



Vorlesung

Elektronische Eigenschaften



Prof. Dr. G. Dehm
Department Materialphysik
MU Leoben

Literatur zur Vorlesung

Rolf E. Hummel, Electronic Properties of Materials

Springer, New York (3rd edition 2005)

ausführliche und gut verständliche Darstellung der Grundlagen der Elektronentheorie sowie der elektronischen, optischen, magnetischen und thermischen Eigenschaften, Vorlesung orientiert sich an diesem Buch!

Konrad Kopitzki, Einführung in die Festkörperphysik,

Teubner, Stuttgart (1989)

physikalische Darstellung der Elektronentheorie, enthält auch ausführliche Darstellung der dielektrischen Eigenschaften, Magnetismus, Supraleitung und Thermodynamik von Legierungen

Charles Kittel, Einführung in die Festkörperphysik, Oldenbourg, München

Klassiker der Festkörperphysik

Waldemar von Münch, Werkstoffe der Elektrotechnik

Teubner, Stuttgart, 1993 bzw. Neuauflage Ellen Ivers-Tiffée und Waldemar von

Münch, Werkstoffe der Elektrotechnik, Teubner, Stuttgart 2004

Zusammenfassende Darstellung der Eigenschaften von Metallen, Halbleitern, dielektrischen und magnetischen Werkstoffen

Günter Gottstein, Physikalische Grundlagen der Materialkunde, Springer-Verlag Berlin

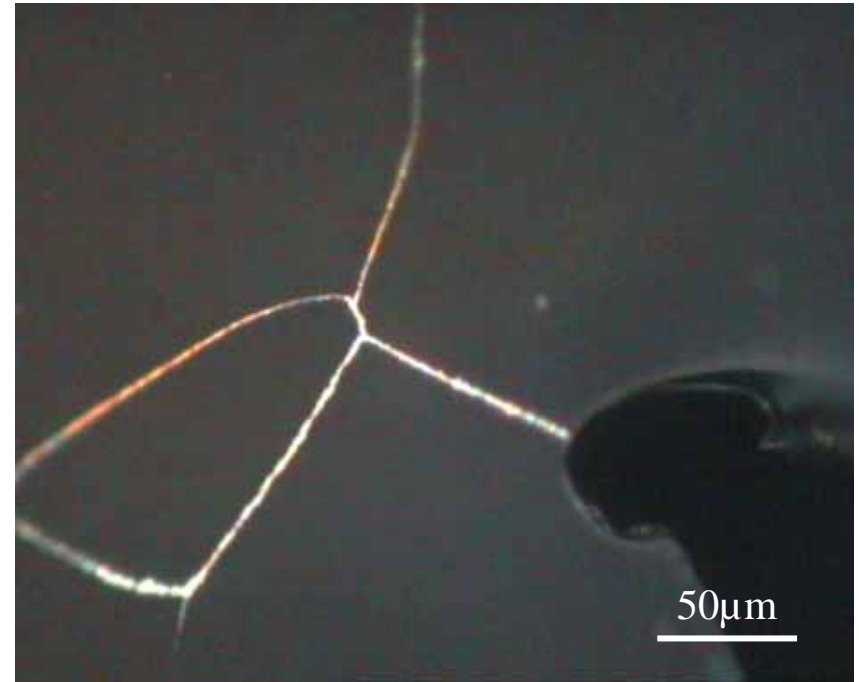
kurze Zusammenfassung der elektronischen und magnetischen Eigenschaften in Kapitel 10, die aber nicht als Prüfungsvorbereitung ausreicht.

Wozu braucht man die Quantenmechanik als WWler ?

Segregation: Al (Ga)



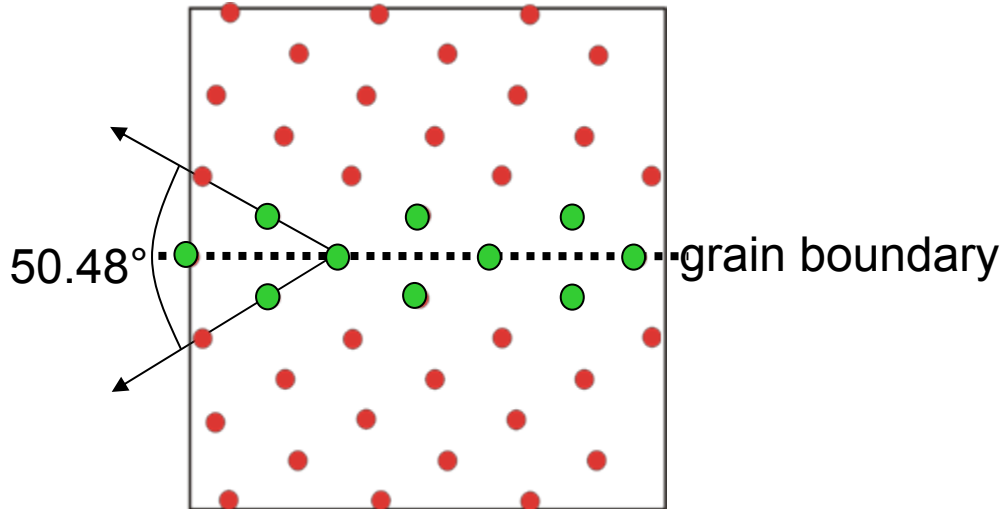
optical microscopy



Atomare und elektronische Struktur

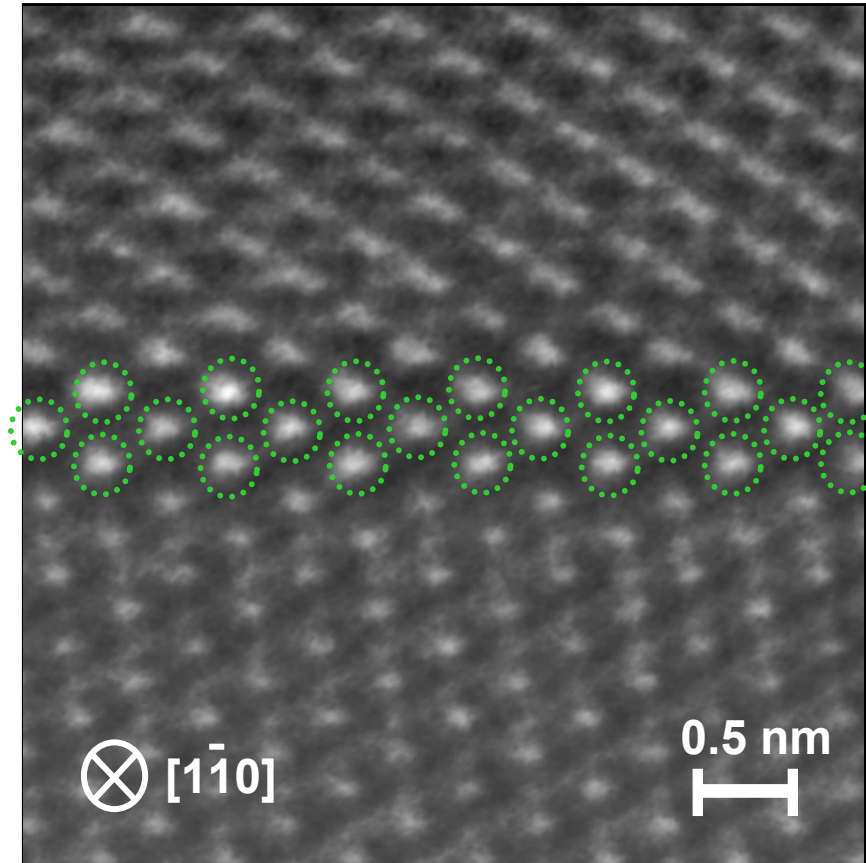
Ab initio Model

$\Sigma 11(113)[\bar{1}10]$



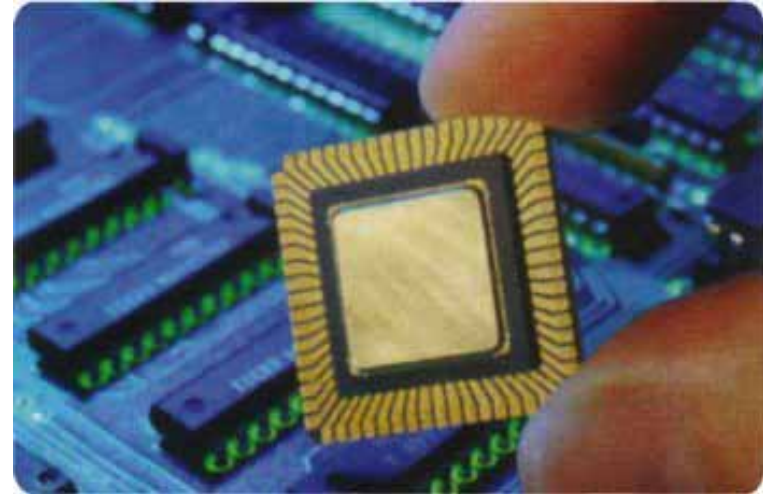
- Al column
- Ga column

high-resolution TEM

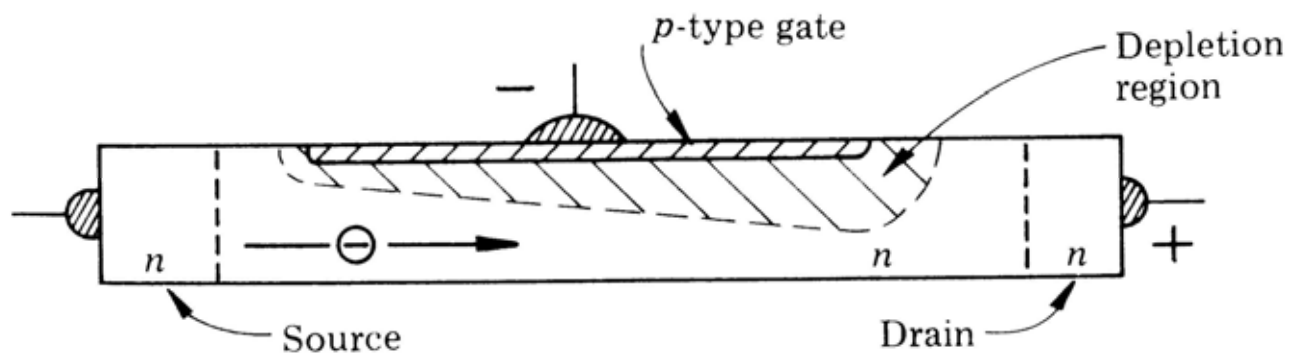


3 Monolayers of Ga

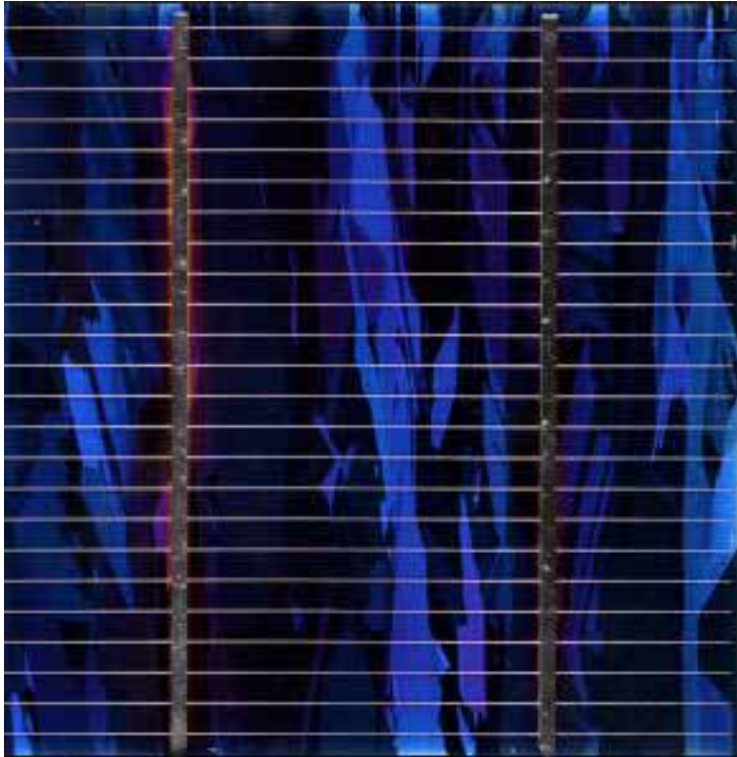
Elektrische Leitfähigkeit in Metallen



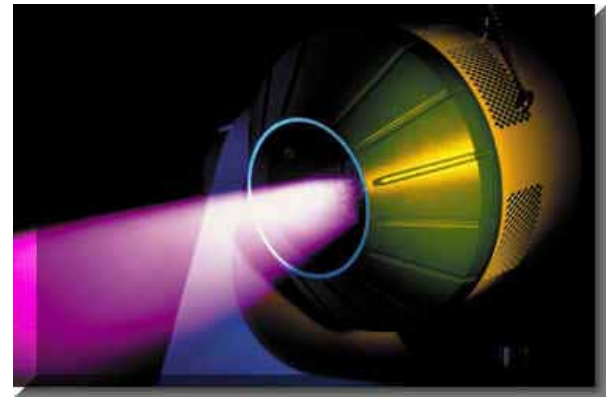
Störstellenleitung in Halbleitern: Feldeffekt - Transistor



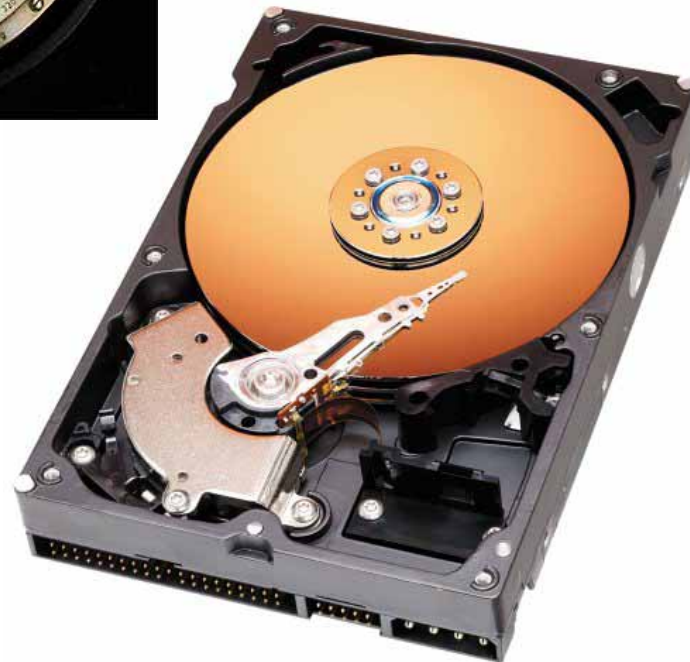
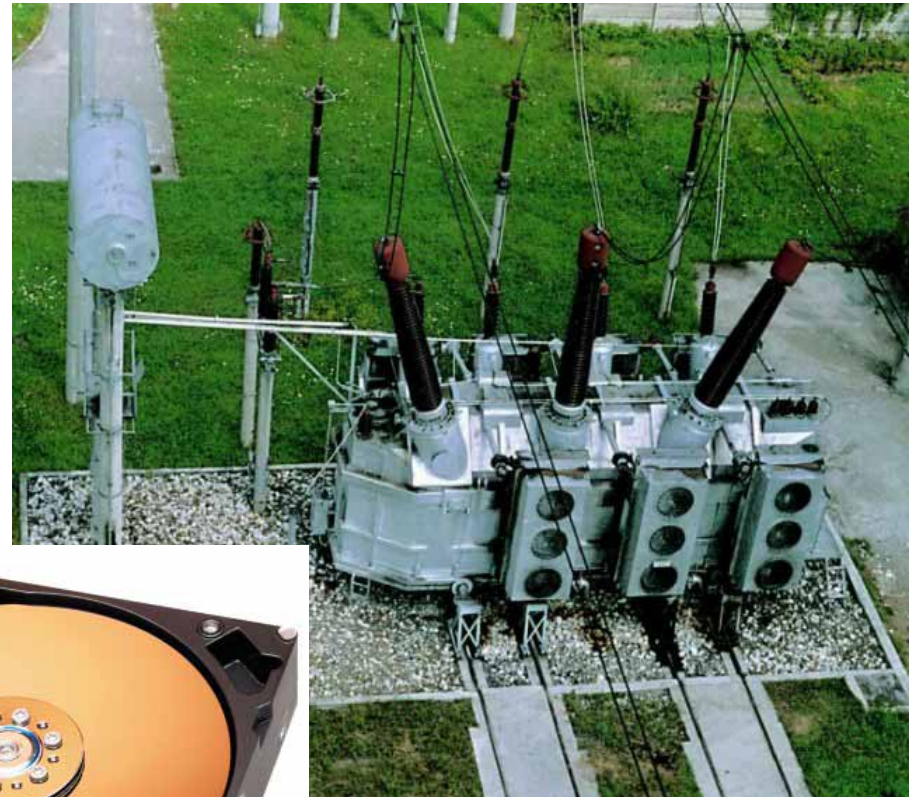
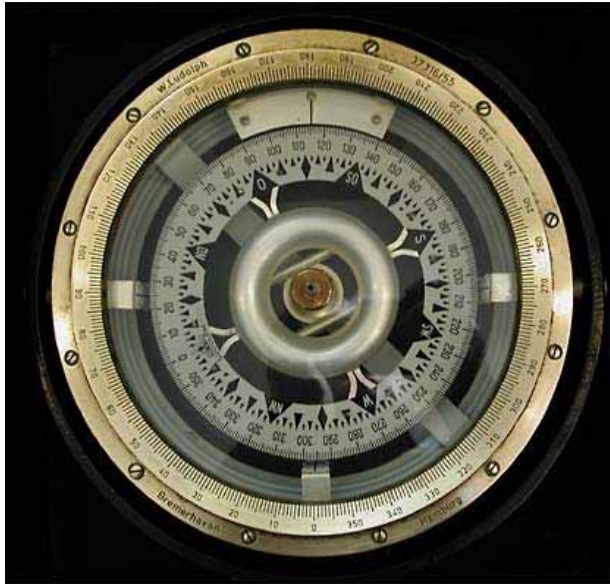
Solarzelle



Optoelektronik: Halbleiterlaser



Ferromagnetismus: Vom Kompass zum Umspannwerk und zur Datenspeicherung



0. Einführung

Mechanische Eigenschaften

Elastizität, Dämpfung,
Fließgrenze, Zugfestigkeit,
Härte, Zähigkeit,
Kriech-, Ermüdungsfestigkeit,
Verschleißfestigkeit.....

Chemische Eigenschaften

Stabilität,
Korrosionsbeständigkeit,
Oxidationsbeständigkeit,
Toxizität.....

Optische Eigenschaften

Reflexionsvermögen,
Photoeffekt,
Lichtabsorption,
Emissionsvermögen....

Thermische Eigenschaften

Schmelzpunkt, Schmelzwärme,
Bildungsenthalpie,
Wärmeausdehnung,
Wärmeleitfähigkeit, -kapazität...

Elektronische Eigenschaften

**Elektrische Leitfähigkeit,
Spezifischer Widerstand,
Isolationsfähigkeit,
Dielektrische Eigenschaften,
Magnetische Suszeptibilität,
Sättigungsmagnetisierung,
Koerzitivkraft, Remanenz,
Sprungtemperatur.....**

**Welche Eigenschaften werden durch die Bindung,
welche durch die Mikrostruktur beeinflusst?**

Übersicht: Wichtige elektronische Effekte

EFFEKT	FELD	ELEKTRONEN-EIGENSCHAFT	MECHANISMUS	ANWENDUNG
Elektrische Leitung Eigenleitung Störstellenleitung Supraleitung Ionenleitung Tunneleffekt	elektrisch	Ladung	Bewegung von Elektronen (Löchern)	Elektrik, Datenverarbeitung Diode, Transistor, etc.
		Paar-Bildung	Bewegung von El. Paaren	Kabel, Schalter, Lager, Magnete
			Bewegung von Ionen	Sensoren
		Welleneigenschaft	Tunneln	Feldemission, Tunnelmikroskop
		Ladungsverteilungen	Ladungsverschiebungen	Kondensator Quarzuhr, Ultraschall, Positionierung, Aktoren
Polarisation Piezoelektrizität Ferroelektrizität				optische Eigenschaften
Wechselwirkung mit Strahlung Photoeffekt Emission	elektromagnetisch	diskrete Energieniveaus, Bandstruktur	Quantensprünge	Detektor, Photozelle, Xerographie Laser, Optoelektronik
Magnetismus Diamagnetismus Paramagnetismus Ferromagnetismus Magnetostriktion	magnetisch	Bahnbewegung und Spin	Induktionsstrom	Strukturbestimmung
		Kooperation	Ausrichtung der elektronischen Momente	Motor, Generator, Trafo, Datenspeicherung
				Ultraschall
Thermische Effekte Glüh/Feldemission Seebeck-Effekt Peltier-Effekt Wärmeleitung (Metalle)	thermisch	Beweglichkeit	thermische Aktivierung Energieausgleich	Kathoden, Feldelektronenmikroskop Thermoelement Kühlung Maschinenbau

Naturkonstanten

Absoluter Temperaturnullpunkt	- 273.2 °C
Avogadro-Zahl, N_A	$6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Boltzmann-Konstante, k_B	$1.381 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$
Elektronenladung, e	$1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Faraday-Konstante, F	$9.649 \cdot 10^4 \text{ C mol}^{-1}$
Gaskonstante, R	$8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Magnetisches Moment des Elektrons	$9.274 \cdot 10^{-24} \text{ A m}^{-2}$
Influenzkonstante, ϵ_0	$8.854 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
Induktionskonstante, μ_0	$1.256 \cdot 10^{-6} \text{ Vs/Am}$
Planck'sches Wirkungsquantum, h	$6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
$\hbar = h/2\pi$	$1.054 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
Ruhemasse des Elektrons	$9.110 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Ruhemasse des Neutrons	$1.675 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Ruhemasse des Protons	$1.673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Atommasseneinheit	$1.661 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	$2.998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Ideales Gasvolumen unter Standardbedingungen (0 °C, 1 atm)	$\approx 22.4 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$

Umrechnungen

$1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
$1 \text{ C} = 1 \text{ A} \cdot \text{s} = 1 \text{ J/V}$
$1 \Omega = 1 \text{ V/A} = 1 \text{ J/CA}$
$1 \text{ N} = 1 \text{ CV/m}$
$1 \text{ W} = 1 \text{ VA}$

Inhaltsverzeichnis

1. Grundlagen der Elektronentheorie

eine **kurze Wiederholung** von:

1.1 Schrödinger-Gleichung

1.2 Bändermodell des Festkörpers

1.3 Besetzung von Energiezuständen

2. Elektrische Eigenschaften

2.1 Elektrische Leitfähigkeit: Grundlagen

2.2 Leitfähigkeit von Metallen

2.3 Leitfähigkeit von Halbleitern

2.4 Leitfähige Polymere

2.5 Ionenkristalle



1. Grundlagen der Elektronentheorie

1. Wiederholung der Grundlagen der Elektronentheorie

1.1 Schrödingergleichung und einige wichtige Lösungen

Erinnerung: Welle -Teilchen Dualismus

de Broglie: Elektron besitzt wie Licht (Photon) eine Wellennatur und eine Teilchennatur. Impuls des Teilchens und Wellenlänge sind verknüpft:

$$\lambda \cdot p = h$$

„Teilcheneigenschaften“:

$$E = \frac{1}{2} m v^2$$

Energie

$$\vec{p} = m \vec{v}$$

Impuls

„Welleneigenschaften“:

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

Wellenvektor

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi}{|\vec{k}|}$$

Wellenlänge (de Broglie)

Schrödinger-Gleichung (zeitunabhängige Form)

eindimensional:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \cdot \Psi(x) = 0$$

m ... Teilchenmasse

E ... Gesamtenergie

V(x) ... potentielle Energie

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

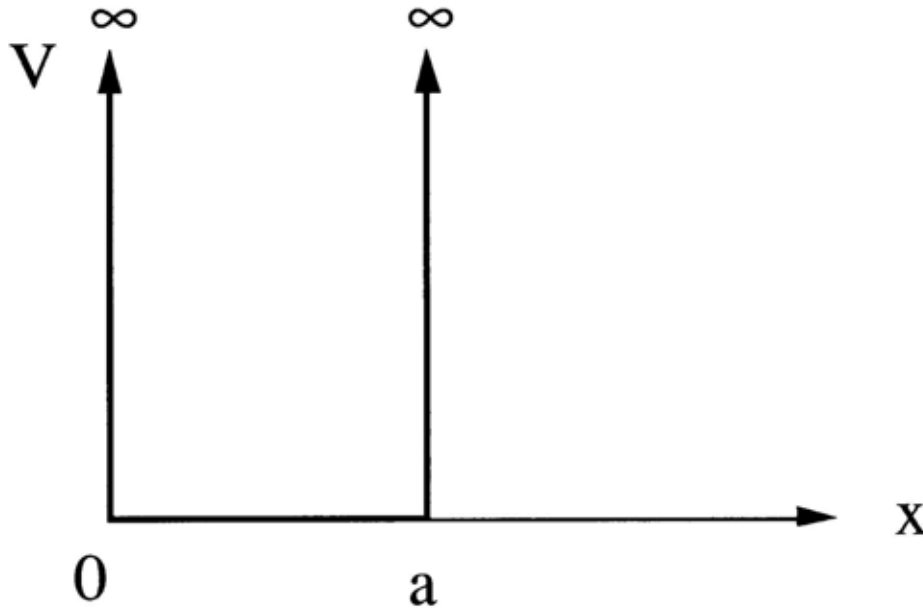
beachte:

$$|\Psi|^2 = \text{Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte}$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens wird durch die Wellenfunktion Ψ charakterisiert:

1.1.2 Elektron im Potentialtopf: diskrete Energieniveaus

Unendliches Kastenpotential (1D)



$$\begin{aligned}x \leq 0 & : V \rightarrow \infty \\0 < x < a & : V = 0 \\x \geq a & : V \rightarrow \infty\end{aligned}$$

Lösungsansatz:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E \cdot \Psi = 0$$

$$\Psi = A \cdot e^{i\alpha x} + B \cdot e^{-i\alpha x}$$

ergibt:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Randbedingungen:

$$\Psi(0) = 0 : A + B = 0; B = -A$$

$$\Psi(a) = 0 : A \cdot e^{i\alpha a} + B \cdot e^{-i\alpha a} = 0$$

$$A \cdot e^{i\alpha a} - A \cdot e^{-i\alpha a} = 0$$

mit EULER: $e^{ix} - e^{-ix} = 2i \cdot \sin x$ folgt: $2i \cdot \sin(\alpha a) = 0$

Quantisierung: $\alpha \cdot a = n \cdot \pi \quad n = 1, 2, \dots$

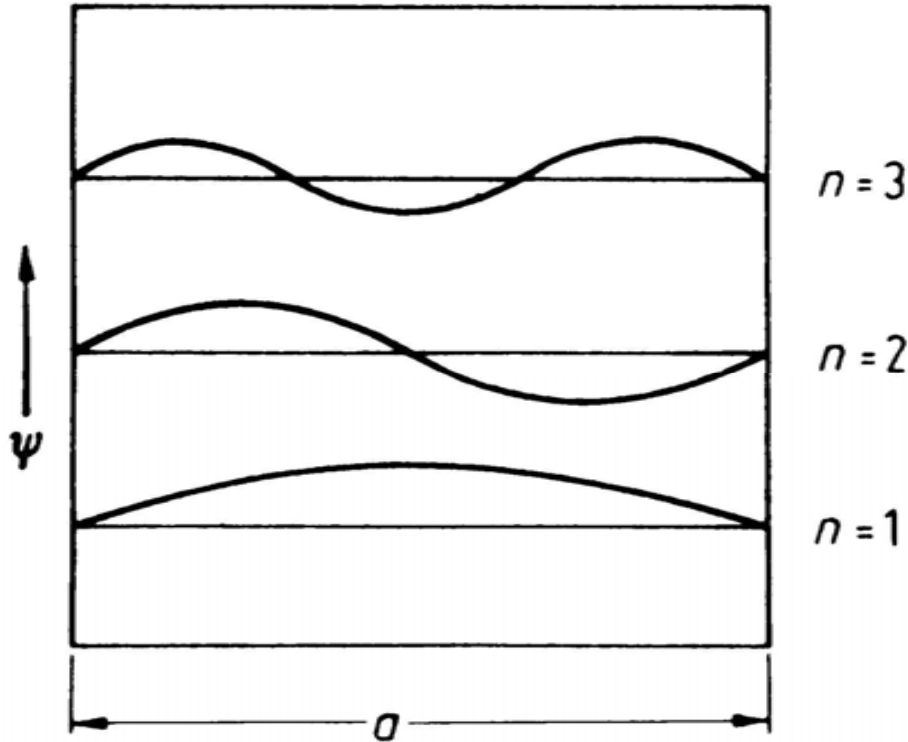
$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

Quantisierungsbedingung: $E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ mit $|k| = n \cdot \frac{\pi}{a}$

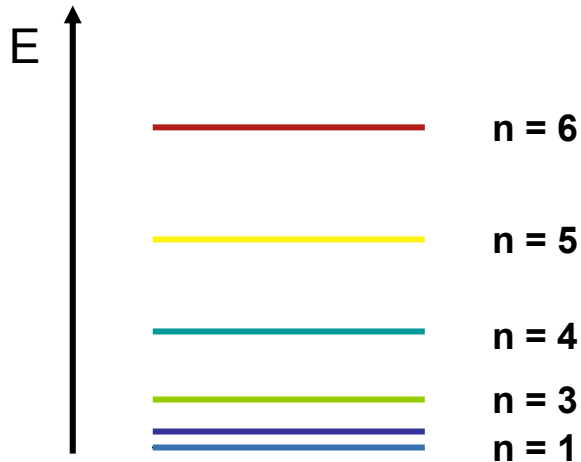
Wie sieht das grafisch aus?

Wellenfunktion für $n=1,2,3\dots$

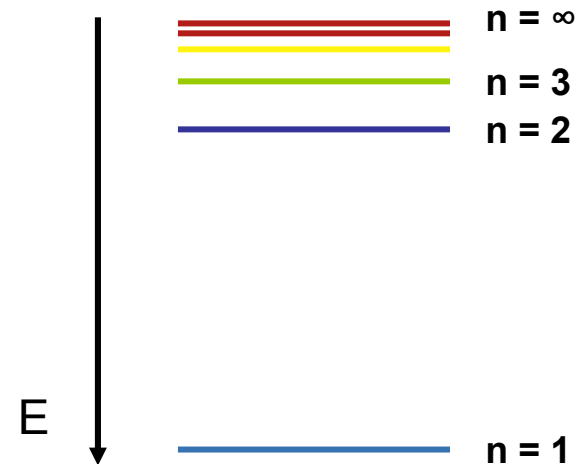
Aufenthaltswahrscheinlichkeit



Diskrete Energieniveaus



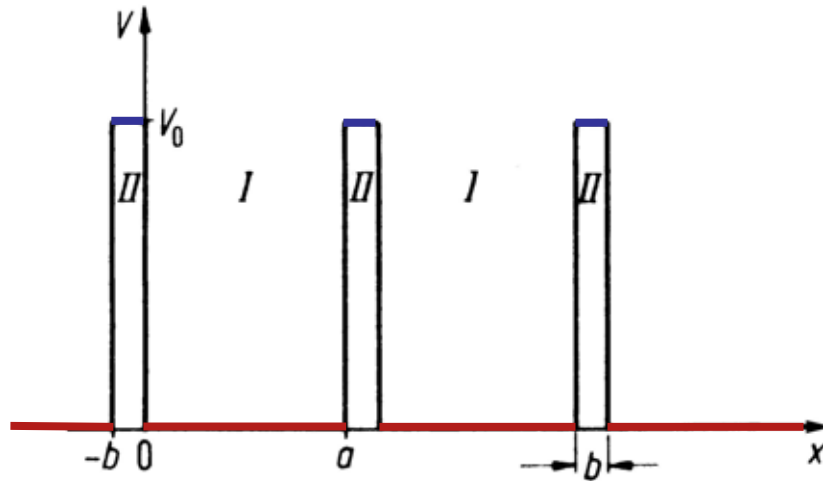
Kastenpotential



Coulomb-Potential

Anmerkung: Kastenpotential ist starke Vereinfachung. Bessere Näherung für Atome durch Verwendung des Coulombpotentials. Dadurch ergibt sich anstelle der $E \sim n^2$ eine $E \sim -1/n^2$ Abhängigkeit.

