

Bindungsmodell der Halbleiter

Eine sehr anschauliche, vorwiegend qualitative Beschreibung der elektrischen Leitungsvorgänge in Halbleitern ist mit Hilfe des Bindungsmodells möglich. Dabei geht man von dem in der Chemie gebräuchlichen Begriff der Valenzen, die durch die Valenzelektronen zustande kommen, aus. Diese Valenzen führen zu Bindungen zwischen den Atomen. Bei ihrem Aufbrechen – als Folge der endlichen Temperatur – werden Elektronen frei, die für den Ladungserhalt zur Verfügung stehen. Dabei werden den Elektronen im Wesentlichen die Eigenschaften klassischer Teilchen zugeordnet.

Die Frage nach der Ursache der Valenzen führt in das Gebiet der Atomphysik und kann nur durch die Quantenmechanik beantwortet werden. Diese angewendet auf Halbleiterkristalle, ergibt sich das Bändermodell, in welchem als entscheidende Größe die Energie der Elektronen, gegebenenfalls als Funktion des Impulses der Elektronen, betrachtet wird. Dieses Modell ermöglicht quantitative Aussagen.

Wegen der Anschaulichkeit wird zunächst das Bindungsmodell beschrieben. Das Bändermodell wird in groben Zügen erklärt.

Gitterstruktur der Halbleiter

Der Aufbau der Materie ist gekennzeichnet durch eine Quantelung der Masse und der Ladung. Nach dem Bohrschen Atommodell wird ein positiv geladener Atomkern von Elektronen „umkreist“. Die Masse ist zum größten Teil im Kern konzentriert, der „Abmessungen“ der Größenordnung 10^{-15}m hat. Die Elektronenhülle – und damit das Atom – hat „Abmessungen“ der Größenordnung vom 10^{-10}m ($= 0,1\text{ nm}$). Die chemische und elektrischen Eigenschaften der Stoffe werden durch die Elektronenhülle bestimmt, deren Eigenschaften durch die Quantenmechanik zufriedenstellend beschrieben werden. Das Elektron hat eine Ruhemasse $m_0=9,11\cdot 10^{-31}\text{kg}$ und eine Ladung $-e = -1,6\cdot 10^{-19}\text{C}$.

I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
H 1							He 2
Li 3		B 5	C 6				Ne 10
Na 11		Al 13	Si 14	P 15	S 16		Ar 18
		Ga 31	Ge 32	As 33			
	Cd 48	In 49		Sb 51			

Abbildung 1 -Auszug aus dem periodischen System der Elemente

Die Elektronen der Elektronenhülle des Atoms sind in sogenannten Schalen angeordnet, wobei jeder Schale eine bestimmte, nicht überschreitbare Anzahl von Elektronen zugeordnet ist. (Pauli Prinzip – Haupt- Neben- und Spinquantenzahlen). Ausgehend vom einfachsten Atom, dem Wasserstoffatom, füllen sich mit zunehmendem Atomgewicht die Schalen durch Elektronen von innen.

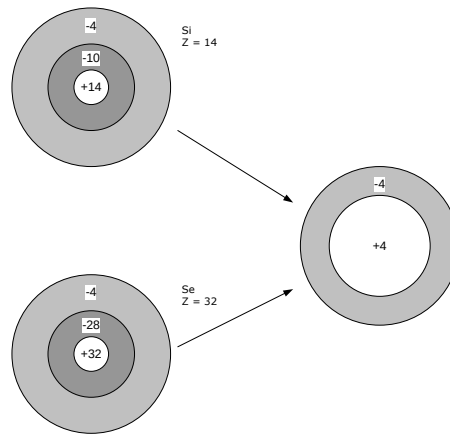


Abbildung 2- Ersatz von Atomkernen und abgeschlossenen Schalen durch den Atomrumpf

Wenn jeweils eine Schale vollständig gefüllt ist, erhält man ein chemisch besonders stabiles Element, ein Edelgas. Dieser Schalenaufbau erklärt das periodische System der Elemente. Die Edelgase mit ihren abgeschlossenen Schalen gehören zur VIII. Gruppe. Elemente der I. Gruppe (Alkalimetalle) haben außer abgeschlossenen Schalen gerade 1 Elektron welches leicht abgetrennt werden kann, oder welches zur Bindung mit einem anderen Atom dienen kann. Man nennt daher die Elemente der I. Gruppe einwertig, das Elektron in der nicht abgeschlossenen Schale Valenzelektron.

