

2. Bandstrukturen

2.1. Entstehung von Bandstrukturen

Die Entstehung von Bandstrukturen kann man auf verschiedene Arten erklären. Die beiden gängigsten Modelle sind:

1. Überlagerung von Atomorbitalen

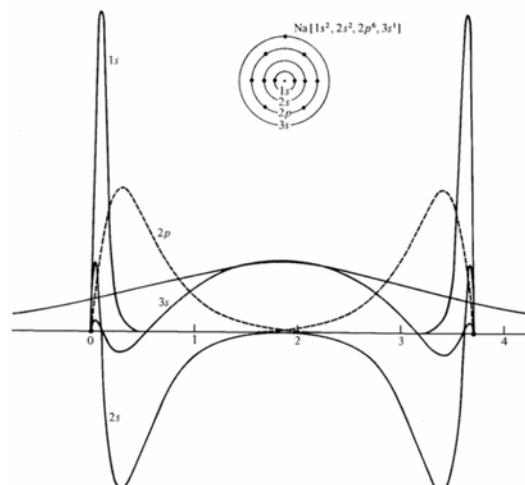
Die Orbitale der Atome in einem Festkörper überlagern sich. Durch die Wechselwirkung mit den benachbarten Atomen werden aus den scharfen Energieniveaus der isolierten Atome Energiebänder.

2. Elektron in periodischem Potential (Wellenbild)

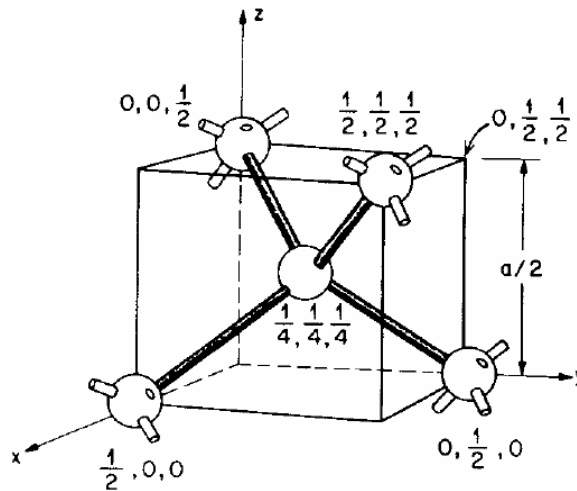
Hier betrachtet man ein Elektron als eine Welle, die sich in einem periodischen Potential ausbreitet. Durch das Potential ändert sich die Dispersion des Elektrons, es kommt zu Bildung von Energiebändern und Bandlücken.

Neben der Veranschaulichung von Bandstrukturen können beide Modelle auch zur Berechnung von Energiebändern verwendet werden. Bei Rechnungen nach dem ersten Modell (Überlagerung von Atomorbitalen) spricht man von ‚tight binding‘ Verfahren, Rechnungen im Wellenbild werden als ‚plane wave expansion‘ (Entwicklung nach ebenen Wellen) bezeichnet.

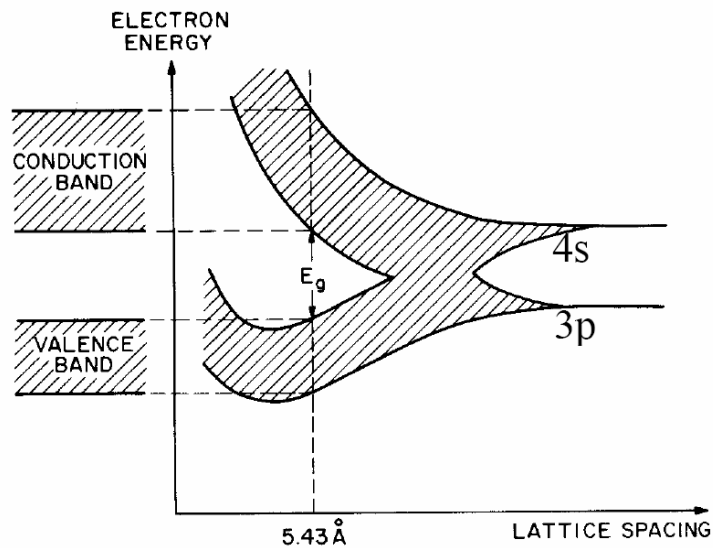
Überlagerung von Atomorbitalen



Orbitale zweier Na-Atome im Abstand von 3.7 Å. Die 3s Orbitale besitzen den grössten Überlapp. Die Überlagerung der Atomorbitale führt zur Bildung von bindenden und anti-bindenden Orbitalen.



Bindungen im Si Kristall. Jedes Si-Atom besitzt vier Bindungen in Tetraederkonfiguration zu den nächsten Nachbarn.



Energiezustände als Funktion des Atomabstands.

Bei Annäherung der Atome spalten die scharfen atomaren Energieniveaus in Bänder auf. Im Gleichgewichtsabstand (Gitterkonstante von 5.43 Å) sind die Zustände in komplett mit Elektronen besetztes Valenzband und ein leeres Leitungsband aufgespalten.

9. Halbleiter

In Kap. 8 haben wir gesehen, daß nur ein teilweise gefülltes Band zum elektrischen Strom beitragen kann. Ein Material, daß nur vollständig gefüllte und vollständig leere Bänder aufweist ist demnach ein Isolator. Ist jedoch der energetische Unterschied zwischen der Oberkante des höchsten besetzten Bandes (**Valenzband**) und der Unterkante des niedrigsten unbesetzten Bandes (**Leitungsband**) in der Größenordnung von etwa 1 eV, so macht sich bei nicht zu niedrigen Temperaturen die Aufweichung der Fermi-Verteilung bemerkbar: Elektronen von der Valenzbandkante können thermisch aktiviert ins Leitungsband gelangen, und dort einen elektrischen Strom tragen. In diesem Fall spricht man von einem Halbleiter. Die Energiebandverhältnisse für ein Metall, einen Halbleiter und einen Isolator sind in Fig. 9.1 skizziert.

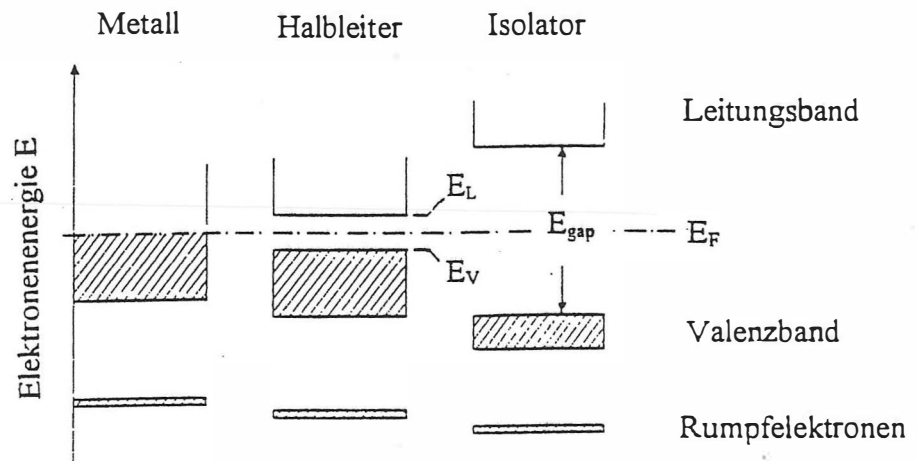


Fig. 9.1: Energie-Termschema für ein Metall, einen Halbleiter und einen Isolator

In Tab. 9.1 ist für die wichtigsten Halbleiter der Wert der Energielücke bei $T = 300 \text{ K}$ angegeben:

	$E_{\text{gap}} [\text{eV}]$
Si	1.12
Ge	0.67
GaAs	1.43
InSb	0.18

Tab. 9.1: Gap-Energien der gebräuchlichsten Halbleiter für $T = 300 \text{ K}$

9.1 Der intrinsische Halbleiter

Als intrinsisch bezeichnet man einen Halbleiter, bei dem freie Elektronen (und Löcher) nur durch elektronische Anregungen aus dem Valenzband ins Leitungsband gelangen. Die Zahl der Elektronen im Leitungsband sei $n = N/V$. Wir erhalten n über die Beziehung:

$$n = 2 \cdot \int_{E_L}^{\infty} D_L(E) \cdot f(E) \cdot dE \quad (9.1)$$

Dabei ist $D_L(E)$ die Zustandsdichte im Leitungsband und $f(E)$ die Fermi-Verteilungsfunktion. Analog findet man für die Löcher im Valenzband:

$$p = 2 \cdot \int_{-\infty}^{E_V} D_V(E) \cdot [1 - f(E)] \cdot dE \quad (9.2)$$

Die Verhältnisse sind schematisch in Fig. 9.2 dargestellt.

