

Ladungsträgerprozesse in Halbleitern

Die Ladungsträgerdichten $n(x,y,z,t)$ bzw. $p(x,y,z,t)$ können in Halbleitern durch unterschiedliche Prozesse verändert werden:

1. Driftstrom aufgrund eines äußeren elektrischen Feldes:

$$\vec{j}_F = \vec{j}_{n,F} + \vec{j}_{p,F} = (en\mu_n + ep\mu_p)\vec{E}$$

2. Diffusionsstrom aufgrund eines Konzentrationsgradienten:

$$\vec{j}_D = \vec{j}_{n,D} + \vec{j}_{p,D} = eD_n\nabla n - eD_p\nabla p$$

3. Generations- und Rekombinationsprozesse

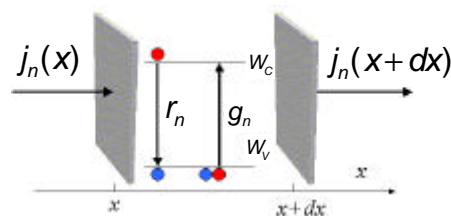
$$g = g(x, y, z, t) = g_{opt} + g_{phonon} + g_{St} + \dots$$

$$r = r(x, y, z, t) = r_{opt} + r_{phonon} + r_{St} + \dots$$

Halbleitergrundgleichungen

(H1)	$\vec{j}_n = en\mu_n\vec{E} + eD_n\nabla n$	Drift- und Diffusion
(H2)	$\vec{j}_p = ep\mu_p\vec{E} - eD_p\nabla p$	

Wie ändert sich dann die lokale Ladungsträgerdichte ?



$$\frac{\partial(-en)}{\partial t} = -\frac{\partial j_n}{\partial x} - e(g_n - r_n)$$

bzw. in 3D:

$$\frac{\partial(-en)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_n = -e(g_n - r_n)$$

(Kontinuitätsgleichung)

Halbleitergrundgleichungen

$$(H1) \quad \vec{j}_n = en\mu_n \vec{E} + eD_n \nabla n$$

$$(H2) \quad \vec{j}_p = ep\mu_p \vec{E} - eD_p \nabla p$$

Drift- und
Diffusionsgleichung
für Elektronen und Löcher

$$(H3) \quad \frac{\partial(-en)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_n = -e(g_n - r_n)$$

$$(H4) \quad \frac{\partial(ep)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_p = e(g_p - r_p)$$

Kontinuitätsgleichungen
für Elektronen
und Löcher

...dann fehlt nur noch die Verkopplung von Ladung und E-Feld...

Maxwell-Gleichung: $\nabla \cdot \vec{D} = \nabla \cdot \epsilon \epsilon_0 \vec{E} = \rho$ bzw. mit $\vec{E} = -\nabla \phi$

die Poisson-Gleichung: $\text{divgrad} \phi = \nabla^2 \phi = \Delta \phi = -\frac{\rho}{\epsilon \epsilon_0}$

Halbleitergrundgleichungen

$$(H1) \quad \vec{j}_n = en\mu_n \vec{E} + eD_n \nabla n$$

$$(H2) \quad \vec{j}_p = ep\mu_p \vec{E} - eD_p \nabla p$$

Drift- und
Diffusion

$$(H3) \quad \frac{\partial(-en)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_n = -e(g_n - r_n)$$

$$(H4) \quad \frac{\partial(ep)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_p = e(g_p - r_p)$$

Kontinuitäts-
gleichungen

$$(H5) \quad \Delta \phi = -\frac{e}{\epsilon \epsilon_0} (p - n + n_D^+ - n_A^-); \quad \vec{E} = -\nabla \phi$$

Poisson-
Gleichung

Das elektrochemische Potential

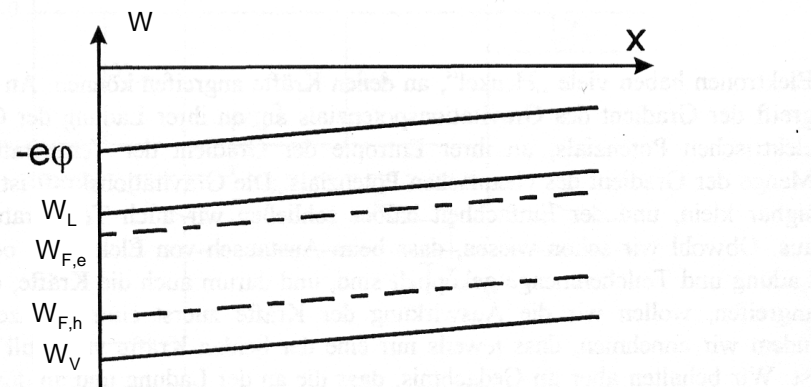
Die Trennung von Drift- und Diffusionsströmen ist nur ein Hilfsmittel zur quantitativen Modellierung.

