

Bei großer Anzahl von Elektronen sind die Bänder voll besetzt, die Bänder oberhalb (= Leitungsband) vollst. leer.



Isolator

Fig 4.13

Bem: Mit dieser Argumentation gibt es keine zweite Metalle

→ Für 3-dim. Kristalle werden die Dispersionskurven für verschiedene Kristallrichtungen i. a. einen unterschiedlichen Verlauf haben. Das führt dazu, daß Energiebereiche die in einer Richtung wohl-separiert sind in 3-dim überlappen können. Durch diesen Überlapp entstehen teilgefüllte Bänder und damit FK mit metall. Eigenschaften (Bsp. Mg.) Ist der Überlapp gering, tragen nur wenige Elektronen zum Ladungstransport bei → Halbmetalle

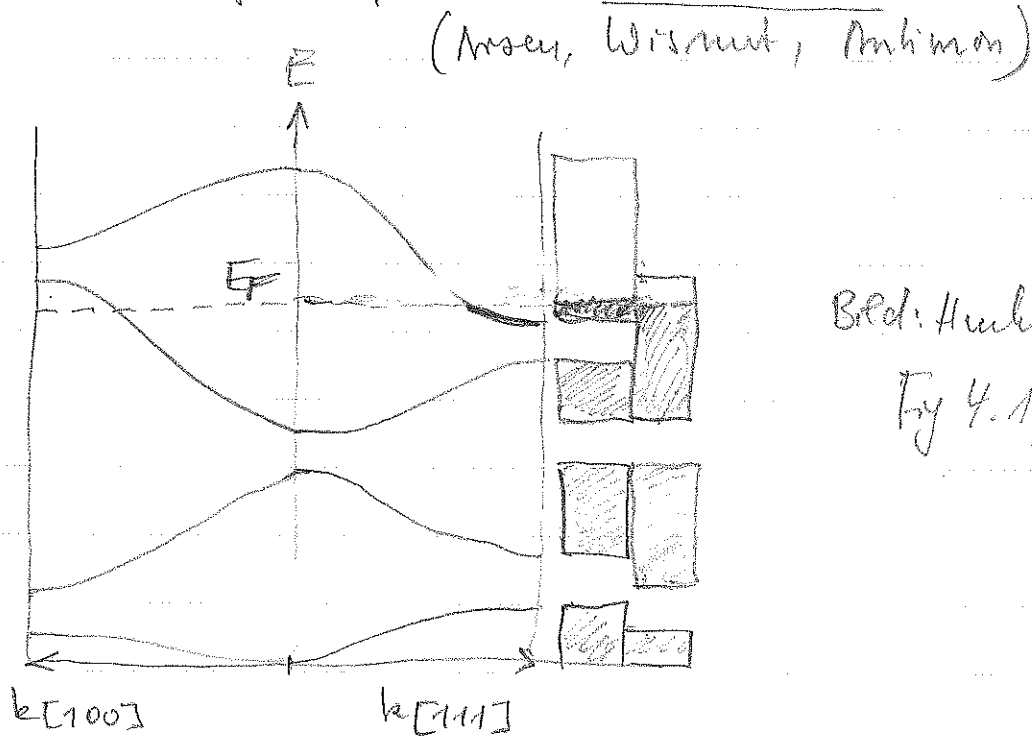


Bild: Hurler S. 302

Fig 4.14

Die Bezeichnung HL deutet darauf hin, daß die elektr. Leitfähigkeit dieser Materialien zwischen der von Metallen und von Isolatoren liegt: spezifischer Widerstand variiert zwischen $10^{-4} \Omega \text{cm}$ und $10^7 \Omega \text{cm}$.

HL-Elemente findet man in der 4. Hauptgruppe des Periodensystems: Si und Ge sind dabei für die technische Anwendung am interessantesten.

Am absoluten Nullpunkt verhalten sich HL wie Isolatoren: Die über dem Valenzbändern liegenden Leitungsbande sind vollständig leer. Bei hohen Temperaturen werden Valenzelektronen in das leere Leitungsband gehoben und tragen zur Leitfähigkeit bei.