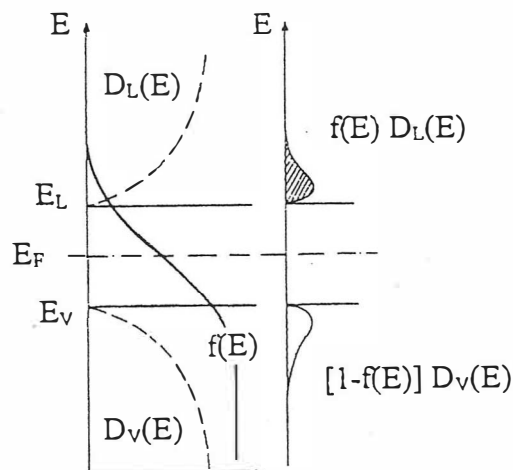


Fig. 9.2: Fermi-Funktion $f(E)$, Zustandsdichte $D(E)$ und Elektronen- bzw. Löcherkonzentration im Leitungs- und Valenzband

Setzen wir z.B. im Leitungsband die folgende Dispersionsrelation an:

$$E(\vec{k}) = E_L + \frac{\hbar^2}{2} \cdot \left(\frac{k_x^2}{m_{xx}^*} + \frac{k_y^2}{m_{yy}^*} + \frac{k_z^2}{m_{zz}^*} \right),$$

so finden wir für die Zustandsdichte der Elektronen im Leitungsband:

$$D_L(E) = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (m_{xx}^* \cdot m_{yy}^* \cdot m_{zz}^*)^{\frac{1}{2}} (E - E_L)^{\frac{1}{2}} \quad (9.3)$$

mit $E > E_L$. Im Falle isotroper effektiver Masse $m_{xx}^* = m_{yy}^* = m_{zz}^* \equiv m_n^*$ wird dies:

$$D_L(E) = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_n^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot (E - E_L)^{\frac{1}{2}} \quad E > E_L \quad (9.4)$$

Analog für die Löcher im Valenzband:

$$D_V(E) = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot (E_V - E)^{\frac{1}{2}} \quad E_V > E \quad (9.5)$$

Wir wollen nun die Frage beantworten, wo die Fermi-Energie E_F bzw. das chemische Potential μ im Falle eines Halbleiters liegt. Dazu berechnen wir zunächst, unter Zuhilfenahme der Zustandsdichten nach Gl. (9.4) und (9.5), die Elektronen- bzw. Löcherkonzentration nach Gl. (9.1) und (9.2):

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_n^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{E_L}^{\infty} \frac{(E - E_L)^{\frac{1}{2}}}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1} dE \quad (9.6)$$

$$p = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{E_V} \frac{(E_V - E)^{\frac{1}{2}}}{\exp\left(\frac{\mu - E}{kT}\right) + 1} dE \quad (9.7)$$

Wir substituieren:

$$\frac{E - E_L}{kT} = x \quad \frac{E_V - E}{kT} = y$$

$$\frac{\mu - E_L}{kT} = \alpha \quad \frac{E_V - \mu}{kT} = \beta$$

$$\frac{E - \mu}{kT} = x - \alpha \quad \frac{\mu - E}{kT} = y - \beta$$

$$dE = kT dx \quad dE = -kT dy$$

Gl. (9.6) und (9.7) werden:

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} n_0 \int_{E_L}^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{\exp(x - \alpha) + 1} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} n_0 F_{1/2}(\alpha) \quad (9.8)$$

$$p = \frac{2}{\sqrt{\pi}} p_0 \int_{-\infty}^{E_V} \frac{\sqrt{y} dy}{\exp(y - \beta) + 1} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} p_0 F_{1/2}(\beta) \quad (9.9)$$

$F_{1/2}(\alpha, \beta)$ bezeichnet man als Fermi-Integral. Die n_0 und p_0 sind effektive Ladungsträgerkonzentrationen bzw. effektive Zustandsdichten:

$$(n, p)_0 = \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{2 m_{(n,p)}^* kT}{\hbar^2 \pi} \right)^{3/2} \quad (9.10)$$

Wir wissen bereits aus Kapitel 7, daß sich das Fermi-Gas oberhalb der sogenannten Entartungstemperatur T_E wie ein klassisches Gas verhält. Diese Temperatur ist für ein typisches Metall wie Cu etwa $3 \cdot 10^4$ K (dieser Temperatur entspricht eine kritische Ladungsträgerkonzentration). Oberhalb dieser Temperatur kann das Fermi-Gas wie ein klassisches Gas beschrieben werden. D.h. im Falle der Entartung kann die Fermi-Dirac-Statistik ersetzt werden durch die Boltzmann-Statistik.

Wir nehmen nun an, daß im Halbleiter normalerweise gilt:

$$n \ll n_{\text{krit.}}$$

$$p \ll p_{\text{krit.}}$$

d.h. die Elektron- und Lochkonzentrationen sind nicht entartet. In dieser Näherung der Nichtentartung gilt:

$$\begin{array}{l} E_L - \mu \gg kT \\ \mu - E_V \gg kT \end{array} \quad \text{oder} \quad \begin{array}{l} \alpha \ll -1 \\ \beta \ll -1 \end{array}$$

D.h. von den Anregungsenergien her sind wir im Grenzfall tiefer Temperaturen. Die Fermi-Integrale sind nun lösbar mit:

$$x - \alpha \gg 1$$

Wir finden für die Fermi-Integrale:

$$F_{\frac{1}{2}}(\alpha) = \int_{E_L}^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{\exp(x - \alpha) + 1} \approx e^{\alpha} \cdot \int_0^{\infty} \sqrt{x} \cdot e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{\alpha}$$

Gl. (9.8) und (9.9) werden somit zu:

$$n = n_0 \cdot \exp\left(\frac{\mu - E_L}{kT}\right) \quad (9.11)$$

$$p = p_0 \cdot \exp\left(\frac{E_V - \mu}{kT}\right) \quad (9.12)$$

Dabei sind n_0 und p_0 die effektiven Zustandsdichten nach Gl. (9.10). Die beiden Gleichungen (9.11) und (9.12) lassen die formale Interpretation zu, daß man sich das gesamte Leitungsband bzw. Valenzband durch ein einziges Energieniveau E_L bzw. E_V mit den temperaturabhängigen (!) Zustandsdichten $N_{\text{eff}}^L = n_0$ bzw. $N_{\text{eff}}^V = p_0$ charakterisiert denkt, deren Besetzungsdichte n bzw. p mittels Boltzmann-Faktoren geregelt wird. Dies entspricht der Näherung der Fermi-Verteilung für den Fall, daß $(E - \mu) \gg kT$ ist.

Im intrinsischen Halbleiter gilt die Neutralitätsbedingung:

$$n = p = n_i \quad (9.13)$$

Wir können nun die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials μ bestimmen. Aus (9.13) folgt:

$$n = p = n_o \cdot \exp(\alpha) = p_o \cdot \exp(\beta)$$

$$\exp(\alpha - \beta) = \frac{p_o}{n_o}$$

Da wir $(\alpha - \beta)$ sowie die effektiven Zustandsdichten kennen, finden wir:

$$\mu = \frac{E_L + E_V}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \left(\frac{m_p^*}{m_n^*} \right) \quad (9.14)$$

Falls effektive Zustandsdichten bzw. effektive Massen, d.h. also auch Bandkrümmungen von Leitungs- und Valenzband gleich wären, läge im intrinsischen Halbleiter für alle Temperaturen das chemische Potential genau in der Mitte der Bandlücke. Sind die effektiven Massen im Leitungs- und Valenzband verschieden, so liegt μ asymmetrisch zu E_L und E_V und zeigt nach Gl. (9.14) eine lineare Temperaturabhängigkeit.

Wir können mit Gl. (9.13) auch die Temperaturabhängigkeit der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration bestimmen:

$$\begin{aligned} n_i^2 &= n \cdot p = n_o \cdot p_o \cdot \exp(\alpha + \beta) \\ &= \frac{1}{16} \left(\frac{2kT}{\pi \hbar^2} \right)^3 (m_n^* m_p^*)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{E_L - E_V}{kT} \right) \end{aligned}$$

Damit haben wir:

$$n_i = \frac{1}{4} \left(\frac{2kT}{\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_n^* m_p^*)^{\frac{3}{4}} \exp \left(-\frac{E_{\text{gap}}}{2kT} \right) \quad (9.15)$$

In Tab. 9.2 sind einige Werte für die intrinsische Ladungsträgerkonzentration angegeben.

	n_i [cm^{-3}]
Ge	$2.4 \cdot 10^{13}$
Si	$1.5 \cdot 10^{10}$
GaAs	$5.0 \cdot 10^7$

Tab. 9.2: Intrinsische Ladungsträgerkonzentration n_i von verschiedenen Halbleitern für $T = 300 \text{ K}$

9.2 Dotierte (extrinsische) Halbleiter

Die in Tab. 9.2 angegebenen intrinsischen Ladungsträgerdichten reichen bei weitem nicht aus, um die in der Praxis erforderlichen Stromdichten in Halbleiterbauelementen zu erzeugen. Um Größenordnungen höhere Konzentrationen lassen sich durch Dotieren, d.h. Einbau von elektrisch aktiven Störstellen, in einen Halbleiter erzeugen.