Woher soll das Elektron wissen, ob es diffundieren oder driften soll ??

Gemeinsame Beschreibung durch die elektrochemischen Potentiale $\mu_{e,h}$, welche identisch sind mit den (Quasi)-Fermi-Energien $W_{F,e}$ bzw. $W_{F,h}$.

Die Quasi-Fermi-Energie kann für Löcher und Elektronen unterschiedlich sein ! (z. B. durch eine von aussen angelegte Spannung oder durch Beleuchtung,)

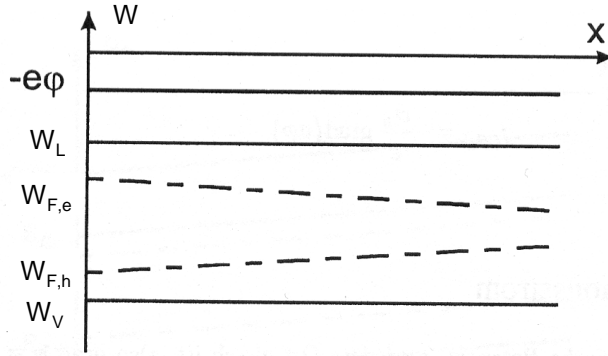
Quasi-Fermi-Energien: Ortsunabhängige Konzentration



Elektronen-Energien im elektrischen Feld bei ortsunabhängiger Elektronen-Konzentration

Quelle: P. Würfel

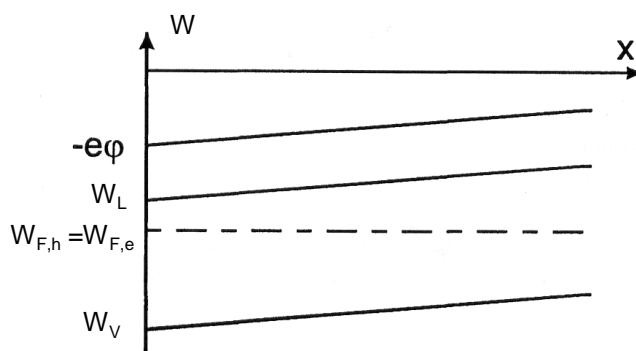
Quasi-Fermi-Energien: Ortsunabhängiges Potential



Elektronen-Energien bei ortsabhängiger Konzentration der Elektronen ohne elektrisches Feld

Quelle: P. Würfel

Ortsunabhängige Quasi-Fermi-Energien

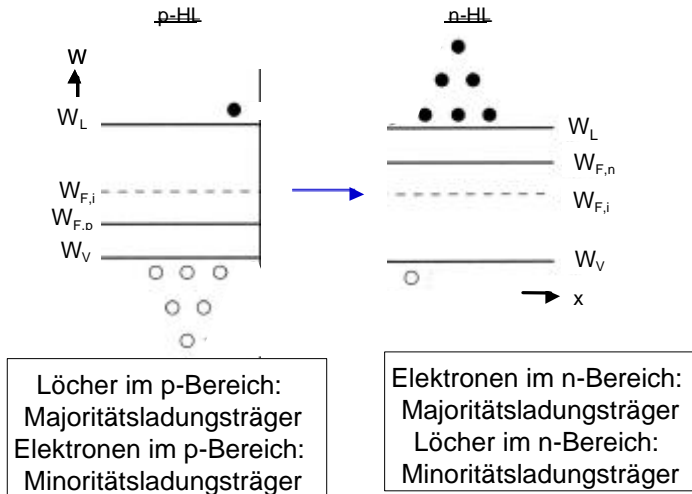


Ortsunabhängige Fermi-Energie in einem Halbleiter, in dem sowohl ein elektrisches Feld als auch Konzentrationsgradienten von Elektronen und Löchern vorhanden sind