1.1.3 Elektron im periodischen Potential: Energiebänder



Kronig und Penney (1931)

$$E < V_0$$

Periodizität : $V(x+R) = V(x)$
mit $R = a+b$

Bereiche I :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \Psi = 0$$

Bereiche II :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \cdot \Psi = 0$$

Lösung für
Kronig und
Penney (1931)

$$f(\alpha a) = P \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ka)$$

mit $P = \frac{maV_0b}{\hbar^2}$

Quantisierungsbedingung

Beispiel: $P = 3\pi/2$

Grenzfälle:

1) $P=0$ (d.h. Potentialbarriere $Vb=0$) ergibt

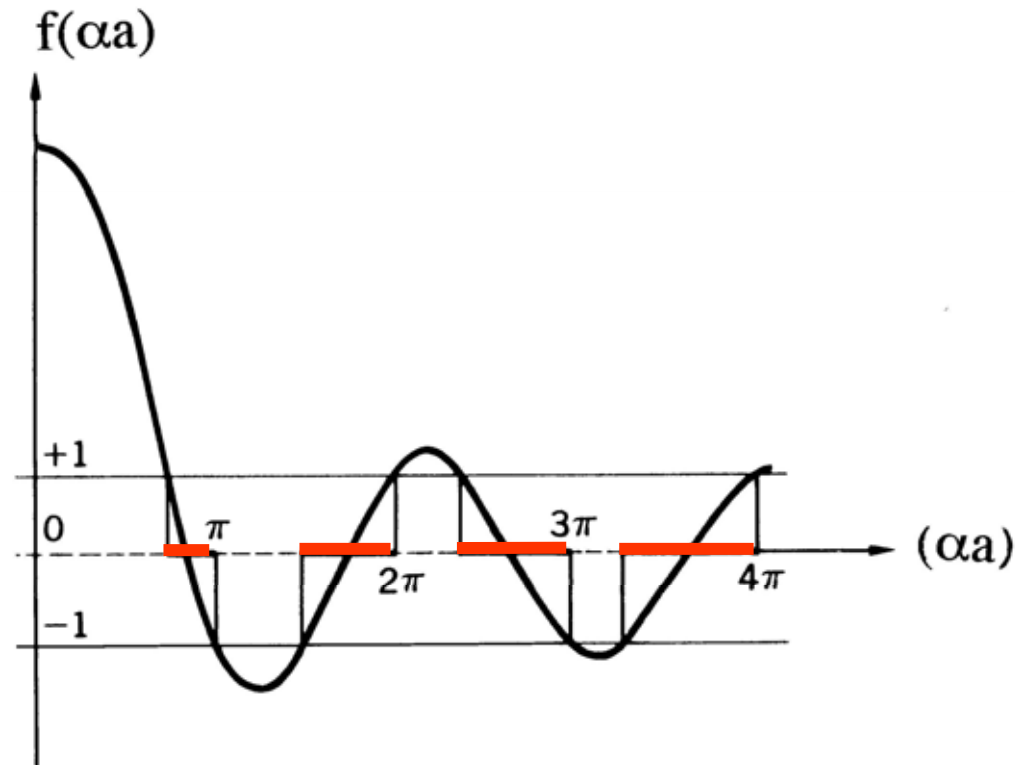
$\alpha=k$; Lösung für freies Elektron $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

2) $P \rightarrow \infty$ (d.h. sehr hohe Potentialbarriere V);

da $f(\alpha a)$ im Bereich ± 1 bleiben muss kann linke Seite der Gleichung nur endlich sein:

$\sin(\alpha a) \rightarrow 0$; d.h. $\alpha a = n\pi$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

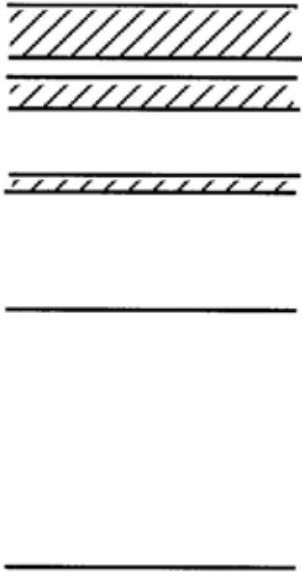
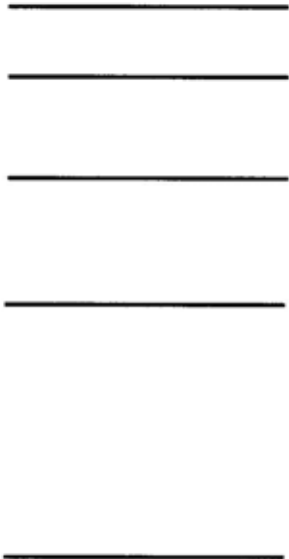
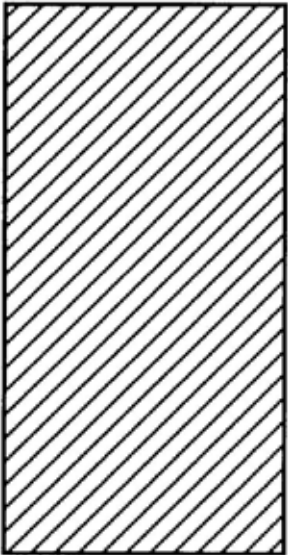


Erlaubte Energieniveaus

freie
Elektronen

gebundene
Elektronen

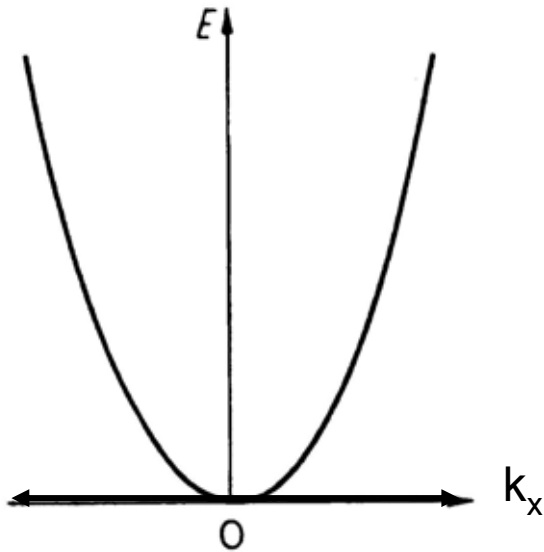
Elektronen
im Festkörper



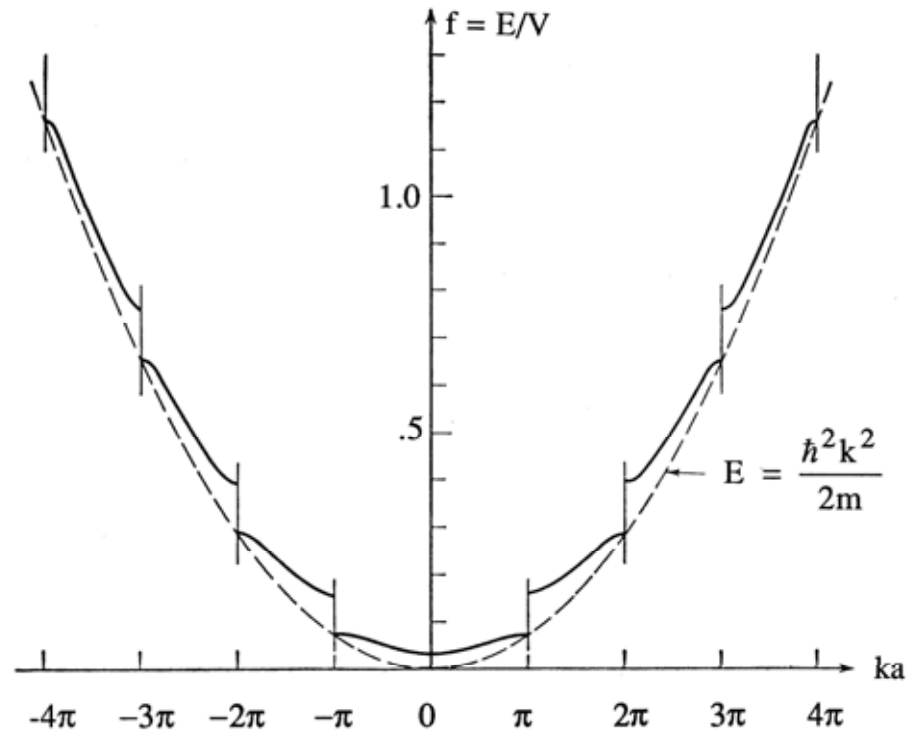
1.2 Bändermodell des Festkörpers

1D

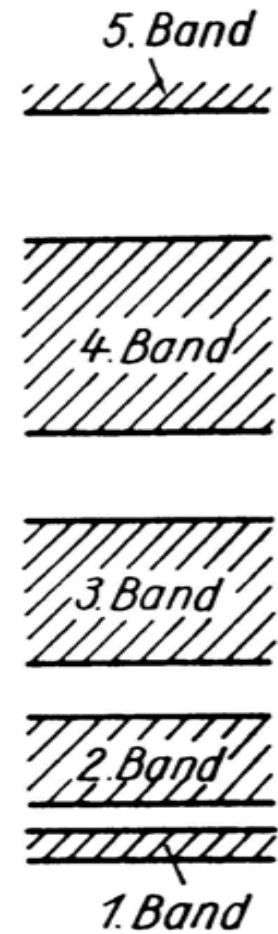
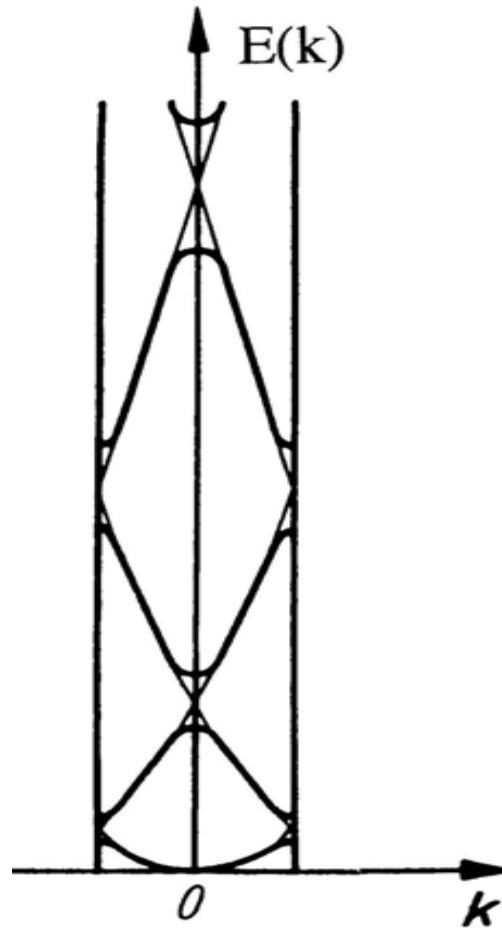
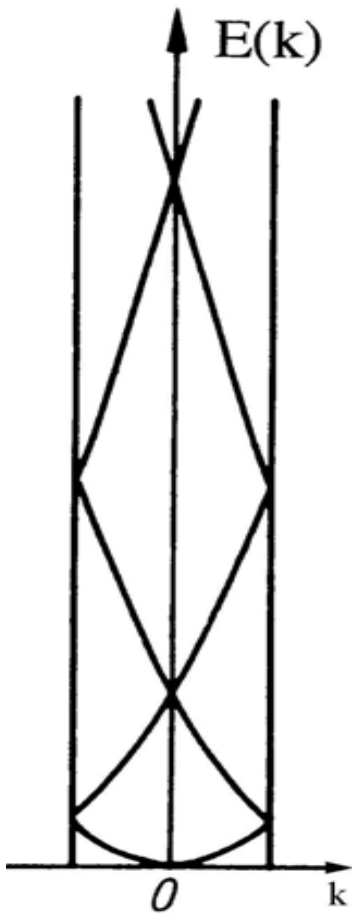
freies Elektron $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$



Elektron im Gitterpotential



Elektron im Kronig-Penney-Potential
(ein-dimensional)

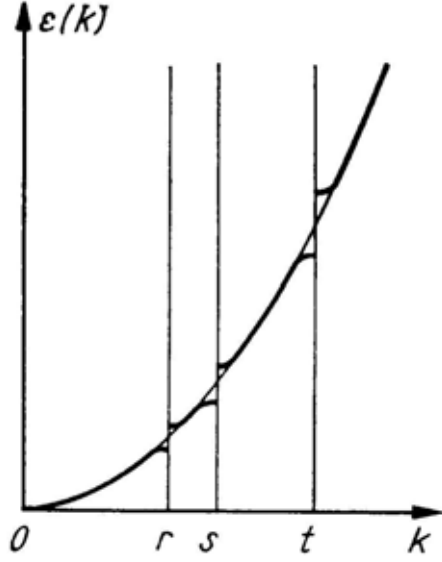
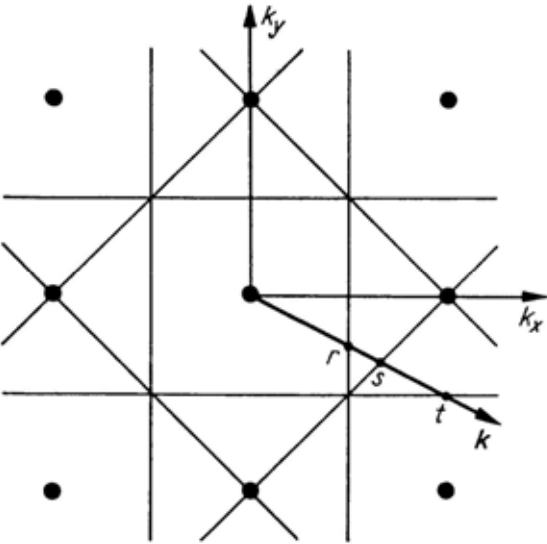


reduziertes Zonenschema

Fazit:

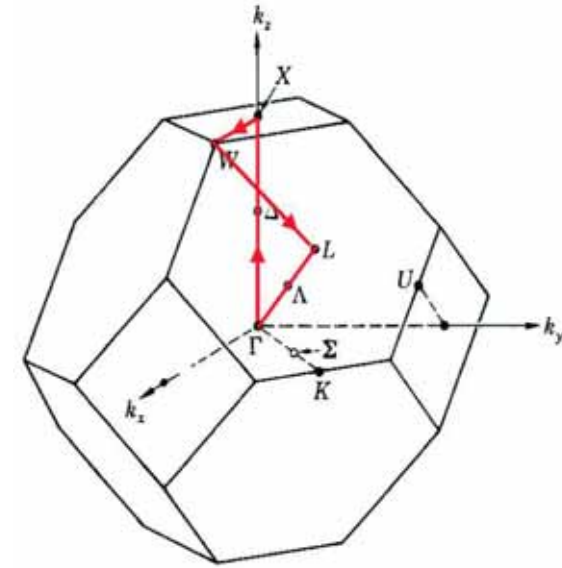
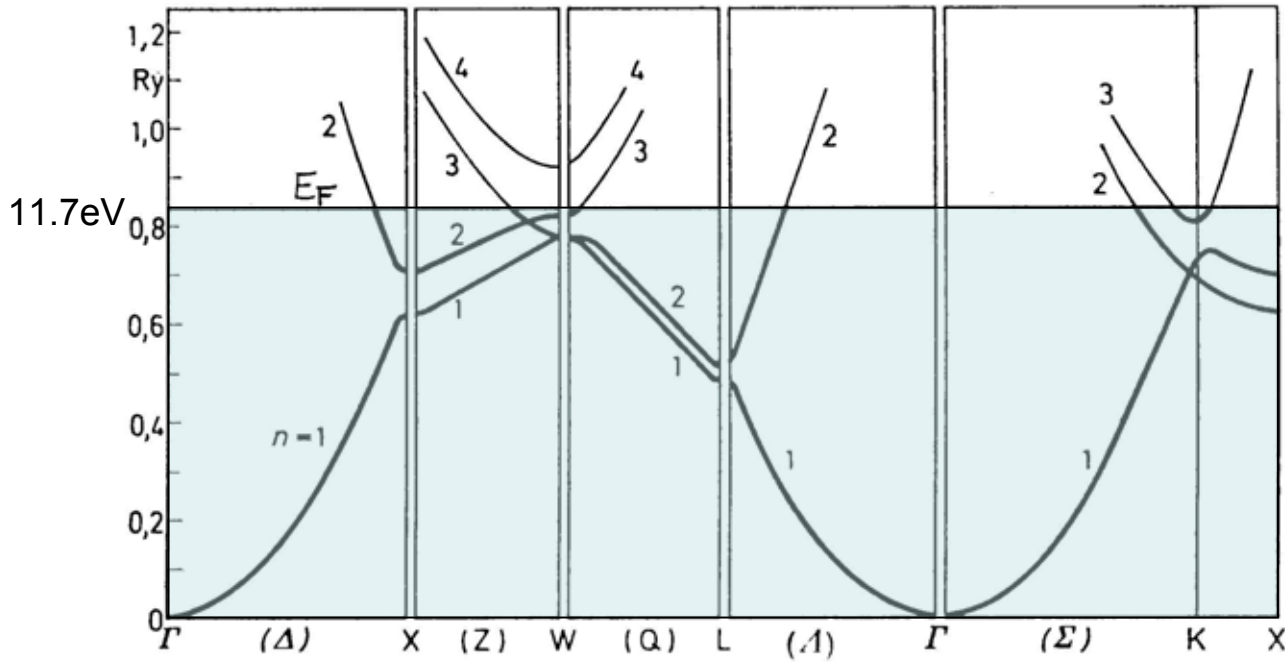
Ein (schwaches) Gitterpotential erzeugt Bandlücken, so dass die E-k-Kurven an den Rändern der Brillouin-Zonen verzerrt werden

Anisotropie der E(k)-Kurven



1.2.1 Bandstrukturen einiger Materialien

Al (kfz)



Al

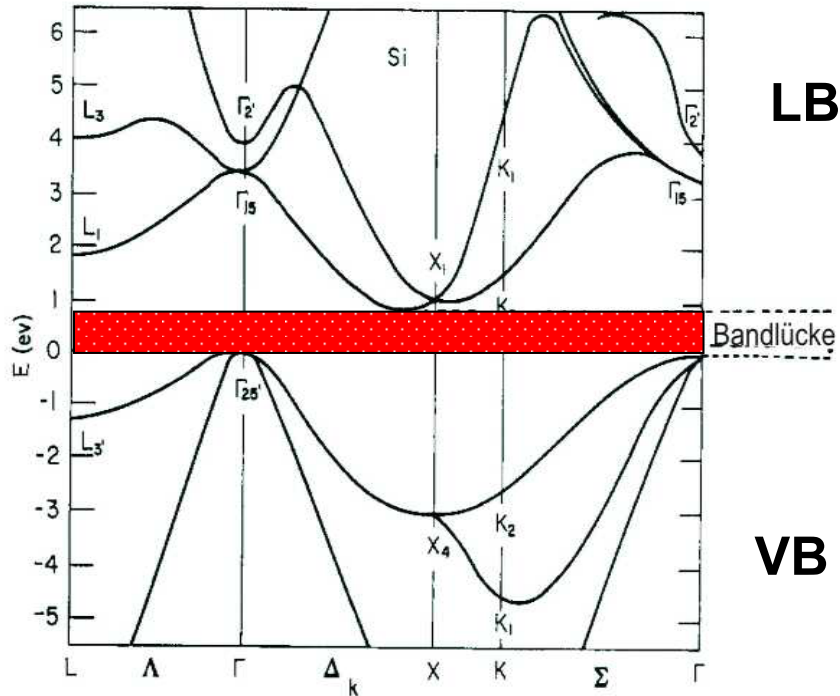
[Ne] 3s²3p

besetzt bei OK

X 100; K 110; L 111

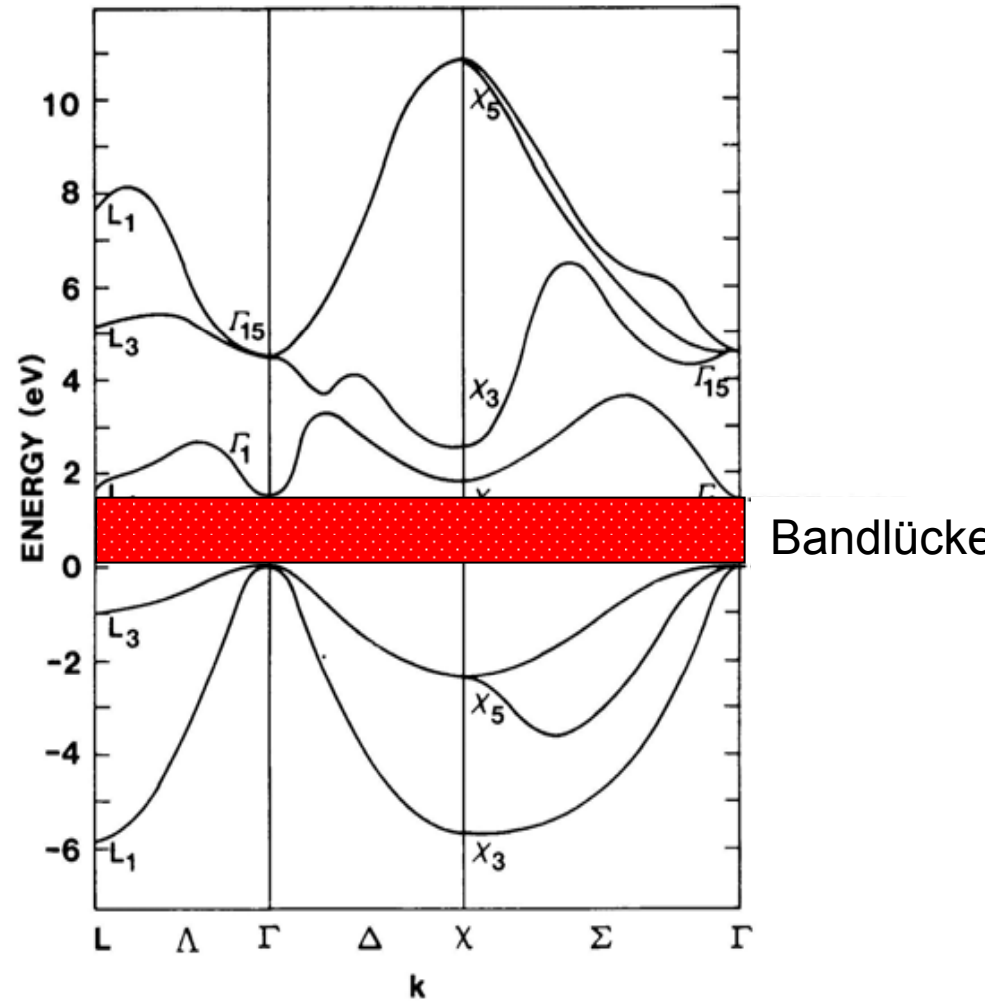
Si

$E_g = 1,12 \text{ eV}$



GaAs

$E_g = 1.4 \text{ eV}$

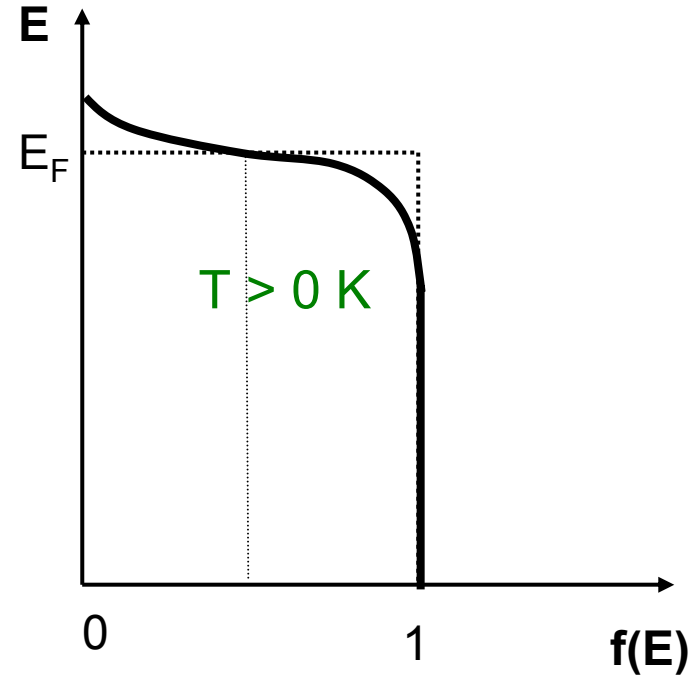
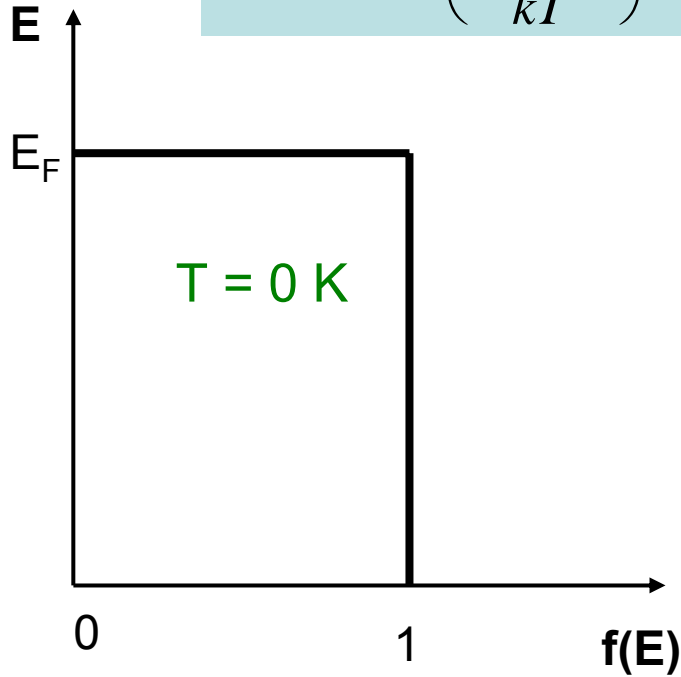


1.3 Besetzung der Energiezustände mit Elektronen

1.3.1 Fermi-Funktion und Fermi-Energie

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$

E_F ... Fermi-Energie



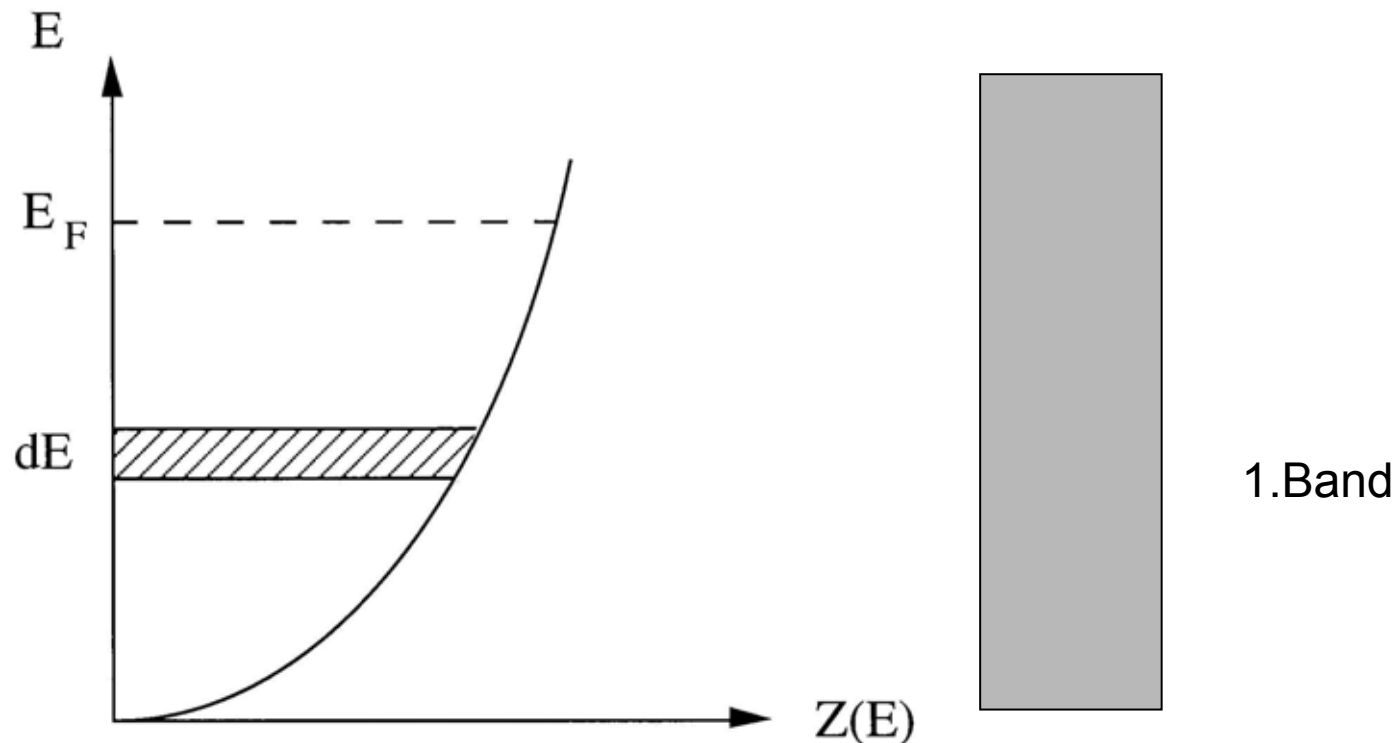
Allgemeine Definition der Fermi-Energie

$$f(E_F) = \frac{1}{2} \quad (\text{für } T > 0 \text{ K})$$

1.3.2 Zustandsdichte

mit $E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} n^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$ und Anzahl der Zustände $\eta = \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi n^3$ folgt:

$$\frac{d\eta}{dE} = Z(E) = \frac{\pi}{4} \left(\frac{2ma^2}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} = \frac{a^3}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$



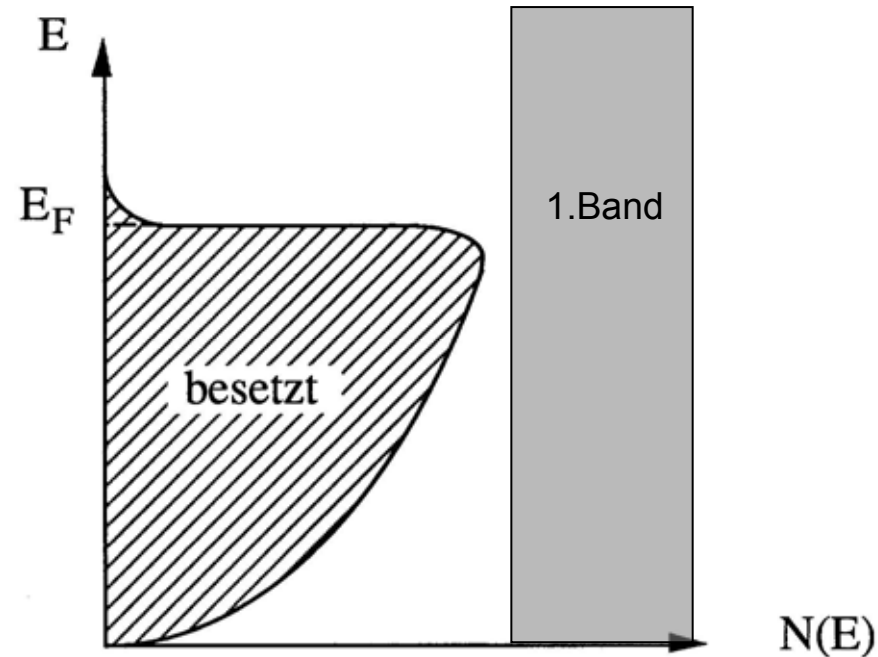
1.3.3 Besetzungsdichte

Wie sind die Elektronen in den Zuständen verteilt. D.h. gesucht ist die Anzahl der Elektronen in Abhängigkeit von der Energie.

$$N(E) = 2 \cdot f(E) \cdot Z(E)$$

↑↓

$$N(E) = \frac{a^3}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{E^{1/2}}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$



Bei $T > 0$ ändert sich die Besetzungsdichte nur in unmittelbarer Nähe (etwa im Bereich kT) der Fermi-Energie.

Für $T=0K$ und $E < E_F$ ist $N(E)=2Z(E)$

1.3.4 Fermi-Energie, Fermi-Temperatur

$$N_V = \int_0^{E_F} N(E) \cdot dE = \int_0^{E_F} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot E^{1/2} \cdot dE = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{3/2}$$

$$E_F = \left(3\pi^2 N_V \right)^{2/3} \cdot \frac{\hbar^2}{2m}$$

N_V ... Elektronen pro Volumen (a^3)

$$N_V = \frac{Z_V}{\Omega} = \frac{Z_V \cdot \rho_m \cdot N_A}{M}$$

Z_V ... Valenz

Ω ... Atomvolumen

M ... relative Atommasse

ρ_m ... Dichte

N_A ... Avogadro-Zahl

„Fermi-Temperatur“: $E_F = k \cdot T_F$

„Fermi-Geschwindigkeit“: $v_F = \frac{p_F}{m} = \left(\frac{2E_F}{m} \right)^{1/2}$

Ende der Wiederholung

2. Elektrische Eigenschaften

2.1 Elektrische Leitfähigkeit: Grundlagen

Klassisches Ohmsches Gesetz:

$$U = R \cdot I$$

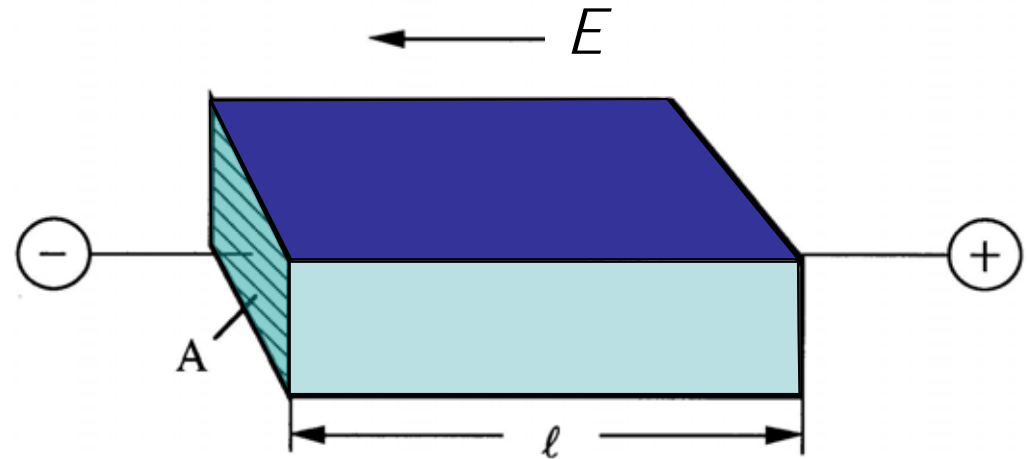
U ... Spannung [V]

I ... Stromstärke [A]

R ... Widerstand [Ω]

$$R = \rho \frac{l}{A}$$

ρ = spezifischer Widerstand [Ωm]



Leitfähigkeit:

$$\sigma = \frac{1}{\rho}$$

[$\Omega^{-1}\text{m}^{-1}$, S/m]

Stromdichte:

$$j = \frac{I}{A} = \sigma \cdot E$$

Transportgleichung:

$$j = N_v \cdot v \cdot e$$

N_v ... Anzahl der „freien“ Elektronen/Volumen

v ... Geschwindigkeit

e ... Elementarladung

Beschleunigung einer Ladung im elektrischen Feld E

$$\vec{F} = q \cdot \vec{E}$$

Kraft auf Ladung q

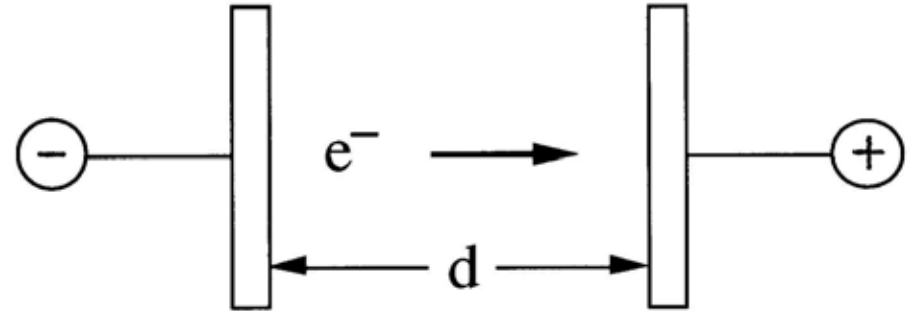
$$\text{Energie} = F \cdot d = q \cdot E \cdot d = q \cdot U$$

U ... Potentialdifferenz [V]

Einheit der Energie:

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

= kinetische Energie, die eine Einheitsladung bei der Beschleunigung entlang einer Potentialdifferenz von 1 V erfährt.



