5.4. Drift-Diffusionsgleichung

- Ausgehend von der Boltzmanngleichung haben wir Bilanzgleichungen für

Teilchendichte	n	(Mittelwert)
Energiedichte	$n\bar{E}$	(2. Moment)
Impulsdichte	$n\bar{p}$	(1. Moment von f)

hergeleitet.

- Ein geschlossenes System von Bilanzgl. erhält man unter folgenden Näherungsannahmen

(i) $T_{ij} = T_e \delta_{ij}$ (skalare Elektronentemperatur)

$$kT_{ij} = m^* \langle (v_i - \langle v_i \rangle)(v_j - \langle v_j \rangle) \rangle$$

(ii) Wärmestromdichte $j_Q = -\kappa \underline{\nabla}_r T_e$

(Phänomenologischer Ansatz mit Wärmeleitfähigkeit κ)

NB: Wärmestromdichte ist für die numerische Stabilität der Lösungen der Bilanzgl. wichtig

(iii) Die Stoßraten J_0, J_1, J_2 müssen durch $n, p, \bar{E}$

ausgedrückt werden.

g-r-Raten $\quad J_0 = \varphi(n, \bar{E})$ $\quad$ (nichtlinear in $n, \bar{E}$)

Impulsrelax. Raten $\quad J_1 = -n \dfrac{\underline{p}}{\tau_m(\bar{E})}$ $\quad$ (nichtlin. Impulsrelax. zeit $\tau_m(\bar{E})$)

Energierelax. Raten $\quad J_2 = -n \dfrac{\bar{E} - E_0}{\tau_e(\bar{E})}$ $\quad$ (nichtlin. Energierelax. zeit $\tau_e(\bar{E})$)

$$E_0 = \frac{3}{2} kT$$

Bilanzgleichungen für die 3 Variablen $n, \bar{p}, \bar{E}$

$$① \quad \frac{\partial}{\partial t} n + \nabla_r (n \underline{v}) = \underline{\varphi(n, \bar{E})}$$

$$② \quad \frac{\partial}{\partial t} \bar{\underline{p}} + (v \nabla_r) \bar{\underline{p}} + \frac{1}{n} \nabla_r (n k T_e) + e \underline{\mathcal{E}} = \underline{- \frac{\varphi(n, \bar{E})}{n} \underline{p} - \frac{\underline{p}}{\tau_m(\bar{E})}}$$

$$③ \quad \frac{\partial}{\partial t} \bar{E} + v \cdot \nabla_r \bar{E} + \frac{1}{n} \nabla_r (n k T_e \underline{v}) - \frac{1}{n} k \Delta T_e + e \underline{v}\, \underline{\mathcal{E}} = \underline{- \frac{\varphi}{n} \bar{E} - \frac{\bar{E} - E_0}{\tau_e(\bar{E})}}$$

Konvektion $\qquad$ Druck $\qquad$ Wärmestrom $\qquad$ Joule-Wärme

Hierbei wurde $\quad \dfrac{\partial}{\partial t} (n \underline{p}) = \dot{n} \underline{p} + n \dot{\underline{p}}$ $\quad$ / $\quad \dfrac{\partial}{\partial t} (n \bar{E}) = \dot{n} \bar{E} + n \dot{\bar{E}}$

sowie $\quad \underline{\nabla}_r (n \underline{v}) = -\dot{n} + \varphi(n, \bar{E})$

und $\quad \underline{\nabla} (n \underline{v} \bar{E}) = (\underline{\nabla} \cdot n \underline{v}) \bar{E} + n \underline{v}\, \underline{\nabla} \bar{E}$

Die abhängigen Variablen $\underline{v}, T_e$ sind durch

$$\underline{p} = m^* \underline{v}$$

und $\bar{E} = \frac{m^*}{2} \underline{v}^2 + \frac{3}{2} k T_e$ bestimmt.