Die gebräuchlichen Halbleiter wie Si oder Ge kristallisieren in der Diamantstruktur (siehe Kap. 1). Es liegt dort für jedes Atom eine tetraedrische Koordination mit vier kovalenten Bindungen vor.

n-Dotierung und Donatoren

Baut man in ein Si-Gitter statt eines Si-Atoms ein fünfwertiges Atom wie P, As oder Sb ein, so bleibt ein überschüssiges Valenzelektron, das keinen Platz in den vier sp^3 -Hybridbindungen findet (siehe Fig. 9.3).

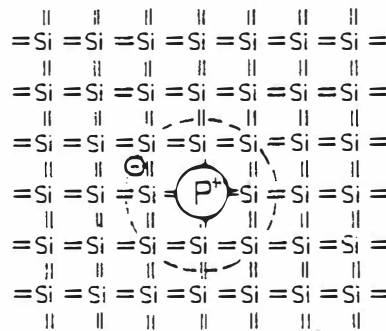


Fig. 9.3: n-dotiertes Silizium

Diese Donatorstörstelle kann näherungsweise wie ein wasserstoffartiges Zentrum mit den Energietermen $E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$ und $E_1 = -13.6 \text{ eV}$

beschrieben werden. Um die Anregungsenergie des überschüssigen P-Valenzelektrons abzuschätzen kann man die Abschirmung durch das umgebende Si-Gitter durch Einsetzen der statischen Dielektrizitätskonstante des Si ($\epsilon_{\text{Si}} = 11.7$) in die Energieterme des Wasserstoffatoms berücksichtigen. Die freie Elektronenmasse muß ersetzt werden durch die effektive Masse: $m_n^* \approx 0.3 \cdot m_e$

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon\epsilon_0)^2} \cdot \frac{m_n^* e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (9.16)$$

Für $n = 1$ finden wir nun eine Ionisierungsenergie für den Donator von etwa 30 meV, d.h. das Energieniveau E_D des Donatorelektrons im gebundenen Zustand liegt etwa 30 meV unter der Leitungsbandkante E_L (siehe Fig. 9.4).

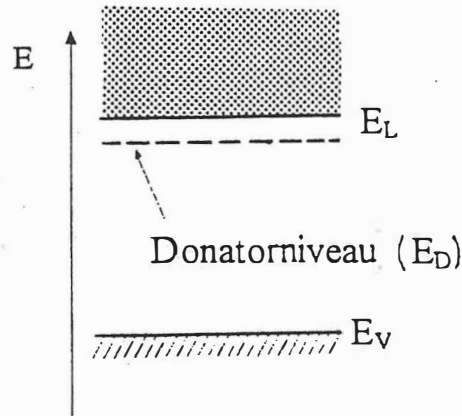


Fig. 9.4: Qualitative Energieposition des Donatorniveaus

p-Dotierung und Akzeptoren

Baut man in das Gitter eines IV-wertigen Elementhalbleiters ein III-wertiges Fremdatom ein (B, Al, Ga, In), so kann der für die tetraedrische Bindung verantwortliche sp^3 -Hybrid leicht ein Elektron aus dem Valenzband unter Zurücklassung eines Defektelektrons (oder Lochs) aufnehmen. Solche Störstellen heißen Akzeptoren (siehe Fig. 9.5)

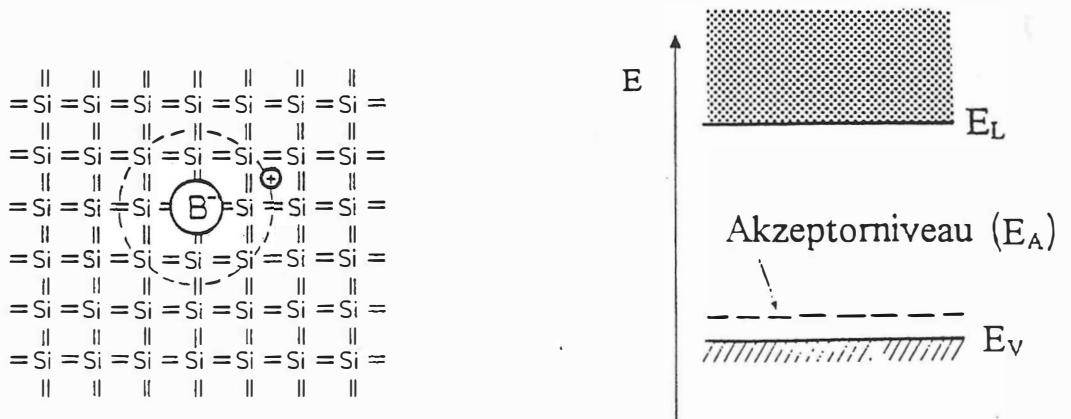


Fig. 9.5: p-dotiertes Silizium und qualitative Energieposition des Akzeptorniveaus

9.3 Thermische Ionisierung von Verunreinigungsatomen

Im dotierten Halbleiter kann ein Elektron entweder aus dem Valenzband oder von einem Donatorniveau thermisch aktiviert ins Leitungsband gelangen. Die Dichte aller vorhandenen Donatoren N_D bzw. aller Akzeptoren N_A setzt sich zusammen aus der Dichte N_D^0 bzw. N_A^0 der Donatoren bzw. Akzeptoren, die neutral sind, und der Dichte N_D^+ der positiv geladenen ionisierten Donatoren bzw. N_A^- der negativ geladenen ionisierten Akzeptoren:

$$\begin{aligned}N_D &= N_D^0 + N_D^+ \\N_A &= N_A^0 + N_A^-\end{aligned}$$

Die Lage des Fermi-Niveaus wird im homogen dotierten Halbleiter festgelegt durch die Neutralitätsbedingung:

$$n + N_A^- = p + N_D^+ \quad (9.17)$$

Im folgenden beschränken wir uns auf die Behandlung eines reinen n-Halbleiters, bei dem nur Donatoren vorhanden sind. Für die Besetzung der Donatorniveaus mit Elektronen gilt:

$$n_D = N_D^0 = N_D \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{E_D - \mu}{kT}\right) + 1} \quad (9.18)$$

Die Zahl der ionisierten Donatorstörstellen ist:

$$N_D^+ = N_D - N_D^0 = N_D \cdot \left[1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{E_D - \mu}{kT}\right) + 1} \right] = N_D \cdot \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\mu - E_D}{kT}\right)} \quad (9.19)$$

Das chemische Potential μ können wir mit Hilfe von Gl. (9.11) ausdrücken:

$$\exp\left(\frac{\mu}{kT}\right) = \frac{n}{n_0} \cdot \exp\left(\frac{E_L}{kT}\right) \quad (9.20)$$

Wir nehmen an, daß der Hauptbeitrag zur Leitfähigkeit von den Donatoren herrührt, d.h. $N_D^+ \gg n_i$. Da dann $n \approx N_D^+$, finden wir für Gl. (9.19) unter Verwendung von Gl (9.20):

$$n \approx \frac{N_D}{1 + \frac{n}{n_0} \cdot \exp\left(\frac{\Delta E_D}{kT}\right)} \quad (9.21)$$

mit $\Delta E_D = E_L - E_D$. Auflösen dieser Gleichung nach n liefert uns eine quadratische Gleichung mit der physikalisch sinnvollen Lösung:

$$n \approx 2 \cdot N_D \cdot \left(1 + \sqrt{1 + 4 \frac{N_D}{n_0} \exp\left(\frac{\Delta E_D}{kT}\right)}\right)^{-1} \quad (9.22)$$

a) ist die Temperatur so klein, daß $4 \frac{N_D}{n_0} \exp\left(\frac{\Delta E_D}{kT}\right) \gg 1$ ist, dann folgt:

$$n \approx \sqrt{n_0 N_D} \exp\left(-\frac{\Delta E_D}{2kT}\right) \quad (9.22a)$$

In diesem Bereich enthalten noch genügend Donatorstörstellen ihr überschüssiges Valenzelektron, man spricht von **Störstellenreserve**. Die Elektronenkonzentration hängt wie beim intrinsischen Halbleiter exponentiell von der Temperatur ab, nur daß statt der Gap-Energie die wesentlich kleinere Donator-Ionisationsenergie ΔE_D eingeht.

b) für Temperaturen T , bei denen $4 \frac{N_D}{n_0} \exp\left(\frac{\Delta E_D}{kT}\right) \ll 1$ ist, folgt:

$$n \approx N_D = \text{konst} \quad (9.22b)$$

d.h. die Konzentration der Elektronen im Leitungsband hat die maximale Konzentration der Donatoren erreicht ; alle Donatoren sind ionisiert, man spricht von **Störstellenerschöpfung**.

c) Bei weiterer Erhöhung der Temperatur nimmt die Konzentration der über die Energielücke angeregten Elektronen zu und wird irgendwann die aus Störstellen freigesetzte Elektronendichte überwiegen. Man spricht vom **intrinsischen Bereich** der Ladungsträgerkonzentration.