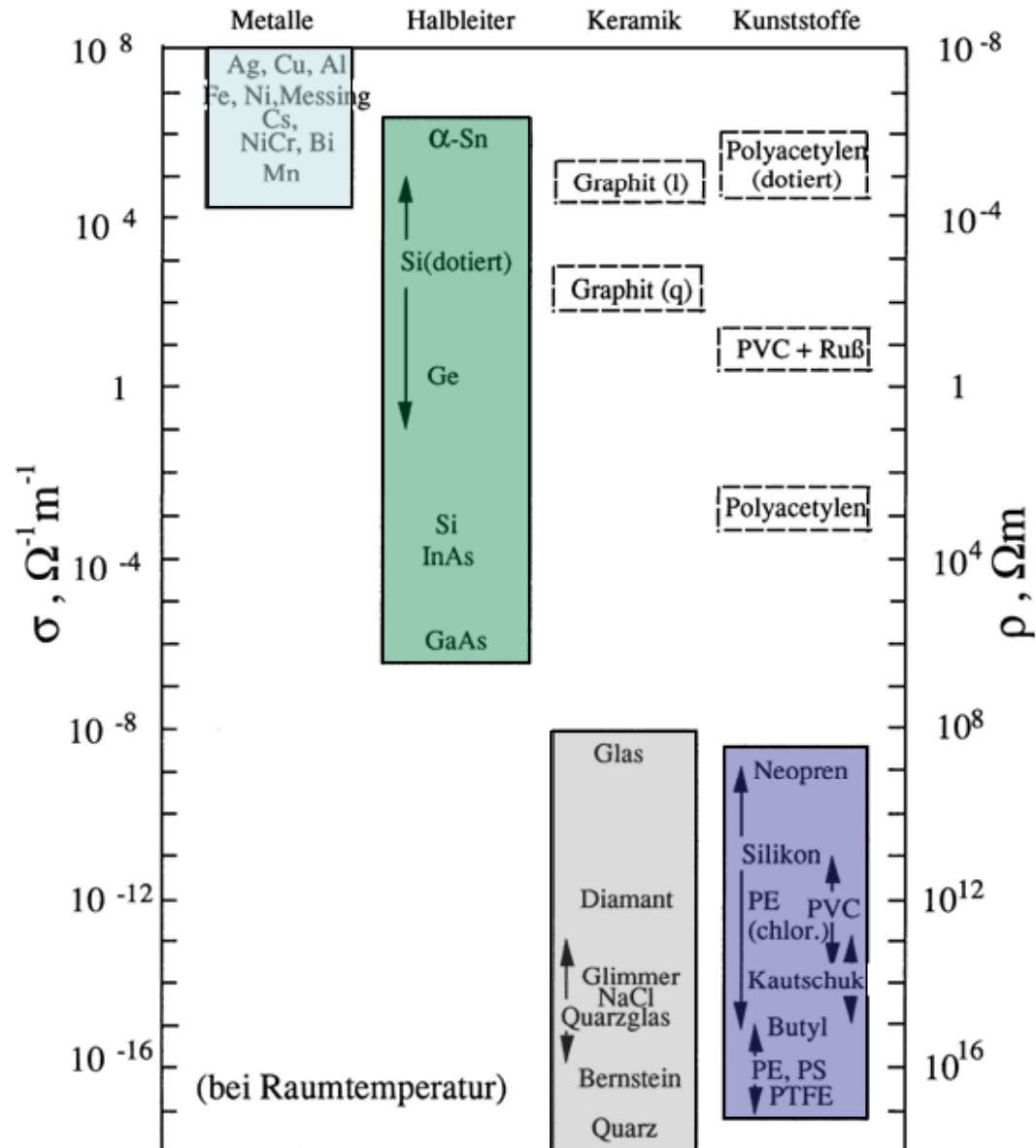
Ablenkung einer bewegten Ladung im Magnetfeld

$$\vec{F} = q \cdot \vec{v} \times \vec{B}$$

Lorentz-Kraft

\vec{B} = magnetische Induktion [Vs/m²]

Leitfähigkeit nach Werkstoffgruppen



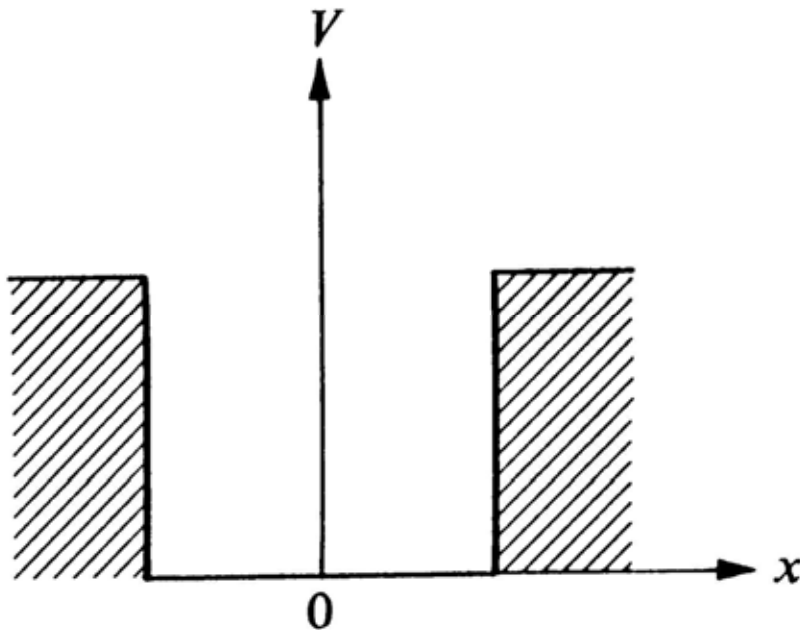
Material	$\sigma, \Omega^{-1}m^{-1}$
Ag	$6,29 \cdot 10^7$
Cu	$5,98 \cdot 10^7$
Al	$3,77 \cdot 10^7$
Fe	$1,03 \cdot 10^7$
Ni	$1,46 \cdot 10^7$
Cs	$5 \cdot 10^6$
Graphit (längs)	$2 \cdot 10^6$
NiCr	10^6
α -Sn	10^6
Bi	$8 \cdot 10^5$
Polyacetylen (dotiert)	$3 \cdot 10^5$
Mn	10^5
Graphit (quer)	$2 \cdot 10^2$
Si (dotiert)	$10^{-1} \dots 10^5$
Ge	2,2
Si	$9 \cdot 10^{-4}$
InAs	10^{-4}

Material	$\sigma, \Omega^{-1}m^{-1}$
GaAs	10^{-6}
Glas	$10^{-9} \dots 10^{-12}$
Neopren	10^{-9}
Silikon	$10^{-9} \dots 10^{-15}$
Diamant	10^{-12}
PE (clor.)	10^{-12}
PVC	$10^{-11} \dots 10^{-14}$
Glimmer	10^{-14}
NaCl	$8 \cdot 10^{-15}$
Quarzglas	$10^{-13} \dots 10^{-15}$
Kautschuk	$10^{-13} \dots 10^{-15}$
Butyl	10^{-15}
PE	$10^{-15} \dots 10^{-17}$
PS	$10^{-15} \dots 10^{-17}$
Bernstein	10^{-16}
PTFE	10^{-17}
Quarz	10^{-18}

2.2 Metalle

2.2.1 Freies Elektronengas („Drude“)

Anzahl der Leitungselektronen pro Volumen



$$N_V = Z \cdot \frac{\delta_m N_A}{M} = Z \cdot \frac{1}{\Omega}$$

Z ... Wertigkeit

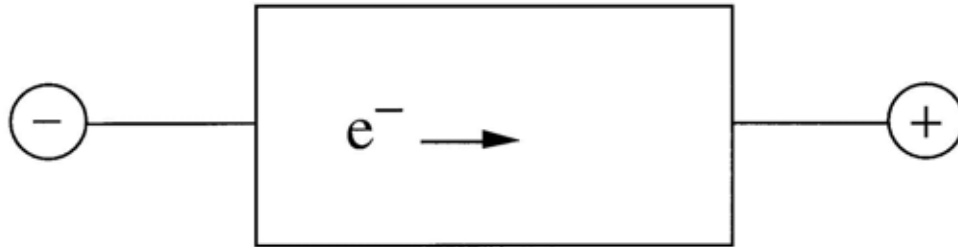
δ_m ... Dichte

N_A ... Avogadro-Zahl

M ... relative Atommasse

Ω -... Atomvolumen

2.2.2 Klassische Theorie der Leitfähigkeit (Drude, Lorentz)



Beschleunigung der „freien“
Elektronen im elektrischen Feld:

$$F = m \cdot \frac{dv}{dt} = e \cdot E$$

Mittlere Geschwindigkeit im Zeitraum τ zwischen Zusammenstößen mit dem Gitter:

$$v = \frac{e \cdot E \cdot \tau}{m}$$

τ ... „Kollisionszeit“
„Lebensdauer“
„Relaxationszeit“

Transportgleichung:

$$j = N_v \cdot v \cdot e = \sigma \cdot E$$

Ergebnis:

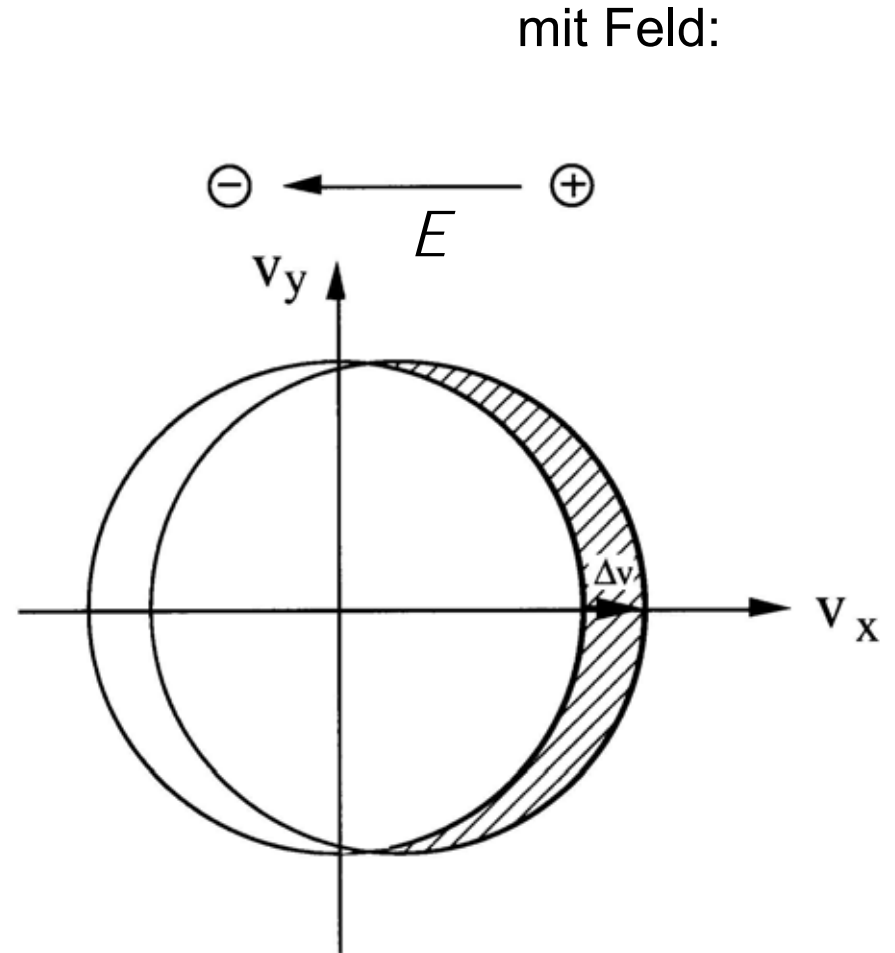
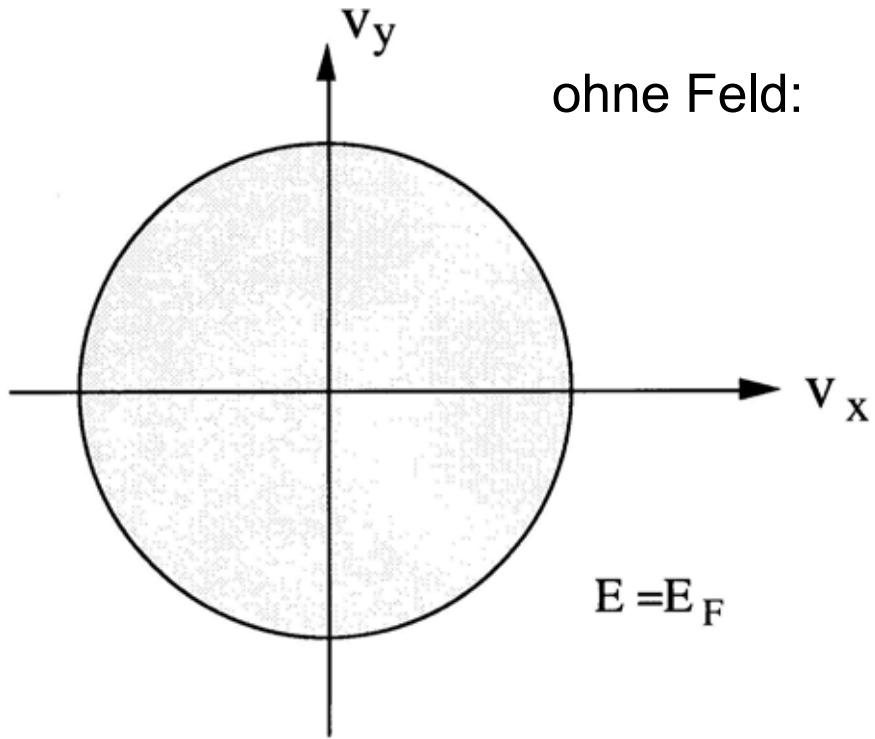
$$\sigma = \frac{N_v \cdot e^2 \cdot \tau}{m}$$

Metalle: Elektrische Leitfähigkeit und andere Parameter (bei Raumtemperatur)

Element	$\sigma, 10^7 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$	$N_v, 10^{28} \text{ m}^{-3}$	$\tau, 10^{-14} \text{ s}$	$I, \text{ \AA}$
Li	1.07	4.6	0.9	110
Na	2.11	2.5	3.1	350
K	1.39	1.3	4.3	370
Rb	0.80	1.1	2.8	220
Cs	0.50	0.85	2.1	160
Cu	5.88	8.45	2.7	420
Ag	6.21	5.85	4.1	570
Au	4.55	5.90	2.9	410
Be	3.03	24.70	0.5	-
Mg	2.36	8.61	1.1	-
Ca	2.67	4.61	2.2	-
Sr	0.44	3.55	0.4	-
Ba	0.17	3.15	0.2	-
Zn	1.69	13.19	2.5	-
Cd	1.38	9.28	0.6	-
Al	3.65	18.06	0.8	-
Ga	0.67	15.30	0.17	-
In	1.14	11.50	0.38	-
Sb	0.23	16.50	0.055	-
Bi	0.08	14.10	0.023	-

Quelle : Omar, S. 154 und Ashcroft, S. 10

2.2.3 Quantenmechanische Theorie



Ableitung der Leitfähigkeit

$$j = N^* \cdot v_F \cdot e$$

N^* ... Anzahl der unkompensierten Elektronen pro Volumen
 v_f ... Fermi-Geschwindigkeit

Berechnung von N^* :

$$N^* \approx N(E_F) \cdot \Delta E$$

$$\Delta E = \hbar v_F \Delta k$$

$$j = e \cdot N(E_F) \cdot \hbar \cdot v_F^2 \cdot \Delta k$$

Verschiebung der
Fermikugel unter
 E -Feld:

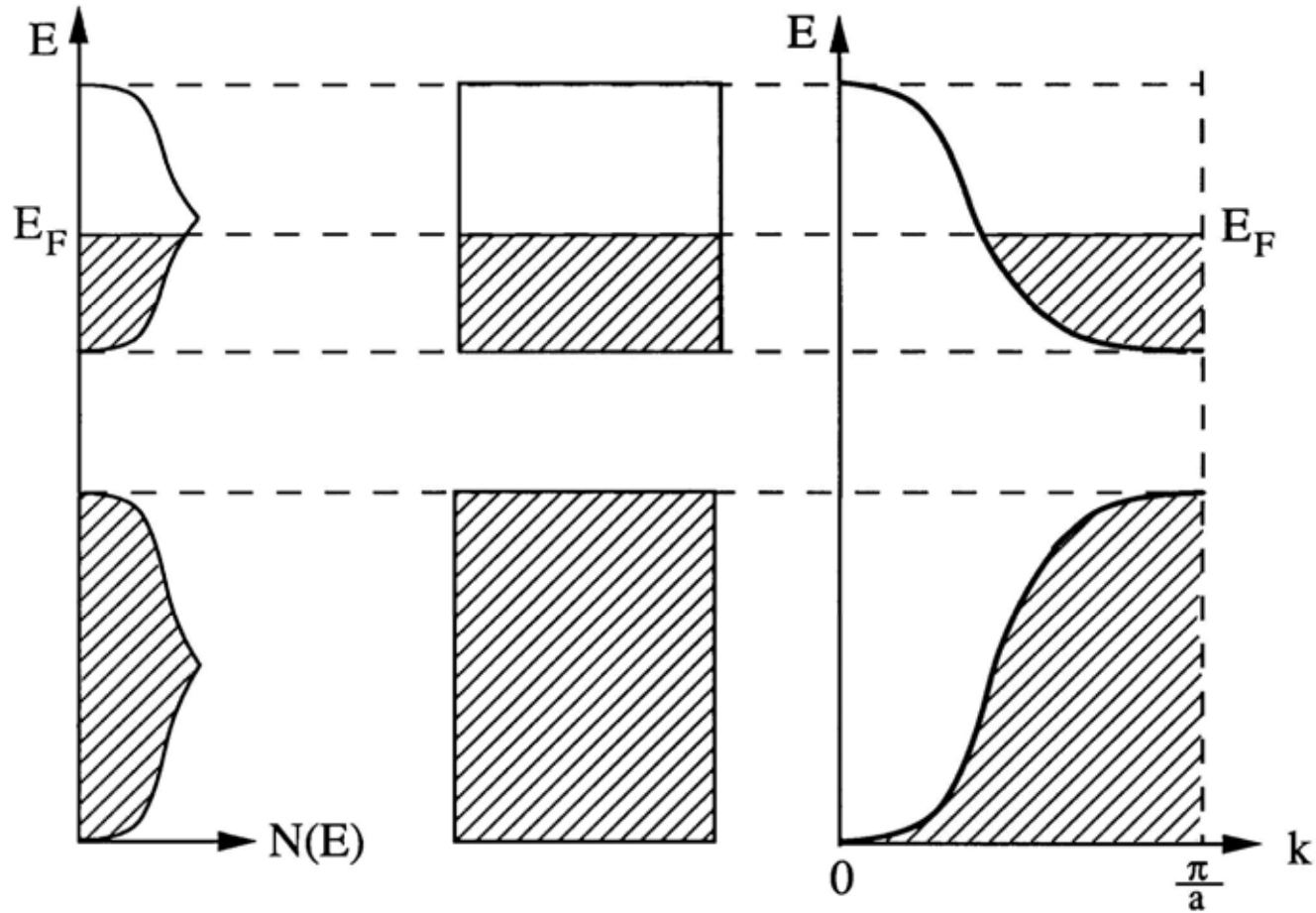
$$\Delta k = \frac{eE}{\hbar} \cdot \Delta t$$

Ergebnis:

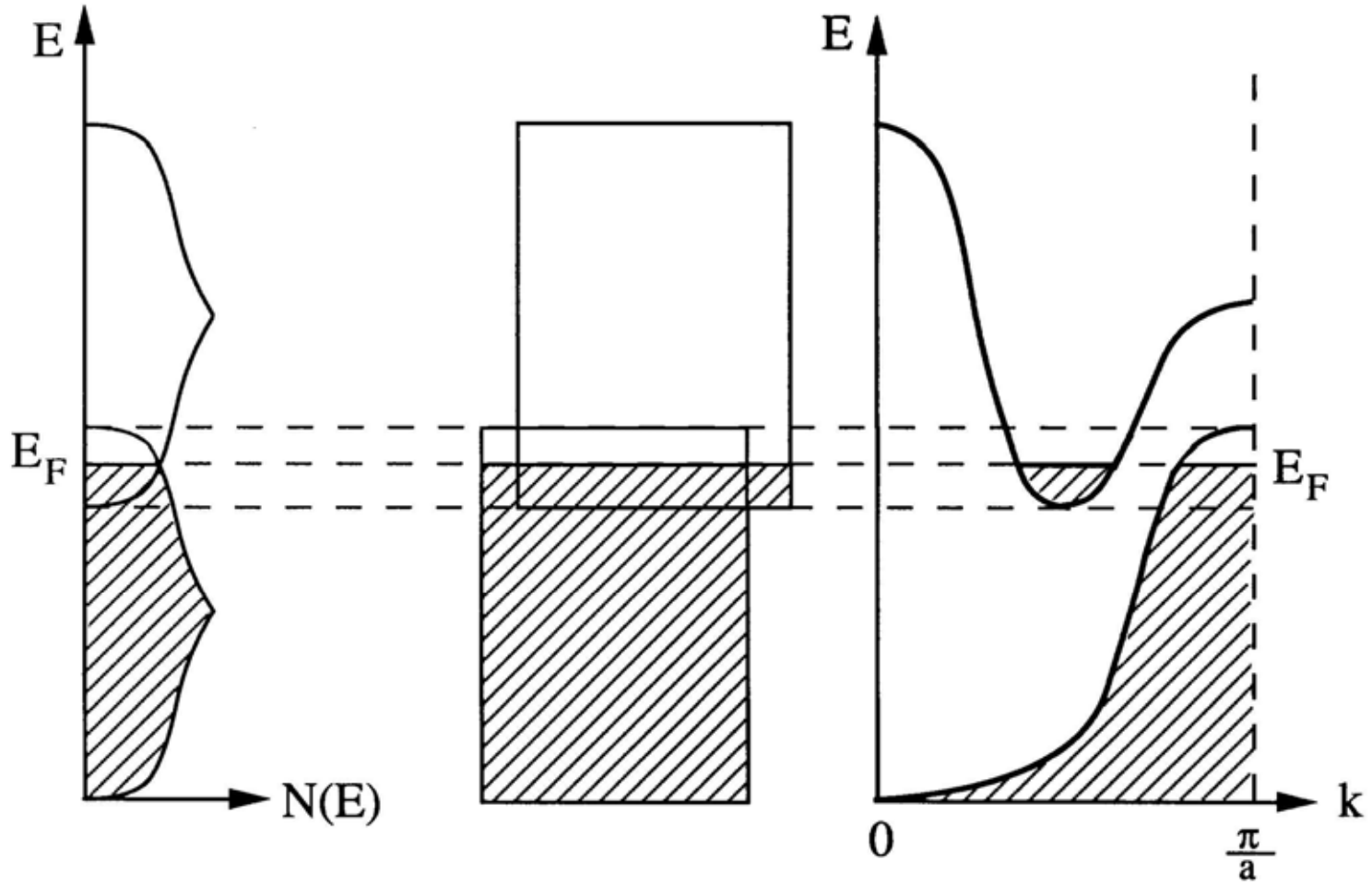
$$\sigma = \frac{1}{3} N(E_F) \cdot e^2 \cdot v_F^2 \cdot \tau$$

