

8. Halbleiterstatistik im Gleichgewicht

Fragestellung: Verteilung der Elektronen auf die verschiedenen Energiebänder und auf lokalisierte Zustände (Störstellen-Niveaus, Quantenpunkte, ...)

- zunächst im thermodyn. Gleichgewicht

11.1 Zustandsdichte

Zustandsdichte auch in amorphen, nicht nur in kristallinen (period.) Festkörpern definiert \rightarrow Info über elektron. Zustände (aus opt. Spektren)

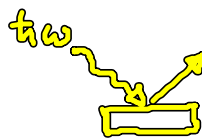
- Halbleiternanostrukturen $3D \rightarrow 2D \rightarrow 1D \rightarrow 0D$
bulk quantum well (QW) quantum wire quantum dot (QD)

V_d Grundvol. im d -dim. Ortsraum ($d=0,1,2,3$)

$D(E)dE$ Zahl der Zustände im Energieintervall $(E, E+dE)$ pro V_d

$D(E)$ Zustandsdichte

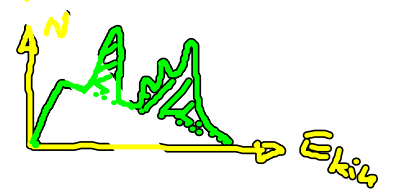
Exp. zugänglich z.B. durch Photoemissionspektroskopie



Analyse von

(UPS = UV
XPS = X-ray)

$$N(E_{ki}) \rightarrow D(E)$$



Kristalle:

$2N$ Zahl der Zust. im k -Raum pro BZ-Vol. V_{BZ}
(N El.zellen im Ortsraum-Vol. V_d , incl. Spin)

$$V_{BZ} = (2\pi)^d \frac{N}{V_d}$$

$$z dk = \frac{2N}{V_d} \frac{dk}{V_{BZ}} = \frac{2}{(2\pi)^d} dk \quad \text{Zahl der Zustände in BZ-Vol. } dk \text{ pro } V_d$$

$$z = \frac{2}{(2\pi)^d}$$

Zahl der Zustände mit Energie $0 \leq E \leq E_0$ pro V_d :

$$\int_0^{E_0} D(E) dE = \int z dk = \frac{2}{(2\pi)^d} \int_0^{E_0} dE \underbrace{\int \delta(E - E(k)) dk}_{\substack{\text{Integration über} \\ \text{Energieflächen } E(k) = \text{const.} \\ \text{in } k\text{-Raum}}}$$

$G(E_0)$
von der Fläche $E(k) = E_0$
um schlossenen Gebiet
in k -Raum

Also

$$D(E) dE = \left\{ \frac{2}{(2\pi)^d} \int \delta(E - E(k)) dk \right\} dE$$

Für $d=3$ 10^4 $d^3k = df_E dk_{\perp} = df_E |\nabla_k E|^{-1} dE$

$$D(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{df_E}{|\nabla_k E(k)|}$$



Beispiel:

Anisotropes parabol. Band in d Dim.:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^d \frac{k_i^2}{m_i} \sigma_i = \sum_{i=1}^d y_i^2 \sigma_i \quad \text{mit } y_i^2 = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_i}, \sigma_i = \pm 1$$

$$dy_i = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_i}} dk_i \rightarrow d^d k = dk_1 \dots dk_d = \frac{\sqrt{2^d m_1 \dots m_d}}{\hbar^d} d^d y$$

$$D(E) = \frac{2}{(2\pi)^d} \frac{\sqrt{2^d m_1 \dots m_d}}{\hbar^d} \int \delta(E - \sum_{i=1}^d \sigma_i y_i^2) d^d y$$

Klassifikation der Bandextrema im k -Raum nach der Vorzeichenfolge $(\sigma_1, \dots, \sigma_d)$ (Van Hove-Singularitäten der Zustandsdichte):

M_0 : alle $\sigma_i > 0$ Minimum von $E(k)$ 

M_1 : $\sigma_1 < 0, \sigma_i > 0$ sonst
 \vdots $\sigma_1, \sigma_2 < 0, \dots$ } Sattelpkt.