Quelle: P. Würfel

Diffusion am pn-Übergang

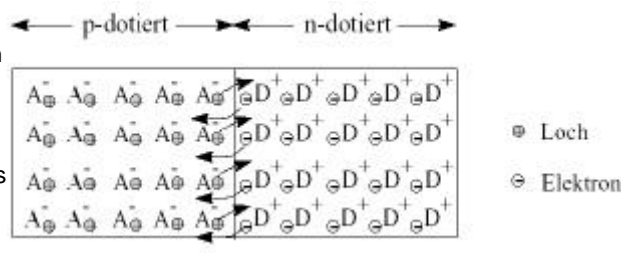
- Werden p- und n-Halbleiter zusammengebracht, so diffundieren Elektronen in den p-Halbleiter und Löcher in den n-Halbleiter.



Raumladungszone am pn-Übergang

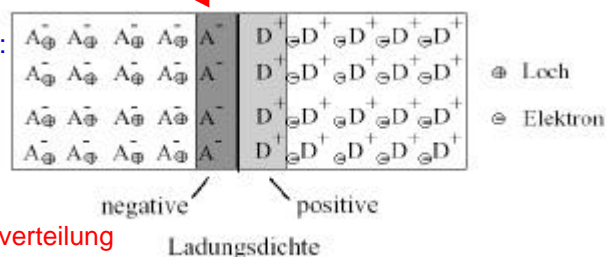
• Diffusionsströme:

- Elektronen diffundieren aus dem n-HL und hinterlassen positiv geladene Donatoren.
- Löcher diffundieren aus dem p-HL und hinterlassen negativ geladene Akzeptoren.



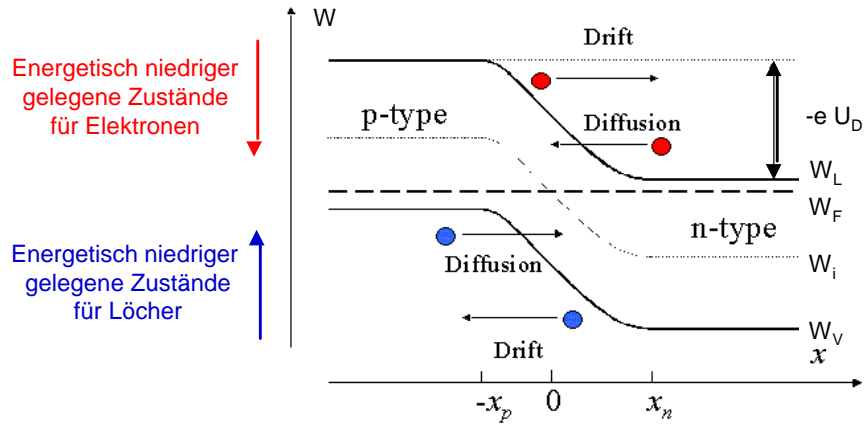
• Es bildet sich eine Raumladungszone (RLZ):

- In einer RLZ ist $\rho \neq 0$.
- Positive Raumladung $\rho > 0$ im n-HL.
- Negative Raumladung $\rho < 0$ im p-HL.



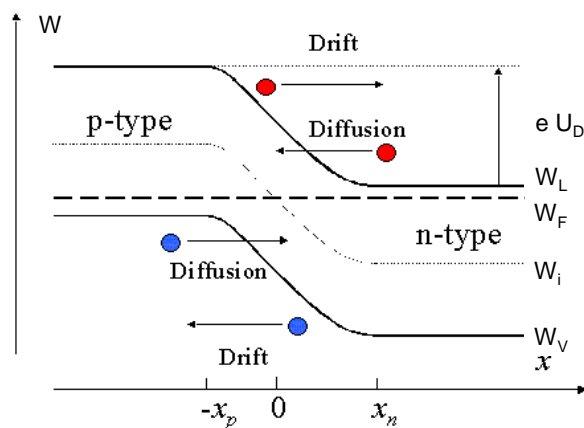
- Durch die neue Ladungsverteilung wird ein E-Feld aufgebaut, das einen Driftstrom der Ladungsträger bewirkt.

Banddiagramm des pn-Übergangs



- Das W-x-Banddiagramm zeigt die erlaubten Zustände der Ladungsträger als eine Funktion der Energie und des Ortes.
- Im Gleichgewicht kompensieren sich Drift- und Diffusionsstrom gerade.