Für die technische Anwendung ist die gezielte Dotierung von Bedeutung und kann die elektrischen Eigenschaften drastisch ändern.

5.1 Intrinsische HL

Leitungsband	E_L	Bandlücke	Typ. Werte für E_G :
	--	$E_G = E_L - E_V$	1,12 eV Si (300K)
Valenzband: voll besetzt	E_V		0,66 eV Ge (300K)

Die Bandlücke läßt sich mittels optischer Absorption bestimmen: Durch Absorption eines Photons wird Elektron in Leitungsband gehoben. Im Valenzband bleibt ein Loch über.

Betrachtet man die Energiekurven im k -Raum, so unterscheidet man direkte und indirekte HL.

(i) direkte HL

Valenzband-Maximum und Leitungsbandminimum liegen im k -Raum an gleicher Stelle (Γ Pkt, $k=0$).

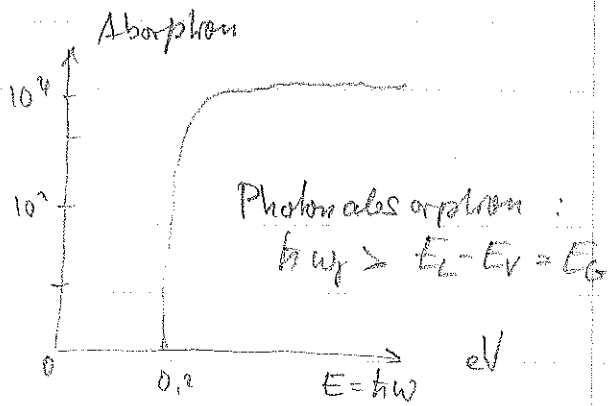
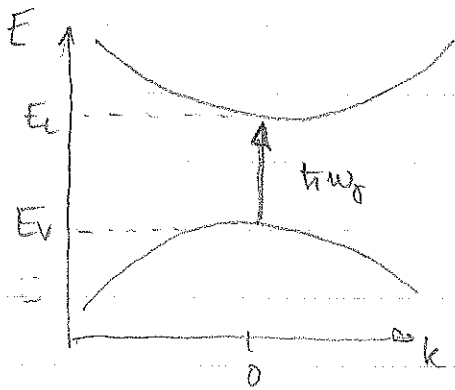


Fig. 5.1

oberhalb Schwellenenergie ist HL „undurchsichtig“ (IR)

(ii) indirekte HL:

Hier sind das Valenzband-Maximum und das Leitungsband-Minimum im k -Raum gegen einander verschoben. Um „minimales“ Gap zu überwinden muß Elektron zusätzlich Impuls aufnehmen.

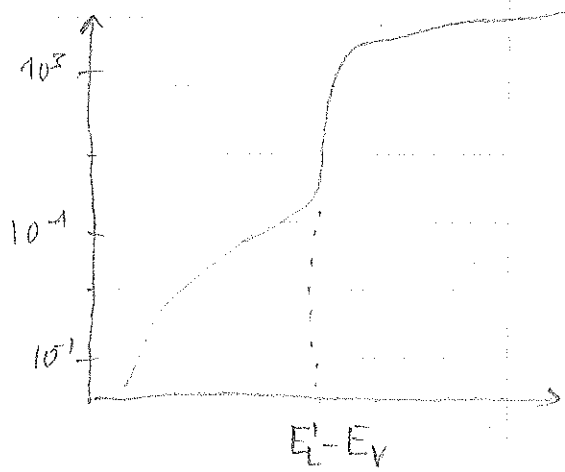
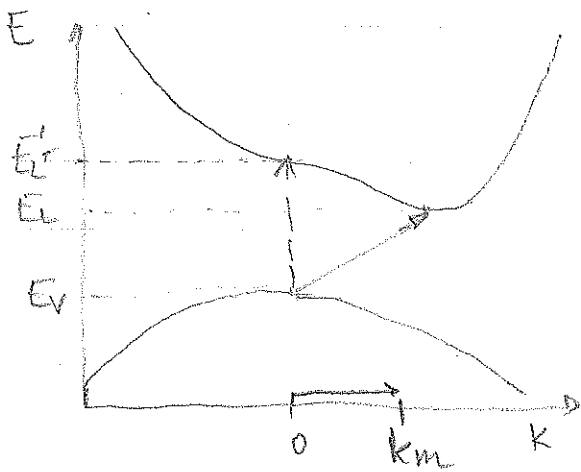