$N(E_F)$... Besetzungsdichte des Fermi-Niveaus

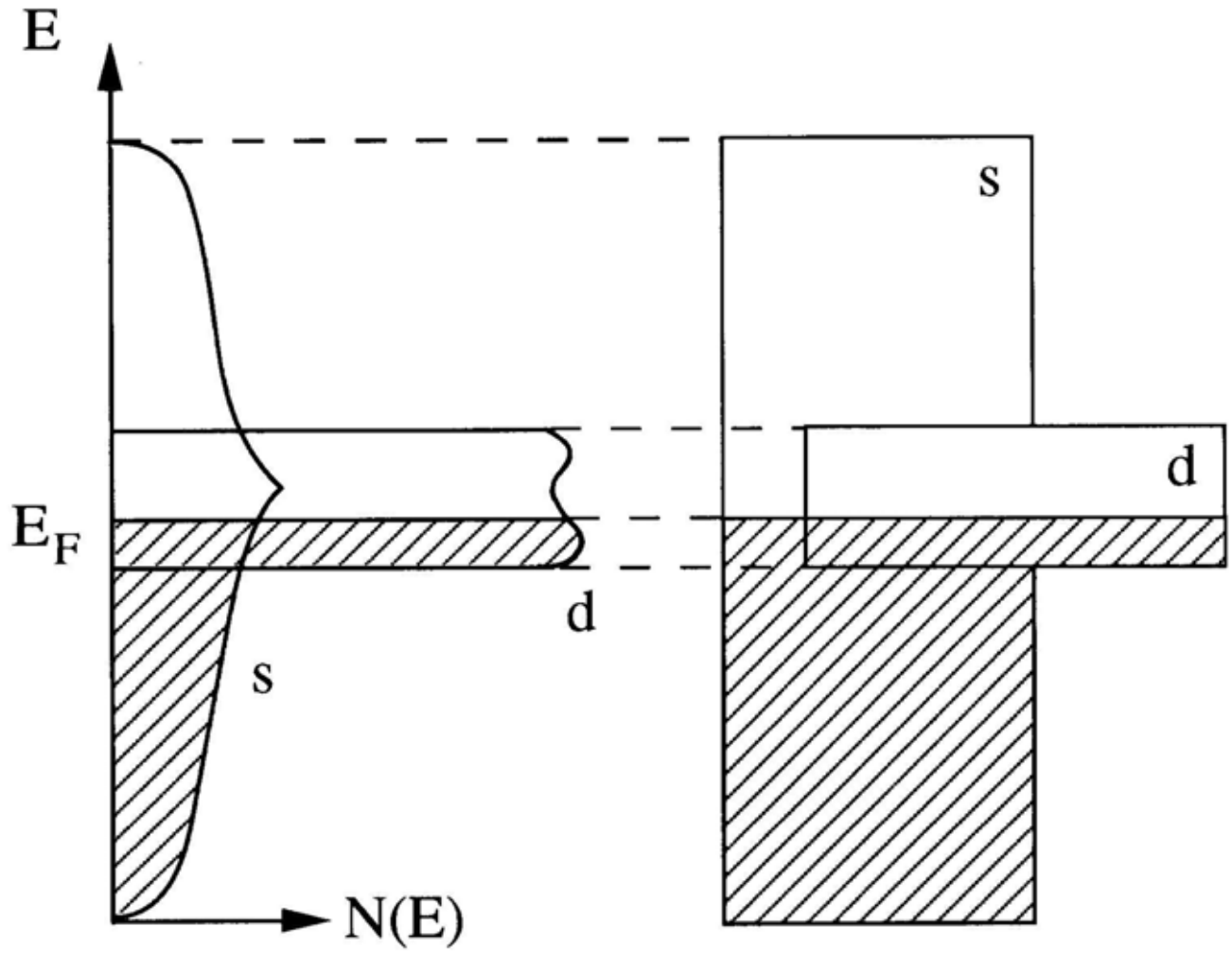
Einwertige Metalle: $N(E_F) \gg 0$



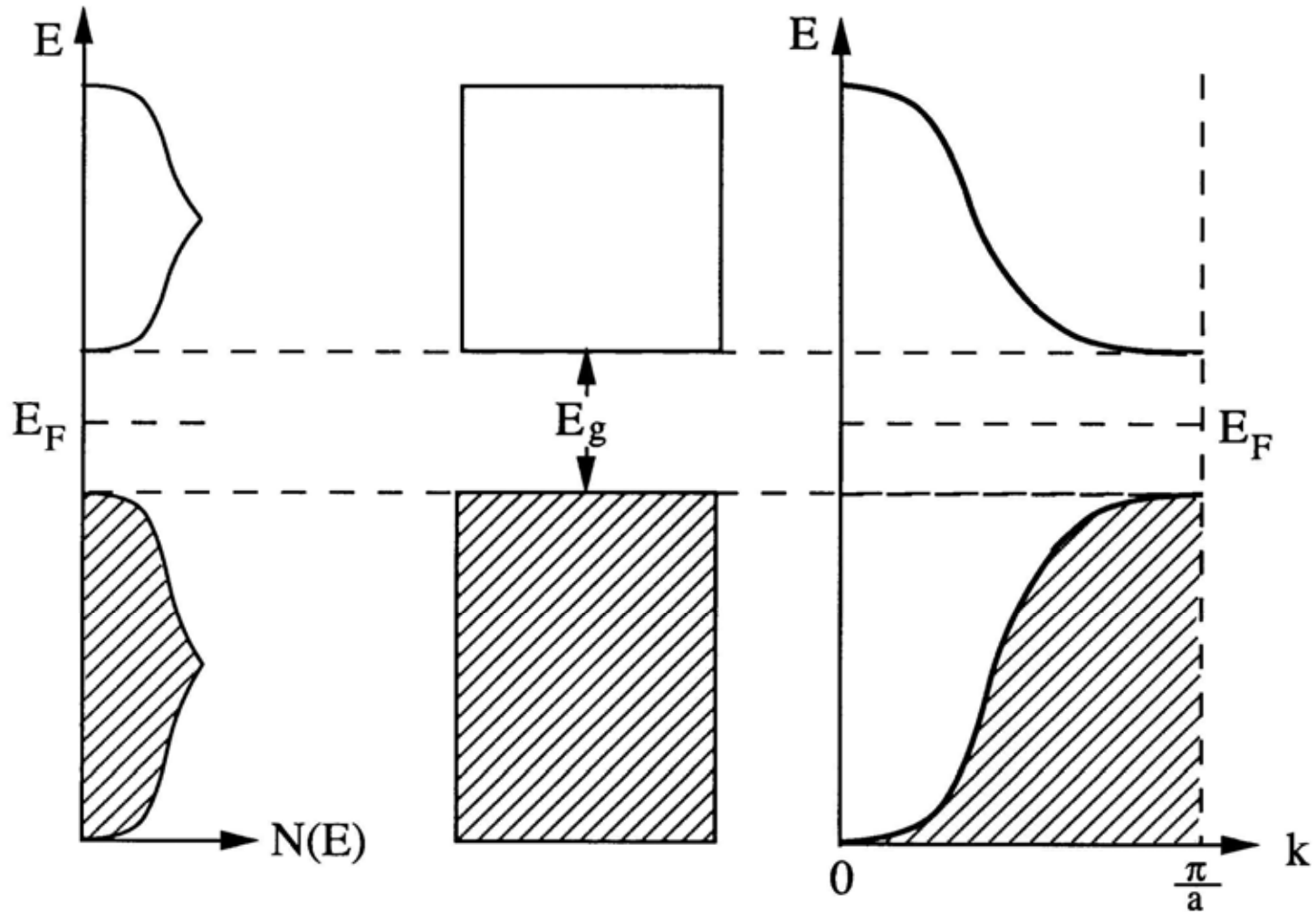
Zweiwertige Metalle: $N(E_F) \gg 0$



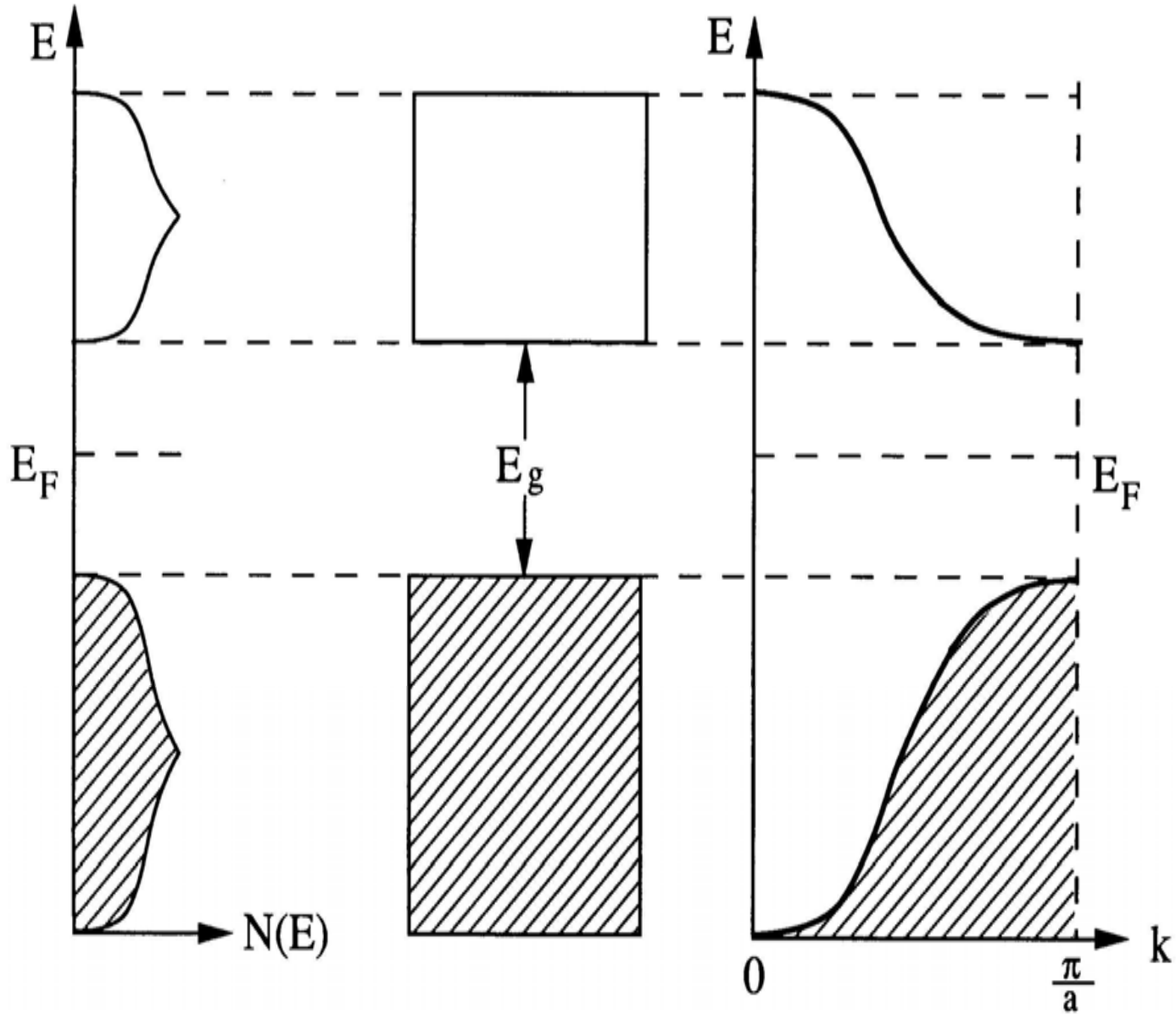
Übergangsmetalle



Halbleiter: $N(E_F) = 0$, $E_g \lesssim 2\text{eV}$

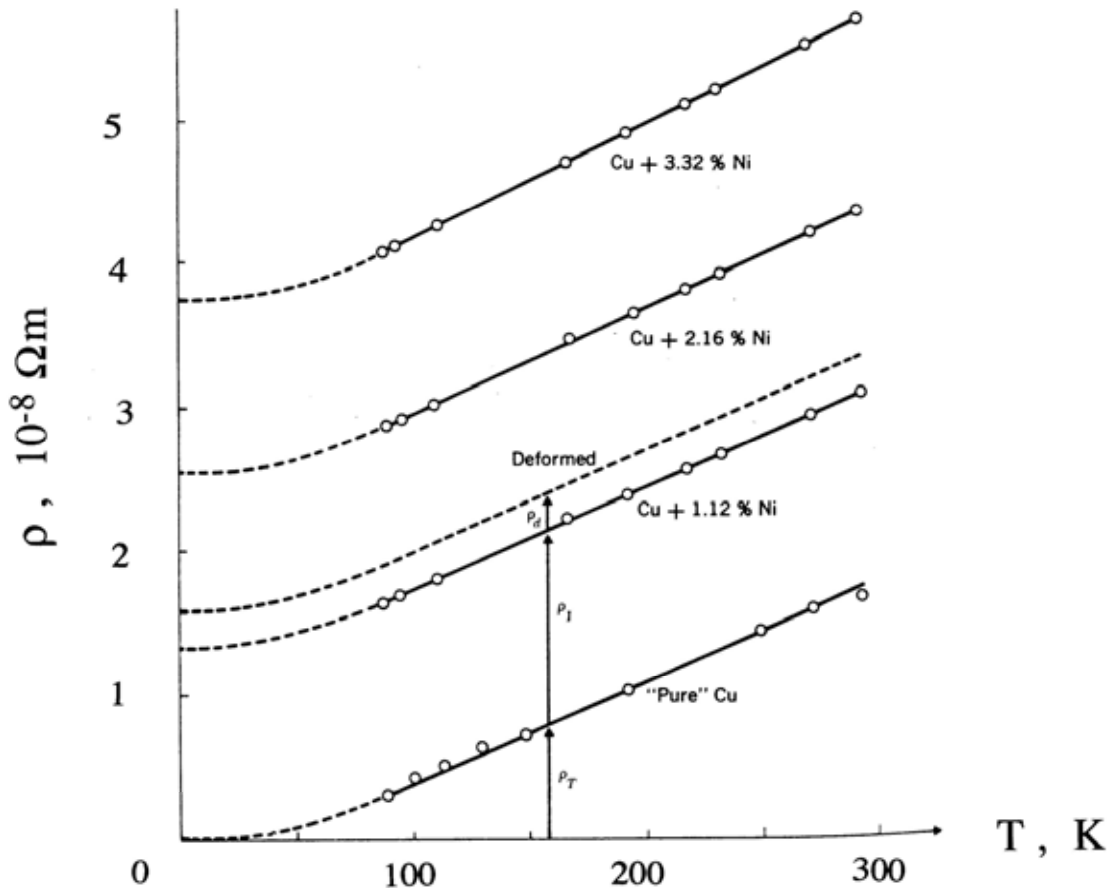


Isolatoren: $N(E_F) = 0$, $E_g \gtrsim 2\text{eV}$



2.2.4 Einfluss von Temperatur, Legierungselementen und Verformung

2.2.4.1 Matthiessen-Regel



$$\rho = \rho_0 + \rho(T)$$

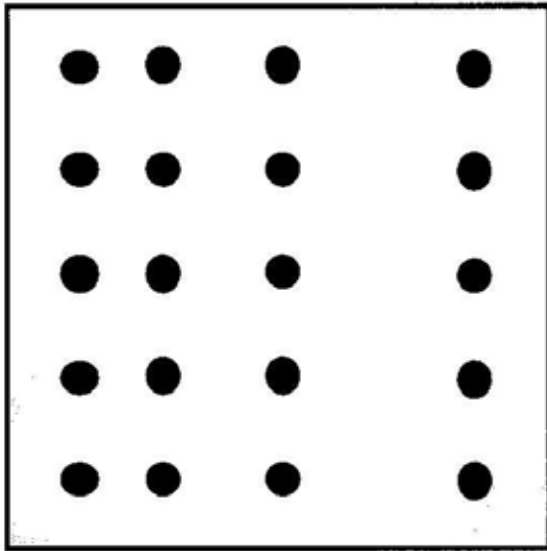
ρ_0 ... „Restwiderstand“
(Defekte)

ρ ... „idealer Widerstand“
(Phononen)

$$\left(\frac{d\rho}{dT} \right)_{\text{rein}} = \left(\frac{d\rho}{dT} \right)_{\text{legiert}}$$

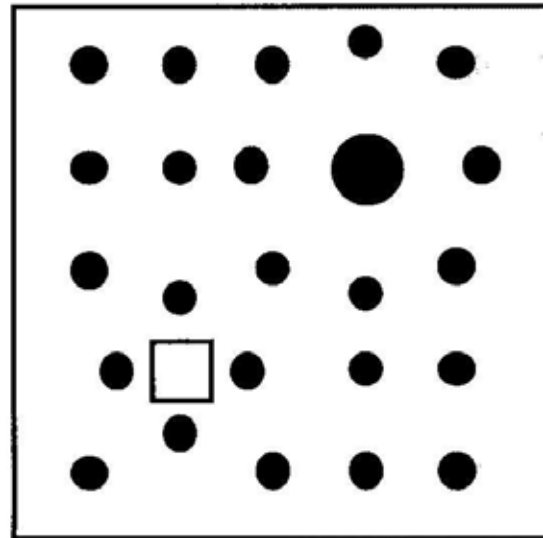
endliche Leitfähigkeit wegen:

„Phononen“



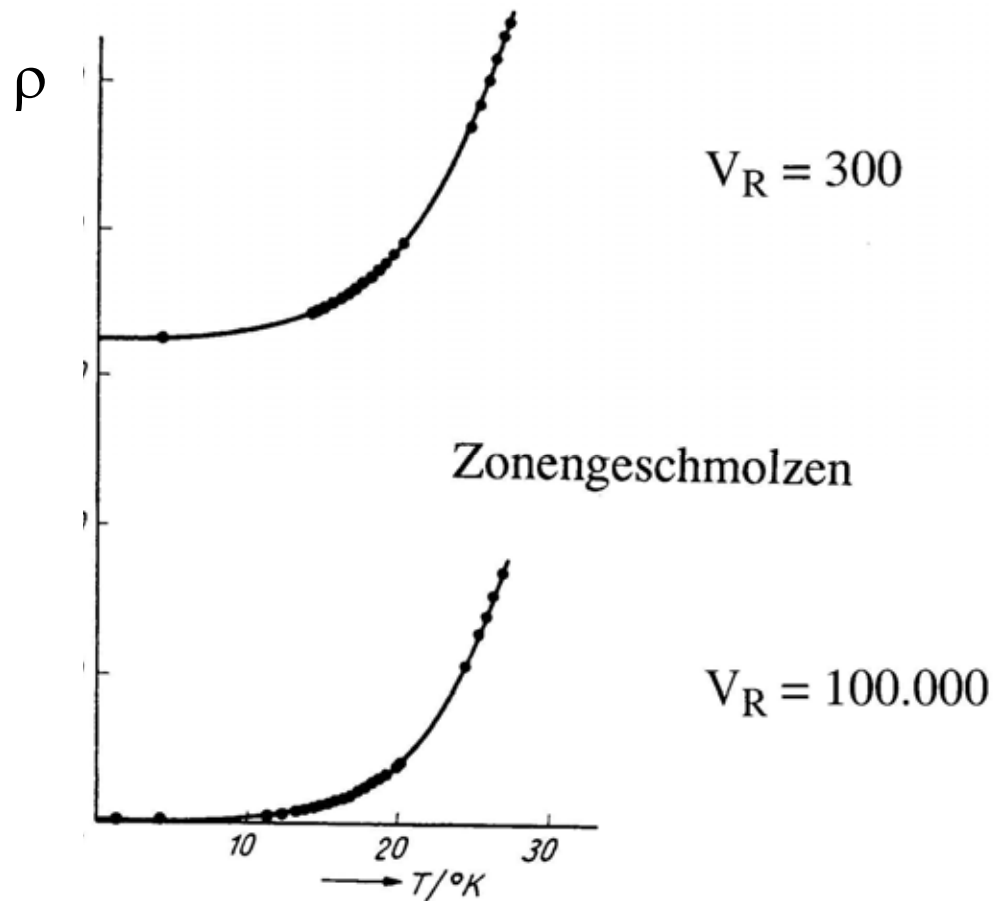
$\rho(T)$

Defekten



ρ_0

Wolfram



Restwiderstandsverhältnis:

$$V_R = \frac{\rho(298 K)}{\rho(4,2 K)}$$

(Maß für Reinheit !)

2.2.4.2 Temperatureinfluss

einfache Überlegung:
$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{3}{N(E_F) \cdot e^2 \cdot v_F^2} \cdot \frac{1}{\tau}$$

wobei
$$\tau = \frac{\ell}{v_F} \quad \ell \dots \text{mittlere freie Weglänge}$$

kinetische Gastheorie:

$$\ell = \frac{1}{\hat{\sigma} \cdot N}$$

$\hat{\sigma}$... Streuquerschnitt
N ... Anzahl Atome/Volumen

Wärmeschwingungen erhöhen den Streuquerschnitt: $\hat{\sigma} \sim kT$

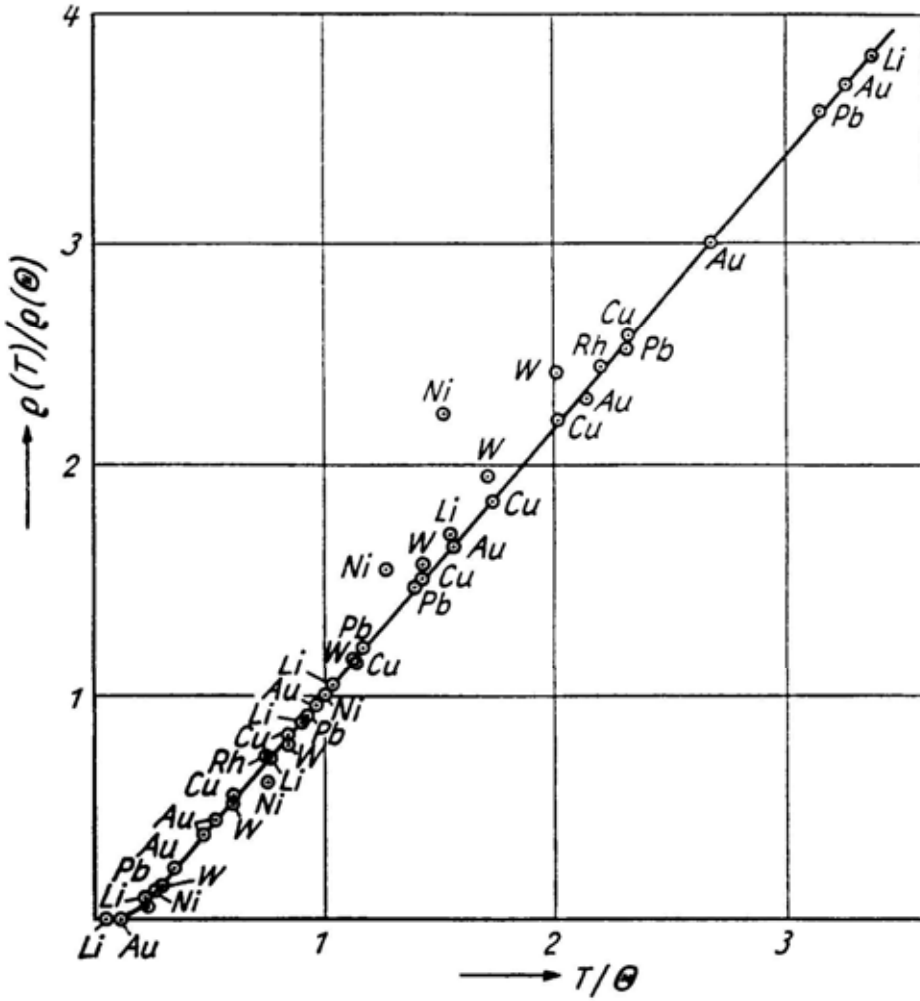
daraus folgt: $\rho(T) \sim T$

und somit:

$$\left(\frac{\rho_T(T)}{\rho_T(\theta)} \right) \propto \left(\frac{T}{\theta} \right)$$

θ = Debye-Temperatur

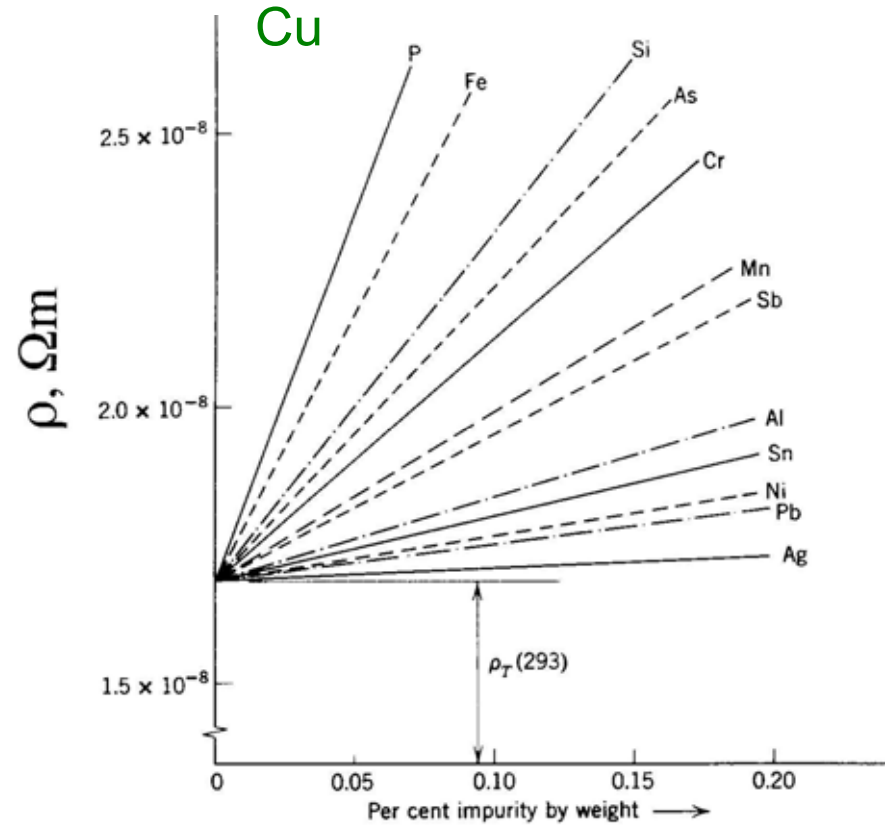
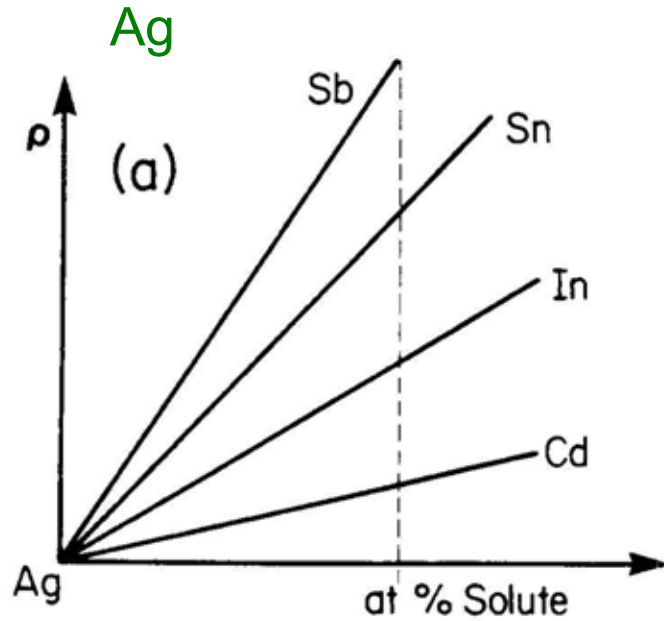
Temperatureinfluss



Regel nach Grüneisen

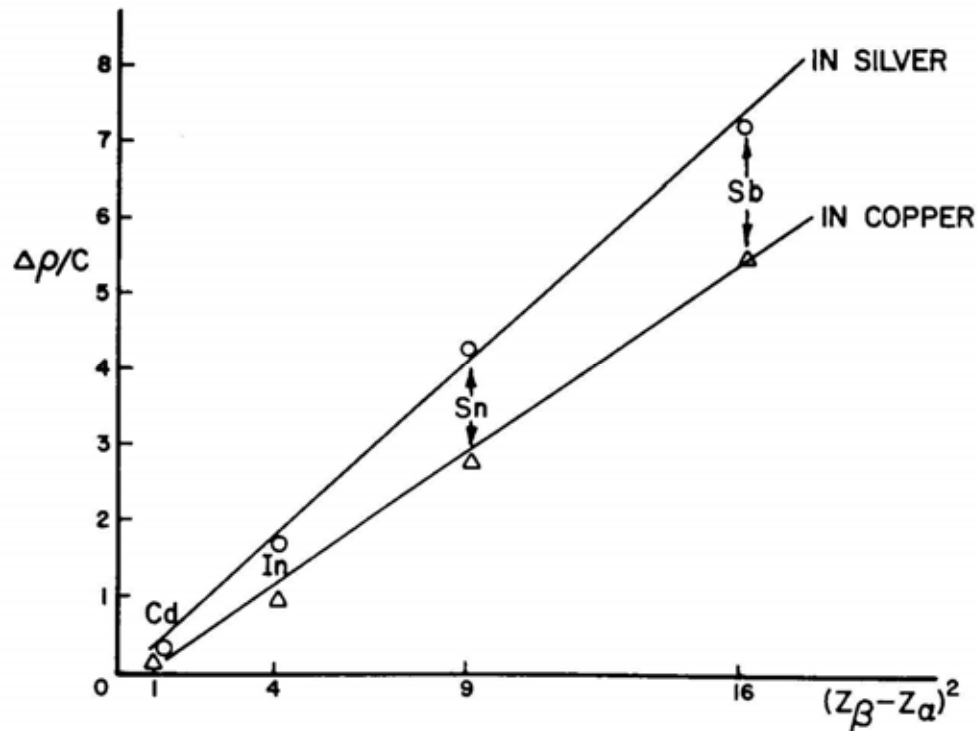
2.2.4.3 Legierungseinflüsse

c-Abhängigkeit



Ursachen: Radienunterschied
Valenzunterschied

Δz -Abhängigkeit

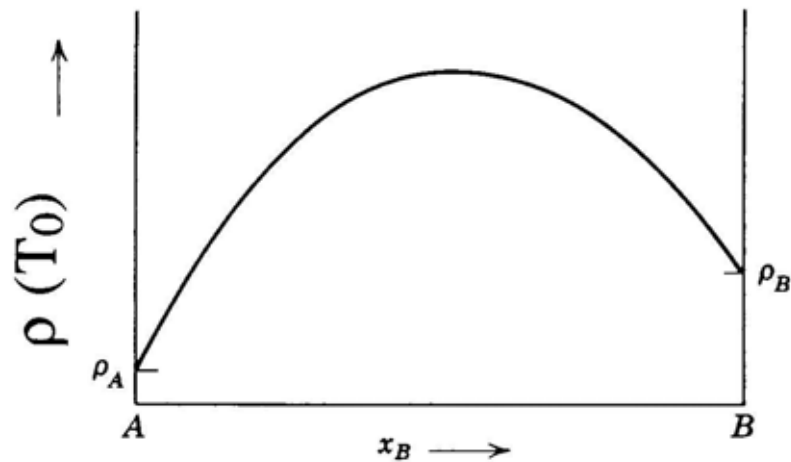
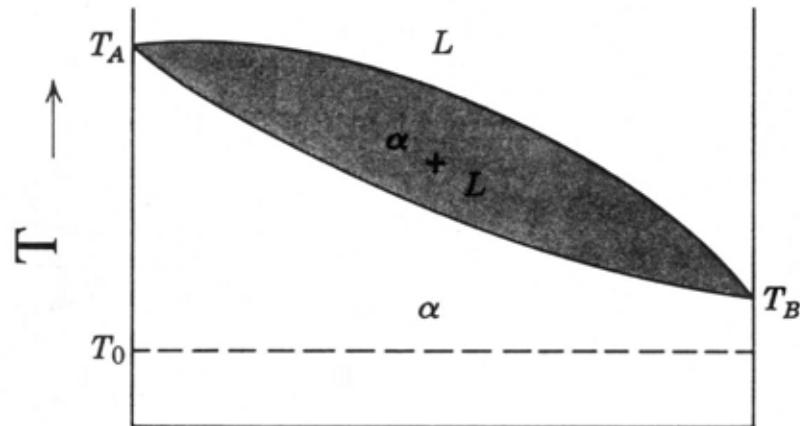


$$\Delta\rho \sim (\Delta Z)^2$$

Regel nach Linde:

Widerstand steigt mit Quadrat der Wertigkeitsdifferenz

Durchgehende Löslichkeit



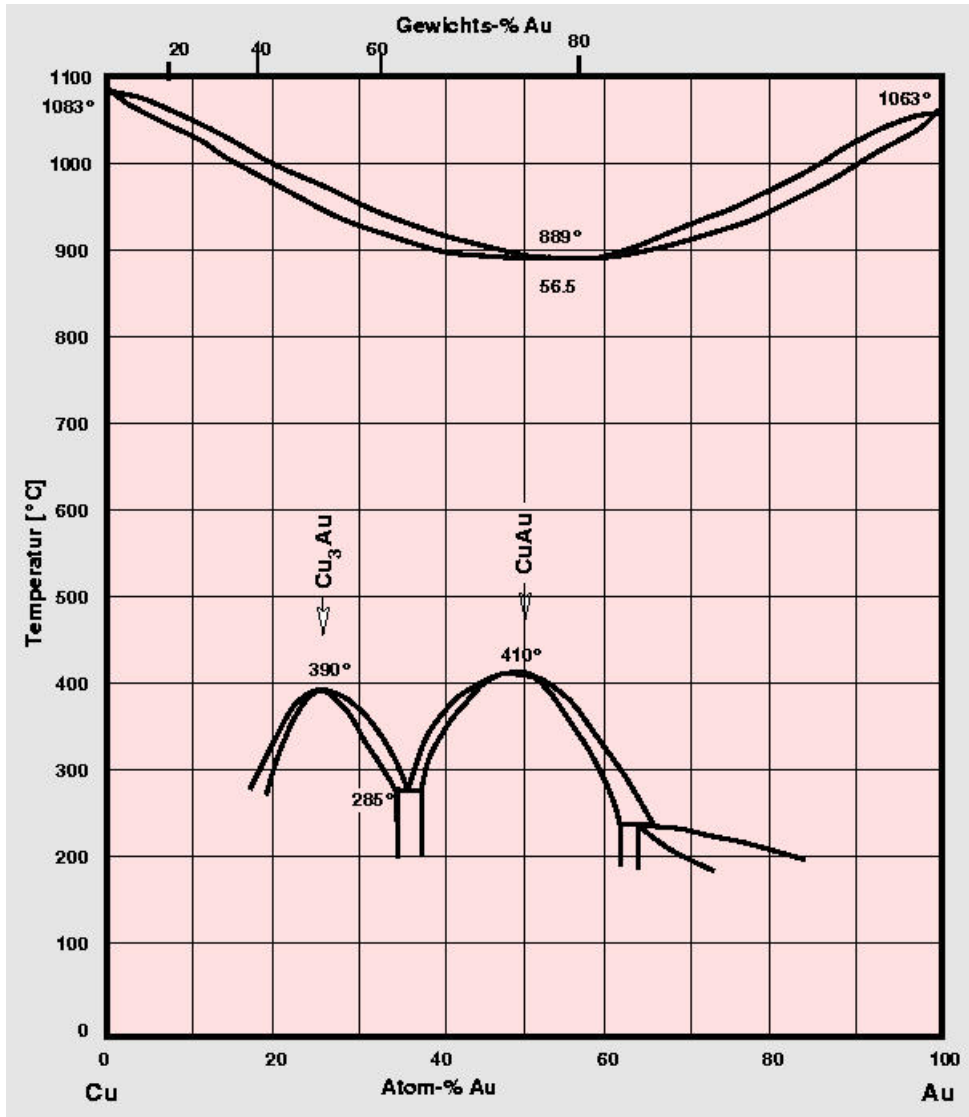
Konzentrationsabhängigkeit:

$$\rho = x_A \rho_A + x_B \rho_B + C x_A x_B$$

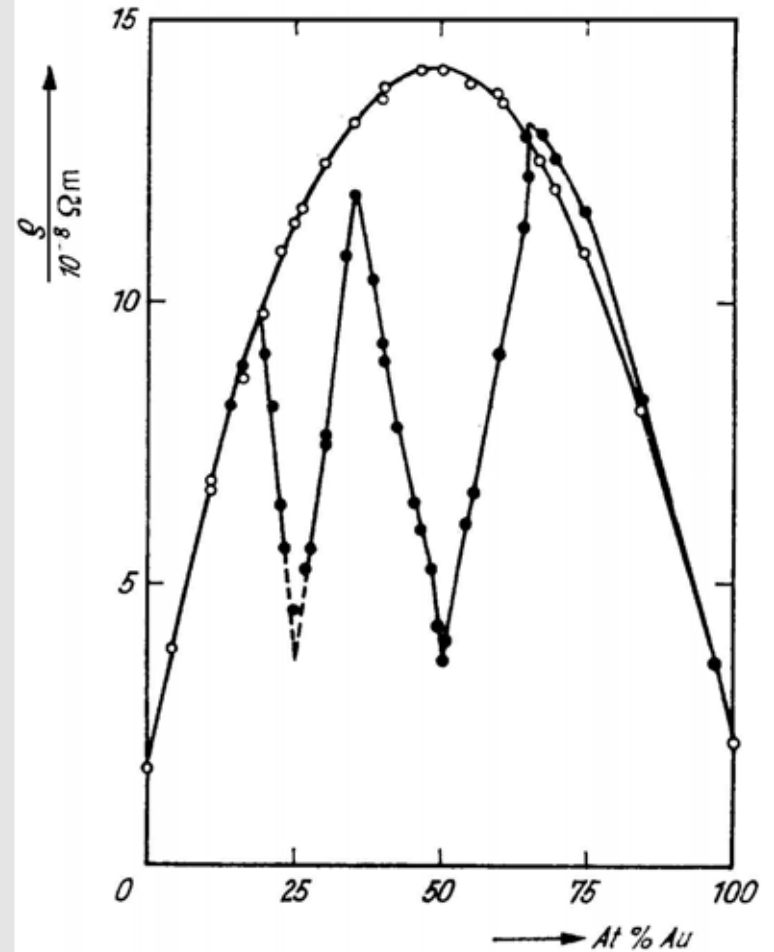
(“Nordheim-Regel“)

mit
C Materialkonstante
 $x_A + x_B = 1$

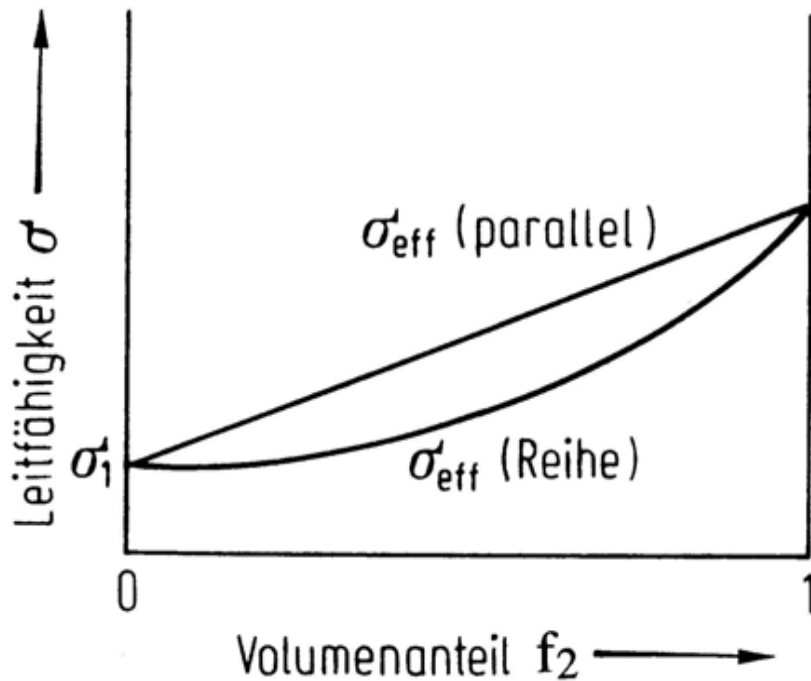
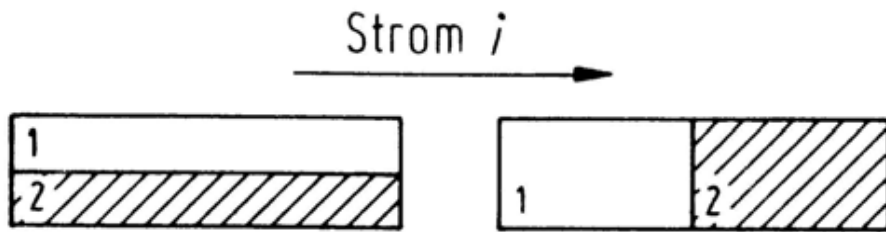
Durchgehende Löslichkeit mit Ordnungseinstellung



Einfluss der Ordnung (z.B. Cu-Au)



Keine Löslichkeit im festen Zustand



Mischungsregeln:

$$\sigma_{eff} = \sigma_1 f_1 + \sigma_2 f_2$$

(Parallel)

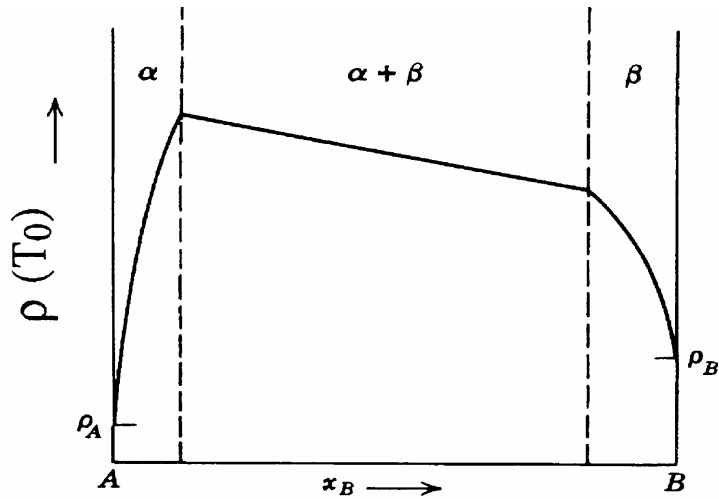
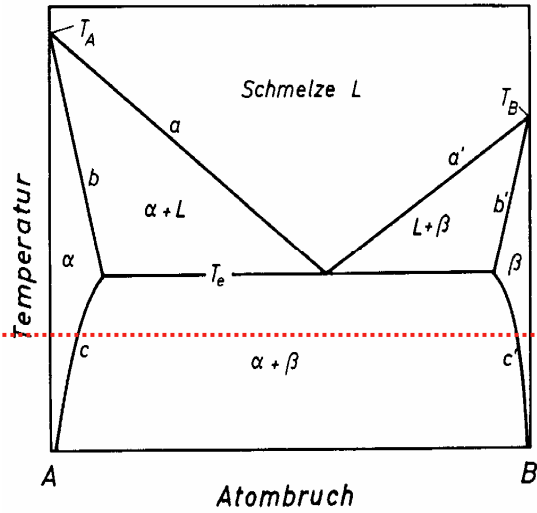
$$\frac{1}{\sigma_{eff}} = \frac{f_1}{\sigma_1} + \frac{f_2}{\sigma_2}$$

bzw.