Diffusionsspannung ?



Diffusionsspannung U_D

Die Diffusionsspannung wird ein entscheidender Parameter für die Beschreibung der nichtlinearen Kennlinie einer Diode sein. Ziel ist es nun, die Diffusionsspannung auf die Materialparameter wie Bandlücke und Dotierungsdichten zurückzuführen.

Die Diffusionsspannung ergibt sich aus der energetischen Differenz der Leitungsbandunterkanten weit weg vom pn-Übergang:

$$eU_D = W_L(-\infty) - W_L(\infty)$$

Für die Ladungsträgerdichten weit weg vom pn-Übergang gilt bei Störstellenerschöpfung:

$$(1) \quad p_p = N_V \exp\left(-\frac{W_F - W_V(-\infty)}{kT}\right) = n_A$$

$$(2) \quad n_n = N_L \exp\left(-\frac{W_L(\infty) - W_F}{kT}\right) = n_D$$

Diffusionsspannung U_D

Multiplikation von (1) und (2) ergibt: $n_A n_D = N_L N_V \exp\left(-\frac{W_L(\infty) - W_V(-\infty)}{kT}\right)$

Mit $W_V = W_L - W_G$ folgt: $n_A n_D = \underbrace{N_L N_V}_{=n_i^2 \text{ (gemäß Massenwirkungsgesetz)}} \exp\left(-\frac{W_L(\infty) - W_L(-\infty)}{kT}\right)$

$\frac{eU_D}{kT}$

Auflösen nach U_D ergibt:
$$U_D = \frac{kT}{e} \ln\left(\frac{n_A n_D}{n_i^2}\right)$$

Damit ist die Diffusionsspannung auf die intrinsische Ladungsträgerkonzentration und auf die Konzentrationen der Dotieratome (beides Materialparameter) zurückgeführt.

Diffusionsspannungen

$$U_D = U_T \ln \left(\frac{n_A n_D}{n_i^2} \right)$$

$$U_T = \frac{kT}{e}$$

$$n_i^2(T) = N_L N_V \exp \left(-\frac{W_G}{kT} \right)$$

T = 300 K	Ge	Si	GaAs
n_i^2/cm^{-6}	$5,8 \cdot 10^{26}$	$2,1 \cdot 10^{20}$	$3,2 \cdot 10^{12}$
n_A/cm^{-3}	10^{15}	10^{15}	10^{15}
n_D/cm^{-3}	10^{15}	10^{15}	10^{15}
U_D/V	0,18	0,56	1,0
n_A/cm^{-3}	10^{15}	10^{15}	10^{15}
n_D/cm^{-3}	10^{18}	10^{18}	10^{18}
U_D/V	0,36	0,73	1,18
n_A/cm^{-3}	10^{18}	10^{18}	10^{18}
n_D/cm^{-3}	10^{18}	10^{18}	10^{18}
U_D/V	0,53	0,90	1,35

- Die Diffusionsspannung hängt nur schwach von der Temperatur ab.
- Die Diffusionsspannung hängt nur schwach von den Dotierungen ab.
- Mit wachsender Dotierung geht $U_D \rightarrow E_g/e$

Diffusionsspannung

- Die Diffusionsspannung ist nicht an den Enden der p- und n-Zonen messbar !!
 - Meßbar ist nur die Differenz des elektrochemischen Potentials (des Fermi-Niveaus).
 - Dieses ist links und rechts exakt auf dem gleichen Niveau, daher kann keine Spannung abgegriffen werden.
 - Wenn z.B. Metallkontakte aufgesetzt werden zur Spannungsmessung, so bilden sich wieder eine Diffusionsspannung, die die eingebaute Spannung gerade kompensieren.