Die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials für den dotierten Halbleiter ermittelt man ähnlich wie im Falle des intrinsischen Halbleiters (Gl. 9.14). Man findet hier:

$$\mu = E_{\text{gap}} - \frac{\Delta E_D}{2} + \frac{1}{2} kT \ln \left(\frac{N_D}{n_0} \right) \quad (9.23)$$

Die verschiedenen Bereiche der Ladungsträgerkonzentration sind mit der entsprechenden Lage des chemischen Potentials in Fig. 9.5 dargestellt.

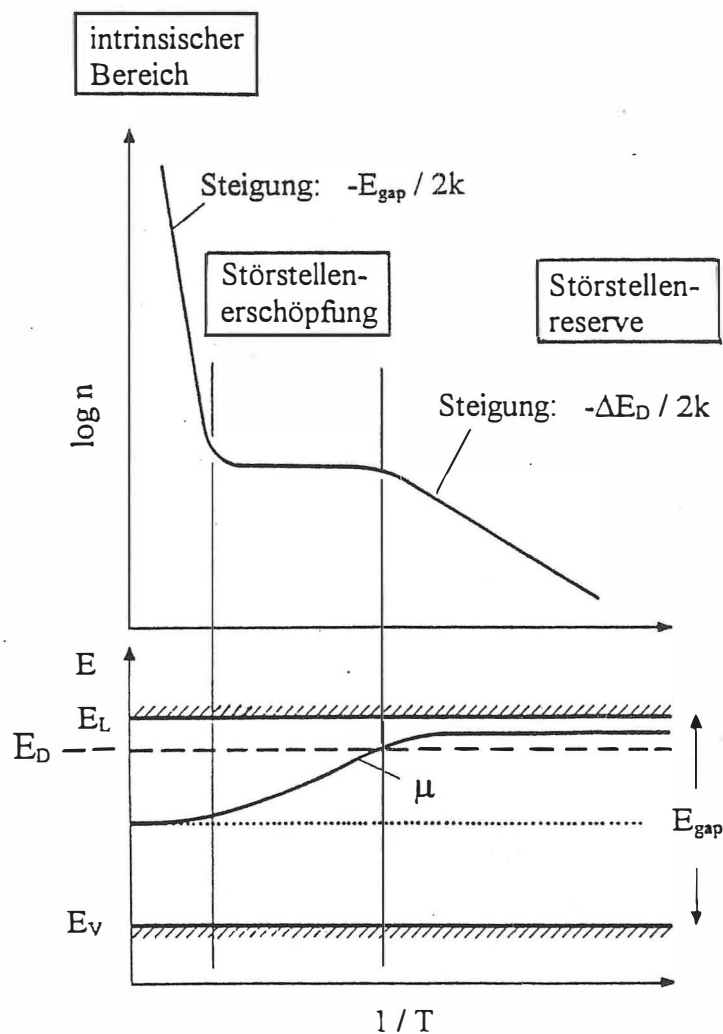


Fig. 9.5: Ladungsträgerkonzentration n und chemisches Potential μ im Bereich der Störstellenreserve, der Störstellenerschöpfung und im intrinsischen Bereich

9.4 Beweglichkeit bei Anwesenheit von Verunreinigungen

Bei Betrachtung der Stromdichte im isotropen Halbleiter müssen sowohl Elektronen am unteren Leitungsbandrand als auch Löcher nahe der oberen Valenzbandkante berücksichtigt werden:

$$\vec{j} = e \cdot (n \mu_n + p \mu_p) \cdot \vec{E} \quad (9.24)$$

Im Gegensatz zum Metall, wo nur Elektronen an der Fermikante berücksichtigt werden müssen, sind die Beweglichkeiten μ_n (μ_p) beim Halbleiter als Mittelwerte über die von Elektronen (Löchern) besetzten Zustände am unteren Leitungsbandrand (oberen Valenzbandrand) aufzufassen. Näherungsweise gilt dort nach Gl. (7.41):

$$\mu \propto \tau \quad (9.25)$$

Wir beschränken uns im folgenden auf eine qualitative Diskussion der Streuprozesse, die Elektronen bzw. Löcher im Halbleiter erleiden. Da die Relaxationszeit in Gl. (9.25) auch umgekehrt proportional zur mittleren freien Flugzeit zwischen zwei Stößen ist, folgt:

$$\frac{1}{\tau} \propto \Sigma \cdot \langle v \rangle \quad (9.26)$$

Dabei ist Σ der Streuquerschnitt für Elektronen bzw. Löcher an einem Streuzentrum und $\langle v \rangle$ der thermische Mittelwert für die Geschwindigkeit der Ladungsträger. Dieser thermische Mittelwert wird mit der Boltzmann-Statistik beschrieben. Er erstreckt sich über alle Elektronen- und Löchergeschwindigkeiten. Aufgrund des Gleichverteilungssatzes ist:

$$\langle v \rangle \propto \sqrt{T} \quad (9.27)$$

Um mit Gl. (9.26) die Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit μ nach Gl. (9.25) zu bestimmen, wollen wir nun für die Streuung an Phononen und ionisierten Störstellen die Temperaturabhängigkeit des Streuquerschnitts betrachten.

Phononen

Der Streuquerschnitt Σ_{Ph} kann hier abgeschätzt werden durch das Quadrat der mittleren Schwingungsamplitude $\langle s^2(\vec{q}) \rangle$ eines Phonons. Für $T \gg \Theta_D$ folgt für eine harmonische Schwingung nach dem Gleichverteilungssatz:

$$\langle s^2(\vec{q}) \rangle = \frac{kT}{M\omega^2(\vec{q})}$$

$$\Sigma_{\text{Ph}} \propto T$$

und damit wird die Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit für Streuung an Phononen:

$$\mu_{\text{Ph}} \propto T^{-\frac{3}{2}} \quad (9.28)$$

Ionisierte Störstellen

In Halbleitern spielt vor allem die Streuung an ionisierten Störstellen (Donatoren und Akzeptoren) eine wichtige Rolle. Die Ladungsträger unterliegen bei diesem Streuprozess der Coulomb-Wechselwirkung und der Streuquerschnitt Σ_{St} kann durch die Rutherford-Streuung beschrieben werden: $\Sigma_{\text{St}} \propto \pi b^2$, mit b dem Streuparameter $\propto 1/v^2$, d.h.

$$\Sigma_{\text{St}} \propto \langle v \rangle^{-4} \text{ mit } \langle v \rangle \propto \sqrt{T}$$

Die Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit für Streuung an ionisierten Störstellen ist damit:

$$\mu_{\text{St}} \propto T^{\frac{3}{2}} \quad (9.29)$$

Für die Gesamtbeweglichkeit bei Vorliegen von Störstellen- und Phononenstreuung ergibt sich qualitativ ein Verlauf wie in Fig. 9.6 dargestellt:

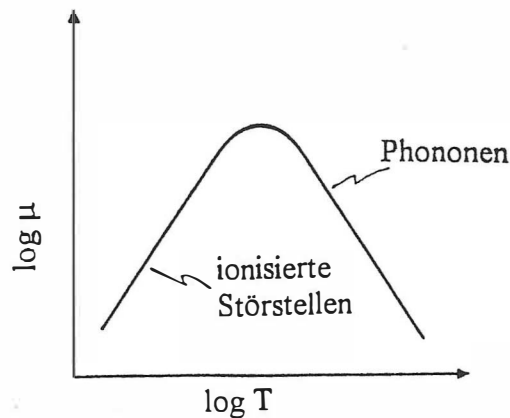


Fig. 9.6: Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit $\mu(T)$ für einen Halbleiter

9.5 Der p-n Übergang im thermischen Gleichgewicht

Ein p-n Übergang entsteht in einem Halbleiter an der Kontaktfläche von zwei entgegengesetzt dotierten Bereichen. In den einen Bereich sind Akzeptoratome eingebaut, die einen p-leitenden Bereich erzeugen. Im anderen Teil erzeugen Donatoratome einen n-leitenden Bereich. Ohne Kontakt liegt das chemische Potential in beiden Bereichen verschieden hoch auf der gleichen Energieskala (vergleiche Fig. 9.7 links oben). Da es sich jedoch um ein und denselben Kristall handelt - es liegt ja nur ein abrupter Dotierungsübergang vor - muß in Kontakt das chemische Potential im thermischen Gleichgewicht in beiden Bereichen identisch sein.