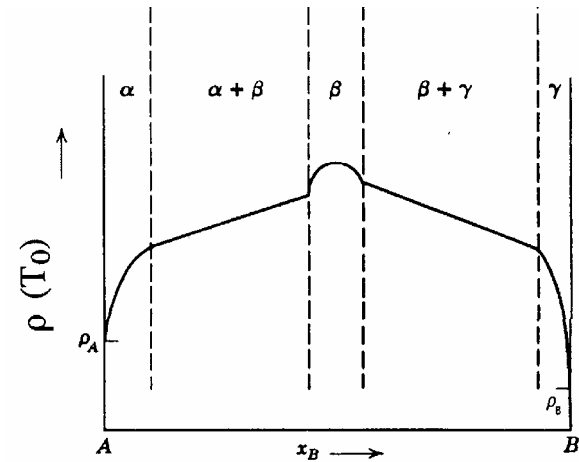
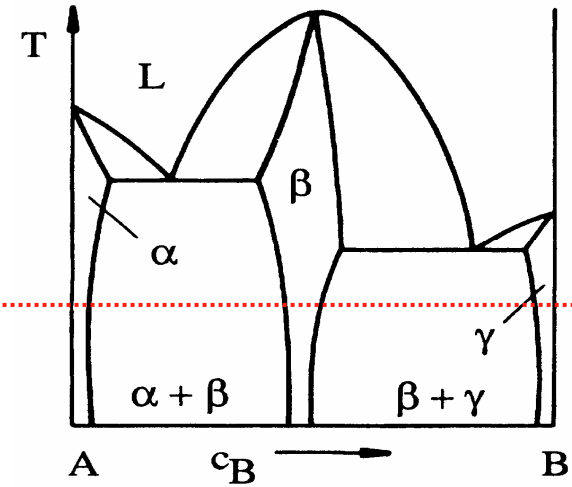
$$\rho_{eff} = f_1 \rho_1 + f_2 \rho_2$$

(Reihe)

Eutektikum mit Randlöslichkeit



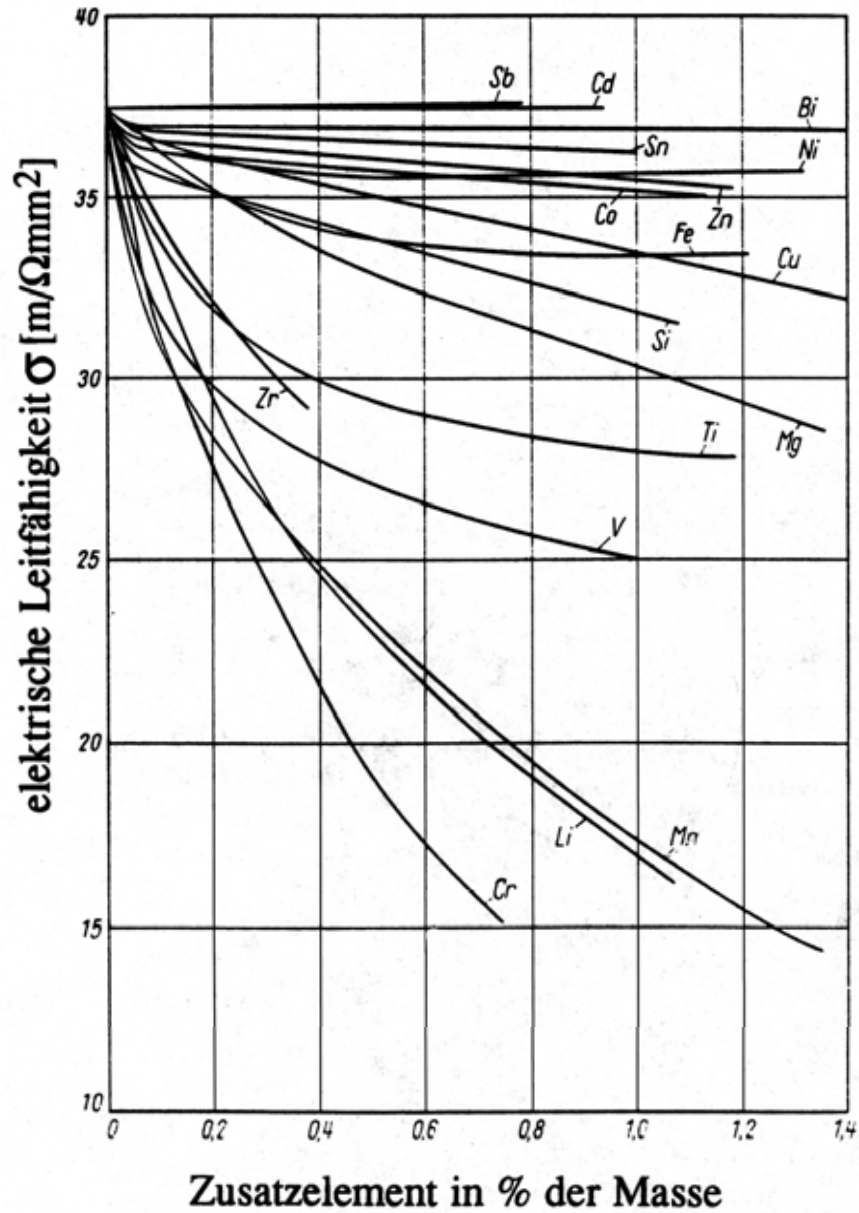
Binäres System mit intermetallischer Phase



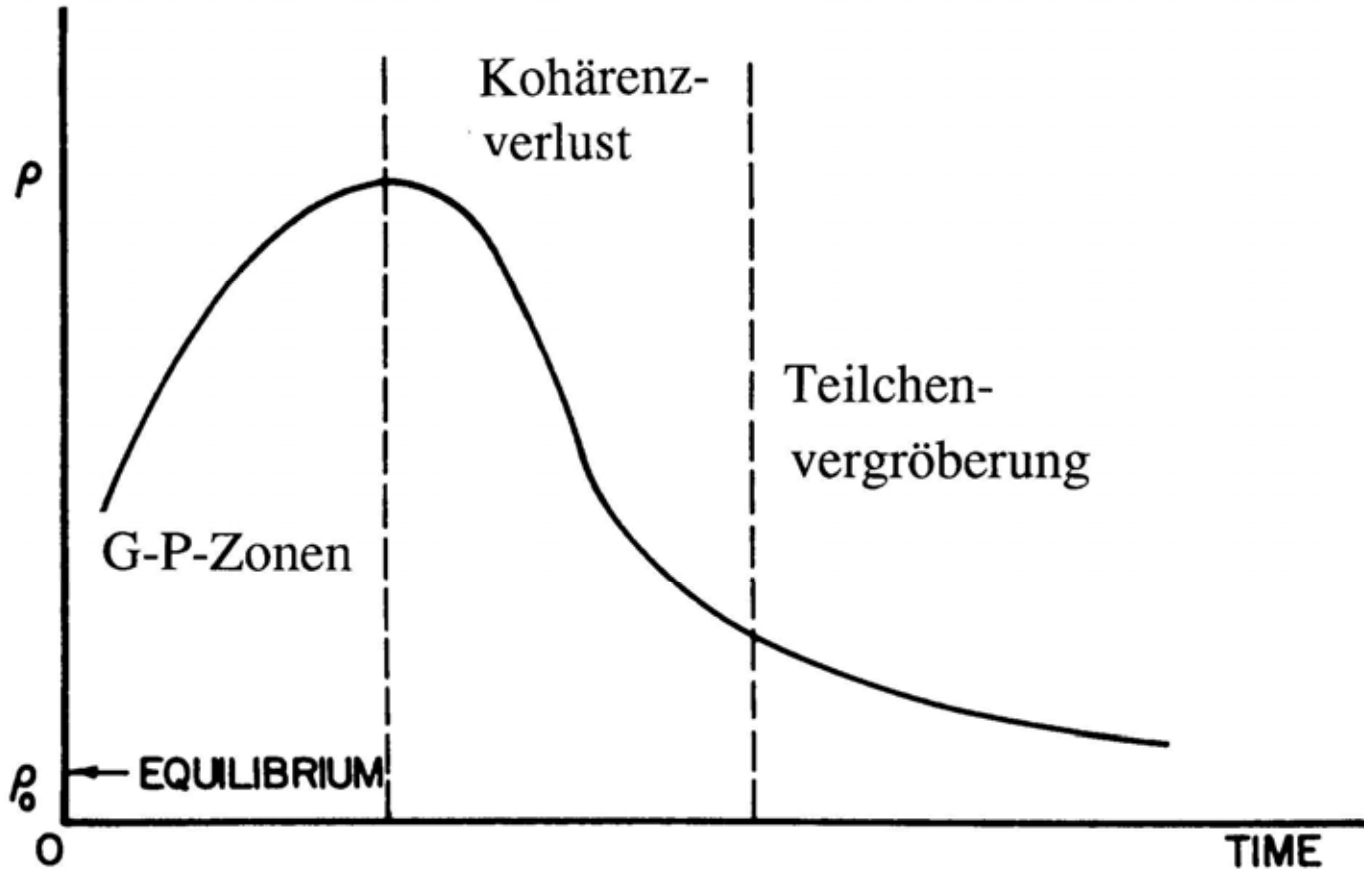
Technisches Beispiel: Al

Element	Maximum solubility in Al, %	Average increase in resistivity per wt%, $\mu\Omega \cdot \text{cm}$	
		In solution	Out of solution(a)
Chromium	0.77	4.00	0.18
Copper	5.65	0.344	0.030
Iron	0.052	2.56	0.058
Lithium	4.0	3.31	0.68
Magnesium	14.9	0.54(b)	0.22(b)
Manganese	1.82	2.94	0.34
Nickel	0.05	0.81	0.061
Silicon	1.65	1.02	0.088
Titanium	1.0	2.88	0.12
Vanadium	0.5	3.58	0.28
Zinc	82.8	0.094(c)	0.023(c)
Zirconium	0.28	1.74	0.044

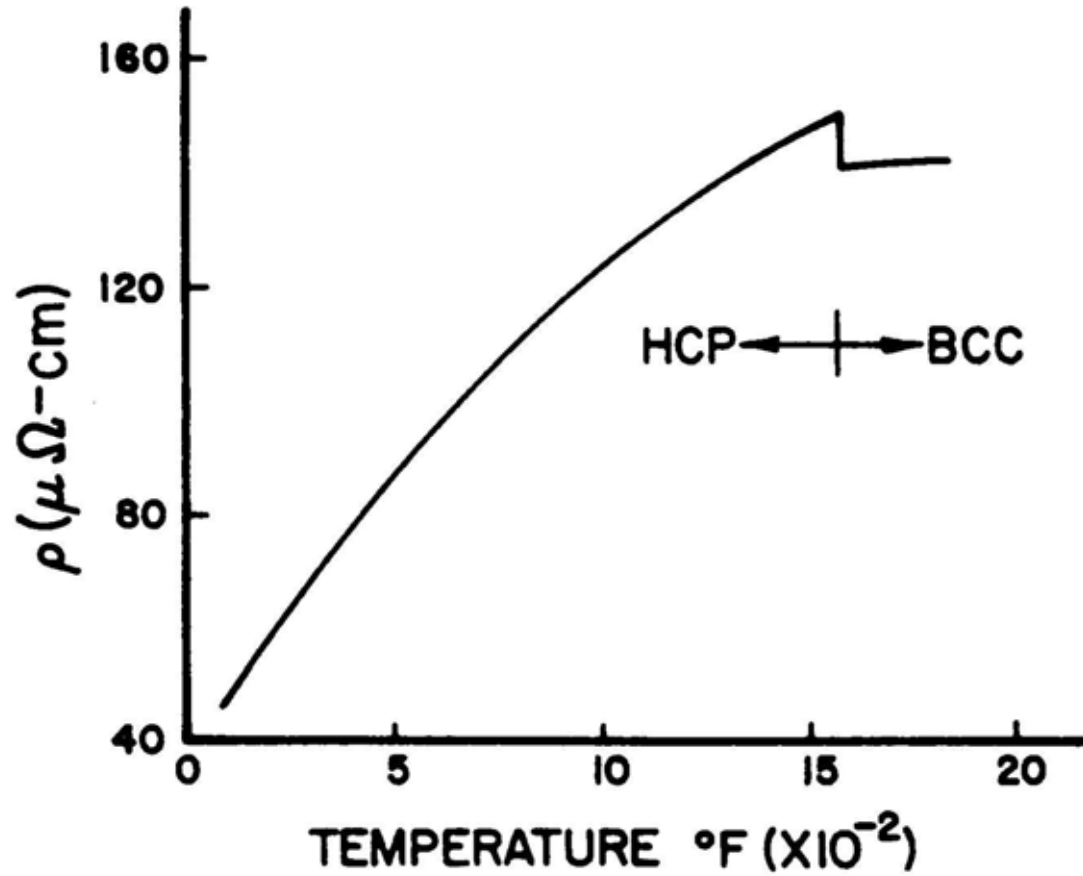
Technisches Beispiel: Al



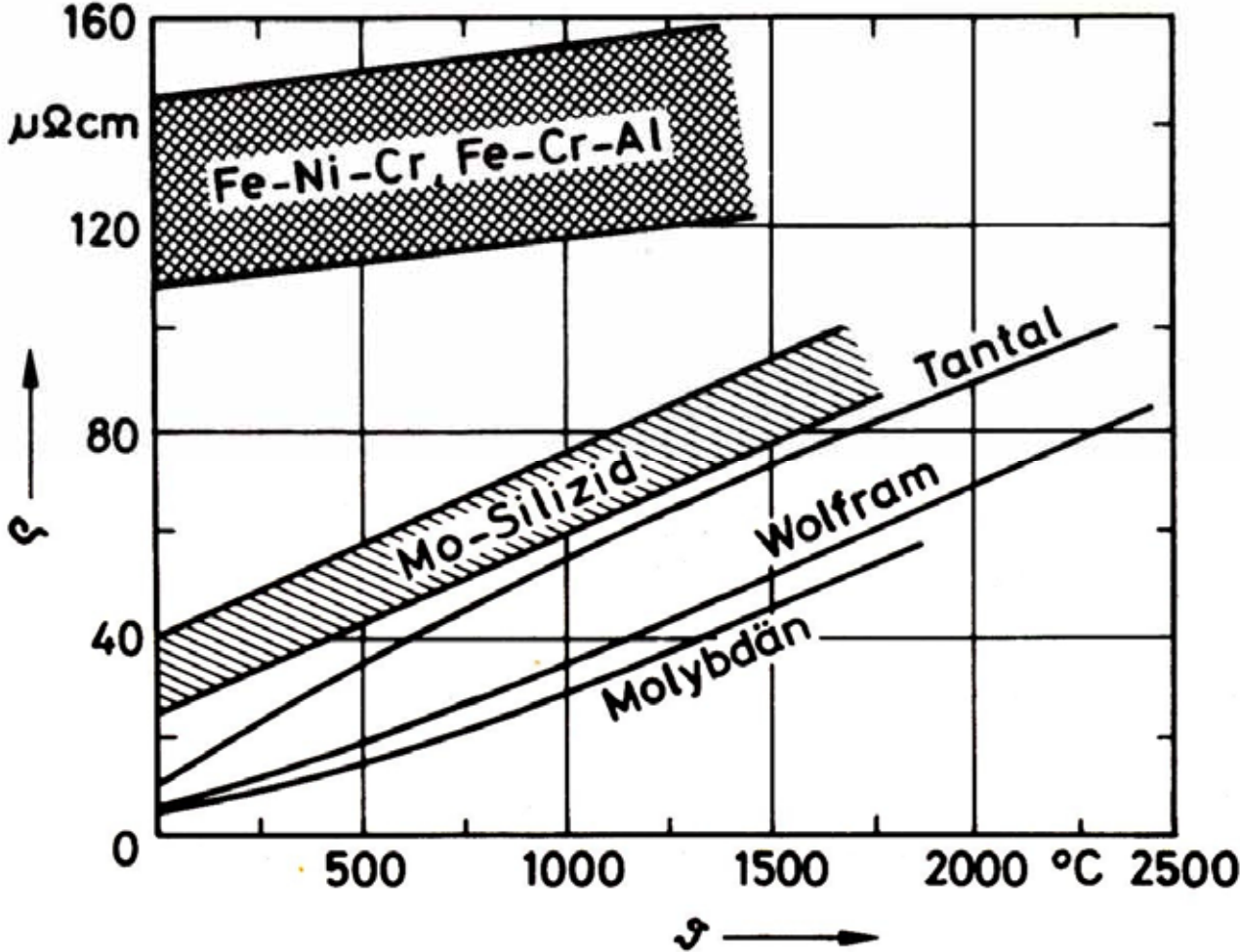
Kohärente Ausscheidungen:



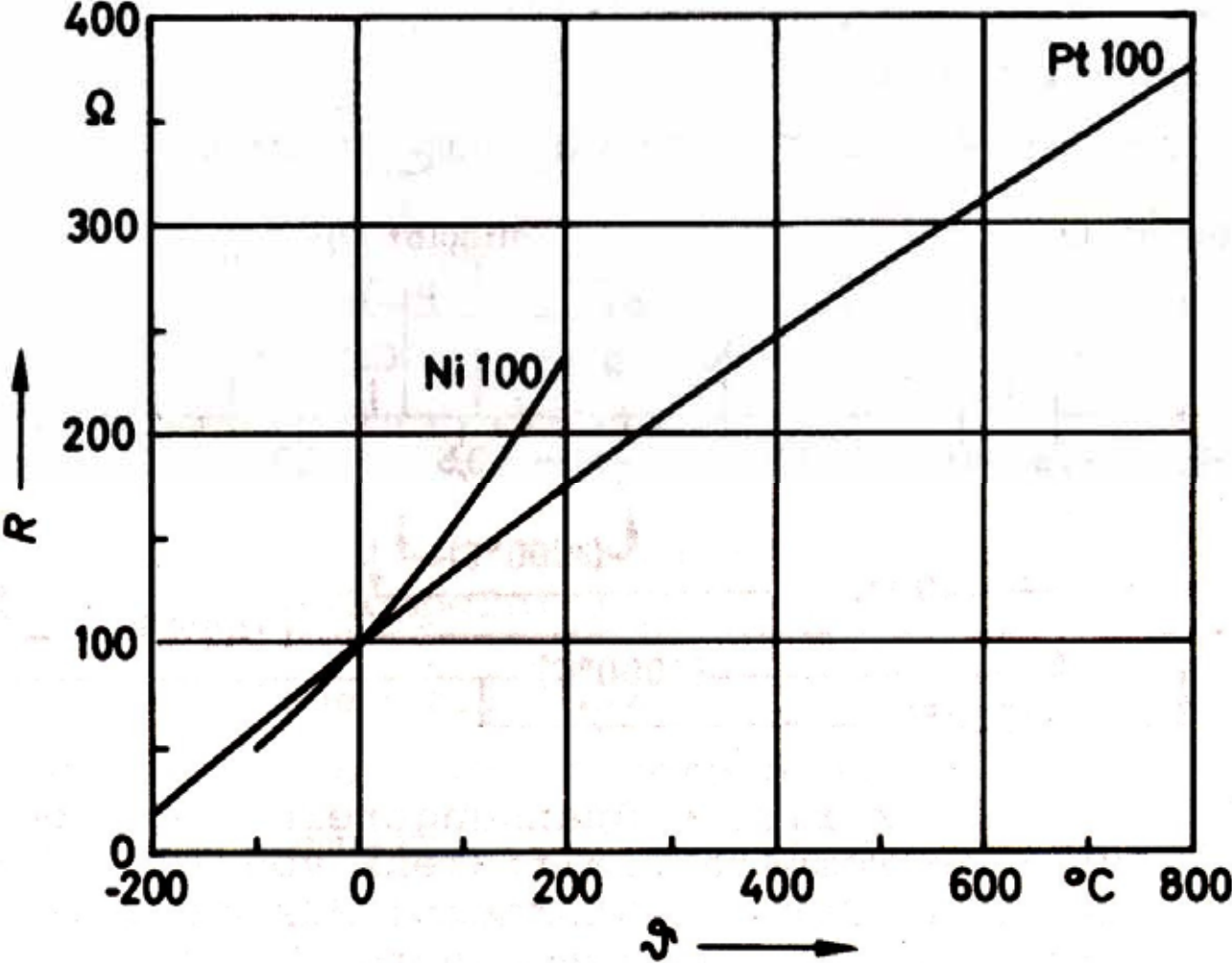
Allotrope Umwandlung: Ti



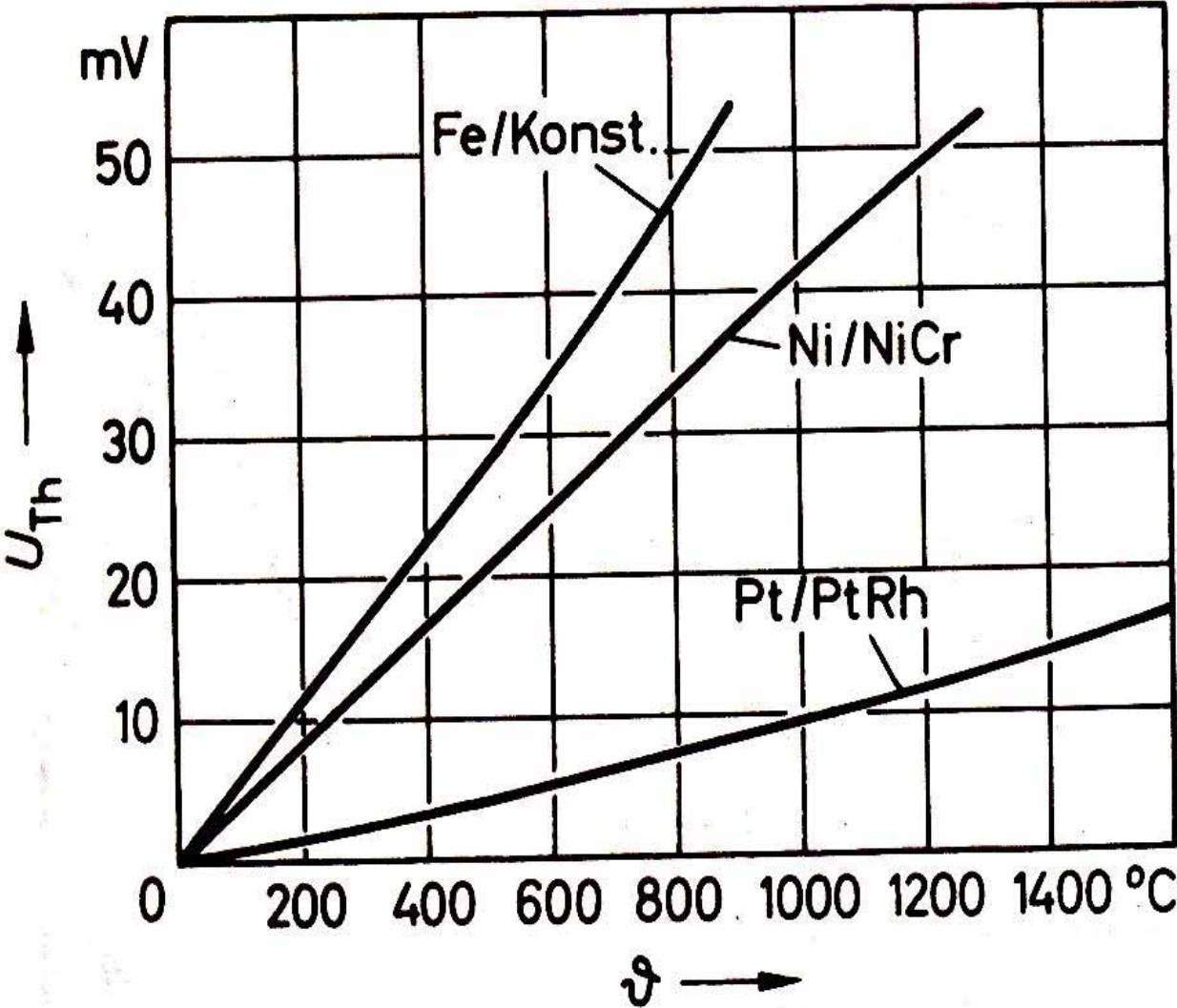
Heizleiterwiderstände



Meßtechnik: Widerstandsthermometer



Meßtechnik: Thermoelemente



Technische Widerstandsmaterialien

Heizleiter

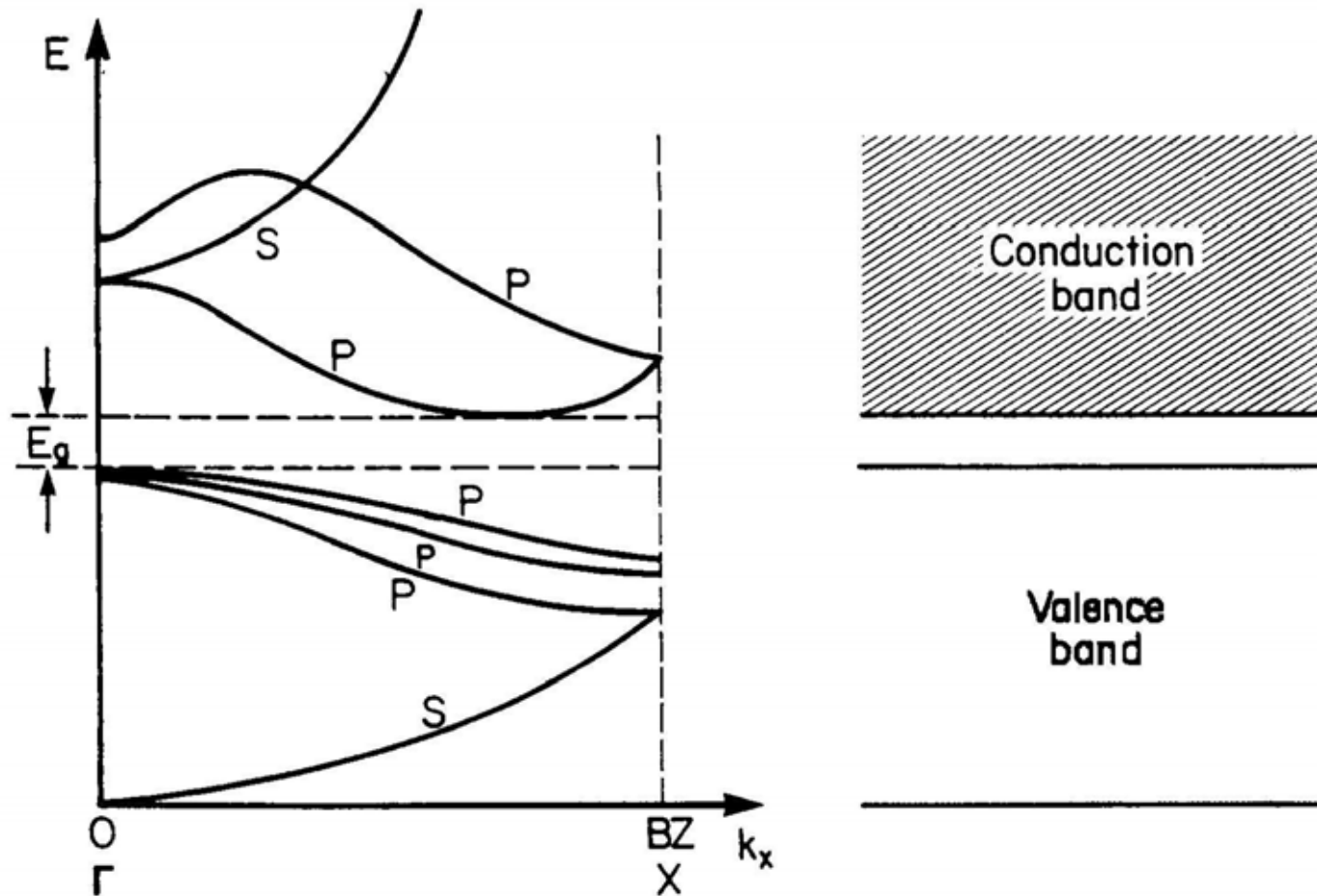
Legierung	Zusammensetzung Gew. %	$\rho/10^{-8} \Omega\text{m}$	$\alpha/10^{-5} \text{K}^{-1}$	$T/^\circ\text{C}$	$T_{\text{max}}/^\circ\text{C}$
Chromnickel	20 Cr, 78–80 Ni 0–2 Mn	106	14	20	1150
Kanthal A 1	72 Fe, 20 Cr, 5 Al 3 Co	145	6	20	1300
Megapyr I	65 Fe, 30 Cr, 5 Al	140	2,5	20	1350

Widerstandswerkstoffe

Legierung	Zusammensetzung Gew. %	$\rho/10^{-8} \Omega\text{m}$	$\alpha/10^{-5} \text{K}^{-1}$	$T/^\circ\text{C}$	$T_{\text{max}}/^\circ\text{C}$
Nickelin	67 Cu, 2–3 Mn 30–31 Ni	40	11	20–100	300
Konstantan	54 Cu, 1 Mn, 45 Ni	50	–3	20–100	400
Manganin	86 Cu, 12 Mn, 2 Ni	43	2	20	300
Resistin	85 Cu, 15 Mn	51	0,8	20	
Neusilber	60 Cu, 17 Ni, 23 Zn	30	35	20–100	

2.3 Halbleiter

2.3.1 Bandstruktur, effektive Masse, Löcher

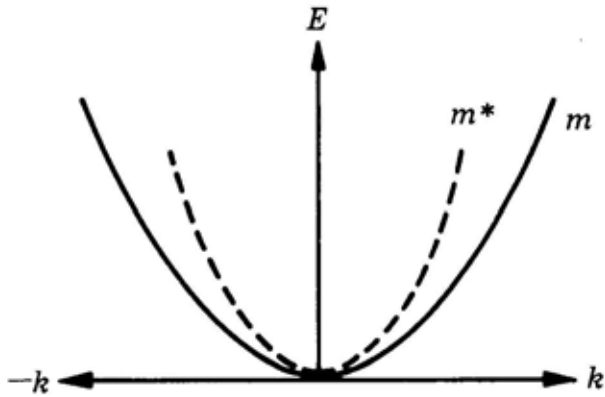


Bandstruktur-Parameter für Halbleiter

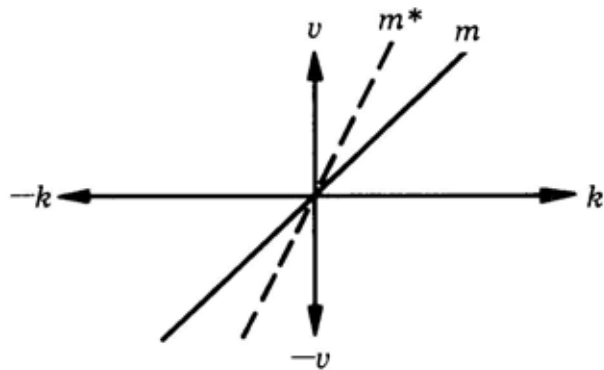
	Material	E_g , eV	m_e/m_0	m_h/m_0	Beweglichkeit, Elektronen	m^2/Vs Löcher
IV:	C	5.4 (i)	0.2	0.25	0.18	0.12
	Si	1.1 (i)	0.97(l), 0.19 (t)	0.5, 0.16	0.15	0.05
	Ge	0.7 (i)	1.6 (l), 0.08 (t)	0.3, 0.04	0.39	0.19
	α -Sn	0.08 (d)			0.14	0.12
	α -SiC (hex)	3.0	0.6	1.0	0.04	0.005
III-V:	GaP	2.3 (i)	0.12	0.50	0.01	0.007
	GaAs	1.4 (d)	0.07	0.7	0.85	0.04
	GaSb	0.7 (d)	0.20	0.39	0.40	0.14
	InAs	0.4 (d)	0.03	0.02	3.30	0.05
	InSb	0.2 (d)	0.01	0.18	8.00	0.13
II-VI:	CdS	2.6 (d)	0.21	0.80		
	CdSe	1.7 (d)	0.13	0.45	0.08	
	CdTe	1.5 (d)	0.14	0.37		

(bei Raumtemperatur)
i = indirekt, d = direkt

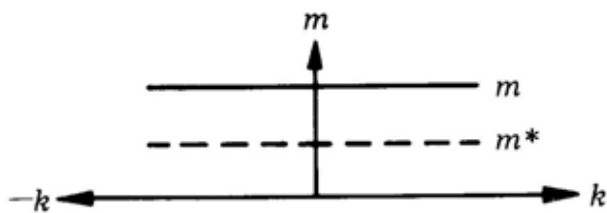
Konzept der „effektiven Masse“



$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)}$$



allgemein: Tensor zweiter Stufe

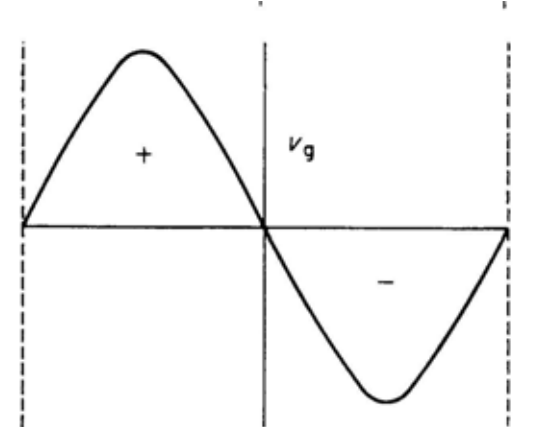
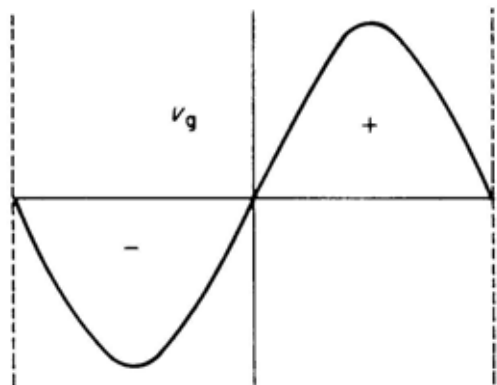
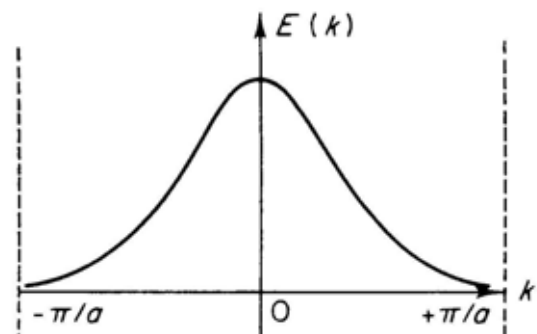
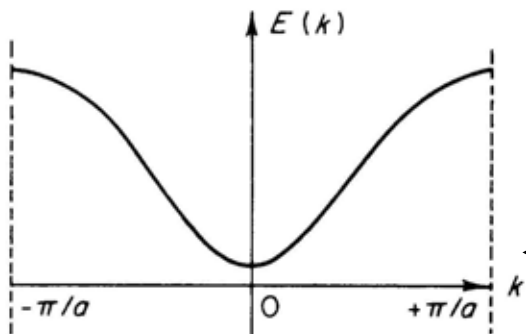