Der technisch wichtigste Halbleiter, Silizium, ist ebenso wie Germanium ein Element der IV. Gruppe, also 4-wertig. Für Ge und Si erkennt man, dass die Anordnung in den nicht abgeschlossenen Schalen gleich ist.

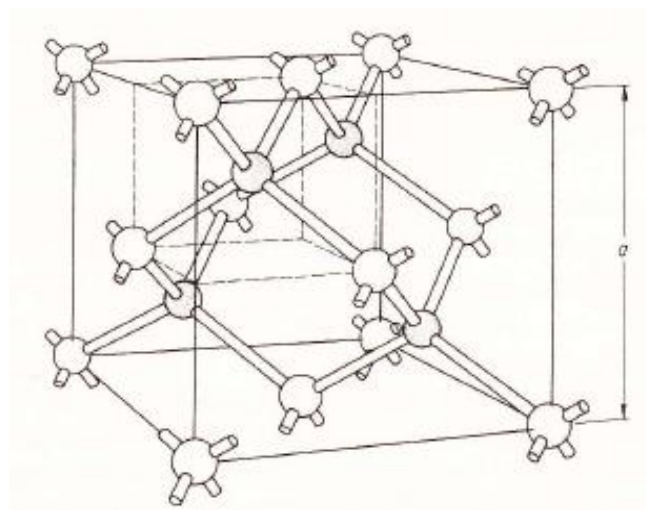


Abbildung 3 - Kristallgitter vom Diamant- und Zinkblendetyp

Abbildung 2 zeigt schematisch Atomkern, abgeschlossene Elektronenschalen und Valenzelektronen für Si und Ge. Für die weitere Betrachtung ist es zulässig, den Atomkern und die abgeschlossenen Schalen als eine vierfach positiv geladene Einheit (Atomrumpf) anzusehen.

Sowohl Si als auch Ge haben 4 Valenzelektronen. Die Valenzelektronen sind gerichtet, und zwar in diesen Fällen so, dass sie zu den vier flächendiagonal gegenüberliegenden Eckpunkten eines Würfels zeigen, in dessen Mitte sich das betreffende Atom befindet (Abbildung 3, gestrichelt gezeichneter Würfel). Nachbaratome werden sich daher bevorzugt in dieser Richtung anlagern.

Die Wechselwirkung zwischen den Atomen ist gekennzeichnet durch die abstoßenden Kräfte zwischen den gleichnamigen Ladungen und die Anziehungskräfte der Valenzelektronen auf Grund ihrer Wechselwirkung. Für ein Wasserstoffmolekül zeigt die Abbildung 4 die Energie in Abhängigkeit vom Abstand der Atomkerne; dies führt zu einem bevorzugten Abstand zwischen den Atomkernen.

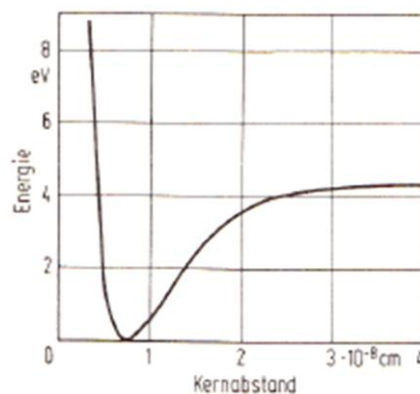


Abbildung 4 - Energie eines Wasserstoffmoleküls als Funktion des Abstands der Atomkerne

Diese Tatsache zusammen mit der bereits erwähnten gerichteten Valenz führt zu einem regelmäßigen Kristallaufbau, der unter geeigneten Erstarrungsbedingungen des Materials entsteht.