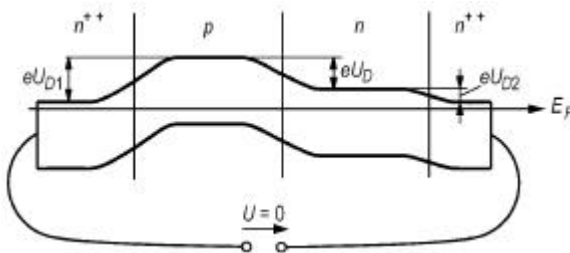
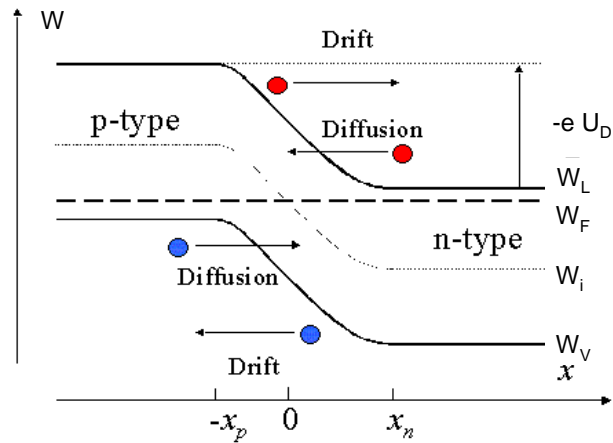


Abb: Spannungsmessung mit zwei n++-dotierten Bereichen

Einsteinrelationen ?



Einsteinrelationen

In der bisherigen Darstellung wurden die Beweglichkeiten $\mu_{n,p}$ und die Diffusionskonstanten $D_{n,p}$, die maßgeblich Drift- und Diffusionsströme bestimmen als unabhängige Parameter behandelt. Im folgenden wird gezeigt, dass diese beiden Größen nicht unabhängig voneinander sind.

Die bekannte Ladungsträgerstatistik erlaubt uns auch für den Bereich der Raumladungszone eine Vorhersage über die ortsabhängige Ladungsträgerdichte:

$$n(x) = N_L \exp\left(-\frac{W_L(\infty) - e\phi(x) - W_F}{kT}\right)$$

Hier kommt zum Ausdruck, dass in das elektrochemische Potential (das Fermi-Niveau) in einem Halbleiter das elektrische Potential $\phi(x)$ mit eingeht. Da wir eine Aussage über Diffusionskonstanten machen wollen, macht es Sinn, den obigen Term nach x abzuleiten:

$$\frac{\partial n(x)}{\partial x} = n(x) \frac{e}{kT} \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} = -n(x) \frac{e}{kT} E(x)$$

Hierbei ist $E = -\text{grad } \phi(x)$ das ortsabhängige elektrische Feld.

Einsteinrelationen

Nun kann ausgenutzt werden, dass im Gleichgewicht sich Drift- und Diffusionsströme gegenseitig kompensieren:

$$\text{Aus } j_F = -j_D \text{ folgt } en(x)\mu_n E(x) = -eD_n \frac{\partial n}{\partial x}$$

Setzt man nun die abgeleitete ortsabhängige Ladungsträgerdichte (3) in diese Beziehung ein, so ergibt sich:

$$en(x)\mu_n E(x) = (-eD_n) \left(-n(x)\right) \frac{e}{kT} E(x)$$

Aus diesem Ausdruck kann das meiste weggekürzt werden, so dass man zur sogenannten Einsteinrelation kommt:

$$D_n = \frac{kT}{e} \mu_n$$

Die gleiche Ableitung liesse sich auch für die Löcher machen und man kommt auf diese Weise zu:

$$D_p = \frac{kT}{e} \mu_p$$

Diese hier am Spezialfall pn-Übergang hergeleitete Beziehung ist eine viel allgemeinere Beziehung der statistischen Thermodynamik und gilt z. B. genauso auch bei der Bewegung von Ionen in einer Elektrolytlösung.

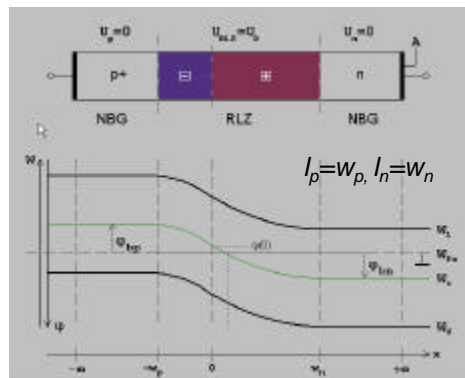
Schottky-Modell der pn-Diode

- Annahme: Räumlich abrupter Übergang von neutralen zu vollständig ionisierten Störstellen

$$r(x) = \begin{cases} 0 & : x \leq -l_p \\ -en_A & : -l_p < x \leq 0 \\ en_D & : 0 < x \leq l_n \\ 0 & : x > l_n \end{cases} \quad N_{A(D)} : \text{Dichte der Akzeptor- (Donator-) Atome}$$

