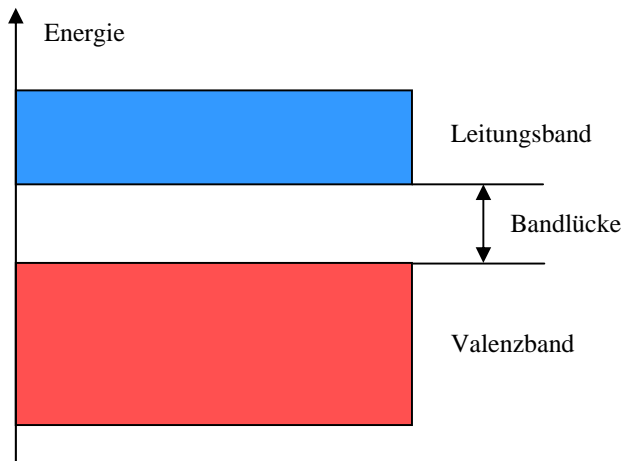


Intrinsische Halbleiter

Ein völlig reines Halbleitermaterial (ohne Fremdatome, ohne Fehlstellen, ohne "Antisites") nennt man **intrinsisch**. Bei einem intrinsischen Halbleiter hängen die Ladungsträgerkonzentrationen im Leitungsband und im Valenzband nur von der Temperatur (und von der Bandlücke) ab. Oft zeichnet man die Bänder nur schematisch:



Während dieses Bild für ganz einfache Betrachtungen gerade noch ausreicht, muss man für quantitative Berechnungen ein wesentlich detailliertes Modell mit Berücksichtigung der Bandstruktur verwenden. Wir werden hier ein solches Modell vorstellen und analysieren.

Als konkretes Material verwenden wir den Halbleiter GaAs. Gegenüber Elementhalbleitern wie Silizium oder Germanium bietet er folgende Vorteile:

- a) GaAs ist ein Halbleiter mit einem direkten Bandgap. Das Maximum des Valenzbandes und das Minimum des Leitungsbandes liegen am Γ -Punkt der Brillouinzone direkt gegenüber.
- b) Das Leitungsband hat am Γ -Punkt reine s-Symmetrie, die Valenzbänder haben dort reine p-Symmetrie.

Die fundamentale Bandlücke von GaAs ist (wie bei allen Halbleitern) leicht temperaturabhängig und beträgt:

$$E_{\text{gap}}(0\text{K}) = 1.519 \text{ eV}, \quad E_{\text{gap}}(300\text{K}) = 1.424 \text{ eV}.$$

Die effektiven Massen in GaAs sind präzise bekannt:

$$\text{Leitungsband: } m_e^* = 0.063$$

$$\text{Valenzband: } m_{\text{lh}}^* = 0.082 \quad m_{\text{hh}}^* = 0.51 \quad m_{\text{soh}}^* = 0.14 \quad \Delta_{\text{SO}} = 0.341 \text{ eV}$$