M_d : alle $\sigma_i < 0$ Maximum von $E(k)$ 

Berechn. der Zustandsdichte für d -dim. Min. (M_0):

$$\int \delta(E - \sum_{i=1}^d y_i^2) d^d y = \Omega_d \int_0^\infty \delta(E - y^2) y^{d-1} dy = \frac{\Omega_d}{2} \int_0^\infty \delta(E - z) z^{\frac{d-2}{2}} dz$$

\uparrow d -dim. Kugeloberfl.
 $(E > 0)$
 $= \frac{\Omega_d}{2} E^{\frac{d-2}{2}}$

wobei $\Omega_d = \frac{2}{\pi^{d/2}} \Gamma(d/2)$ das $d-1$ dim. Winkelintegral ist

($\Omega_d y^{d-1}$ ist Oberfläche einer d -dim. Kugel)

$\Omega_1 = 2\sqrt{\pi} / \Gamma(\frac{1}{2}) = 2$ (Strecke)  $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$

$\Omega_2 = 2\pi / \Gamma(1) = 2\pi$ (Kreis)  $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$

$\Omega_3 = 2\pi^{3/2} / \Gamma(\frac{3}{2}) = 4\pi$ (Kugel) 

Erg.:

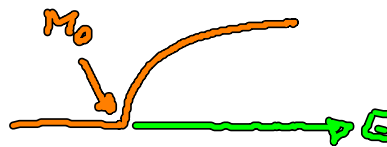
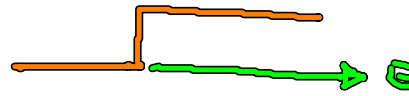
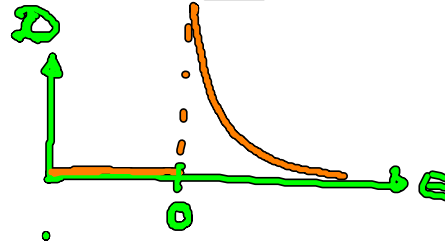
$$D(E) = \begin{cases} \frac{2\sqrt{m_1 \dots m_d}}{(2\pi\hbar^2)^{d/2} \Gamma(\frac{d}{2})} E^{\frac{d-2}{2}} & E > 0 \\ 0 & E < 0 \end{cases}$$

Insbesondere:

d=1: $D(E) = \frac{\sqrt{2m_1}}{\pi\hbar} E^{-1/2}$

d=2: $D(E) = \frac{\sqrt{m_1 m_2}}{\pi\hbar^2}$

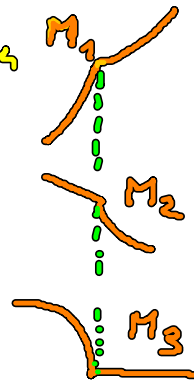
d=3: $D(E) = \frac{\sqrt{8m_1 m_2 m_3}}{2\pi^2\hbar^3} E^{1/2}$



Zustandsdichte an der Bandkante schärfer mit reduz. Dim.

→ geringere Laser-Schwelle!

an diese Van-Hove-Singularitäten (d=3)



8.2 Ladungsträgerkonzentr. in den Bändern

Mittlere Elektronendichte in thermodyn. Gleichgewicht

$$n = \int_{E_c}^{\infty} f(E; T, E_F) D(E) dE \quad \text{f Fermi-Verteilung}$$

d-dim. parabol. Band vom Typ M_0 : $E_c = 0$

$$n = \frac{2\sqrt{m_1 \dots m_d}}{(2\pi\hbar^2)^{d/2} \Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^{\infty} \frac{E^{d/2-1}}{1 + \exp\left[\frac{E-E_F}{kT}\right]} dE$$

$$= 2 \frac{(2\pi m_e kT)^{d/2}}{(2\pi\hbar)^d} \frac{1}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^\infty \frac{x^{d/2-1}}{1 + \exp(x-\eta)} dx$$