$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \quad (i, j = x, y, z)$$

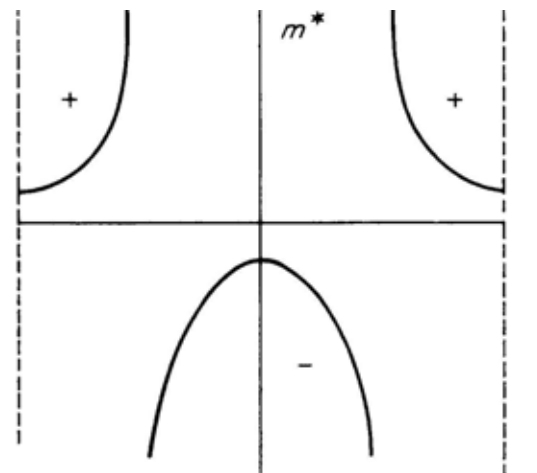
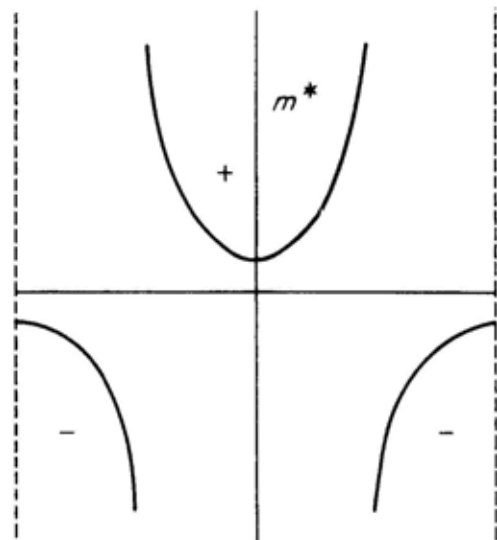
„Standard“-Bandstruktur

obere Bandkante VB

untere Bandkante LB



1. Ableitung



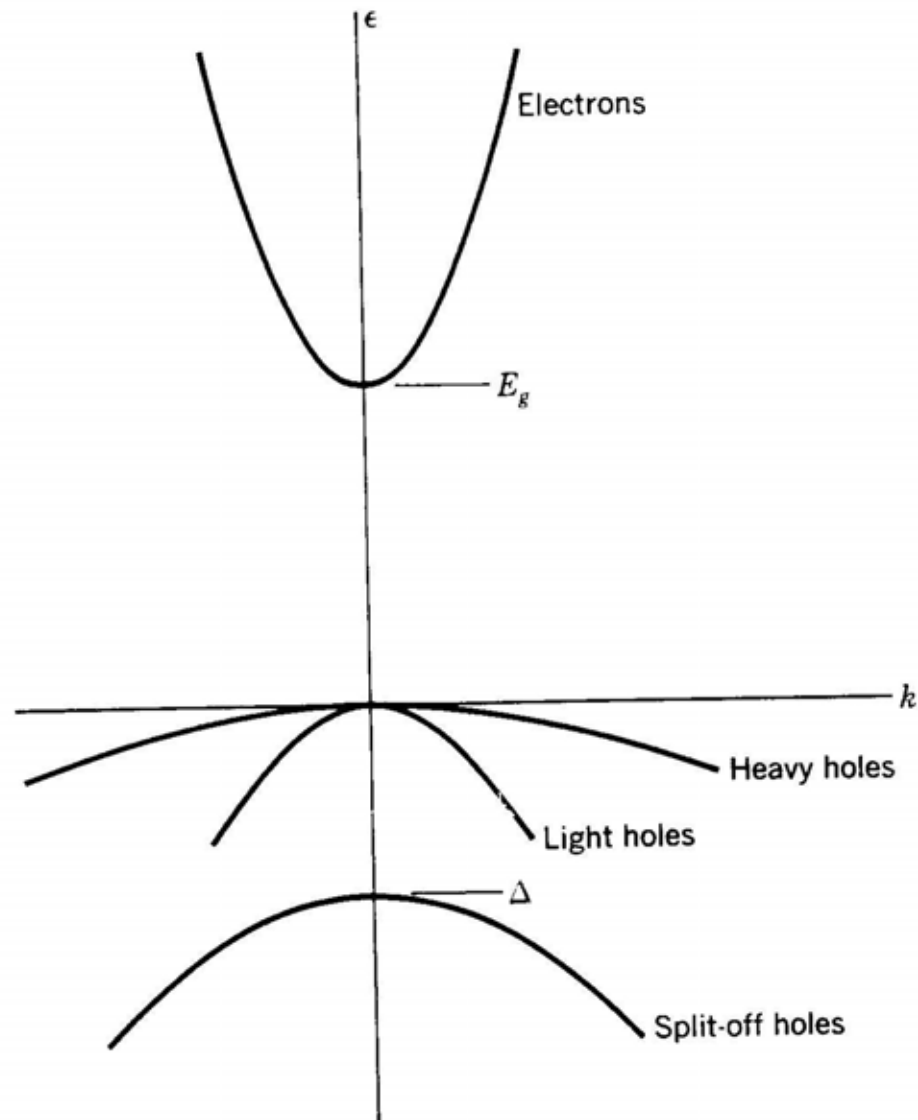
Elektron:

$$m_e = m^*, q = -e$$

„Loch“:

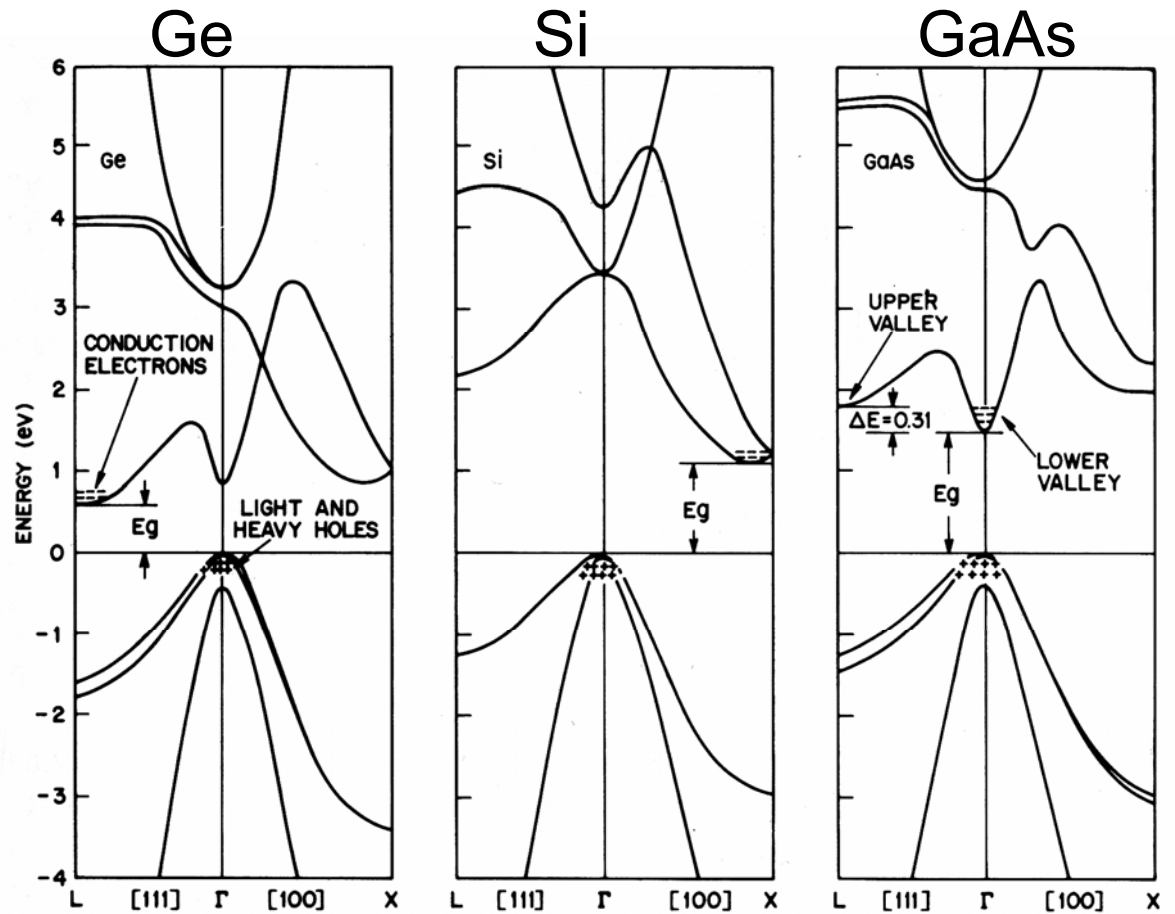
$$m_h = |m^*|, q = +e$$

„Löcher“ als Ladungsträger

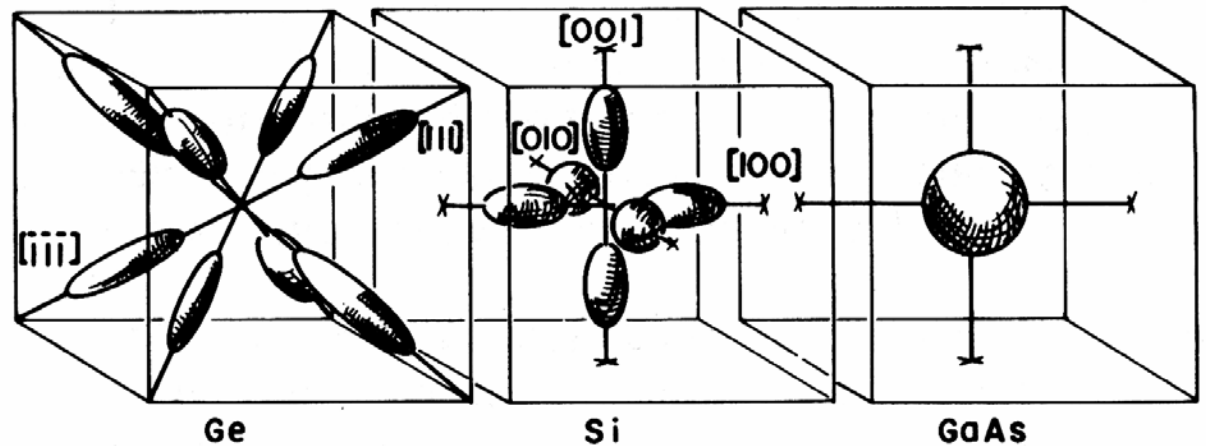


Bandstruktur

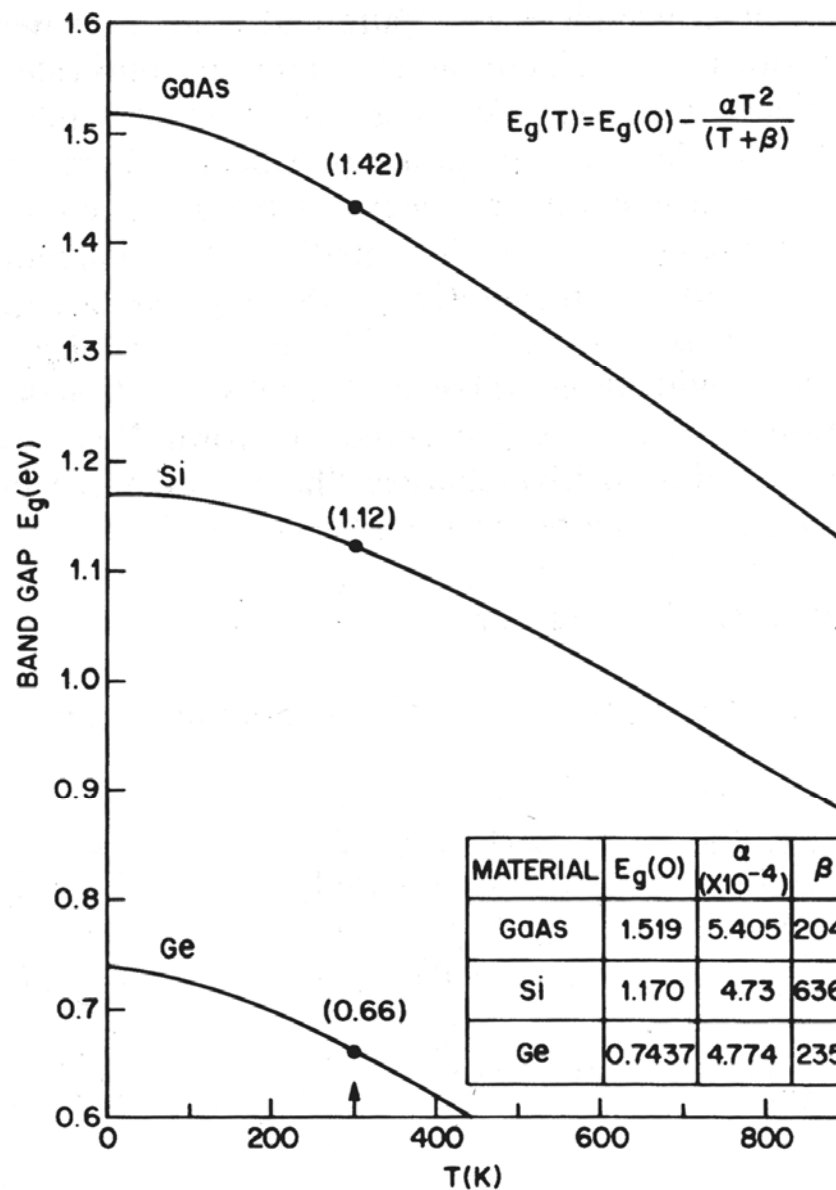
Effektive Masse beeinflusst
Beweglichkeit und somit
Leitfähigkeit



Flächen
konstanter
Energie der
Energiminima
des LB

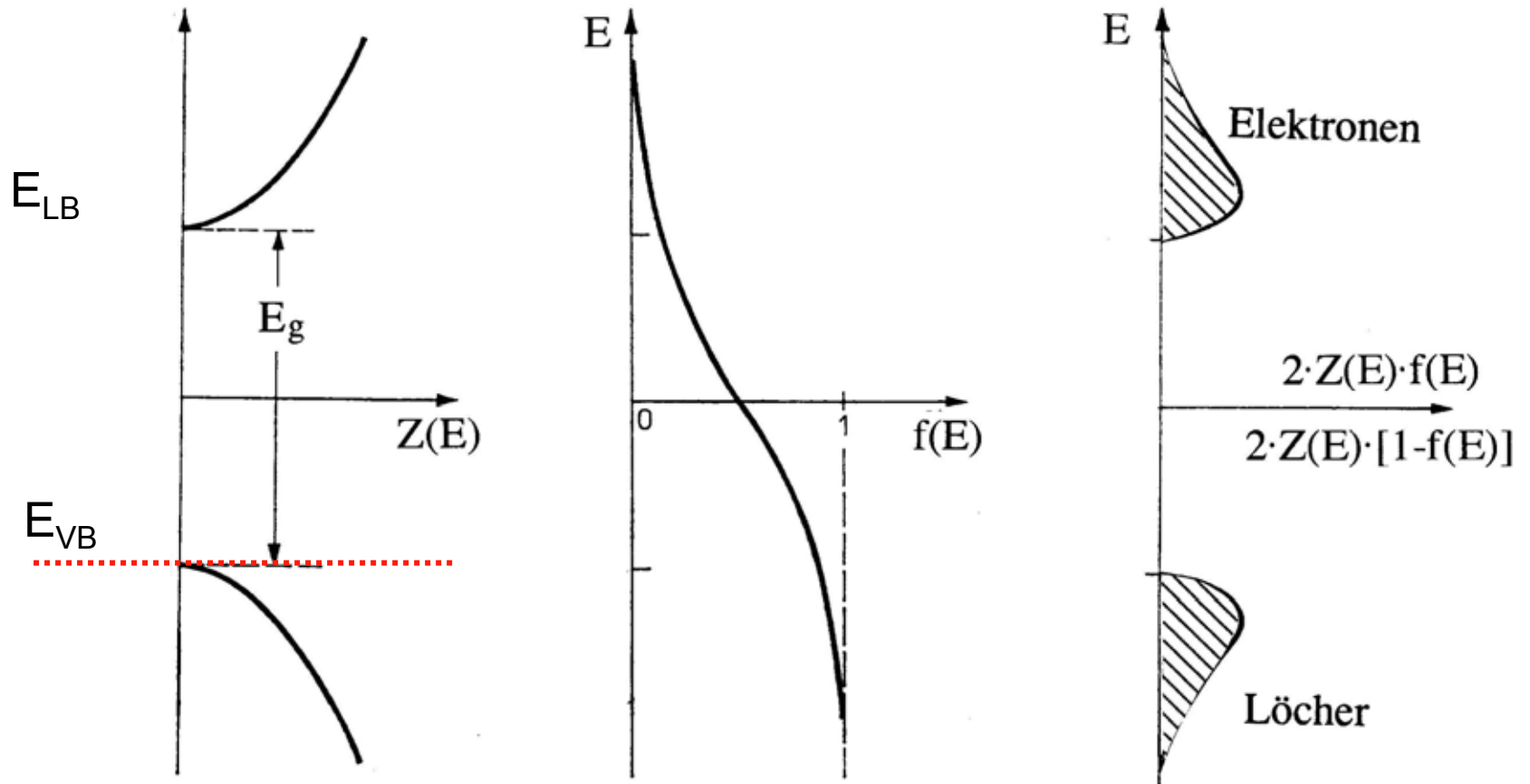


Temperaturabhängigkeit der Bandlücke für Si, Ge und GaAs



2.3.2 Eigenhalbleiter („intrinsisch“)

2.3.2.1 Berechnung der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration



Elektronenkonzentration im Leitungsband:

$$n = \int_{E_{LB}}^{\infty} 2Z(E) \cdot f(E) dE \quad \text{mit} \quad Z(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E)^{1/2}$$

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right) + 1} \approx \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_B T}\right)$$

$$n = \underbrace{\frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2}}_C \int_{E_g}^{\infty} (E)^{1/2} \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_B T}\right) dE$$

mit $\int_0^{\infty} x^{0,5} e^{-nx} dx = \frac{1}{2n} \sqrt{\frac{\pi}{n}}$

$$n \propto (k_B T)^{3/2} \exp\left(\frac{E_F}{k_B T}\right) = (k_B T)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

Ergebnis:

Elektronenkonzentration:

$$n = \underbrace{\frac{1}{4} \left(\frac{2m_0 k_B}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \left(\frac{m_e}{m_0} \right)^{3/2}}_{N_L} T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

Löcherkonzentration:

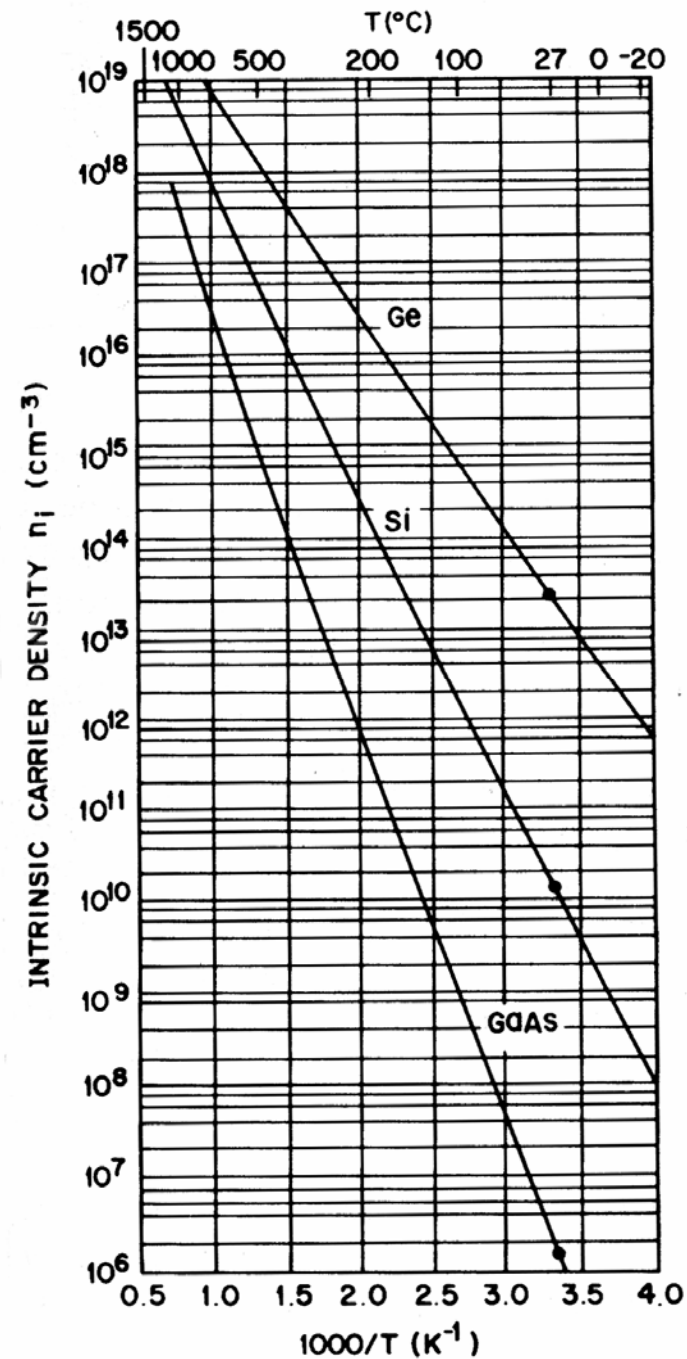
$$p = \underbrace{\frac{1}{4} \left(\frac{2m_0 k_B}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \left(\frac{m_h}{m_0} \right)^{3/2}}_{N_V \approx N_L} T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

intrinsisch:

$$\text{für } m_e = m_h : \\ n = p = N_L \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

$$E_F = -E_g / 2$$

Die Konzentration der Ladungsträger hängt exponentiell von der Bandlücke und der Temperatur ab. Es werden gleich viele Elektronen und Löcher erzeugt (Ladungsneutralität).



Daten bei 300 K	Ge	Si	GaAs
E_g [eV]	0.66	1.12	1.42
n_i [cm^{-3}]	$2 \cdot 10^{13}$	$1 \cdot 10^{10}$	$2 \cdot 10^6$
Dichte [g/cm^{-3}]	5.3	2.3	5.3
Atome [cm^{-3}]	$4 \cdot 10^{22}$	$5 \cdot 10^{22}$	$4 \cdot 10^{22}$

sehr geringe Anzahl an Ladungsträgern!

Si: bei RT liefert nur jedes 10^{12} Atom ein Elektron
 \Rightarrow Leitfähigkeit ca. 10^{11} mal schlechter als bei Cu

2.3.2.2 Leitfähigkeit bei Eigenleitung

$$\sigma = n \cdot e \cdot \mu_e + p \cdot e \cdot \mu_h = n \cdot e \cdot (\mu_e + \mu_h)$$

mit $\mu_e = \frac{v_e}{E}$... Elektronenbeweglichkeit

$\mu_h = \frac{v_h}{E}$... Löcherbeweglichkeit

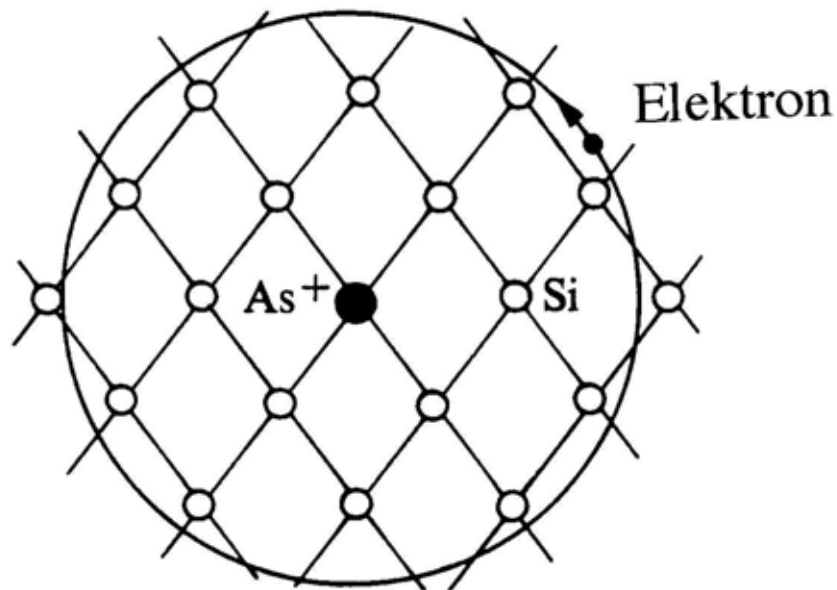
$$\sigma = 4.8 \cdot 10^{15} T^{3/2} \cdot e (\mu_e + \mu_h) \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

Die Leitfähigkeit intrinsischer HL wird vorwiegend durch die Anzahl der Ladungsträger bestimmt. Die Beweglichkeit sinkt zwar mit steigender Temperatur (Phononenstreuung!), aber die exponentielle Zunahme an Ladungsträgern dominiert

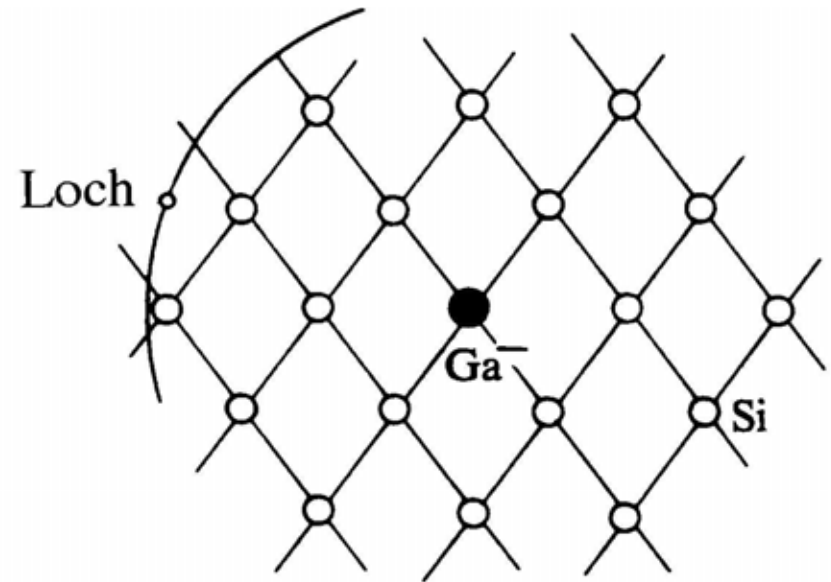
2.3.3 Störstellenhalbleiter („extrinsisch“)

2.3.3.1 Prinzip des Dotierens

n-Typ: Donator (P, As, Sb)



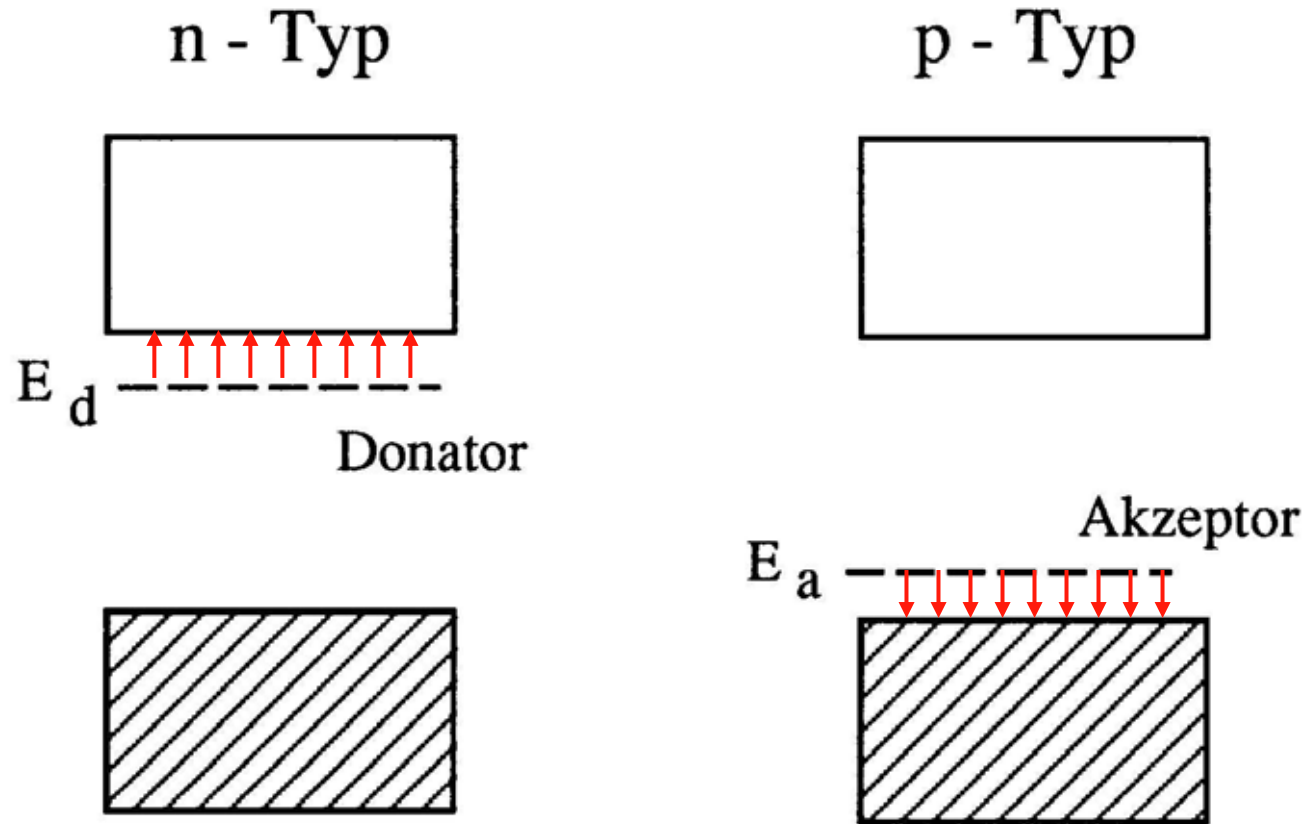
p-Typ: Akzeptor (B, Al, Ga, In)



Einbau eines 5-wertigen Elements auf Si Platz führt zu einem schwach gebundenen zusätzlichen Elektron, das thermisch ins LB angehoben werden kann und dann „frei“ ist (Elektronenleitung).

Analog wird bei einem 3-wertigen Element ein Defektelektron erzeugt, das durch thermische Anregung „frei“ beweglich wird (Löcherleitung).