Fig 5.2

Da der Photonimpuls vernachlässigbar ist tragen Löcher mit Phononen zur Impulserhaltung bei:

→ Energie: $h\omega_p + h\omega_g = E_G$ vernachlässigbar

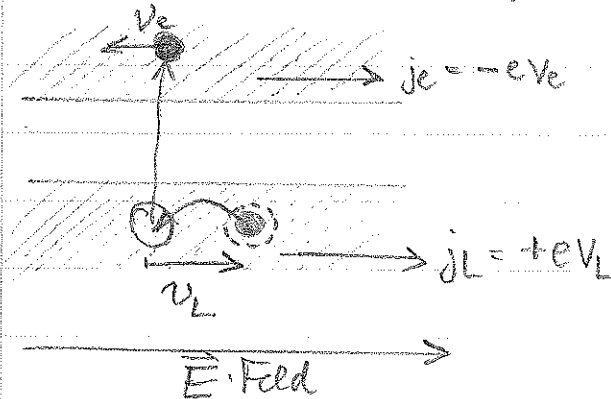
Impuls: $h k_p = h q = h k_{ph}$ vernachlässigbar.

→ Energie kommt vom Photon, Impulserhaltung durch Phononen

a) Elektronen und Löcher

5-3

Wird ein Elektron in einem HL vom Valenzband in das Leitungsband angeregt, so ist es frei beweglich und kann zum Stromtransport beitragen. Zusätzlich entsteht im Valenzband aber auch ein unbesetzter Zustand = Loch.



Ein Loch verhält sich in einem äußeren \vec{E}/\vec{B} -Feld so als hätte es positive Ladung und trägt ebenfalls zum Strom bei.

Zur korrekten Beschreibung des dynamischen Verhaltens von Elektronen und Löchern bei Anlage äußerer Felder muß ihre effektive (dynamische) Masse berücksichtigt werden. Diese Massen ergeben sich aus der Krümmung des Dispersionskurven ($\frac{d^2 E}{dk^2}$) und weichen erheblich von der wirklichen Elektronenmasse ab. (*)

Experimentell können diese Massen beispielsweise durch die Messung der Zyklotronfrequenz $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ bestimmt werden.

(*) Man findet (s. a. C. Kittel S. 230): $m_L^* = -m_e^*$, da aber m_e^* im Valenzband mit neg. Krümmung (↖) selbst < 0 ist, ist $m_L^* = -m_e^* > 0$!

b) Ladungsträgerdichte und intrinsische Leitfähigkeit

Im HL tragen sowohl e^- als auch L^+ zum Ladungstransport bei. Analog zu Kap 4.1(b)

$$G = e(n \mu_n + p \cdot \mu_p)$$

mit Beweglichkeit $\mu_{n,p} = \frac{e}{m_{n,p}^*} \cdot \tau_{n,p}$ und n sowie p als die Dichte der freien Elektronen und Löcher.

Durch thermische Anregung existiert bei Temp T eine endliche Ladungsträgerdichte n und p :

Elektronenkonzentration im L-Band:

$$n = \int_{E_L}^{\infty} \underbrace{D_L(E)}_{\substack{\text{Zustandsdichte} \\ \text{im L-Band}}} \underbrace{f(E, T)}_{\substack{\text{Besetzungsdichte:} \\ \text{Fermi-Dirac}}} dE$$

Ladungsträgerkonzentration (Löcher) im V-Band:

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} \underbrace{D_V(E)}_{\substack{\text{Zustandsdichte} \\ \text{V-Band}}} \underbrace{(1 - f(E, T))}_{\substack{\text{Besetzungswahrsch. mit } f \text{ Löcher} \\ = \text{unbesetzte Elektronenzustände}}} dE$$

Da an den Bandextrema die Dispersionskurven parabol-förmig verlaufen ($E \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$) können analogweise für die Zustandsdichte des „freien“ Elektronen benutzt werden, wenn statt E nun $E - E_L$ (für $E > E_L$) und $E_V - E$ ($E < E_V$) und statt der Elektronenmasse die effektiven Massen m_n^* und m_p^* verwendet werden. Laut Kap 4.1 erhält man dann:

$$D_L(E) = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_L} \quad \text{für } E > E_L$$

$$D_V(E) = \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_V - E} \quad \text{für } E < E_V$$

(Die Bänder sind voneinander getrennt, im Bereich $E_V < E < E_L$ existieren keine Zustände).