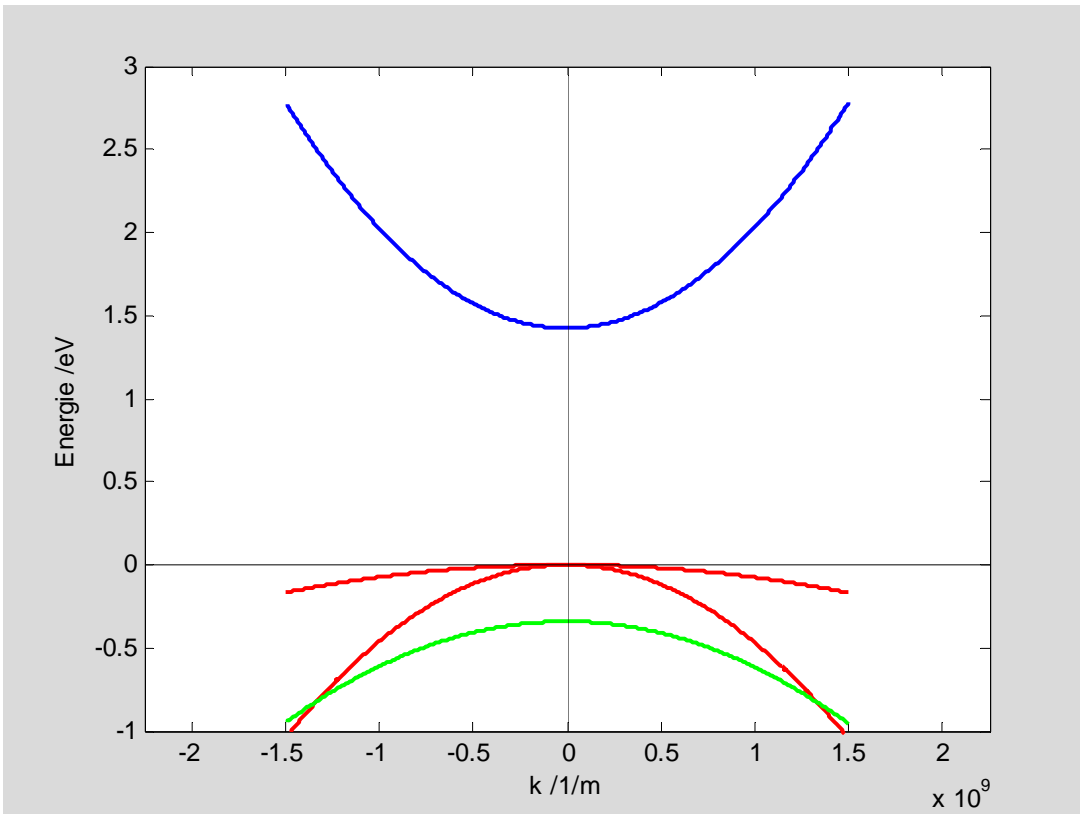
(Quelle: Gross, Marx Tabelle 10.3)

```
SI_e=1.602176462e-19;
SI_m=9.10938188e-31;
SI_h=6.62606876e-34;
SI_hbar=1.054571596e-34;
SI_k=1.3806503e-23;

Nk=1000;
kmax=1.5e9;
k=linspace(-kmax,kmax,Nk);
me=0.063;
mlh=0.082;
mhh=0.51;
msoh=0.14;
delta_SO=0.341;
Egap=1.424;

band_e=SI_hbar^2/(2*SI_m*me)*k.^2/SI_e+Egap;
band_lh=-SI_hbar^2/(2*SI_m*mlh)*k.^2/SI_e;
band_hh=-SI_hbar^2/(2*SI_m*mhh)*k.^2/SI_e;
band_soh=-SI_hbar^2/(2*SI_m*msoh)*k.^2/SI_e-delta_SO;

plot(k,band_e,'b-','Linewidth',2);axis([-1.5*kmax1.5*kmax -1 3]);
xlabel('k /1/m');ylabel('Energie /eV');hold on;
plot(k,band_hh,'r-','Linewidth',2);axis([-1.5*kmax1.5*kmax -1 3]);
plot(k,band_lh,'r-','Linewidth',2);axis([-1.5*kmax1.5*kmax -1 3]);
plot(k,band_soh,'g-','Linewidth',2);axis([-1.5*kmax1.5*kmax -1 3]);
plot([0 0],[-1 3],'k-');axis([-1.5*kmax1.5*kmax -1 3]);
plot([-1.5*kmax 1.5*kmax],[0 0],'k-');axis([-1.5*kmax1.5*kmax -1 3]);
hold off;
```



Bandstruktur von GaAs (T=300K). Der k-Vektor erstreckt sich über ca. 25 % von Γ -X.
Die Länge der Brillouin-Zone in X-Richtung ist:

```
a=0.565e-9;  
pi/a,
```

ans = 5.5603e+09 D.h., ein $k_{\max}=1.5e9$ 1/m ist ca. 25 % der Γ -X Entfernung in der Brillouin-Zone.

Um die Besetzung dieser Bänder im thermischen Gleichgewicht zu bestimmen, benötigt man die Zustandsdichten.

Bei T=0K sind alle Valenzbänder vollständig besetzt und das Leitungsband ist leer. Das elektrochemische Potential μ könnte prinzipiell überall in der Energielücke sein. Aber: man legt es so, dass es der Grenzwert für $T \rightarrow 0K$ wird. Und für endliche Temperaturen $T \neq 0$ kann man die Lage des elektrochemischen Potentials leicht berechnen.