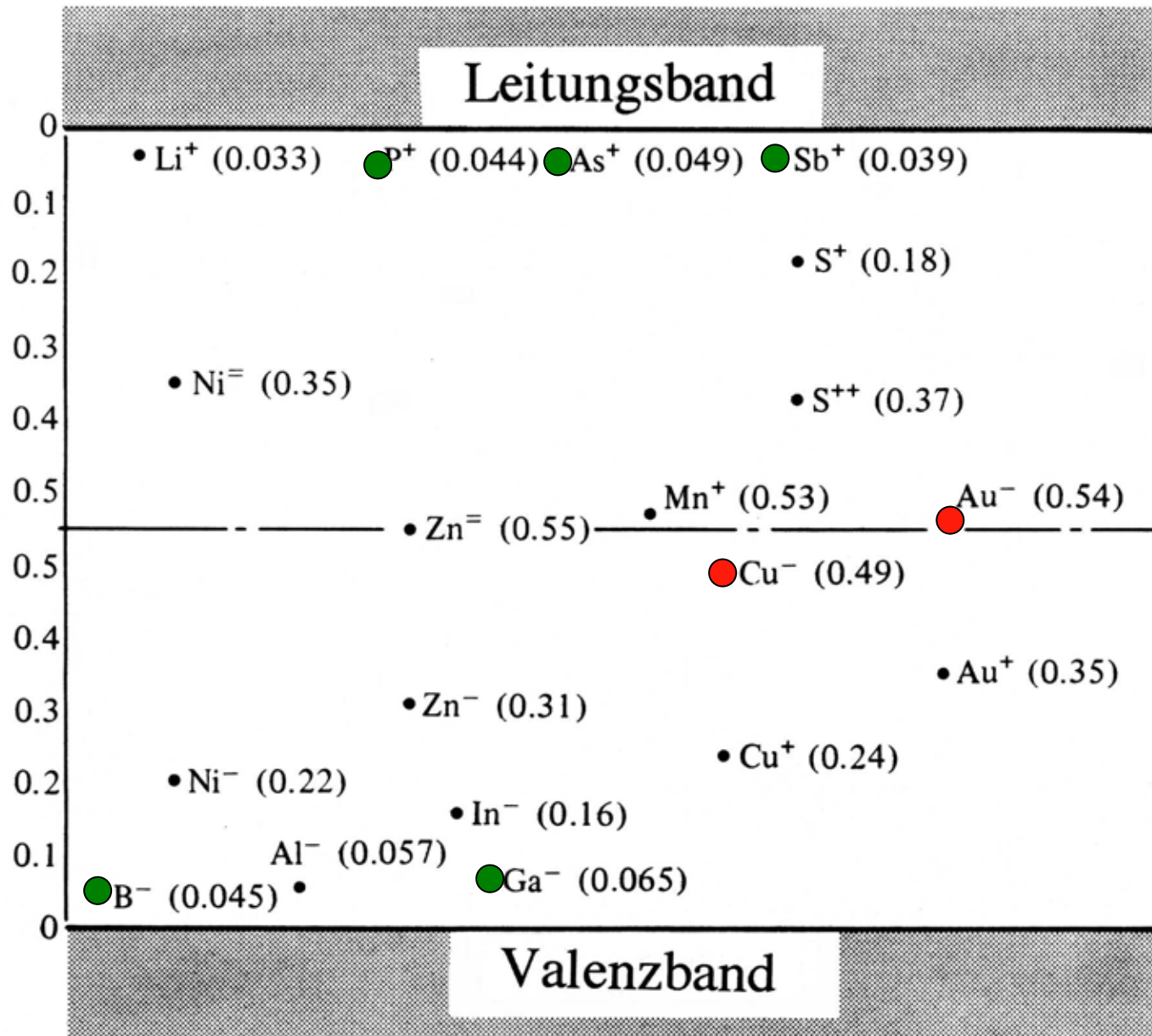
2.3.3.2 Bandstruktur eines Störstellenhalbleiters



Beachte:

- Ladungsneutralität
- Dotieratome liefern die Majoritätsladungsträger, daneben gibt es noch
- Minoritätsladungsträger

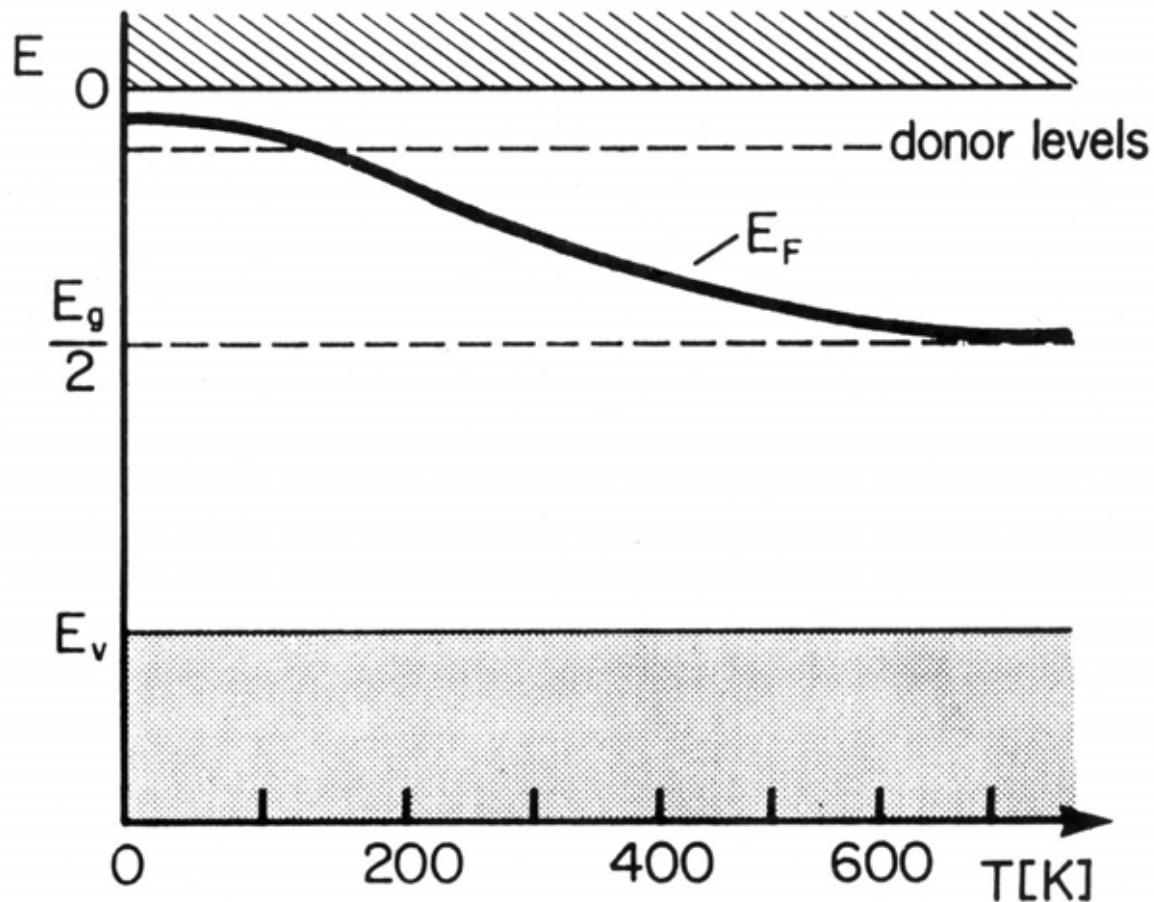
Dotierniveaus in Si:



Anmerkung: Die Donator- und Akzeptorniveaus werden durch Einzeichnen in das Bandschema veranschaulicht; die Bandstruktur des HL bleibt gleich.

2.3.3.3 Verschiebung des Fermi-Niveaus mit der Temperatur

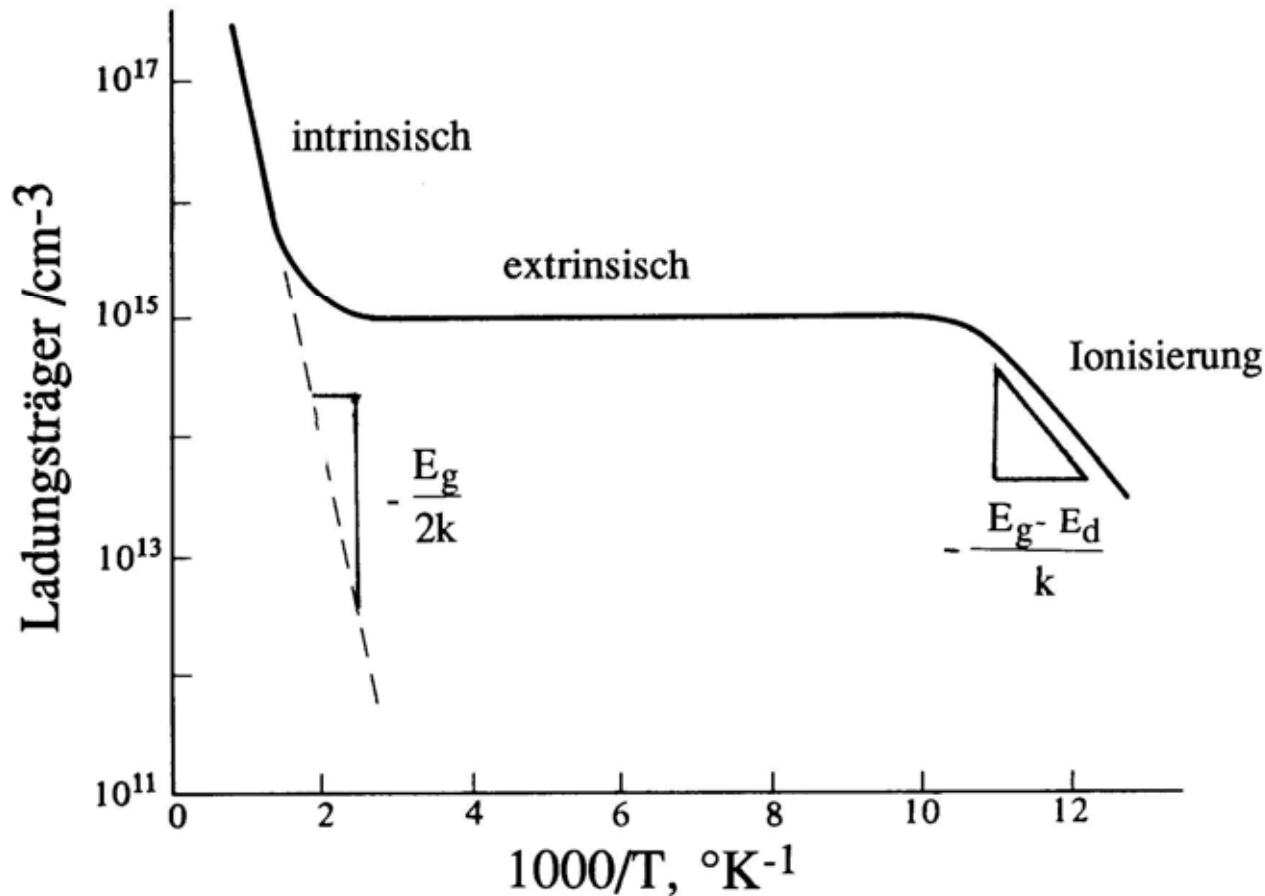
für: n-Typ, $N_d \approx 10^{16}/\text{cm}^3$



mit zunehmender Temperatur wandert E_F zur Mitte der Bandlücke (der HL wird intrinsisch)

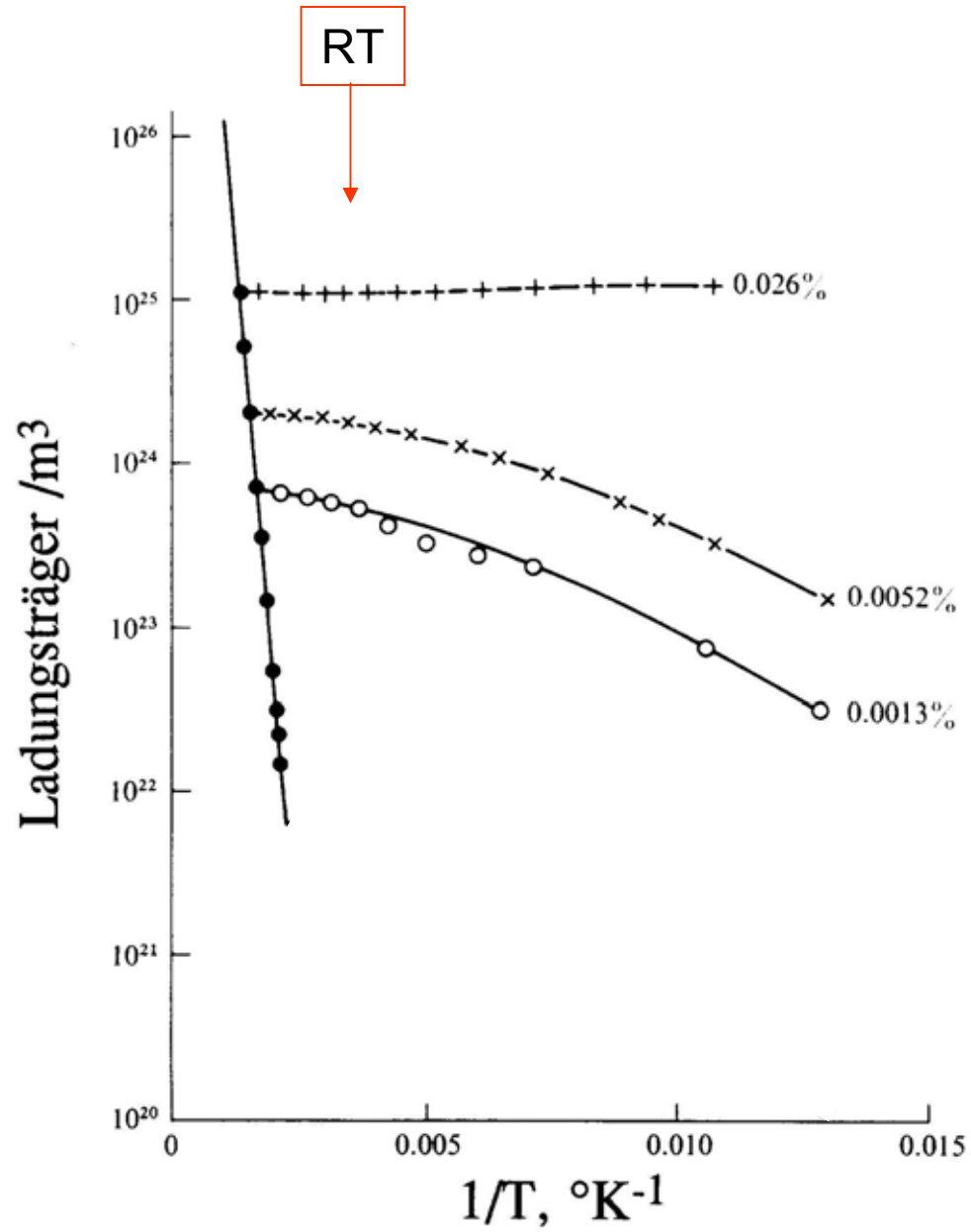
Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerkonzentration

n-Si, $N_d = 10^{15}/\text{cm}^3$



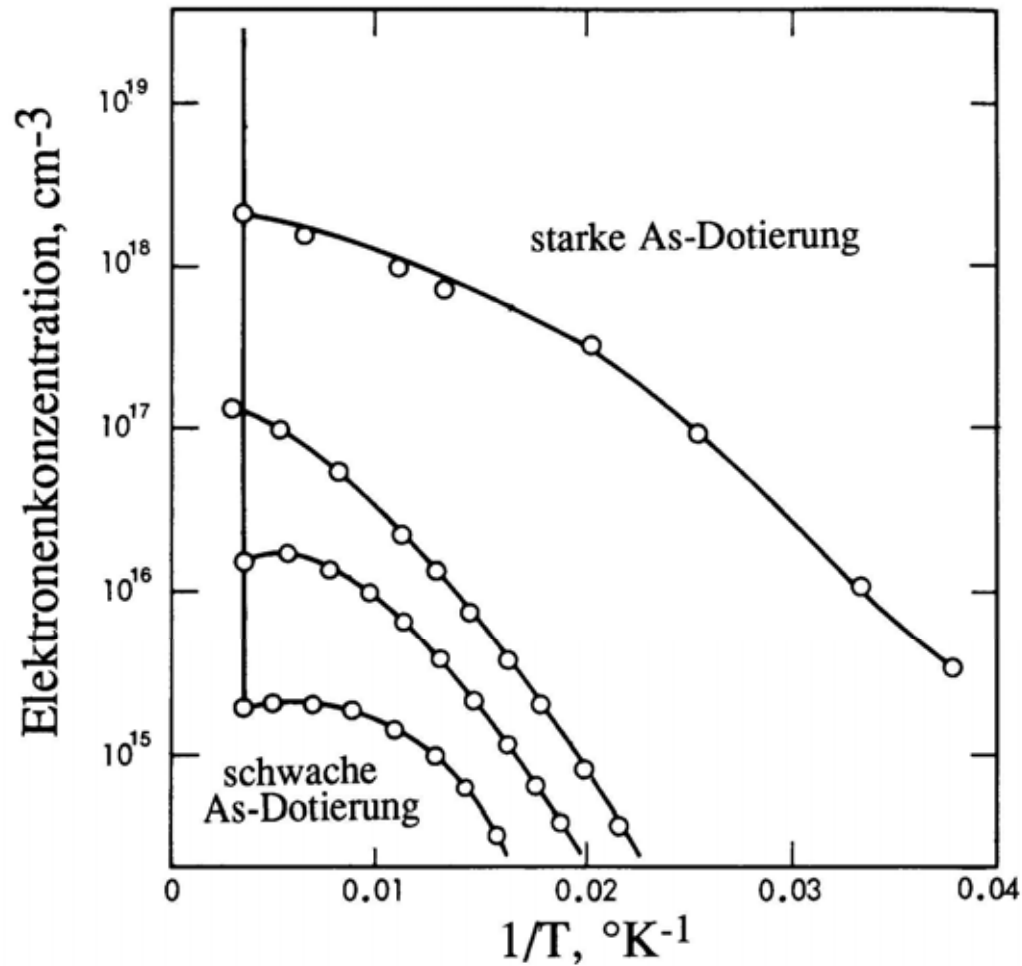
Bei hohen Temperaturen ist der HL intrinsisch. Der Bereich fast konstanter Zahl an Ladungsträger (durch die ionisierten Dotieratome) wird „Erschöpfung“ bzw. „Saturation Range“ genannt. Bei tiefen Temperaturen reicht die thermische Energie nicht aus, um alle Dotieratome zu Ionisieren („Freeze-Out Range“, Reserve).

Si, B-dotiert

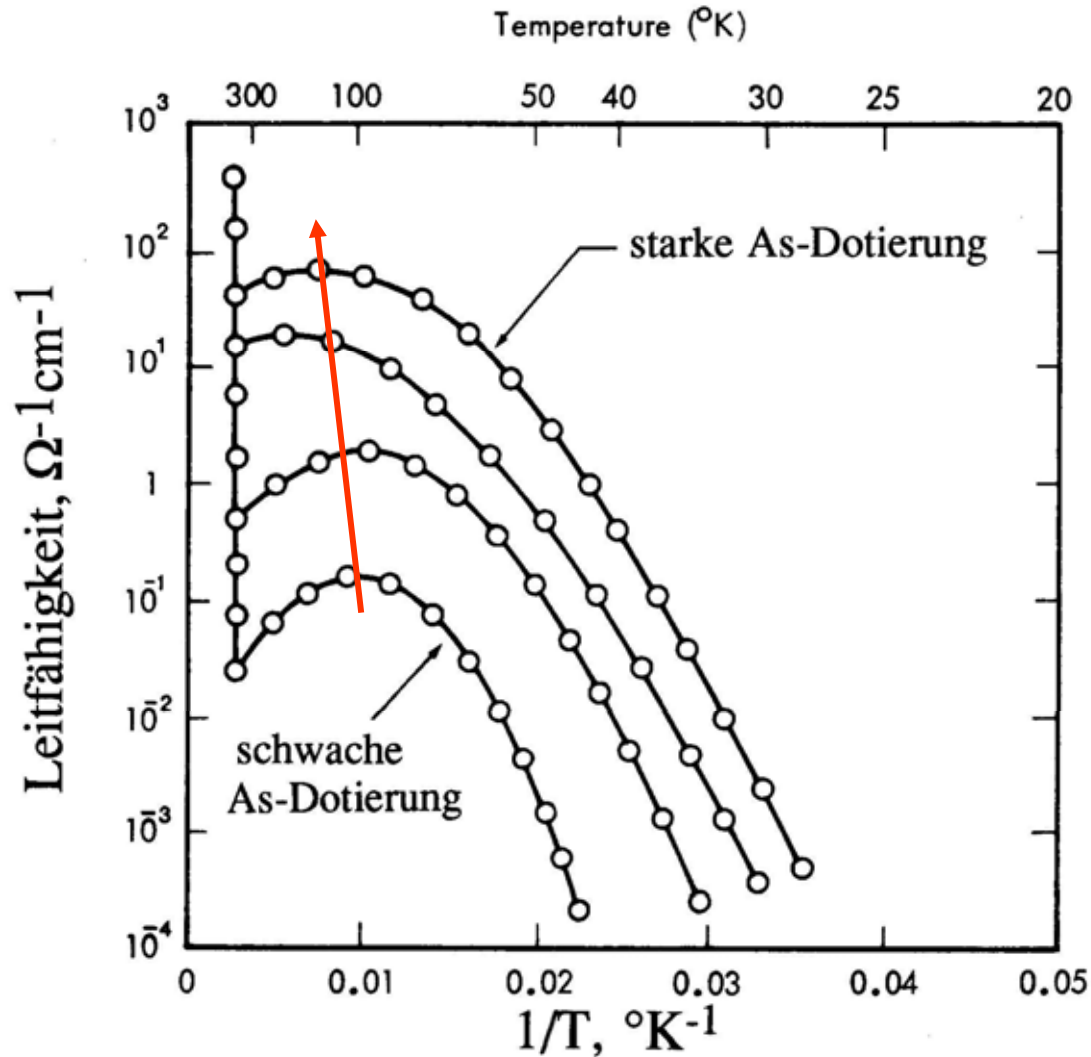


2.3.3.4 Leitfähigkeit als Funktion der Temperatur

Si, As-dotiert

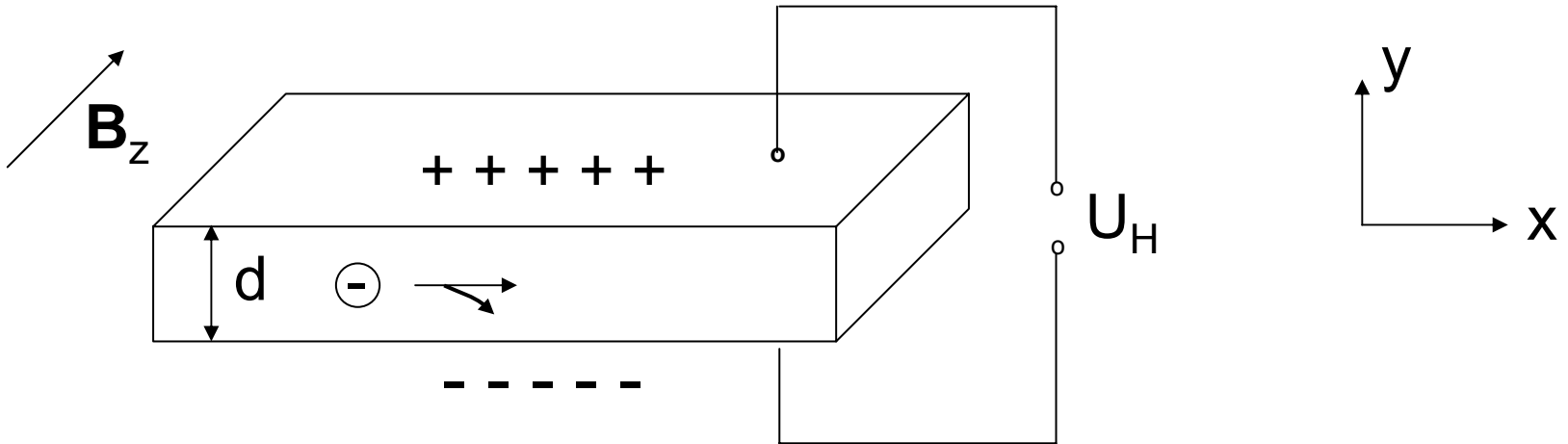


n-Si, As-dotiert



Die Abnahme der Leitfähigkeit bei hohen Temperaturen (aber noch unterhalb der Eigenleitung) wird durch Phononenstreuung verursacht.

2.3.4 Hall-Effekt



Hall-Koeffizient:

$$R_H = \frac{1}{n \cdot q} = \frac{E_y}{j_x \cdot B_z} = \frac{U_H}{d \cdot j_x \cdot B_z}$$

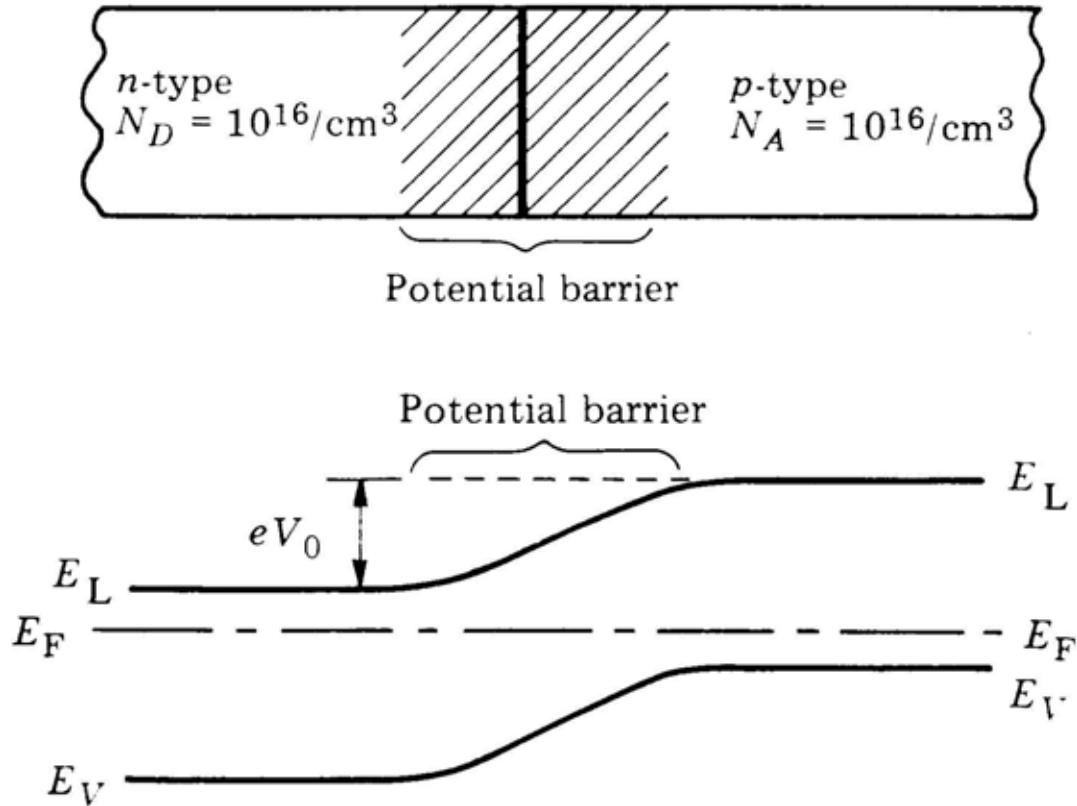
Hall-Beweglichkeit:

$$\mu_H = \sigma \cdot R_H$$

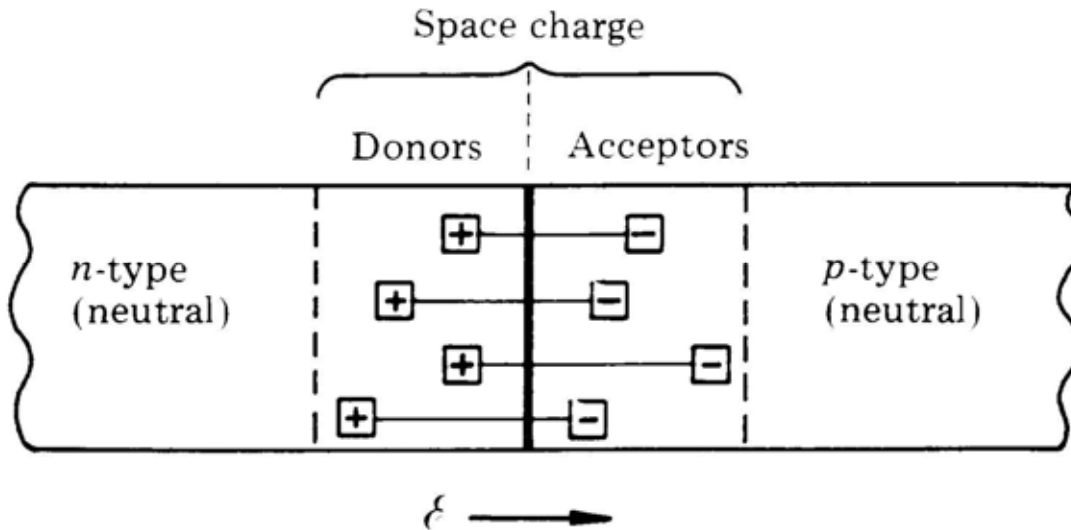
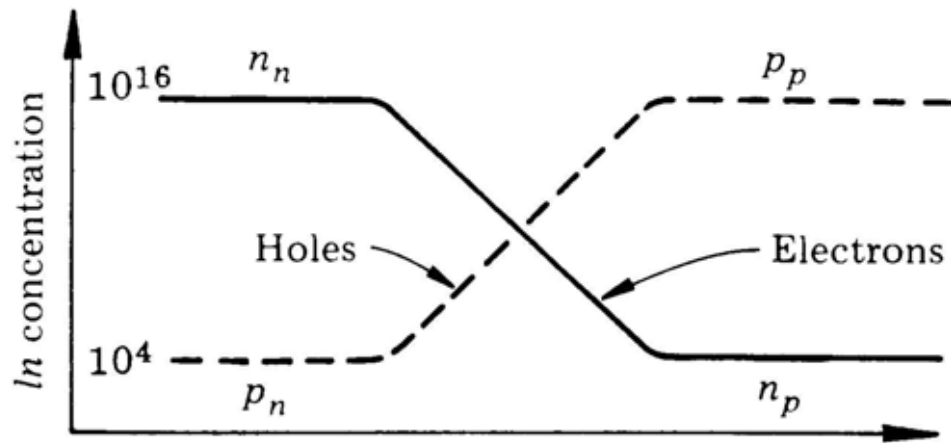
Durch ein senkrecht zum Strompfad (x-Richtung) angelegtes Magnetfeld (z-Richtung) werden die Elektronen in y-Richtung abgelenkt. Die Lorentzkraft wird durch eine elektrische Feldkraft kompensiert. Im Gleichgewicht tritt an der Oberfläche eine (Hall-) Spannung auf. Aus dem Vorzeichen und der Größe des Hall-Koeffizienten kann auf die Ladungsträgerart und -konzentration geschlossen werden.

2.3.5 Halbleiterübergänge und Bauelemente

p-n-Übergang



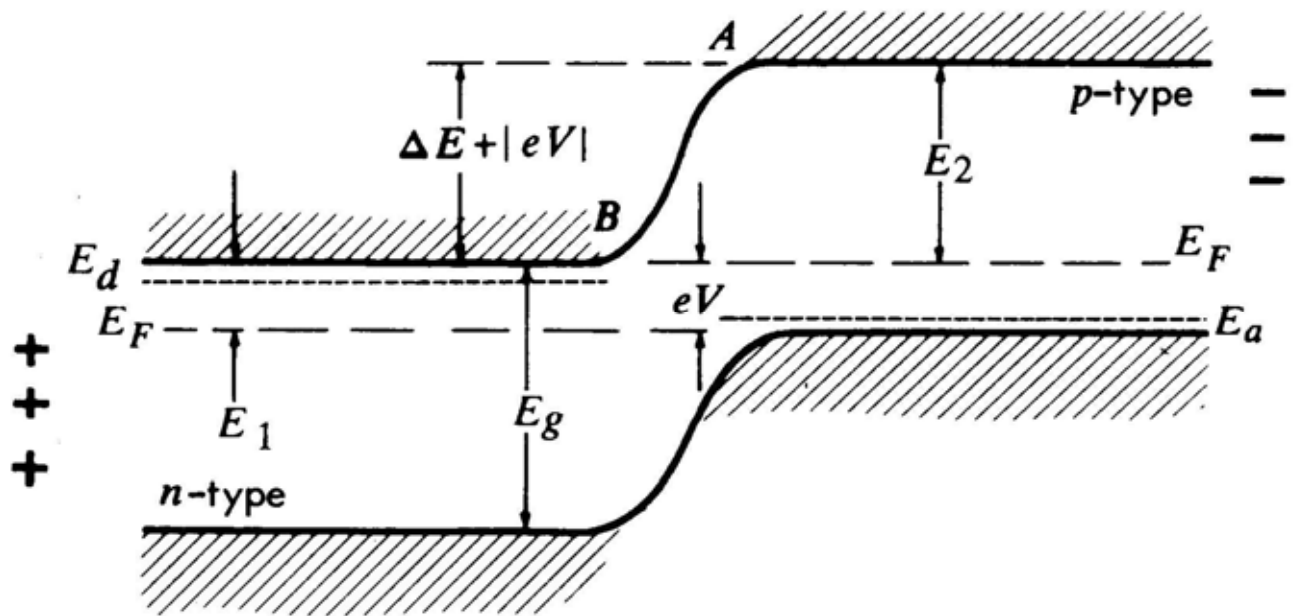
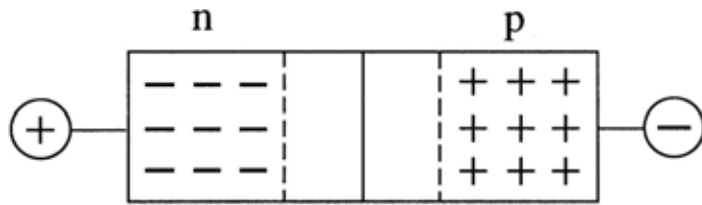
- im thermodynamischen Gleichgewicht ist E_F für n- und p-HL des pn-Übergangs gleich
- Ausbildung einer Potentialbarriere zwischen beiden



$$I = I_{\text{Diff}} - I_{\text{Feld}} = 0$$

- im n-HL höhere Konz. an Elektronen als im p-HL
- analog mehr Löcher im p-HL als im n-HL
- Konzentrationsgefälle verursacht Diffusion (damit Diffusionsstrom)
- in p-HL eindiffundierende Elektronen rekombinieren mit Löchern, und eindiff. Löcher im n-HL mit e⁻
- dadurch verarmt Umgebung des pn-Übergangs an beweglichen Ladungsträgern
- Überschuß an neg. Akzeptoren am Rand des p-HL und pos. Donatoren am Rand des n-HL
- Ausbildung einer Feldes (Feldstrom)
- **ohne äußere Spannung: Feldstrom und Diffusionsstrom heben sich auf**

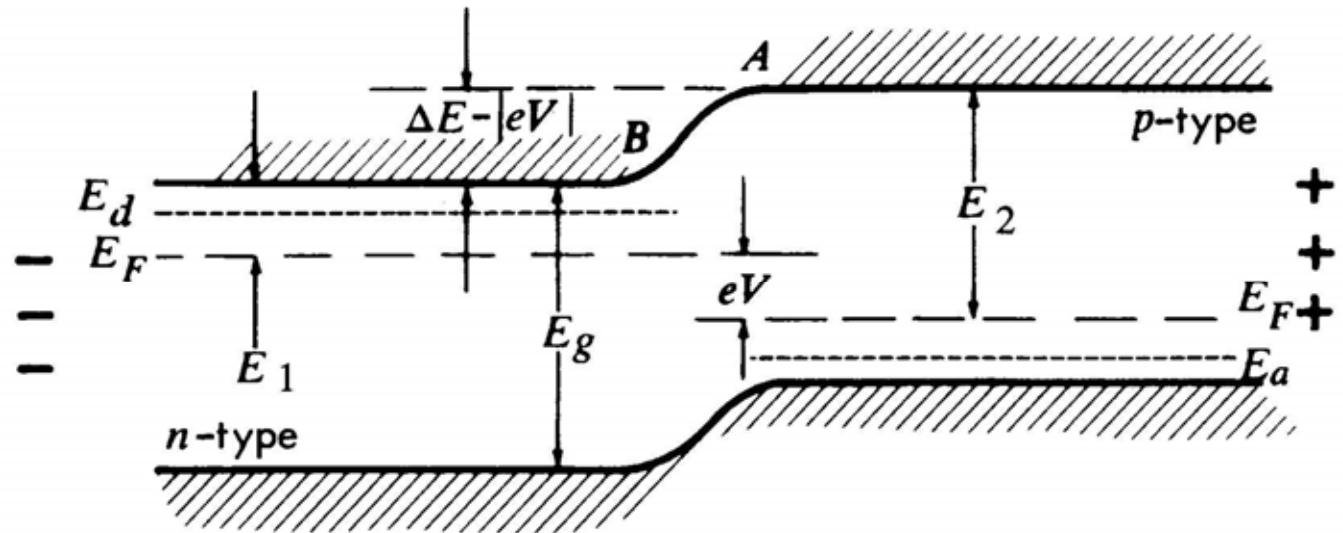
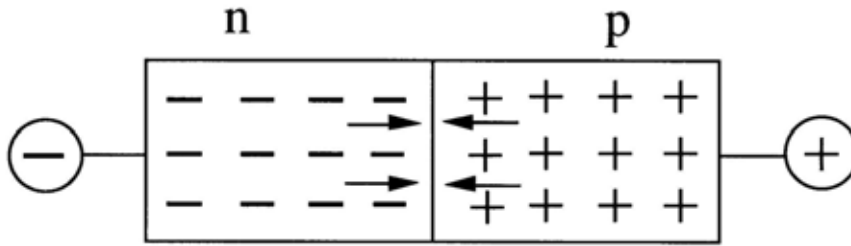
p-n-Übergang unter Spannung: Sperrrichtung