Wie wir noch sehen werden, liegt die Fermi-Energie bei Eigenleitung in der Mitte der Energielücke:

Der Abstand zu den Bandkanten $|E_L - E_F|$ bzw. $|E_V - E_F|$ ist viel größer als thermische Energie $k_B T$. Die Fermi-Fkt. $f(E, T)$ kann in den obigen Integralen deshalb durch Exponentialfkt. ersetzt werden:

$$f(E, T) = \frac{1}{e^{(E - E_F)/k_B T} + 1} \approx e^{-(E - E_F)/k_B T} \quad \text{für } E > E_F$$

$$1 - f(E, T) = \left(\frac{e^{(E - E_F)/k_B T} + 1 - 1}{e^{(E - E_F)/k_B T} + 1} \right) = \frac{1}{e^{+(E_F - E)/k_B T} + 1} \approx e^{-(E_F - E)/k_B T} \quad \text{für } E < E_F$$

Damit lassen sich die Ladungsträgerkonzentrationen berechnen:

$$n = 2 \left(\frac{m_n^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(E_L - E_F)/k_B T} = N_L e^{-(E_L - E_F)/k_B T}$$

$$p = 2 \left(\frac{m_p^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(E_V - E_F)/k_B T} = N_V e^{-(E_F - E_V)/k_B T}$$

Die eingeführten „effektiven Zustandsdichten“ N_L und N_V sind verglichen mit dem Boltzmann-Faktor nur schwach T abhängig.

Erinnerung: $f(E, T) = \frac{1}{e^{(E - E_F)/k_B T} + 1}$

*) Man spricht deshalb von nicht-entartet

Die Ladungsdichten n und p hängen von der Lage des Fermi-Niveaus E_F ab (konkretes Wert: $\mu = E_F(T) = \text{chem. Potential}$)
 Das Produkt der Ladungsträgerdichten ist unabhängig von E_F :

$$n \cdot p = N_L \cdot N_V e^{-E_G/k_B T} = 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_n^* m_p^*)^{3/2} e^{-E_G/k_B T}$$

Das Produkt wird durch die effektiven Massen und durch die Bandlücke E_G beschrieben und hat für jedes HL einen von der Temp. abhängigen Wert.

Häufig wird die Bedingung " $n \cdot p = \text{const}$ " auch als "Massenwirkungsgesetz" bezeichnet: Erhöht man durch Dotierung des HL die Elektronendichte, muß automatisch die Lochdichte sinken.

Bem: Die bisherigen Überlegungen sind nicht auf intrinsische HL beschränkt sondern sind auch für dotierte HL anwendbar!

Für intrinsische HL gilt $n_i = p_i$ ($i = \text{intrinsisch}$)

$$n_i = p_i = \sqrt{N_L N_V} e^{-E_G/2k_B T}$$

Typische Werte:	HL	E_G [eV]	n_i / m^{-3}	$T = 300\text{K}$
	Ge	0.66	$2.4 \cdot 10^{19}$	
	Si	1.12	$1.1 \cdot 10^{16}$	
	GaAs	1.42	$1.8 \cdot 10^{12}$	

Die Lage des Fermi-Niveaus E_F und dessen Temp. abh. läßt sich aus der Bedingung der Ladungsneutralität bestimmen. Mit $n_i = p_i$ folgt:

$$E_F = \frac{E_L + E_V}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \left(\frac{N_V}{N_L} \right) = \frac{E_L + E_V}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_n^*}{m_p^*} \right)$$

Für $T = 0\text{K}$ liegt E_F genau in der Mitte der Bandlücke