Die Berechnung der Zustandsdichten ist einfach: Jedes Band trägt gemäß seiner effektiven Masse und seiner energetischen Lage bei.

$$g_{3D}(E) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \cdot \hbar^3} \cdot \sqrt{m^*} \cdot \sqrt{E}$$

```
NE=10000;  
E=linspace(-1,2.5,NE);  
fact=sqrt(2)/(SI_hbar^3*pi^2)*SI_e^1.5; %% Zustandsdichte in 1/m3 1/(eV)^3/2
```

Der Vorfaktor wurde in Einheiten von eV gerechnet. Die Dimension ist: $\frac{1}{\text{eV} \cdot \text{m}^3} \cdot \frac{1}{\sqrt{\text{eV}}}$

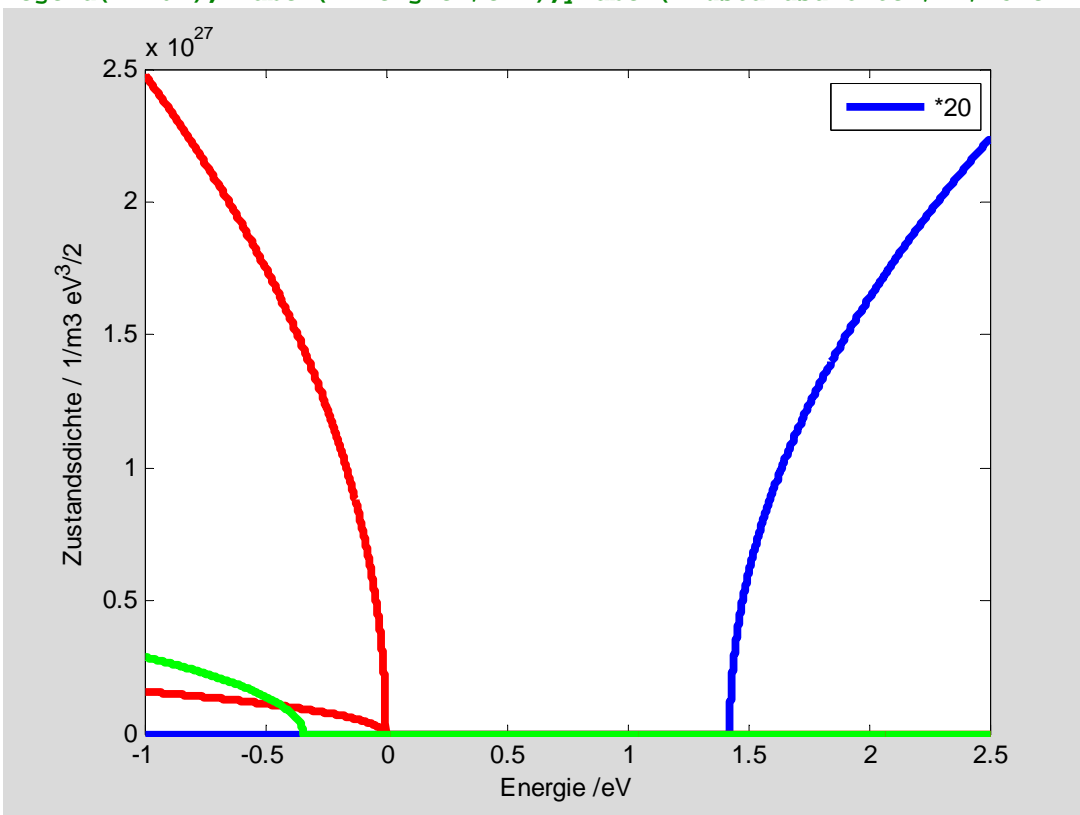
```

DOS_e=zeros(1,NE);