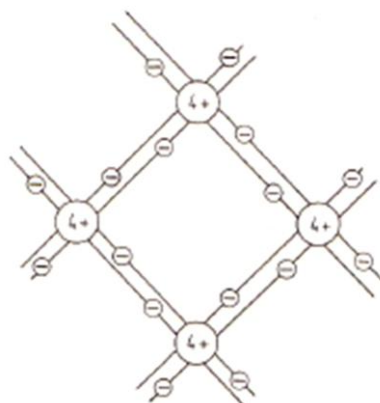


Abbildung 5 - Ebenes Schema für die Diamantgitterstruktur

In Abbildung 3 ist die sogenannte Elementarzelle des Kristallgitters abgebildet, die in jeder der bevorzugten Kristallachsen eine Periode des Kristallgitters umfasst. Im Fall des hier gezeichneten für Si und Ge gültigen Diamantgitters, ist die Elementarzelle ein Würfel mit den angegebenen Kantenlängen, den sogenannten Gitterkonstanten a^1 .

Kohlenstoff als Einkristall (Diamant) hat zwar die gleiche Gitterstruktur wie Si und Ge; seine Leitfähigkeit ist jedoch so klein, dass er zu den Isolatoren gezählt wird.

Da die Darstellung des dreidimensionalen Kristallgitters umständlich ist, verwendet man meist ein ebenes Schema zur Beschreibung der Vorgänge im Kristallgitter.

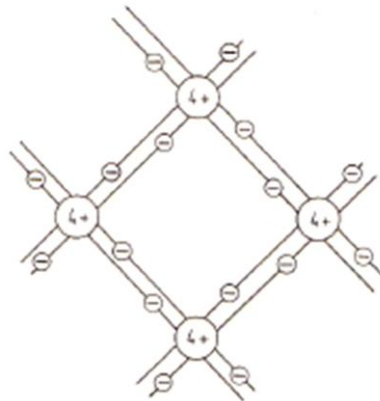


Abbildung 6 -Ebenes Schema für die Diamantgitterstruktur

Abbildung 6 zeigt dieses für Ge und Si gleichermaßen gültige Schema; gezeichnet sind die vierfach positiven Atomrümpfe und die jeweils zu den Atomen gehörenden einfach negativen Valenzelektronen.

Außer den Elementhalbleitern Ge und Si gibt es die Verbindungshalbleiter. Abbildung 7 zeigt die Elektronenanordnung der beiden Elemente Ga (3-wertig) und As (5-wertig), die als stöchiometrische Verbindung den Verbindungshalbleiter GaAs ergeben.

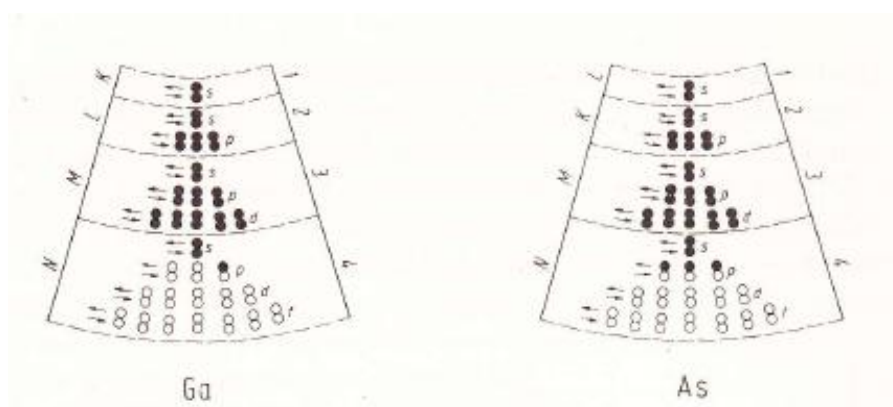


Abbildung 7 - Elektronenanordnung der Elemente Ga und As.

Das Kristallgitter für GaAs ist von der sogenannten Zinkblendestruktur. Man hat in Abbildung 3 abwechseln Si durch Ga und As zu ersetzen (Ga-Atome dunkel gezeichnet). Solche Verbindungshalbleiter gibt es in großer Zahl. Bestehen sie aus Elementen der III.