6.1 Electron Motion

6.1.1 Calculation of Electron and Hole Concentration (B)

Here we give the standard calculation of carrier concentration based on (a) excitation of electrons from the valence to the conduction band leaving holes in the valence band, (b) the presence of impurity donors and acceptors (of electrons) and (c) charge neutrality. This discussion is important for electrical conductivity among other properties.

We start with a simple picture assuming a parabolic band structure of semiconductors involving conduction and valence bands as shown in Fig. 6.1. We will later find our results can be generalized using a suitable effective mass (Sect. 6.1.6). Here when we talk about donor and acceptor impurities we are talking about shallow defects only (where the energy levels of the donors are just below the conduction band minimum and of acceptors just above the valence-band maximum). Shallow defects are further discussed in Sect. 11.2. Deep defects are discussed and compared to shallow defects in Sect. 11.3 and Table 11.1. We limit ourselves in this chapter to impurities that are sufficiently dilute that they form localized and discrete levels. Impurity bands can form where $4\pi a^3 n/3 \cong 1$ where a is the lattice constant and n is the volume density of impurity atoms of a given type.

The charge-carrier population of the levels is governed by the Fermi function f . The Fermi function evaluated at the Fermi energy $E = \mu$ is 1/2. We have assumed μ is near the middle of the band. The Fermi function is given by

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1}. \quad (6.1)$$

In Fig. 6.1 E_C is the energy of the bottom of the conduction band. E_V is the energy of the top of the valence band. E_D is the donor state energy (energy with one electron and in which case the donor is assumed to be neutral). E_A is the acceptor state energy (which when it has two electrons and no holes is singly charged). For more on this model see Table 6.3 and Table 6.4. Some typical donor and acceptor energies for column IV semiconductors are 44 and 39 meV for P and Sb in Si, 46 and 160 meV for B and In in Si.¹

We now evaluate expressions for the electron concentration in the conduction band and the hole concentration in the valence band. We assume the nondegenerate case when E in the conduction band implies $(E - \mu) \gg kT$, so

$$f(E) \cong \exp\left(-\frac{E - \mu}{kT}\right). \quad (6.2)$$

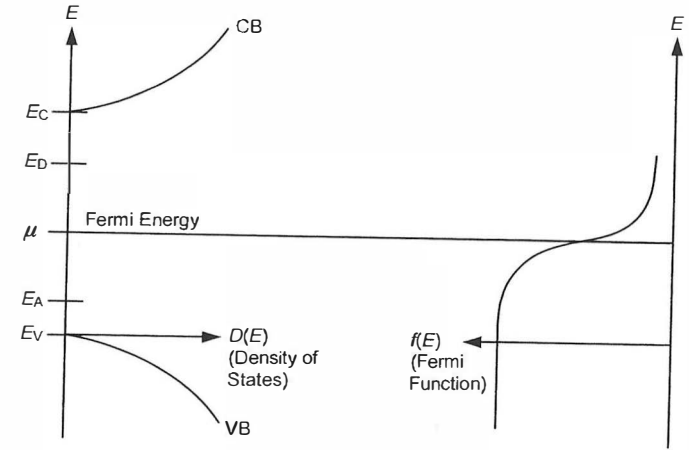


Fig. 6.1. Energy gaps, Fermi function, and defect levels (sketch). Direction of increase of $D(E)$, $f(E)$ is indicated by arrows

We further assume a parabolic band, so

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} + E_C, \quad (6.3)$$

where m_e^* is a constant. For such a case we have shown (in Chap. 3) the density of states is given by

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E - E_C}. \quad (6.4)$$

The number of electrons per unit volume in the conduction band is given by:

$$n = \int_{E_C}^{\infty} D(E) f(E) dE. \quad (6.5)$$

Evaluating the integral, we find

$$n = 2 \left(\frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{\mu - E_C}{kT}\right). \quad (6.6)$$

For holes, we assume, following (6.3),

$$E = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*}, \quad (6.7)$$

which yields the density of states

$$D_h(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_h^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_V - E}. \tag{6.8}$$

The number of holes per state is

$$f_h = 1 - f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\mu - E}{kT}\right) + 1}. \tag{6.9}$$

Again, we make a nondegeneracy assumption and assume $(\mu - E) \gg kT$ for E in the valence band, so

$$f_h \cong \exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right). \tag{6.10}$$

The number of holes/volume in the valence band is then given by

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} D_h(E) f_h(E) dE, \tag{6.11}$$

from which we find

$$p = 2 \left(\frac{m_h^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_V - \mu}{kT}\right). \tag{6.12}$$

Since the density of states in the valence and conduction bands is essentially unmodified by the presence or absence of donors and acceptors, the equations for n and p are valid with or without donors or acceptors. (Donors or acceptors, as we will see, modify the value of the chemical potential, μ .) Multiplying n and p , we find

$$np = n_i^2, \tag{6.13}$$

where

$$n_i = 2 \left(\frac{kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right), \tag{6.14}$$

where $E_g = E_C - E_V$ is the bandgap and n_i is the intrinsic (without donors or acceptors) electron concentration. Equation (6.13) is sometimes called the Law of Mass Action and is generally true since it is independent of μ .

We now turn to the question of calculating the number of electrons on donors and holes on acceptors. We use the basic theorem for a grand canonical ensemble (see, e.g., Ashcroft and Mermin, [6.2, p 581])

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_j N_j \exp[-\beta(E_j - \mu N_j)]}{\sum_j \exp[-\beta(E_j - \mu N_j)]}, \tag{6.15}$$

Table 6.3. Model for energy and degeneracy of donors

Number of electrons	Energy	Degeneracy of state
$N_j = 0$	0	1
$N_j = 1$	E_d	2
$N_j = 2$	$\rightarrow \infty$	neglect as too improbable

We are considering a model of a donor level that is doubly degenerate (in a single-particle model). Note that it is possible to have other models for donors and acceptors. There are basically three cases to look at, as shown in Table 6.3. Noting that when we sum over states, we must include the degeneracy factors. For the mean number of electrons on a state j as defined in Table 6.3

$$\langle n \rangle = \frac{(1)(2) \exp[-\beta(E_d - \mu)]}{1 + 2 \exp[-\beta(E_d - \mu)]}, \tag{6.16}$$

or

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\frac{1}{2} \exp[-\beta(E_d - \mu)] + 1} = \frac{n_d}{N_d}, \tag{6.17}$$

where n_d is the number of electrons/volume on donor atoms and N_d is the number of donor atoms/volume. For the acceptor case, our model is given by Table 6.4.

Table 6.4. Model for energy and degeneracy of acceptors

Number of electrons	Number of holes	Energy	Degeneracy
0	2	very large	neglect
1	1	0	2
2	0	E_A	1

The number of electrons per acceptor level of the type defined in Table 6.4 is

$$\langle n \rangle = \frac{(1)(2) \exp[-\beta(-\mu)] + 2(1) \exp[-\beta(E_A - 2\mu)]}{2 \exp[\beta\mu] + \exp[-\beta(E_A - 2\mu)]}, \tag{6.18}$$

which can be written

$$\langle n \rangle = \frac{\exp[\beta(\mu - E_A)] + 1}{\frac{1}{2} \exp[\beta(\mu - E_A)] + 1}. \tag{6.19}$$

where $\beta = 1/kT$ and $\langle n \rangle$ = mean number of electrons in a system with states i , with

Now, the average number of electrons plus the average number of holes associated with the acceptor level is 2. So, $\langle n \rangle + \langle p \rangle = 2$. We thus find

$$\langle p \rangle = \frac{p_a}{N_a} = \frac{1}{\frac{1}{2} \exp[\beta(\mu - E_a)] + 1}, \quad (6.20)$$

where p_a is the number of holes/volume on acceptor atoms. N_a is the number of acceptor atoms/volume.