Insgesamt Ladungsneutralität:

$$n_A \cdot l_p = n_D l_n$$



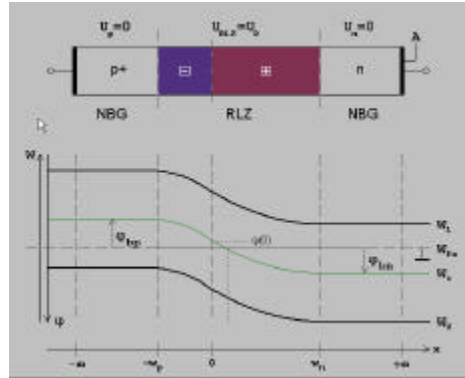
Berechnung des Bandverlaufs

Berechnung des Bandverlaufs durch Integration der Poisson-Glg.:

$$(H5) \quad \Delta j = -\frac{e}{\epsilon \epsilon_0} (\rho - n + n_D^+ - n_A^-); \quad \vec{E} = -\nabla j$$

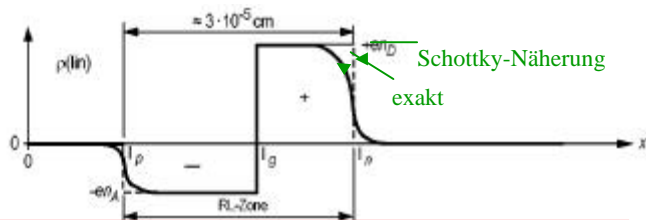
$$r(x) = \begin{cases} 0 & : x \leq -l_p \\ -en_A & : -l_p < x \leq 0 \\ en_D & : 0 < x \leq l_n \\ 0 & : x > l_n \end{cases}$$

$$\frac{\partial^2 j(x)}{\partial x^2} = \frac{-1}{\epsilon \epsilon_0} \begin{cases} 0 & : x \leq -l_p \\ -en_A & : -l_p < x \leq 0 \\ en_D & : 0 < x \leq l_n \\ 0 & : x > l_n \end{cases}$$

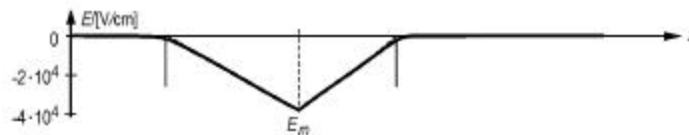


$$\begin{cases} \rho_p = -en_A \\ \rho_n = en_D \end{cases}$$

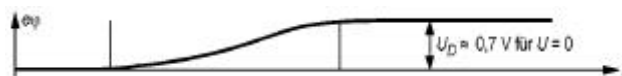
Schottky-Näherung



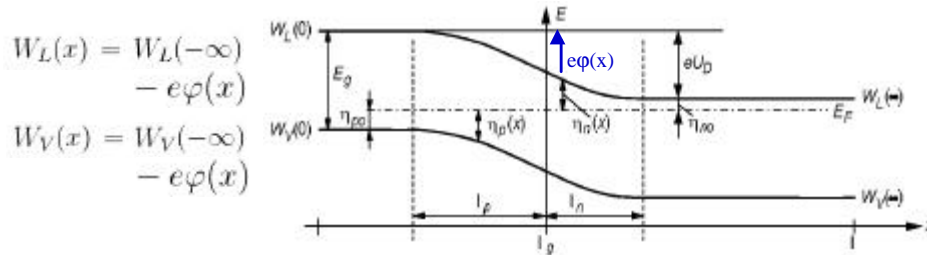
$$\frac{dE}{dx} = \frac{\rho}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad E(x) = -\frac{en_A}{\epsilon_r \epsilon_0} (x + l_p) \quad \Bigg| \quad E(x) = \frac{en_D}{\epsilon_r \epsilon_0} (x - l_n)$$



$$j(x) = -\int_{x_1}^{x_2} E(x) dx - j_0 \quad j(x) = \frac{en_A}{2\epsilon \epsilon_0} (x + l_p)^2 \quad \Bigg| \quad j(x) = -\frac{en_D}{2\epsilon \epsilon_0} (x - l_n)^2 + U_D$$



Berechnung des Bandverlaufs



Für eine quantitative Beschreibung der Kennlinie und für das Ersatzschaltbild (insbesondere Kapazität) ist die Kenntnis der Ausdehnung l_p+l_n der Raumladungszone von grosser Bedeutung. l_p und l_n sind allerdings bisher nur im Rahmen der Näherung Schottky-Modell als zusätzliche Parameter ins Spiel gekommen, ohne diese auf schon bekannte Halbleiterparameter zurückzuführen.