¹ Gitterkonstante C: $a = 0,356 \text{ nm}$, Si: $a = 0,357 \text{ nm}$, Ge: $a = 0,357 \text{ nm}$, GaAs: $a = 0,357 \text{ nm}$.

und V. Gruppe, so werden sie $A^{III}B^V$ Verbindungen genannt; demgemäß bestehen $A^{II}B^{VI}$ Verbindungen aus den Elementen der II und VI Gruppe.

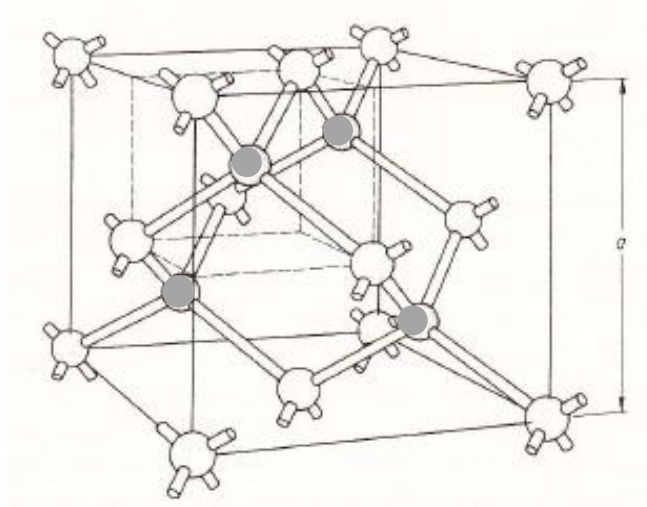


Abbildung 8 - Kristallgitter GaAs, Ga Atome dunkel gezeichnet

Diese aus 2 Elementen bestehenden Verbindungshalbleiter nennt man binäre Halbleiter. Analog gibt es die aus 3 Elementen zusammengesetzten ternären Halbleiter. Hier werden beispielsweise die beiden 3-wertigen Elemente Ga und Al zusammen in gleicher Anzahl wie das 5-wertige Element As in ein Kristallgitter eingebaut; man erhält $Ga_xAl_{1-x}As$ mit $0 \leq x \leq 1$. Als entsprechend duale Möglichkeit existieren $GaAs_xP_{1-x}$. Die weitaus größte Verbreitung haben also die Elementhalbleiter und zwar wegen der besseren technischen Eigenschaften das Silizium. Wenn jedoch, wie zum Beispiel in der Optoelektronik, Eigenschaften gebraucht werden, welche Elementhalbleiter nicht haben, so muß man diese binären bzw. ternären Verbindungshalbleiter benutzen.

Eigenleitung

Die bisher angestellten Überlegungen gelten für reines Halbleitermaterial bei der absoluten Temperatur $T \rightarrow 0$. Bei endlicher Temperatur T führen die Atome Schwingungen um die Ruhelage aus, und es besteht eine endliche Wahrscheinlichkeit für das Aufbrechen einer Bindung. Ein ursprünglich an der Bindung beteiligtes Elektron ist losgelöst und frei im Kristallgitter beweglich, so dass es bei Anlegen eines elektrischen Feldes zu einem elektrischen Strom beitragen kann. Aus dem Valenzelektron ist ein Leitungselektron geworden.

Andererseits hinterlässt dieses Elektron eine Lücke, die im Ganzen gesehen – unter Einbezug der Ladungen der Atomrümpfe – einfach positiv geladen ist ($+e$). Eines der benachbarten Valenzelektronen kann nun diese Lücke schließen und dabei eine neue erzeugen. Diese Wanderung verschiedener Elektronen kann äquivalent ersetzt werden durch die Wanderung einer positiven Ladung, die ebenso wie das Leitungselektron zum Ladungstransport beiträgt. Dieses äquivalente, positiv geladene Teilchen nennt man Defektelektron oder Loch.