Aus ② folgt die dynamische makroskopische Stromdichte

$$\underline{j} = (-e) n \underline{v} = -\frac{e}{m^*} n \underline{p}$$

④

$$\rightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\underline{j} = \frac{\partial}{\partial t}\underline{j} + (\underline{v}\nabla_r)\underline{j} \overset{②}{=} \underbrace{\frac{e^2 n}{m^*}\underline{\mathcal{E}} + \underline{\nabla}\left(\frac{en}{m^*} k T_e\right)}_{\text{Drift}} \underbrace{- (\underline{\nabla}\underline{v})\underline{j}}_{\substack{\text{kompress.}\\ \text{Strömung}}} - \frac{\underline{j}}{\tau_m}}$$

Drift_Diffusions Näherung:

$$\frac{d}{dt}\underline{p} \equiv \overbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} + \underline{v}\underline{\nabla}_r\right)}^{\text{Ableitung im mitbewegten Koordinatensystem}}\underline{p} = -e\underline{\mathcal{E}} - \frac{1}{n}\underline{\nabla}_r(nkT_e) - \frac{\varphi(n,\bar{E})}{n}\underline{p} - \frac{\underline{p}}{\tau_m(\varepsilon)}$$

$$\frac{d}{dt}\underline{j} = \frac{e^2 n}{m^*}\underline{\mathcal{E}} + \underline{\nabla}_r\left(\frac{en}{m^*} k T_e\right) - (\underline{\nabla}\underline{v})\underline{j} - \frac{\underline{j}}{\tau_m}$$

Näherungsannahmen:

(i) $\frac{d}{dt}\underline{p} = 0$ (mittl. Impuls stationär im mitbewegten System)

(ii) $T_e(\underline{r}) = \text{const.}$ (Elektronentemperatur ortsunabhängig)

(iii) Es gilt eine verallgemeinerte Einstein-Beziehung

$$\frac{eD}{kT_e} = \mu$$

μ Beweglichkeit

$$\mu := \frac{e}{m^*} \tau_m$$

⑤ $\rightarrow \boxed{\underline{j} = en\mu \underline{\mathcal{E}} + kT_e \mu \nabla_r n}$

Driftstrom   Diffusions-stromdichte

oder

$$\underline{v} = -\mu \underline{\mathcal{E}} - \frac{D}{n} \nabla_r n$$

Anmerkung: · Für kleine Felder ist μ und D konstant
· Für große Felder hängt μ über τ_m und φ von $\bar{E}$ und n ab.

Nimmt man weiterhin eine stationäre räumlich homogene Energiebilanz an, folgt aus ③

⑥

$$\boxed{e\underline{v}\,\underline{\mathcal{E}} = -\frac{\bar{E} - E_0}{\tau_e(\bar{E})} - \frac{\varphi(n,\bar{E})}{n} \bar{E}}$$

Gleichung ⑤ mit Kontinuitätsgleichung für Teilchendichte

$$\frac{\partial}{\partial t} n - \frac{1}{e} \nabla_r j_n = \varphi_n(n, p, \mathcal{E})$$

und den entsprechenden Lochgleichungen (Lochdichte $p = \int f_h(\underline{r}, k, t)\, 2d^3k$)

$$\boxed{\begin{aligned} &(7)\quad \frac{\partial}{\partial t} p + \frac{1}{e} \nabla_r j_{-p} = \varphi_p(n, p, \mathcal{E}) \quad \text{Stoßprozesse} \\ &(8)\quad \underline{j}_p = e \mu_p\, p\, \underline{\mathcal{E}} - e D_p \underline{\nabla} p \end{aligned}}$$

sind sind die "klassischen" Halbleitertransportgleichungen.

Bem.: Sie sind zu ergänzen durch die Maxwell Gleichungen

(10) $\nabla \underline{\mathcal{E}} = \frac{e}{\varepsilon_0 \varepsilon}(n - p)$ (keine Dotierung Störstellen)

(11) $\nabla \times \underline{\mathcal{E}} = -\mu_0 \mu \dot{\underline{H}}$

(12) $\underline{\nabla} \cdot \underline{H} = 0$

(13) $\underline{\nabla} \times \underline{H} = \varepsilon_0 \varepsilon \dot{\underline{\mathcal{E}}} + (j_n + j_{-p})$

+ Randbedingungen.

→ Die Gln. (1), (5), (7)-(13) bilden die Basis zum Verständnis der wichtigsten Halbleiterbauelemente (pn-Übergang, Transistoren)

Mit Hilfe der nichtlinearen Raten $\varphi(n, \underline{\mathcal{E}})$ können auch auf dieser "vergröberter" Beschreibungsstufe ~~v~~iele

<u>nichtlineare</u> Transportphänomene

z.B. – Negative differentielle Leitfähigkeit

– Bistabilität

– Stromfilamente , räumliche Strukturbildung

– chaotische Oszillationen