DOS_hh=DOS_e;
DOS_lh=DOS_e;
DOS_soh=DOS_e;
DOS_valenz=DOS_e;

for i1=1:NE
E_e=E(i1)-Egap;
if(E_e>=0)
DOS_e(i1)=fact*(me*SI_m)^1.5*sqrt(E_e);
end
if(E(i1) <= 0 )
DOS_hh(i1)=fact*(mhh*SI_m)^1.5*sqrt(-E(i1));
DOS_lh(i1)=fact*(mlh*SI_m)^1.5*sqrt(-E(i1));
end
Esoh=E(i1)+ delta_SO;
if(Esoh<=0)
DOS_soh(i1)=fact*(msoh*SI_m)^1.5*sqrt(-Esoh);
end
end
DOS_valenz=DOS_hh+DOS_hh+DOS_soh;

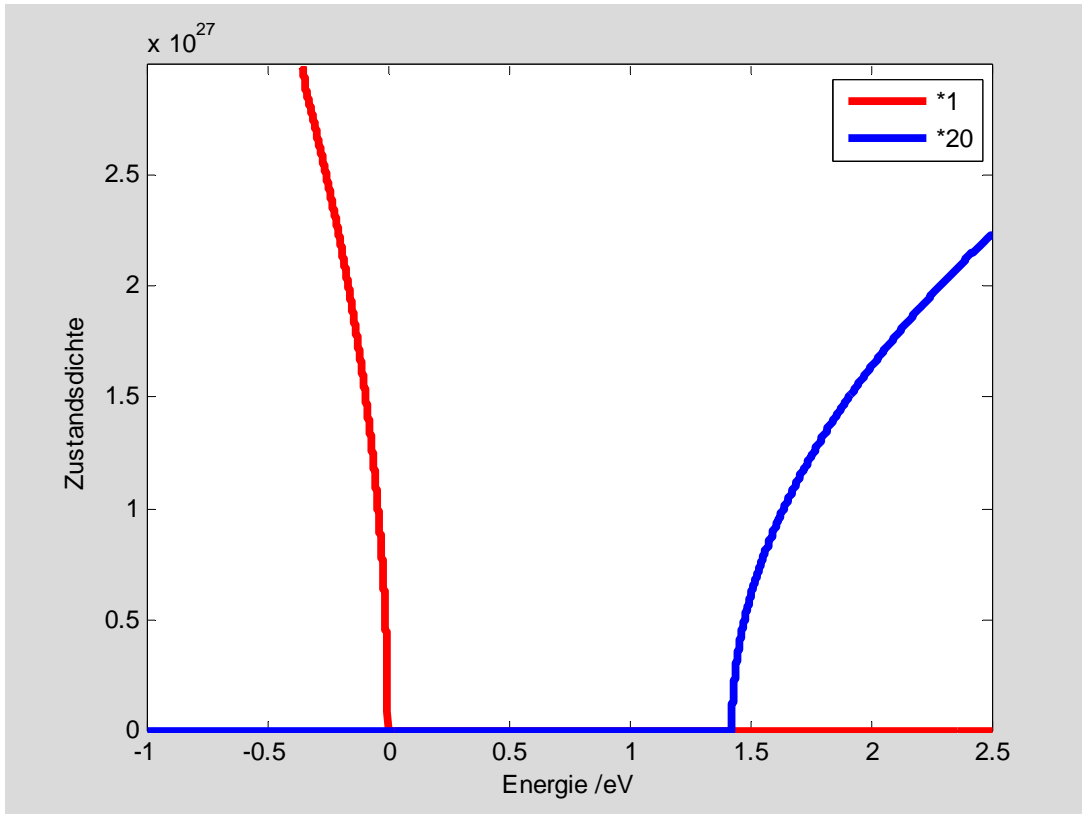
plot(E,20*DOS_e,'b-',E,DOS_hh,'r-',E,DOS_lh,'r-',E,DOS_soh,'g-','Linewidth',3);
legend('*20');xlabel('Energie /eV');ylabel('Zustandsdichte / 1/m3 eV^3/2');