Die Ausdehnung kann aber nun berechnet werden. Hierzu wird die Ladungsneutralität ausgenutzt, sowie berücksichtigt, dass das elektrische Potential bei $x=0$ stetig sein muss:

Ausdehnung der RLZ

Ladungsneutralität:
$$n_D l_n = n_A l_p \Rightarrow l_p^2 = \frac{n_D^2}{n_A^2} l_n^2 \quad (4)$$

Für den Potentialverlauf im p- bzw. im n-Bereich wurden oben explizite Ausdrücke abgeleitet. Aus der Forderung nach Stetigkeit von $j(x)$ an der Stelle $x=0$ folgt:

$$\frac{en_A}{2ee_0} l_p^2 = -\frac{en_D}{2ee_0} l_n^2 + U_D$$

Durch Ausnutzen der Neutralitätsbedingung (4) kommt man zu:

$$l_n^2 \left(\frac{en_A}{2ee_0} \frac{n_D^2}{n_A^2} + \frac{en_D}{2ee_0} \right) = U_D$$

Auflösen nach l_n liefert dann:

$$l_n = \sqrt{\frac{2ee_0 U_D}{e} \frac{\frac{n_A}{n_D} + \frac{n_D}{n_A}}{n_D + n_A}}$$

Ebenso kann dann l_p bestimmt werden:

$$l_p = \sqrt{\frac{2ee_0 U_D}{e} \frac{\frac{n_D}{n_A} + \frac{n_A}{n_D}}{n_D + n_A}}$$

Ausdehnung der RLZ

Die Gesamtausdehnung der Raumladungszone ergibt sich dann als Summe der einzelnen Breiten der RLZs:

Mit ein bisschen Bruchrechnung kommt man zu:

$$l = l_p + l_n = \dots = \sqrt{\frac{2e\epsilon_0 U_D}{e}} \sqrt{\frac{1}{n_D} + \frac{1}{n_A}}$$

Generell gilt also, dass die RLZ umso dünner ist, je stärker die Dotierung der Halbleitermaterialien ist.

Die nachfolgende Tabelle gibt einige konkrete Zahlenwerte für gängige Halbleitermaterialien an.

Ausdehnung der Raumladungszone

- Die Gesamtausdehnung der RLZ ist:

$$l = l_p + l_n = \sqrt{\frac{2\epsilon_r\epsilon_0 U_D}{e}} \left(\frac{1}{n_A} + \frac{1}{n_D} \right)$$

- Die Ausdehnung teilt sich wie folgt auf den n-HL und den p-HL auf:

$$l_p = l \frac{n_D}{n_A + n_D} \quad l_n = l \frac{n_A}{n_A + n_D}$$

- Je nach Dotierung betragen die Ausdehnungen wenige Nanometer bis zu Mikrometern.

- Ist ein HL wesentlich schwächer dotiert als der andere, befindet sich die RLZ fast ausschließlich im schwach dotierten HL.

T = 300 K	Ge	Si	GaAs
ϵ_r	16	11,9	13,1
n_A/cm^{-3}	10^{15}	10^{15}	10^{15}
n_D/cm^{-3}	10^{15}	10^{15}	10^{15}
U_D/V	0,18	0,56	1,0
$l_p/\mu\text{m}$	0,4	0,6	0,85
$l_n/\mu\text{m}$	0,4	0,6	0,85
n_A/cm^{-3}	10^{15}	10^{15}	10^{15}
n_D/cm^{-3}	10^{18}	10^{18}	10^{18}
U_D/V	0,36	0,73	1,18
$l_p/\mu\text{m}$	0,8	1	1,3
$l_n/\mu\text{m}$	0,0008	0,001	0,0013
n_A/cm^{-3}	10^{18}	10^{18}	10^{18}
n_D/cm^{-3}	10^{18}	10^{18}	10^{18}
U_D/V	0,53	0,9	1,35
$l_p/\mu\text{m}$	0,02	0,02	0,03
$l_n/\mu\text{m}$	0,02	0,02	0,03