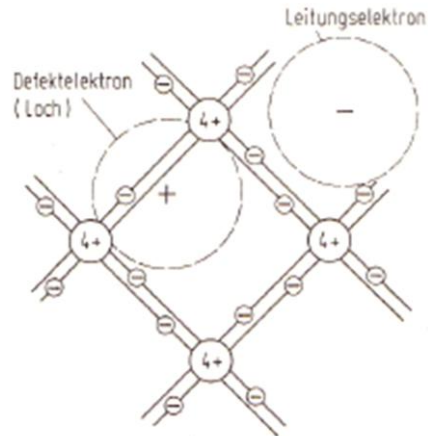


Abbildung 9 - Eigenleitung mit Leitungselektron und Defektelektron (Loch)

Man nennt den soeben geschilderten Leitungsmechanismus Eigenleitung, da er im vollkommen reinen Halbleitermaterial auftritt. Ein Kennzeichen der Eigenleitung ist die Tatsache, dass die Dichte der Leitungselektronen (Anzahl je Volumeneinheit) n gleich der Dichte der Defektelektronen p ist:

$$n = p$$

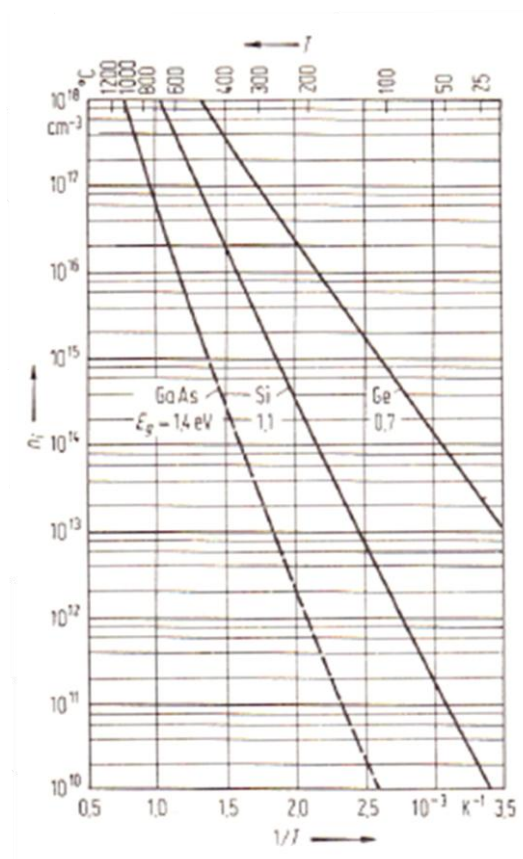


Abbildung 10 - Temperaturabhängigkeit der Eigenleitungsträgerdichten

In der bisherigen Betrachtung wurden Elektronen und Löcher wie klassische Teilchen beschrieben. Eine Abschätzung der „Lokalisierung“ dieser Teilchen mit Hilfe der Unschärferelation zeigt, dass man sich Leitungselektronen bzw. Löcher auf etwa 10^4

Atome „verschmiert“ denken muss. Dies zeigt, dass das Bild des von Lücke zu Lücke springenden Valenzelektrons nur ein dürftiges Modell zur Erklärung des Begriffs Defektelektron bzw. Loch ist. Das Konzept des positiv geladenen Defektelektrons hingegen kann in weiten Bereichen Verwendung finden.

Zur Erzeugung eines Elektron-Lochpaares ist eine bestimmte Mindestenergie E_g (g von gap = Bandabstand) erforderlich (Ionisationsenergie im Kristall). Diese Energie ist Materialabhängig und beträgt bei Raumtemperatur (300 K) ungefähr:

$$\begin{aligned}\text{Si:} & \quad E_g \approx 1,1 \text{ eV,} \\ \text{Ge:} & \quad E_g \approx 0,7 \text{ eV,} \\ \text{GaAs:} & \quad E_g \approx 1,4 \text{ eV.}\end{aligned}$$