```



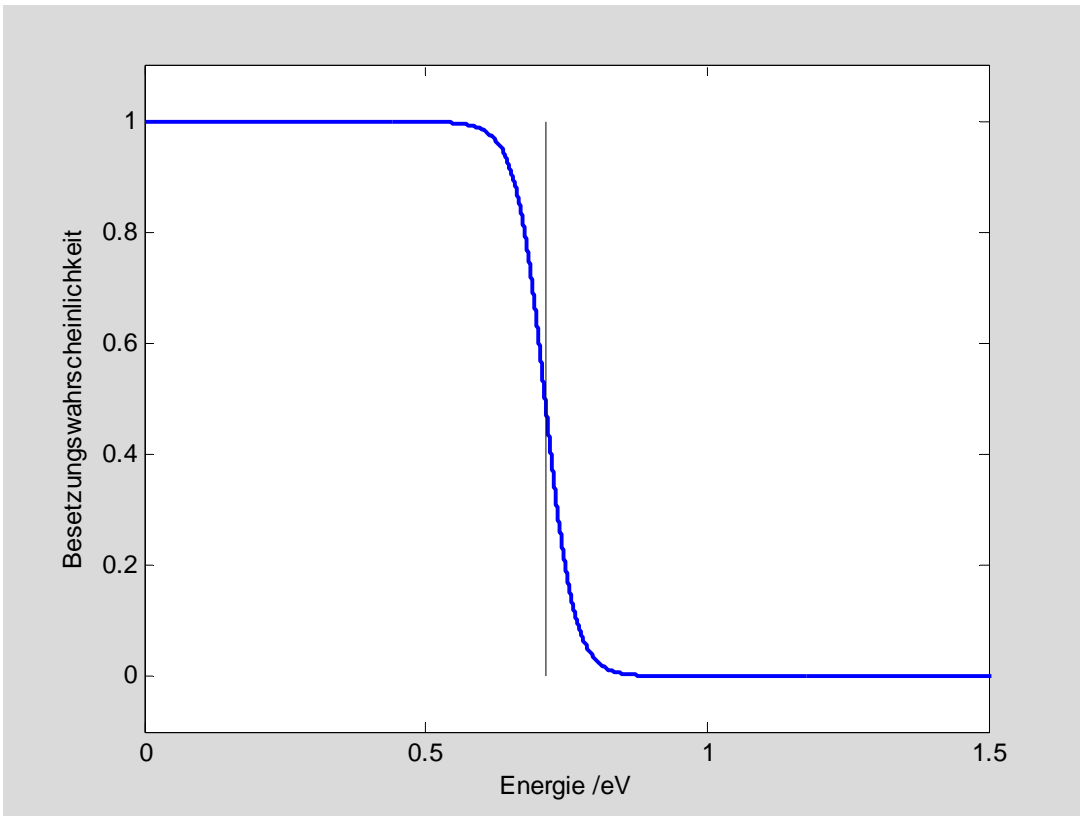
Die Zustandsdichten werden von den effektiven Massen bestimmt. Weil bei GaAs die hh-Masse mit 0.51 ca. 8 mal größer als die effektive Masse im Leitungsband ist, ist die Zustandsdichte im Valenzband über 20 mal größer als im Leitungsband!

```
plot(E,DOS_valenz,'r-',E,20*DOS_e,'b-','Linewidth',3);axis([-1 2.5 0 3e27]);
xlabel('Energie /eV');ylabel('Zustandsdichte ');legend('*1','*20');
```



Um die Besetzung des Leitungsbandes (und die "Leere" des Valenzbandes: Löcher) zu berechnen, benötigen wir die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion.

```
T=300;
mue=Egap/2;
FD=1./(exp(((E-mue)*SI_e)/(SI_k*T))+1);
plot(E,FD,'Linewidth',2);axis([0 1.5 -0.1 1.1]); hold on;
plot([mue,mue],[0 1],'k-');axis([0 1.5 -0.1 1.1]);
xlabel('Energie /eV');ylabel('Besetzungswahrscheinlichkeit');
hold off;
```