$N_c^{(d)}(T)$ eff. Zustandsdichte
 $z := \frac{E_F}{kT}$ reduz. Fermi'ean
 $F_{\frac{d}{2}-1}(\eta)$ Fermi-Dirac-Integral der Ordnung $s = \frac{d}{2} - 1$

$m_c := (\nu_c^2 m_1 \dots m_d)^{1/d}$ eff. Zustandsdichtemasse
 (Ge: 0.57 m_0 , Si: 1.08 m_0)
 ν_c Zahl der äquiv. Leitungsbandminia
 (Ge: 8, Si: 6)

d=3: $n = N_c(T) F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_c}{kT} \right)$



analog für Löcher im Valenzband (Besetz. Wahr. 1-f)

$p = N_v^{(d)} F_{\frac{d}{2}-1} \left(\frac{E_v - E_F}{kT} \right)$



mit der eff. Zustandsdichte des Valenzbandes

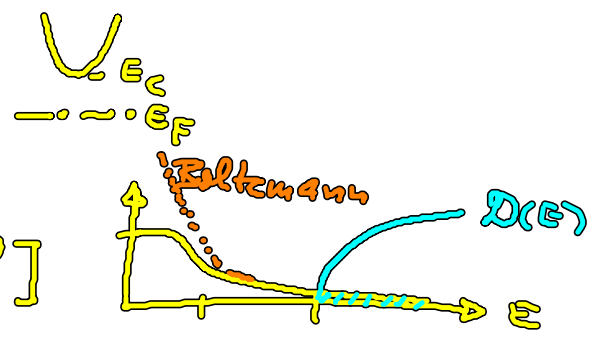
$N_v^{(d)}(T) := 2 \frac{(2\pi m_0 kT)^{d/2}}{(2\pi\hbar)^d}$
 $m_0 := (\nu_v^2 m_1 \dots m_d)^{1/d}$

N_c, N_v = Entartungskonzentrationen im Leitungs-, Valenzband

Grenzfälle

(i) Nichtentarteter Halbleiter

$E_F - E_c < 0$
 $|E_F - E_c| \gg kT$
 $f(E, T, E_F) \approx \exp \left[-\frac{(E - E_F)}{kT} \right]$



$$\Rightarrow F_s(\eta) = \frac{1}{\Gamma(s+1)} \int_0^{\infty} x^s \exp[-(x-\eta)] dx = e^{\eta} \quad (s > -1)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} n = N_c^{(d)}(T) \exp\left[\frac{E_F - E_c}{kT}\right] & n \ll N_c^{(d)}(T) \\ p = N_v^{(d)}(T) \exp\left[\frac{E_v - E_F}{kT}\right] & p \ll N_v^{(d)}(T) \end{cases}$$

$$\Rightarrow np = N_c^{(d)}(T) N_v^{(d)}(T) \exp\left[-\frac{E_c - E_v}{kT}\right] =: n_i^2$$

hängt nicht vom Fermi-Niveau ab, sondern nur von T und von der Bandlücke $E_G = E_c - E_v$

Im Eigenhalbleiter (keine Dotierung, $n=p$) ist

$n = p = n_i$ (intrinsische Gleichgewichtszustände)

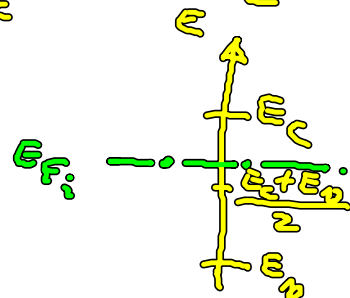
$$\Rightarrow n_i = N_c^{(d)}(T) e^{\frac{E_F - E_c}{kT}} = N_v^{(d)}(T) e^{\frac{E_v - E_F}{kT}} \quad (*)$$

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{F_i}}{kT}\right)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{E_{F_i} - E_F}{kT}\right)$$

mit dem intrinsischen Fermi-niveau

$$E_{F_i} = \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_v^{(d)}}{N_c^{(d)}} \quad d=3 \quad = \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \frac{m_p}{m_c}$$



für $m_p \neq m_c$
nicht in
der Mitte
der
Bandlücke