So far, we have four equations for the five unknowns n , p , n_d , p_a , and μ . A fifth equation, determining μ can be found from the condition of electrical neutrality. Note:

$$N_d - n_d \equiv \text{number of ionized and, hence, positive donors} \equiv N_d^+,$$

$$N_a - p_a \equiv \text{number of negative acceptors} = N_a^-.$$

Charge neutrality then says,

$$p + N_d^+ = n + N_a^-, \quad (6.21)$$

or

$$n + N_a + n_d = p + N_d + p_a. \quad (6.22)$$

We start by discussing an example of the exhaustion region where all the donors are ionized. We assume $N_a = 0$, so also $p_a = 0$. We assume $kT \ll E_g$, so also $p = 0$. Thus, the electrical neutrality condition reduces to

$$n + n_d = N_d. \quad (6.23)$$

We also assume a temperature that is high enough that all donors are ionized. This requires $kT \gg E_c - E_d$. This basically means that the probability that states in the donor are occupied is the same as the probability that states in the conduction band are occupied. But, there are many more states in the conduction band compared to donor states, so there are many more electrons in the conduction band. Therefore $n_d \ll N_d$ or $n \approx N_d$. This is called the exhaustion region of donors.

As a second example, we consider the same situation, but now the temperature is not high enough that all donors are ionized. Using

$$n_d = \frac{N_d}{1 + a \exp[\beta(E_d - \mu)]}. \quad (6.24)$$

In our model $a = 1/2$, but different models could yield different a . Also

$$n = N_c \exp[-\beta(E_c - \mu)], \quad (6.25)$$

where

$$N_c = 2 \left(\frac{m_c^* kT}{\pi} \right)^{3/2}. \quad (6.26)$$

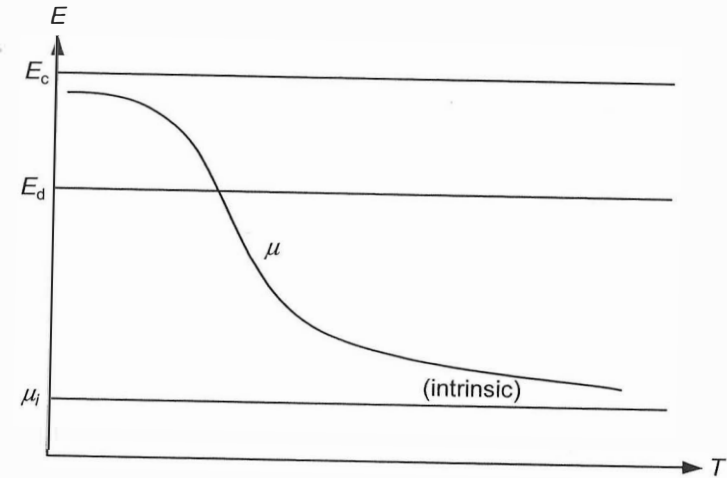


Fig. 6.2. Sketch of variation of Fermi energy or chemical potential μ , with temperature for $N_a = 0$ and $N_d > 0$

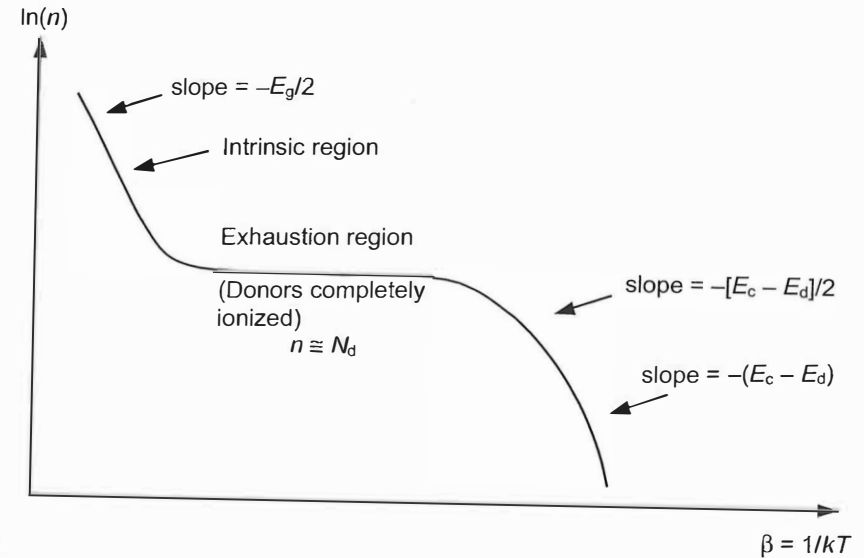


Fig. 6.3. Energy gaps, Fermi function, and defect levels (sketch)

The neutrality condition then gives

$$N_c \exp[-\beta(E_c - \mu)] + \frac{N_d}{1 + a \exp[\beta(E_d - \mu)]} = N_d. \quad (6.27)$$

realistic solution for low temperatures, $kT \ll (E_c - E_d)$, we find x and, hence,

$$n = \sqrt{a} \sqrt{N_c N_d} \exp[-\beta(E_c - E_d)/2]. \quad (6.28)$$

This result is valid only in the case that acceptors can be neglected, but in actual impure semiconductors this is not true in the low-temperature limit. More detailed considerations give the variation of Fermi energy with temperature for $N_a = 0$ and $N_d > 0$ as sketched in Fig. 6.2. For the variation of the majority carrier density for $N_d > N_a \neq 0$, we find something like Fig. 6.3.

6.1.2 Equation of Motion of Electrons in Energy Bands (B)

We start by discussing the dynamics of wave packets describing electrons [6.33, p23]. We need to do this in order to discuss properties of semiconductors such as the Hall effect, electrical conductivity, cyclotron resonance, and others. In order to think of the motion of charge, we need to think of the charge being transported by the wave packets.² The three-dimensional result using free-electron wave packets can be written as

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}). \quad (6.29)$$

This result, as we now discuss, is appropriate even if the wave packets are built out of Bloch waves.

Let a Bloch state be represented by

$$\psi_{n\mathbf{k}} = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (6.30)$$

where n is the band index and $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ is periodic in the space lattice. With the Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 + V(\mathbf{r}), \quad (6.31)$$

where $V(\mathbf{r})$ is periodic,

$$\mathcal{H} \psi_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}, \quad (6.32)$$

and we can show

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}, \quad (6.33)$$

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{i} \nabla + \mathbf{k} \right)^2 + V(\mathbf{r}). \quad (6.34)$$

Note

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} u_{n\mathbf{k}+\mathbf{q}} = E_{n\mathbf{k}+\mathbf{q}} u_{n\mathbf{k}+\mathbf{q}}, \quad (6.35)$$

and to first order in \mathbf{q} :

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \mathcal{H}_{\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{q} \cdot \left(\frac{1}{i} \nabla + \mathbf{k} \right). \quad (6.36)$$

To first order

$$E_n(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = E_n(\mathbf{k}) + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}}. \quad (6.37)$$

Also by first-order perturbation theory

$$E_n(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = E_n(\mathbf{k}) + \int u_{n\mathbf{k}} \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{q} \cdot \left(\frac{1}{i} \nabla + \mathbf{k} \right) u_{n\mathbf{k}} dV. \quad (6.38)$$

From this we conclude

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} &= \int u_{n\mathbf{k}} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{1}{i} \nabla + \mathbf{k} \right) u_{n\mathbf{k}} dV \\ &= \hbar \int \psi_{n\mathbf{k}} \frac{\hbar}{mi} \nabla \psi_{n\mathbf{k}} dV \\ &= \hbar \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \frac{P}{m} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle. \end{aligned} \quad (6.39)$$

Thus if we define

$$\mathbf{v} = \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \frac{P}{m} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle, \quad (6.40)$$

then \mathbf{v} equals the average velocity of the electron in the Bloch state $n\mathbf{k}$. So we find

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}}.$$

Note that \mathbf{v} is a constant velocity (for a given \mathbf{k}). We interpret this as meaning that a Bloch electron in a periodic crystal is not scattered.

Note also that we should use a packet of Bloch waves to describe the motion of electrons. Thus we should average this result over a set of states peaked at \mathbf{k} . It can also be shown following standard arguments (Smith [6.38], Sect. 4.6) that (6.29) is the appropriate velocity of such a packet of waves.

² The standard derivation using wave packets is given by, e.g., Merzbacher [6.24]. In Merzbacher's derivation, the peak of the wave packet moves with the group velocity.

We now apply external fields and ask what is the effect of these external fields on the electrons. In particular, what is the effect on the electrons if they are already in a periodic potential? If an external force F_{ext} acts on an electron during a time interval δt , it produces a change in energy given by

$$\delta E = F_{\text{ext}} \delta x = F v_g \delta t. \quad (6.41)$$

Substituting for v_g ,

$$\delta E = F_{\text{ext}} \frac{1}{\hbar} \frac{\delta E}{\delta k} \delta t. \quad (6.42)$$

Canceling out δE , we find

$$F_{\text{ext}} = \hbar \frac{\delta k}{\delta t}. \quad (6.43)$$

The three-dimensional result may formally be obtained by analogy to the above:

$$F_{\text{ext}} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}. \quad (6.44)$$

In general, F is the external force, so if E and B are electric and magnetic fields, then

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6.45)$$

for an electron with charge $-e$. See Problem 6.3 for a more detailed derivation. This result is often called the acceleration theorem in \mathbf{k} -space.