Je nach Messbedingungen ergeben sich für E_g verschiedene Werte. (elektrisch – optisch). Es wurde festgestellt, dass bei endlicher Temperatur eine endliche Wahrscheinlichkeit für das Aufbrechen einer Bindung besteht. Stellt man sich vor, dass man das Halbleitermaterial sprunghaft von der Temperatur 0 auf eine endliche Temperatur T gebracht hat, so wird pro Zeiteinheit eine ganz bestimmte Anzahl von Bindungen aufbrechen. Diese Rate ist konstant, solange – wie in der Praxis der Fall – die Anzahl der noch vorhandenen Bindungen praktisch unverändert ist. Die Anzahl der Elektronen und Löcher wächst an, bis ein gegenläufiger Prozess, die Rekombination, der Generation das Gleichgewicht hält. Bei der Rekombination wird ein Leitungselektron von einer Lücke (Loch) eingefangen, und es wird Energie – meist Wärme frei. Die Wahrscheinlichkeit für einen Rekombinationsprozess wächst proportional mit der Anzahl der verfügbaren Partner (Elektronen und Löcher). Es wird sich der her der Gleichgewichtszustand mit einer ganz bestimmten Trägerkonzentration n (Elektronen) p (Löcher) einstellen, für den die Generationsrate gleich der Rekombinationsrate ist. Die Trägerdichte im eigenleitenden Halbleiter $n = p = n_i$ ist stark temperaturabhängig; sie hat für Zimmertemperatur die Werte:

$$\begin{aligned}\text{Si:} & \quad n_i \approx 1,5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}, \\ \text{Ge:} & \quad n_i \approx 2,5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}, \\ \text{GaAs:} & \quad n_i \approx 1,8 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-3}.\end{aligned}$$

Der Index i kennzeichnet den eigenleitenden (intrinsic) Zustand. Die Abbildung 10 zeigt die Temperaturabhängigkeit der Eigenleitungsträgerdichten im halblogarithmischen Maßstab. Der starke Unterschied der Trägerdichten ist im Wesentlichen eine Folge der verschiedenen erforderlichen Energien E_g für die Paarbildung. Bedenkt man, dass die Dichte der Atome bei etwa $5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ liegt, so erkennt man, dass bei eigenleitenden Si eine Bindung von etwa 10^{12} Bindungen gelöst ist (ein Leitungselektron auf 10^{12} Valenzelektronen); bei eigenleitenden Ge ist bei Zimmertemperatur etwa ein Leitungselektron auf 10^9 Valenzelektronen anzutreffen.

Obiges Gedankenexperiment sollte vor allem darauf hinweisen, dass nicht eine bestimmte Anzahl von Leitungselektronen gebildet wird und bestehen bleibt, sondern sich durch die gegenläufigen, ständig stattfindenden Prozesse der Generation und Rekombination ein Gleichgewicht einstellt. Diese Feststellung ist wichtig für Ausgleichsvorgänge (Relaxationen), bei denen durch das Überwiegen des einen oder anderen Effekts die Trägerdichten den angegebenen Gleichgewichtsdichten zustreben.

Störstellenleitung

Die Ladungsträgerdichte ist nach den eben geführten Überlegungen für ein bestimmtes hochreines Material nur von der Temperatur abhängig. Die Entwicklung der Halbleiter Bauelemente war erst möglich, als man die Ladungsträgerdichten gezielt durch besondere Maßnahmen festlegen konnte. Der Einbau von Fremdatomen in reines Halbleitermaterial – die Dotierung – dient diesem Zweck.

n-Typ Halbleiter

Wird an den Gitterplatz eines Halbleiteratoms – Ge oder Si – ein fünfwertiges Atom gebracht, so ist ein Valenzelektron nicht durch Bindungen abgesättigt. Dieses Elektron kann sehr leicht vom Dotierungsatom gelöst werden und ist dann als Leitungselektron verfügbar. (Abbildung 11)

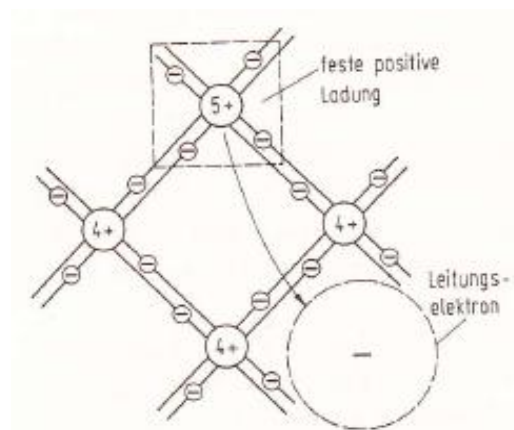


Abbildung 11 - n-Typ Störstellenleitung, Leitungselektron übertrieben lokalisiert