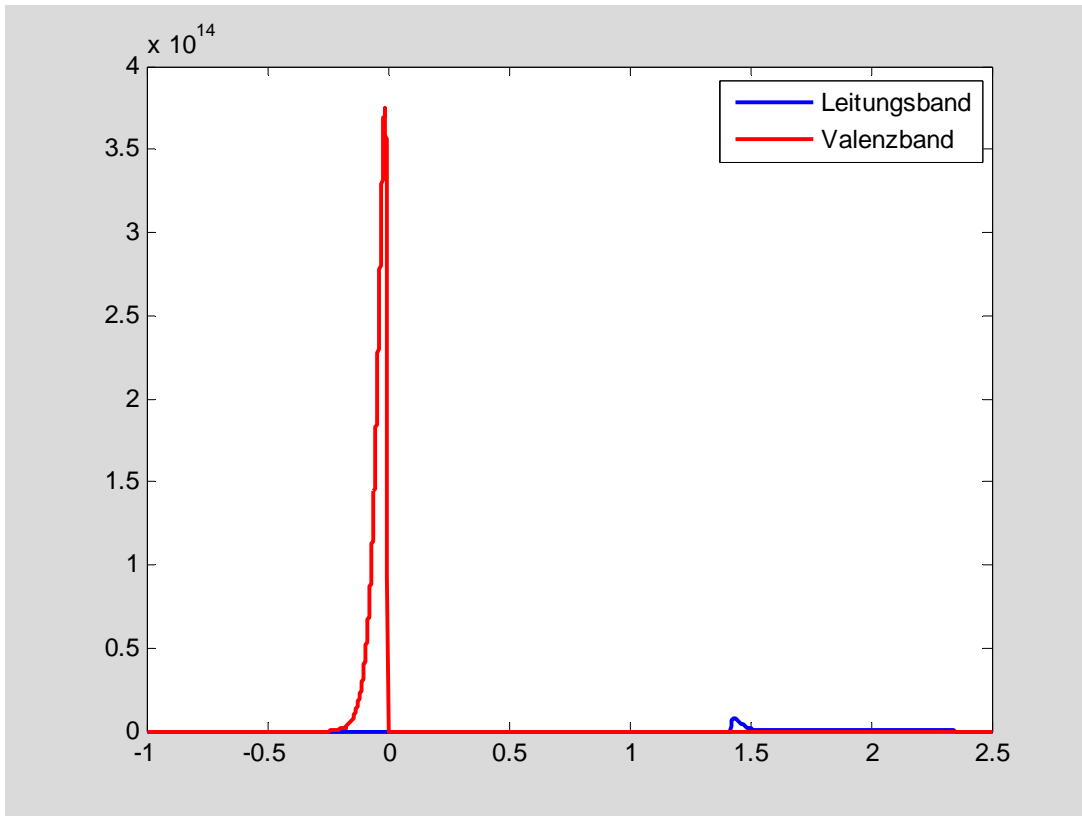


Verlauf der Fermi-Dirac Verteilung für $T=300\text{K}$. Das elektrochemische Potential liegt beim halben Bandgap.

```
Ze=DOS_e.*FD;
```

```
Zv=DOS_valenz.*(1-FD);
```

```
plot(E,Ze,'b-',E,Zv,'r-','Linewidth',2);legend('Leitungsband','Valenzband');
```