We next introduce the concept of effective mass. In one dimension, by taking the time derivative of the group velocity we have

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F_{\text{ext}}. \quad (6.46)$$

Defining the effective mass so

$$F_{\text{ext}} = m^* \frac{dv}{dt}, \quad (6.47)$$

we have

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}. \quad (6.48)$$

In three dimensions:

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}. \quad (6.49)$$

Notice in the free-electron case when $E = \hbar^2 k^2 / 2m$,

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m}. \quad (6.50)$$

6.1.3 Concept of Hole Conduction (B)

The totality of the electrons in a band determines the conduction properties of that band. But, when a band is nearly full it is usually easier to consider holes that represent the absent electrons. There will be far fewer holes than electrons and this in itself is a huge simplification.

It is fairly easy to see why an absent electron in the valence band acts as a positive electron. See also Kittel [6.17, p206ff]. Let f label filled electron states, and g label the states that will later be emptied. For a full band in a crystal, with volume V , for conduction in the x direction,

$$j_x = -\frac{e}{V} \sum_f v_x^f - \frac{e}{V} \sum_g v_x^g = 0, \quad (6.51)$$

so that

$$\sum_f v_x^f = -\sum_g v_x^g. \quad (6.52)$$

If g states of the band are now emptied, then the current is given by

$$j_x = -\frac{e}{V} \sum_f v_x^f = \frac{e}{V} \sum_g v_x^g. \quad (6.53)$$

Notice this argument means that the current in a partially empty band can be considered as due to holes of charge $+e$, which move with the velocities of the states that are missing electrons. In other words, $q_h = +e$ and $v_h = v_e$.

Now, let us talk about the energy of the holes. Consider a full band with one missing electron. Let the wave vector of the missing electron be k_e and the corresponding energy $E_e(k_e)$:

$$E_{\text{solid, full band}} = E_{\text{solid, one missing electron}} + E_e(k_e). \quad (6.54)$$

Since the hole energy is the energy it takes to remove the electron, we have

$$\text{Hole energy} = E_{\text{solid, one missing electron}} - E_{\text{solid, full band}} = -E_e(k_e) \quad (6.55)$$

by using the above. Now in a full band the sum of the \mathbf{k} is zero. Since we identify the hole wave vector as the totality of the filled electronic states

$$k_e + \sum' \mathbf{k} = 0, \quad (6.56)$$

$$k_h = \sum' \mathbf{k} = -k_e, \quad (6.57)$$

where $\Sigma' \mathbf{k}$ means the sum over \mathbf{k} omitting k_e . Thus, we have, assuming symmetric bands with $E_e(k_e) = E_e(-k_e)$:

$$E_h(k_h) = -E_e(-k_e), \quad (6.58)$$

or

$$E_h(k_h) = -E_e(k_e). \quad (6.59)$$

Notice also, since

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_e}{dt} = -e(E + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B}), \quad (6.60)$$

with $q_h = +e$, $k_h = -k_e$ and $v_e = v_h$, we have

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_h}{dt} = +e(E + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B}), \quad (6.61)$$

as expected. Now, since

$$v_e = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_e(k_e)}{\partial(k_e)} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial(-E_h(k_h))}{\partial(-k_h)} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_h}{\partial k_h}, \quad (6.62)$$

and since $v_e = v_h$, then

$$v_h = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_h}{\partial k_h}. \quad (6.63)$$

Now,

$$\frac{dv_h}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E_h}{\partial k_h^2} \frac{dk_h}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_h}{\partial k_h^2} F_h. \quad (6.64)$$

Defining the hole effective mass as

$$\frac{1}{m_h^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_h}{\partial k_h^2}, \quad (6.65)$$

we see

$$\frac{1}{m_h^*} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_e}{\partial(-k_e)^2} = -\frac{1}{m_e^*}, \quad (6.66)$$

or

$$m_e^* = -m_h^*. \quad (6.67)$$

Notice that if $E_e = Ak^2$, where A is constant then $m_e^* > 0$, whereas if $E_e = -Ak^2$, then $m_h^* = -m_e^* > 0$, and concave down bands have negative electron masses but positive hole masses. Later we note that electrons and holes may interact so as to form excitons (Sect. 10.7, Exciton Absorption).

6.1.4 Conductivity and Mobility in Semiconductors (B)

Current can be produced in semiconductors by, e.g., potential gradients (electric fields) or concentration gradients. We now discuss this.

We assume, as is usually the case, that the lifetime of the carriers is very long compared to the mean time between collisions. We also assume a Drude model with a unique collision or relaxation time τ . A more rigorous presentation can be made by using the Boltzmann equation where in effect we assume $\tau = \tau(E)$. A consequence of doing this is mentioned in (6.102).

We are actually using a semiclassical Drude model where the effect of the lattice is taken into account by using an effective mass, derived from the band structure, and we treat the carriers classically except perhaps when we try to estimate their scattering. As already mentioned, to regard the carriers classically we must think of packets of Bloch waves representing them. These wave packets are large compared to the size of a unit cell and thus the field we consider must vary slowly in space. An applied field also must have a frequency much less than the bandgap over \hbar in order to avoid band transitions.

We consider current due to drift in an electric field. Let \mathbf{v} be the drift velocity of electrons, m^* be their effective mass, and τ be a relaxation time that characterizes the friction drag on the electrons. In an electric field E , we can write (for $e > 0$)

$$m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{m^* \mathbf{v}}{\tau} - eE. \quad (6.68)$$

Thus in the steady state

$$\mathbf{v} = -\frac{e\tau E}{m^*}. \quad (6.69)$$

If n is the number of electrons per unit volume with drift velocity \mathbf{v} , then the current density is

$$\mathbf{j} = -nev. \quad (6.70)$$

Combining the last two equations gives

$$\mathbf{j} = \frac{ne^2\tau E}{m^*}. \quad (6.71)$$

Thus, the electrical conductivity σ , defined by \mathbf{j}/E , is given by

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}. \quad (6.72)$$

³ The electrical mobility is the magnitude of the drift velocity per unit electric field $|\mathbf{v}/E|$, so

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*}. \quad (6.73)$$

³ We have already derived this, see, e.g., (3.214) where effective mass was not used and in (4.160) where again the m used should be effective mass and τ is more precisely evaluated at the Fermi energy.

Notice that the mobility measures the scattering, while the electrical conductivity measures both the scattering and the electron concentration. Combining the last two equations, we can write

$$\sigma = ne\mu. \quad (6.74)$$

If we have both electrons (e) and holes (h) with concentration n and p , then

$$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h, \quad (6.75)$$

where

$$\mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e^*}, \quad (6.76)$$

and

$$\mu_h = \frac{e\tau_h}{m_h^*}. \quad (6.77)$$

The drift current density J_d can be written either as

$$J_d = -nev_e + pev_h, \quad (6.78)$$

or

$$J_d = [(ne\mu_e) + (pe\mu_h)]E. \quad (6.79)$$

As mentioned, in semiconductors we can also have current due to concentration gradients. By Fick's Law, the diffusion number current is negatively proportional to the concentration gradient with the proportionality constant equal to the diffusion constant. Multiplying by the charge gives the electrical current density. Thus,

$$J_{e, \text{diffusion}} = eD_e \frac{dn}{dx} \quad (6.80)$$

$$J_{h, \text{diffusion}} = -eD_h \frac{dp}{dx}. \quad (6.81)$$

For both drift and diffusion currents, the electronic current density is

$$J_e = \mu_e enE + eD_e \frac{dn}{dx}, \quad (6.82)$$

and the hole current density is

$$J_h = \mu_h epE - eD_h \frac{dp}{dx}. \quad (6.83)$$

In both cases, the diffusion constant can be related to the mobility by the Einstein relationship (valid for both Drude and Boltzmann models)

$$eD_e = \mu_e kT, \quad (6.84)$$

$$eD_h = \mu_h kT. \quad (6.85)$$

6.1.5 Drift of Carriers in Electric and Magnetic Fields: The Hall Effect (B)

The Hall effect is the production of a transverse voltage (a voltage change along the "y direction") due to a transverse B -field (in the "z direction") with current flowing in the "x direction." It is useful for determining information on the sign and concentration of carriers. See Fig. 6.4.