Die für die Ablösung eines nicht an der Bindung beteiligten Elektrons erforderlichen Energie liegt in der Größenordnung von 0,01 eV, ist also wesentlich kleiner als die zur Lösung einer Bindung erforderliche Energie. Nach der Ionisation bleibt außer dem Leitungselektron noch ein positiv geladenes, nicht bewegliches Ion (Atomrumpf) bestehen.

Der Halbleiter hat daher als freie Ladungsträger negativ geladene Teilchen, er wird n-Leitend oder n-Typ Halbleiter genannt. Das Dotierungsatom nennt man Donator (Atom), da es ein Elektron gespendet hat. Wesentlich ist die positive Ladung des festen Donatorions, welche dafür sorgt, dass sich Elektronen im Material aufhalten, um im Mittel

Ladungsneutralität zu ergeben. Eine Abweichung von der Neutralität führt nämlich zu starken elektrischen Feldern, die Konvektionsströme zur Folge haben, so dass sich innerhalb kürzester Zeit (ca. 10^{-12} s) eine Rückkehr zur Neutralität erfolgt.

p-Typ Halbleiter

Analog lässt sich reines Halbleitermaterial – Ge oder Si – durch Einbau eines dreiwertigen Atoms in ein p-leitendes Material dotieren. Durch den Einbau fehlt ein Valenzelektron zur Bindung. Diese Lücke ist allerdings zunächst nicht beweglich, da sie an das dreiwertige Atom gebunden ist. Die Zufuhr einer geringen Energie (Größenordnung 0,01 eV), dass ein normales Valenzelektron des Kristallgitters an das Dotierungsatom, den Akzeptor, gebunden wird. Es entsteht dadurch ein Defektelektron und ein negativ geladenes Ion. (Abbildung 12)

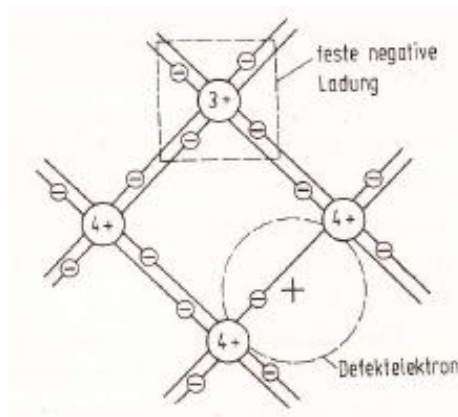


Abbildung 12 - p-Type Störstellenleitung; Defektelektron übertrieben lokalisiert

Der Unterschied zwischen den Ionisationsenergien von Dotierungsatomen und den Ionisationsenergien im reinen (intrinsischen) Halbleiterkristall ergibt bereits bei kleinen Dotierungsdichten ein Übergewicht dieser Störstellenleitung gegenüber der Eigenleitung. Nimmt man an, dass bei Zimmertemperatur jedes Dotierungsatom ionisiert ist, so ergibt beispielsweise eine meist gar nicht vermeidbare Dotierungsdichte von 10^{13} cm^{-3} in Si bereits eine n- bzw. p-Leitung, die bedeutend wirksamer als die Eigenleitung ist.

Wesentlich an der Störstellenleitung ist einmal die Tatsache, dass die Leitfähigkeit durch die Anzahl der Dotierungsatome auf den gewünschten Wert eingestellt werden kann, vor allem aber die Möglichkeit, p- und n-Leitendes Material wahlweise herzustellen. Man nennt die Elektronen im n-Halbleiter Majoritätsladungsträger und Löcher Minoritätsladungsträger; analog sind Löcher im p-Halbleiter Majoritätsladungsträger und Elektronen Minoritätsladungsträger.