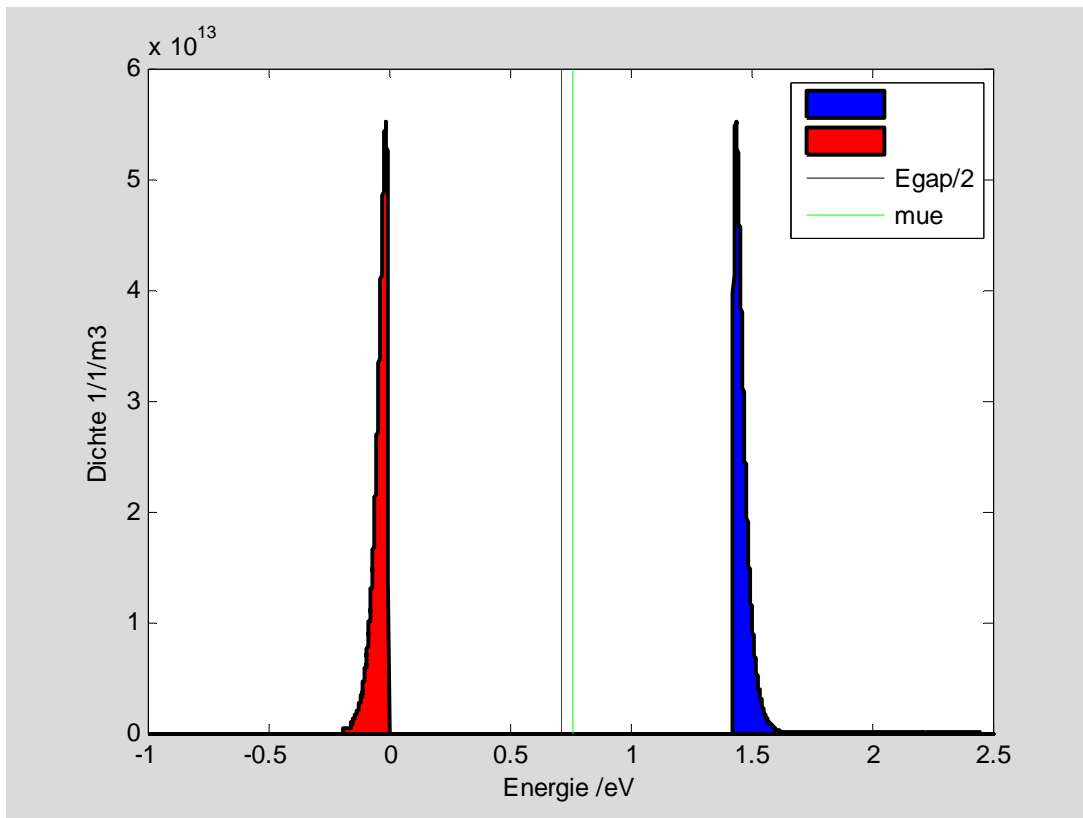


----: Löcherdichte im Valenzband ---: Elektronendichte im Leitungsband

Man erkennt, dass wesentlich mehr "Löcherdichte" im Valenzband ist, als Elektronendichte im Leitungsband.

Um exakt gleichviel Elektronen- und Löcherdichte zu erreichen, müssen wir das elektrochemische Potential etwas nach oben "schieben".

```
T=300;
mue=Egap/2+0.0495;
FD=1./(exp(((E-mue)*SI_e)/(SI_k*T))+1);
Ze=DOS_e.*FD;
Zv=DOS_valenz.*(1-FD);
fill(E,Ze,'b-',E,Zv,'r-','Linewidth',2);axis([-1 2.5 0 6e13]);xlabel('Energie /eV');ylabel('Dichte 1/1/m3');hold on;
plot([Egap/2 Egap/2],[0 6e13],'k-',[mue], [0 6e13],'g-');axis([-1 2.5 0 6e13]);legend(' ',' ','Egap/2', 'mue');
hold off;
```



$$\mu = E_{\text{gap}}/2 + 49.5 \text{ meV.}$$

Das sieht doch schon ziemlich gut aus!

Die Elektronendichte und Löcherdichte ist:

```

deltE = 3.5/NE;
dichte_e=sum(Ze)*deltE,
dichte_v=sum(Zv)*deltE,

dichte_e =
    2.9437e+012
dichte_v =
    2.9414e+012
    
```

Im thermischen Gleichgewicht bei $T=300\text{K}$ hat man also eine Elektronendichte von $2.94 \cdot 10^{12} \text{ 1/m}^3$ resp. $2.94 \cdot 10^6 \text{ 1/cm}^3$. Die gleiche Dichte an Löchern hat man im Valenzband. Im intrinsischen Halbleiter muss das aus Neutralitätsgründen immer so sein: Elektronendichte = Löcherdichte.

Dies Dichte von $2.94 \cdot 10^{12} \text{ 1/m}^3$ ist ziemlich klein. Der mittlere Abstand der Ladungsträger wäre damit:

```

dmittel = (1/2.94e12)^0.3333,

dmittel = 6.9871e-005
    
```

Dies sind $69.8 \mu\text{m}$. Die Ladungsträger sind also wirklich völlig unabhängig voneinander.

Anmerkung: Diese Ladungsträgerdichte ist so niedrig, dass man eigentlich das Material GaAs gar nicht auf eine so niedrige Defektkonzentration reinigen kann.

Bei einer so geringen Ladungsträgerdichte ist auch die Leitfähigkeit sehr klein.

```
mobility_e=0.8; %% 8000 cm2/(Vs) = 0.8 m2/(Vs)
sigma_e=dichte_e*SI_e*mobility_e,
sigma_e= 3.7731e-007
```

Die Leitfähigkeit ist also nur $3.773 \cdot 10^{-7} \text{ 1/}(\Omega \cdot \text{m})$.

GaAs mit dieser niedrigen Ladungsträgerkonzentration ist also schon fast ein guter Isolator.