If the collisional force is described by a relaxation time τ ,

$$m_e \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - m_e \frac{\mathbf{v}}{\tau_e}, \quad (6.86)$$

where \mathbf{v} is the drift velocity. We treat the steady state with $d\mathbf{v}/dt = 0$. The magnetic field is assumed to be in the z direction and we define

$$\omega_e = \frac{eB}{m_e}, \text{ the cyclotron frequency,} \quad (6.87)$$

and

$$\mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e}, \text{ the mobility.} \quad (6.88)$$

For electrons, from (6.86) we can write the components of drift velocity as (steady state)

$$v_x^e = -\mu_e E_x - \omega_e \tau_e v_y^e, \quad (6.89)$$

$$v_y^e = -\mu_e E_y + \omega_e \tau_e v_x^e, \quad (6.90)$$

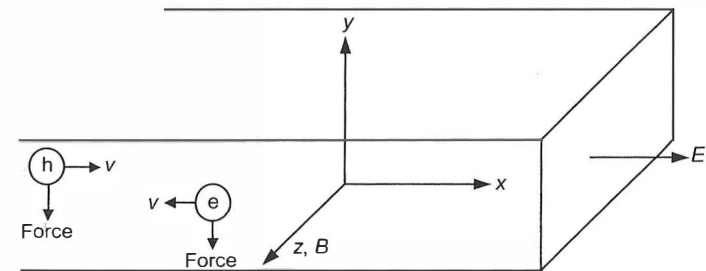


Fig. 6.4. Geometry for the Hall effect

where $v_z^e = 0$, since $E_z = 0$. With similar definitions, the equations for holes become

$$v_x^h = +\mu_h E_x + \omega_h \tau_h v_y^h, \quad (6.91)$$

$$v_y^h = +\mu_h E_y - \omega_h \tau_h v_x^h. \quad (6.92)$$

Due to the electric field in the x direction, the current is

$$j_x = -nev_x^e + pev_x^h. \quad (6.93)$$

Because of the magnetic field in the z direction, there are forces also in the y direction, which end up creating an electric field E_y in that direction. The Hall coefficient is defined as

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B}. \quad (6.94)$$

Equations (6.89) and (6.90) can be solved for the electrons drift velocity and (6.91) and (6.92) for the hole's drift velocity. We assume weak magnetic fields and neglect terms of order ω_e^2 and ω_h^2 , since ω_e and ω_h are proportional to the magnetic field. This is equivalent to neglecting magnetoresistance, i.e. the variation with resistance in a magnetic field. It can be shown that for carriers of two types if we retain terms of second order then we have a magnetoresistance. So far we have not considered a distribution of velocities as in the Boltzmann approach. Combining these assumptions, we get

$$v_x^e = -\mu_e E_x + \mu_e \omega_e \tau_e E_y, \quad (6.95)$$

$$v_x^h = +\mu_h E_x + \mu_h \omega_h \tau_h E_y, \quad (6.96)$$

$$v_y^e = -\mu_e E_y - \mu_e \omega_e \tau_e E_x, \quad (6.97)$$

$$v_y^h = +\mu_h E_y - \mu_h \omega_h \tau_h E_x. \quad (6.98)$$

Since there is no net current in the y direction,

$$j_y = -nev_y^e + pev_y^h = 0. \quad (6.99)$$

Substituting (6.97) and (6.98) into (6.99) gives

$$E_x = -E_y \frac{n\mu_e + p\mu_h}{n\mu_e \omega_e \tau_e - p\mu_h \omega_h \tau_h}. \quad (6.100)$$

Putting (6.95) and (6.96) into j_x , using (6.100) and putting the results into R_H , we find

$$R_H = \frac{1}{e} \frac{p - nb^2}{(p + nb)^2}, \quad (6.101)$$

where $b = \mu_e/\mu_h$. Note if $p = 0$, $R_H = -1/ne$ and if $n = 0$, $R_H = +1/pe$. Both the sign and concentration of carriers are included in the Hall coefficient. As noted, this development did not take into account that the carrier would have a velocity distribution. If a Boltzmann distribution is assumed,

$$R_H = r \left(\frac{1}{e} \right) \frac{p - nb^2}{(p + nb)^2}, \quad (6.102)$$

where r depends on the way the electrons are scattered (different scattering mechanisms give different r).

The Hall effect is further discussed in Sects. 12.6 and 12.7, where peculiar effects involved in the quantum Hall effect are dealt with. The Hall effect can be used as a sensor of magnetic fields since it is proportional to the magnetic field for fixed currents.

6.1.6 Cyclotron Resonance (A)

Cyclotron resonance is the absorption of electromagnetic energy by electrons in a magnetic field at multiples of the cyclotron frequency. It was predicted by Dorfmann and Dingel and experimentally demonstrated by Kittel all in the early 1950s.

In this section, we discuss cyclotron resonance only in semiconductors. As we will see, this is a good way to determine effective masses but few carriers are naturally excited so, external illumination may be needed to enhance carrier concentration (see further comments at the end of this section). Metals have plenty of carriers but skin-depth effects limit cyclotron resonance to those electrons near the surface (as discussed in Sect. 5.4).

We work on the case for Si. See also, e.g. [6.33, pp. 78-83]. We impose a magnetic field and seek the natural frequencies of oscillatory motion. Cyclotron resonance absorption will occur when an electric field with polarization in the plane of motion has a frequency equal to the frequency of oscillatory motion due to the magnetic field. We first look at motion for the energy lobes along the k_z -axis (see Si in Fig. 6.6). The energy ellipsoids are not centered at the origin. Thus, the two constant energy ellipsoids along the k_z -axis can be written

$$E = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{k_x^2 + k_y^2}{m_T} + \frac{(k_z - k_0)^2}{m_L} \right]. \quad (6.103)$$

The shape of the ellipsoid determines the effective mass (T for transverse, L for longitudinal) in (6.103). The star on the effective mass is eliminated for simplicity. The velocity is given by

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_k, \quad (6.104)$$

4. The resonant frequencies can be used to determine the longitudinal and transverse effective mass m_L , m_T .

5. Extremal orbits, with high density of states, are most important for effective absorption.

Some classic cyclotron resonance results obtained at Berkeley in 1955 by Dresselhaus, Kip, and Kittel are sketched in Fig. 6.7. See also the Section below "Power Absorption in Cyclotron Resonance."

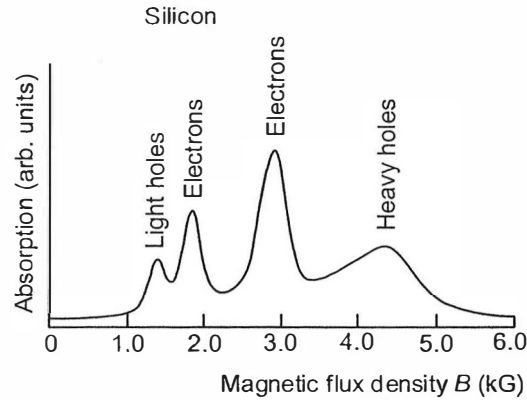


Fig. 6.7. Sketch of cyclotron resonance for silicon. (near 24×10^3 Mc/s and 4 K, B at 30° with [100] and in (110) plane). Adapted from Dresselhaus, Kip and Kittel [6.11]

Density of States Effective Electron Masses for Si (A)

We can now generalize the concept of density of states effective mass so as to extend the use of equations like (6.4). For Si, we relate the transverse and longitudinal effective masses to the density of states effective mass. See "Density of States for Effective Hole Masses" in Sect. 6.2.1 for light and heavy hole effective masses. For electrons in the conduction band we have used the density of states.

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (6.131)$$

This can be derived from

$$D(E) = \frac{dn(E)}{dE} = \frac{dn(E)}{dV_k} \frac{dV_k}{dE},$$

where $n(E)$ is the number of states per unit volume of real space with energy E and dV_k is the volume of k -space with energy between E and $E + dE$. Since we have derived (see Sect. 3.2.3)

$$dn(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} dV_k,$$

$$D(E) = \frac{1}{4\pi^3} \frac{dV_k}{dE},$$

for

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} k^2,$$

with a spherical energy surface,

$$V_k = \frac{4}{3} \pi k^3,$$

so we get (6.131).

We know that an ellipsoid with semimajor axes a , b , and c has volume $V = 4\pi abc/3$. So for Si with an energy represented by ((6.110) with origin shifted so $k_0 = 0$)

$$E = \frac{1}{2} \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{m_T} + \frac{k_z^2}{m_L} \right),$$

the volume in k -space with energy E is

$$V = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2m_T^{2/3} m_L^{1/3}}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{3/2}. \quad (6.132)$$

So

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2(m_T^2 m_L)^{1/3}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (6.133)$$

Since we have six ellipsoids like this, we must replace in (6.131)

$$(m_e^*)^{3/2} \text{ by } 6(m_L m_T^2)^{1/2},$$

or

$$m_e^* \text{ by } 6^{2/3} (m_L m_T^2)^{1/3}$$

for the electron density of states effective mass.