Anlegen der Spannung U in Sperrrichtung bewirkt:

- eine Erhöhung der Potentialbarriere um eU
- Vergrößerung der Raumladungszone, da Elektronen \rightarrow Pluspol und Löcher \rightarrow Minuspol

p-n-Übergang unter Spannung: Durchlassrichtung



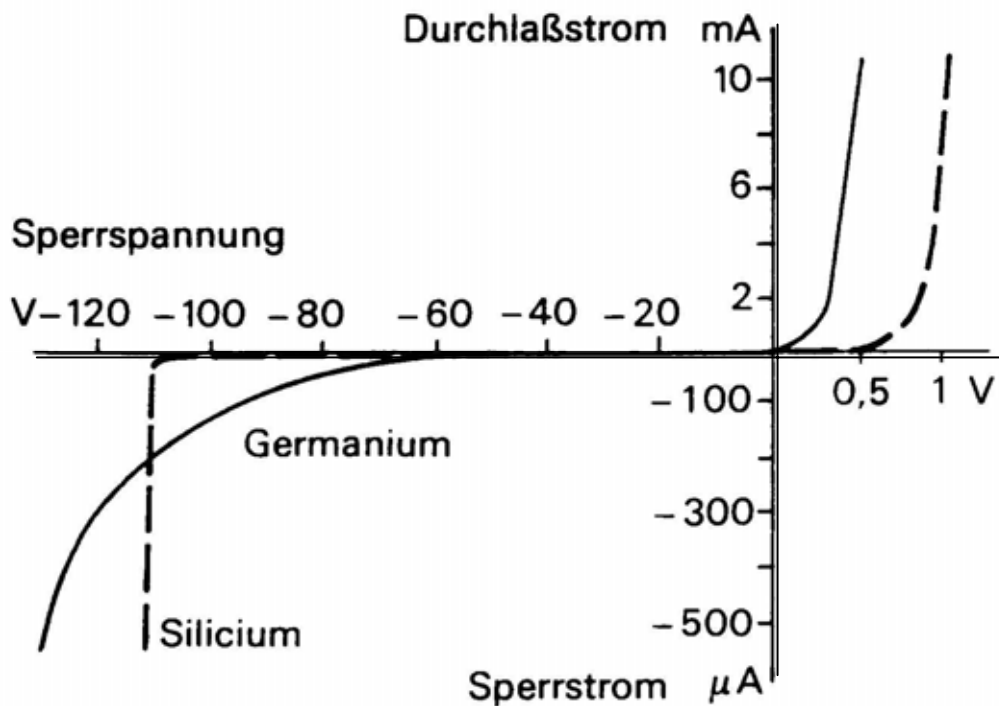
$$I \propto \left(\exp \frac{eU}{kT} - 1 \right)$$

Anlegen der Spannung U in Durchlassrichtung bewirkt Reduzierung der Raumladungszone

Diodengleichung:

$$I = I_0 \left(\exp \frac{eU}{kT} - 1 \right)$$

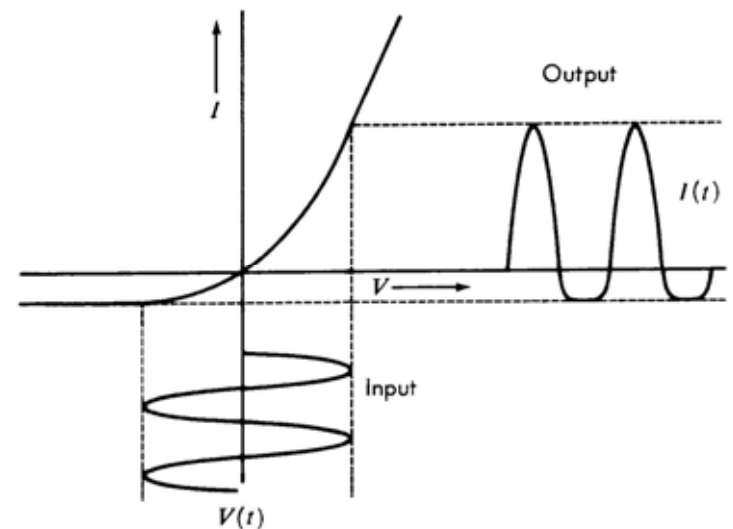
mit I_0 Sperrstrom



„Breakdown“ durch Tunneleffekt bei Ge durch Wärmedurchbruch

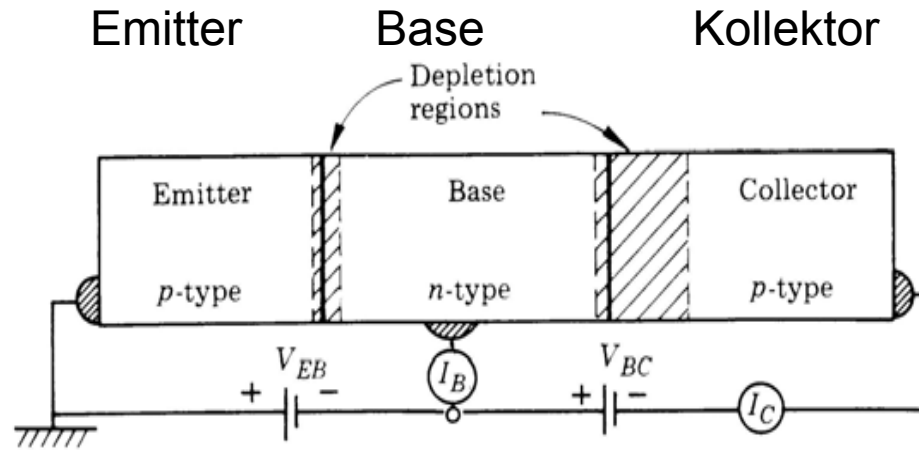
Anwendung:

Gleichrichtung



bei Wechselspannung ist Diode bei einer Halbwelle in Durchlassrichtung, während der anderen in Sperrrichtung gepolt

Flächentransistor (Bipolartransistor)

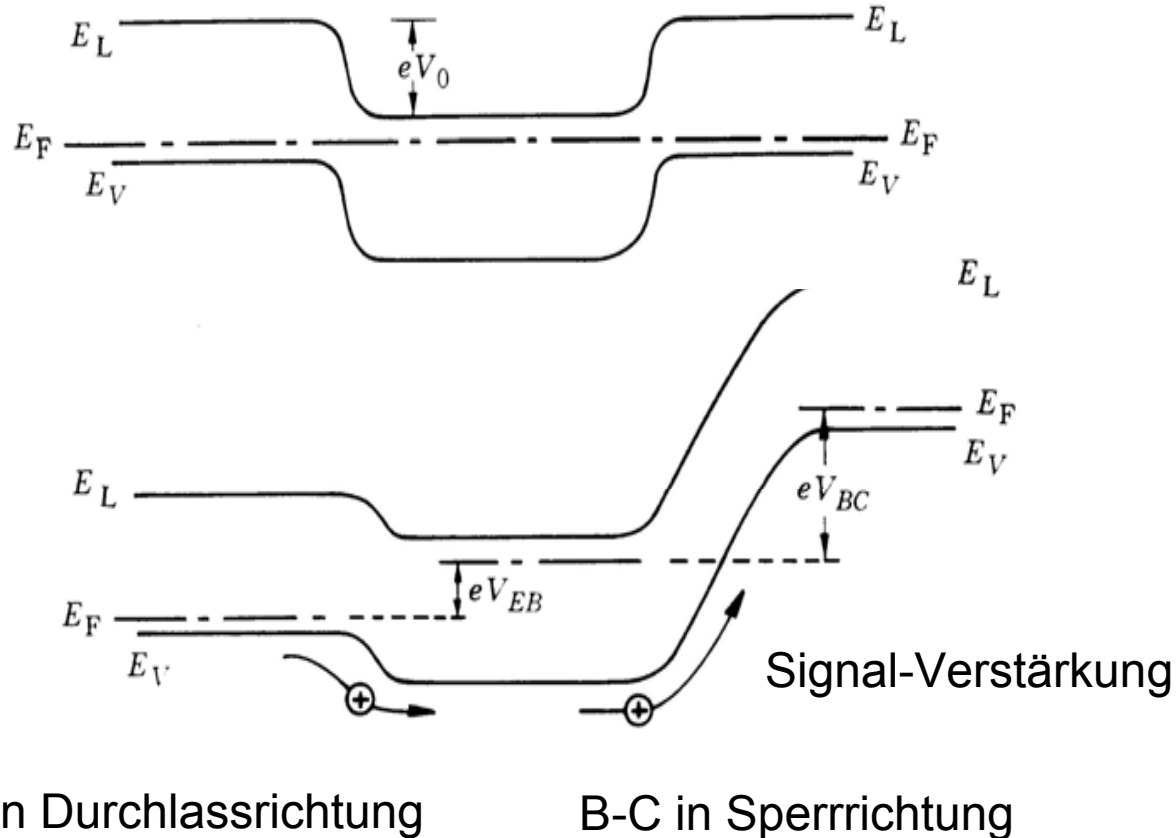


Transistor besteht aus 2
nacheinander folgenden pn
Übergängen:

p-n-p oder n-p-n

Anwendung:

- Signalverstärkung (z.B. Musik)
- elektronischer Schalter (z.B. Logik / Computer)



E-B in Durchlassrichtung

B-C in Sperrrichtung

Flächentransistor (Bipolartransistor)

Funktionsprinzip

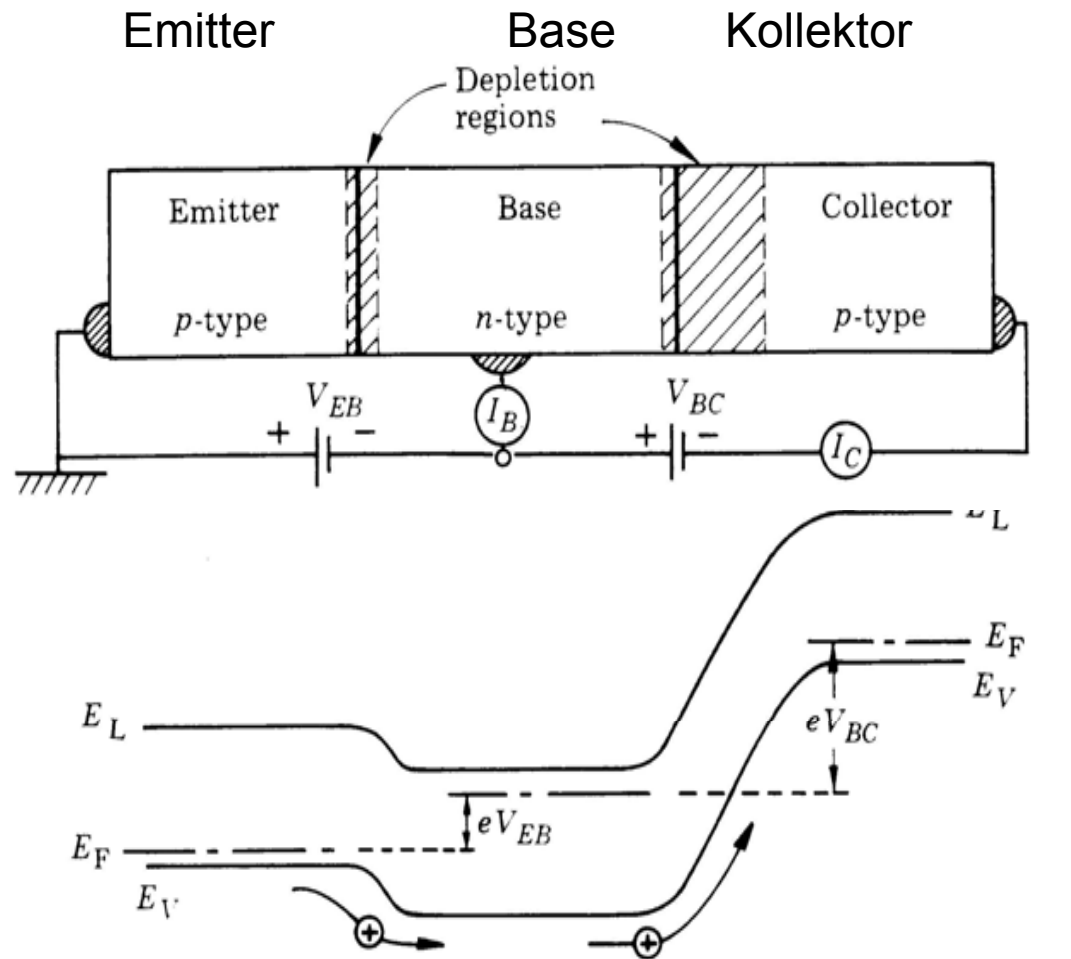
Signalverstärkung:

zur Signalverstärkung ist E-B in Durchlassrichtung und B-C in Sperrrichtung gepolt

- injizierte Löcher überwinden Potentialbarriere zwischen E und B
- Löcher werden von B in C durch Kollektorspannung beschleunigt
- Beschleunigung entspricht Signalverstärkung

Funktionsprinzip Schalter:

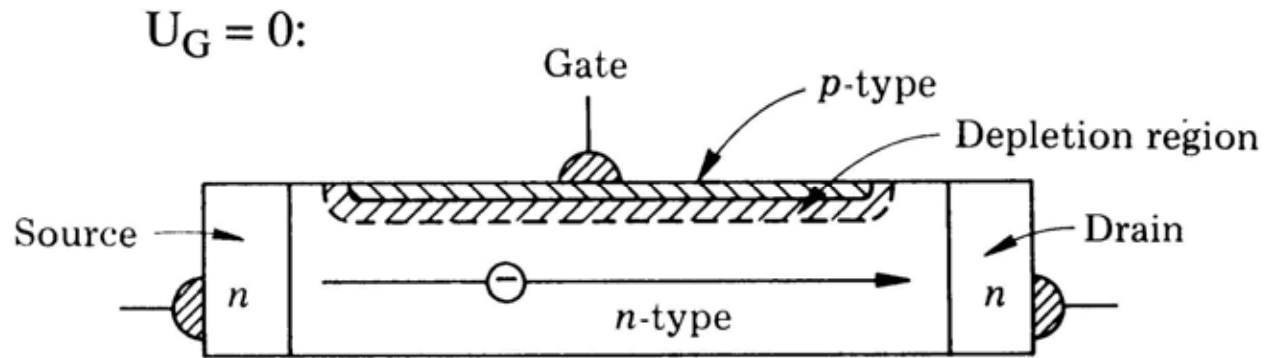
- durch Base-Spannung kann Fluß von E nach C geregelt werden (an – aus)



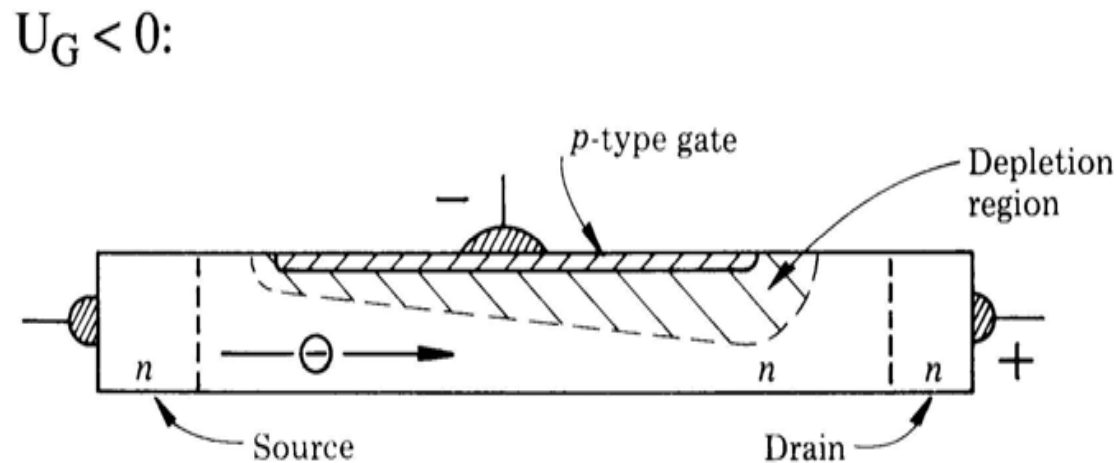
E-B in Durchlassrichtung

B-C in Sperrrichtung

Feldeffekt-Transistor (FET)

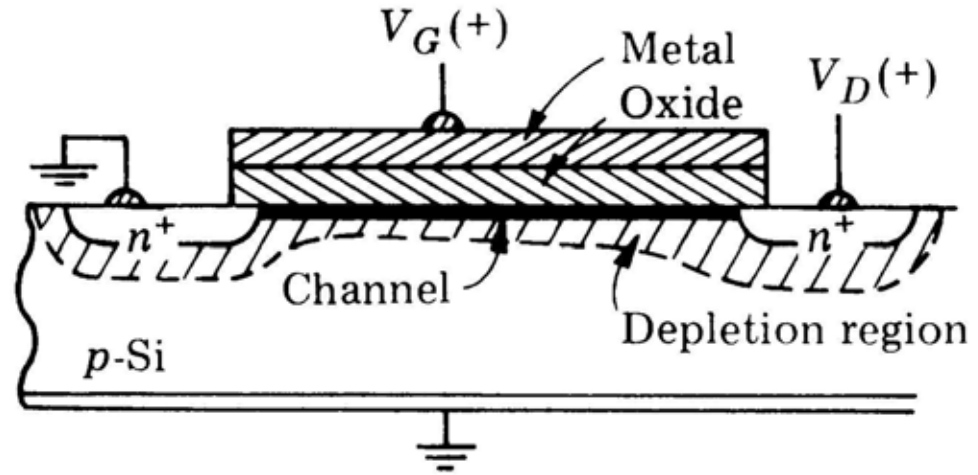


Source und Drain sind stärker n-dotiert als n-Bereich unter Gate

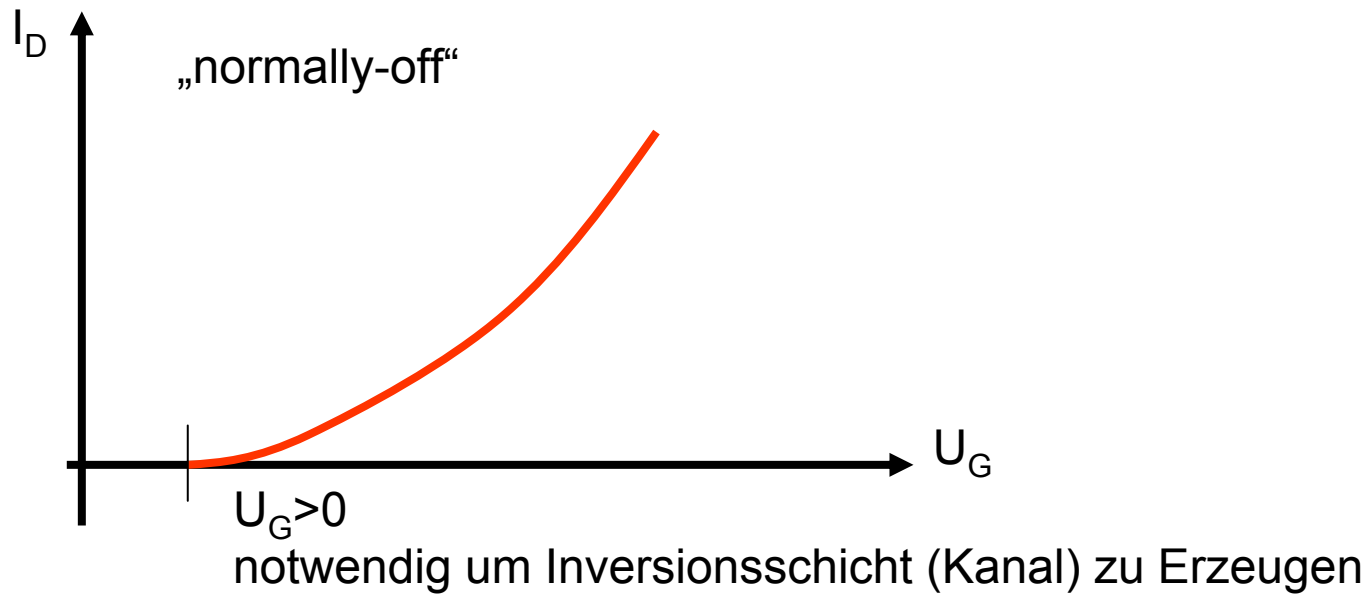


Anlegen einer negativen Gate-Spannung führt zu Verarmung an e^- unter Gate
Stromfluß zwischen Source und Drain sinkt, da Kanal unter Gate kleiner wird

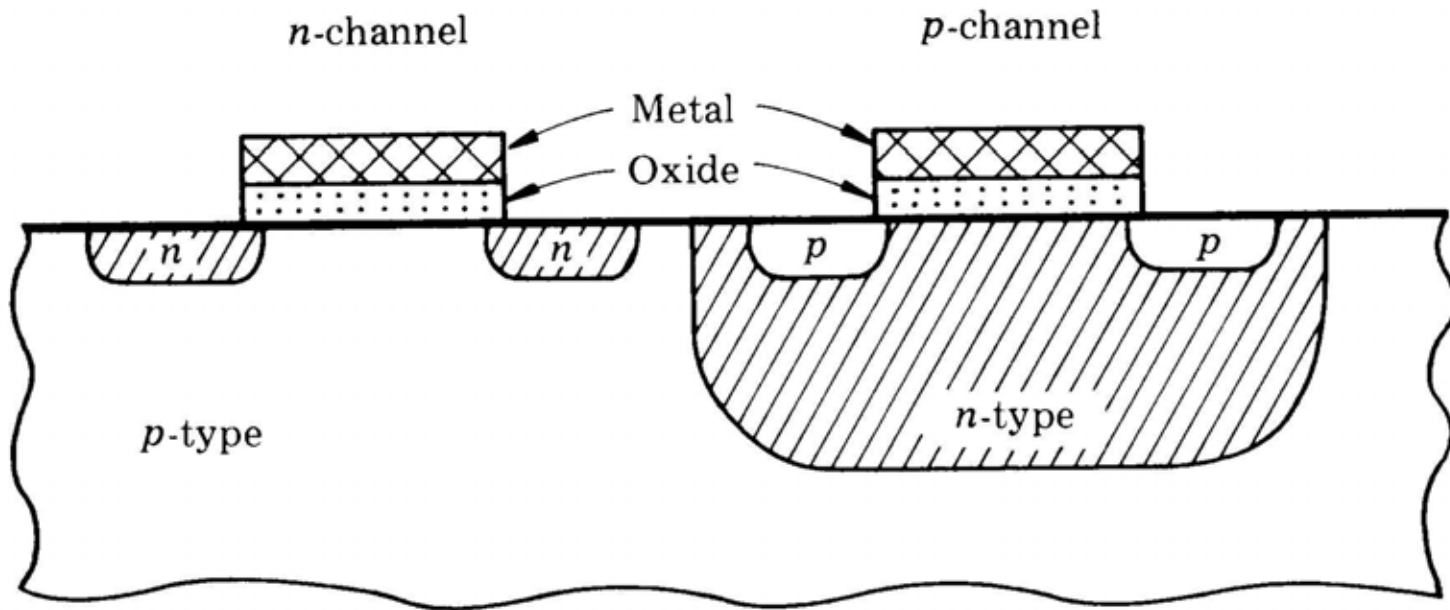
MOSFET = Metal-Oxide-Semiconductor-FET



Strom (Drain) – (Gate) Spannungscharakteristik:



CMOS = Complementary MOS



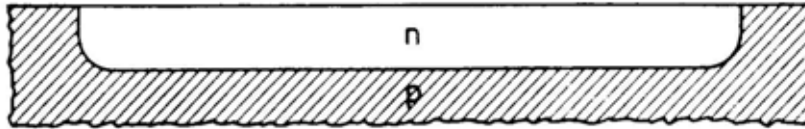
p- und n-Bauelemente werden in einem Chip integriert (CMOS)

- geringe Betriebsspannung (0,1V)
- geringer Leistungsverbrauch (Erwärmung!)
- kleine Kanalgröße – hohe Schaltgeschwindigkeiten (ns)

typische Dimensionen: Gateoxiddicke 50nm, Kanallänge 1 μ m, Bauelement wenige μ m

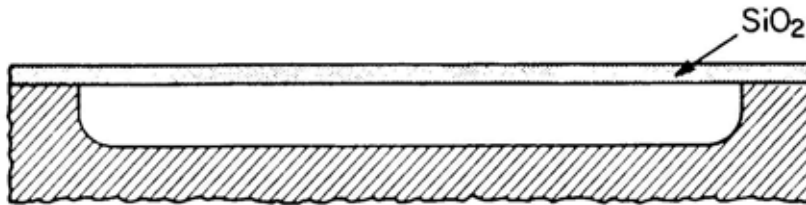
Mikroelektronik: Herstellungsschritte

1. Initial



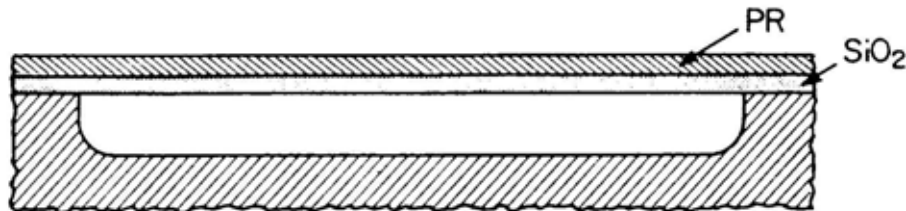
Diffusion oder Implantation

2. Oxidation



900-1200°C für thermische Oxidation
(meist feucht mit Wasserdampf)

3. Photoresist application



Spin-coating mit Photolack

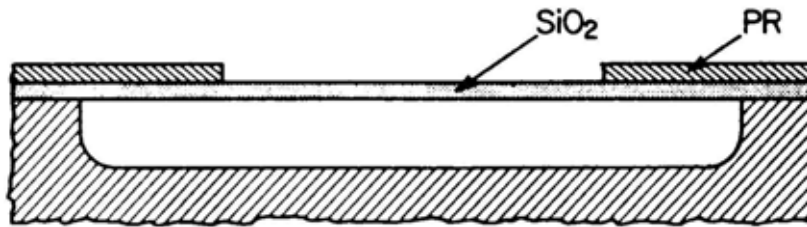
4. Mask alignment
PR exposure



Lokale Belichtung mit UV Licht
durch strukturierte Maske

Mikroelektronik: Herstellungsschritte

5. Photoresist develop



Belichteter Bereich wird gelöst

6. Oxide etch



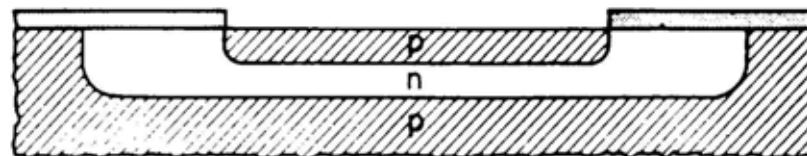
SiO₂ Oxid mit HF ätzen (naßchemisch) oder durch Ätzgase, Ionenätzen etc.

7. Photoresist strip



Entfernen des Photolacks

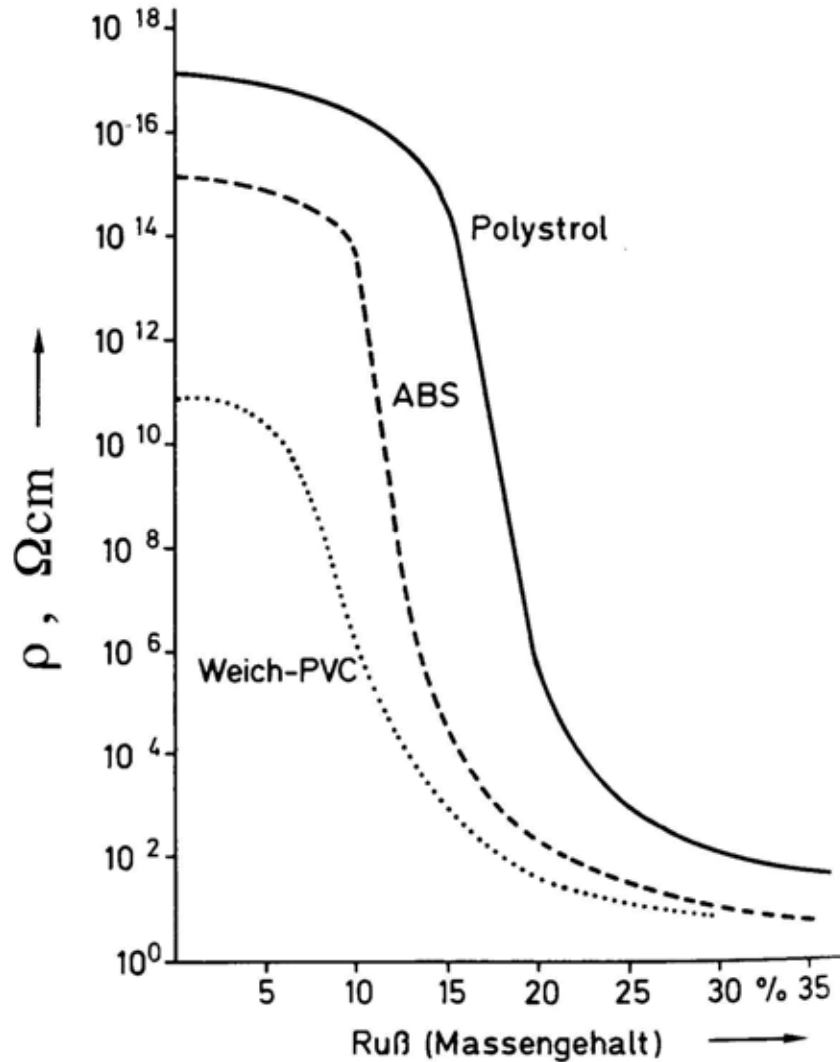
8. Diffusion of Boron into n-type S.C.



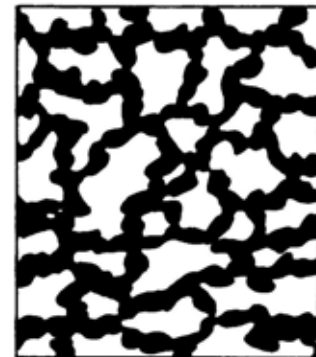
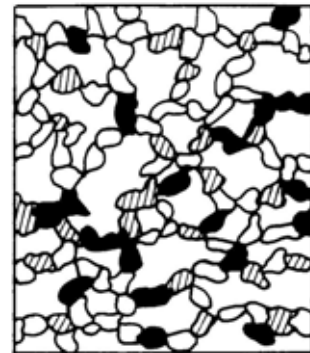
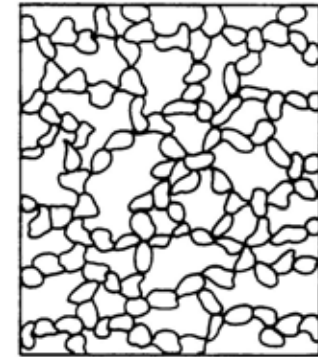
lokale Implantation oder Eindiffusion

2.4 Leitende Polymere

2.4.1 Einlagerung leitfähiger Teilchen



„Perkolation“

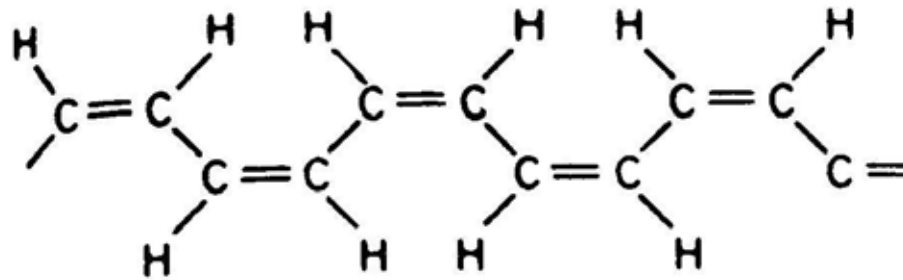


c

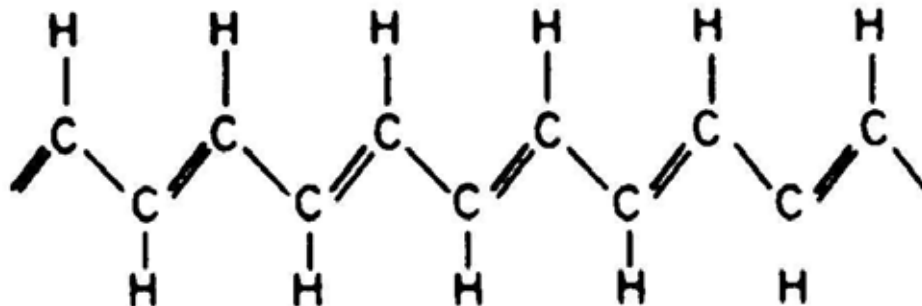
2.4.2 Leitfähige Polymere

Polyacetylen

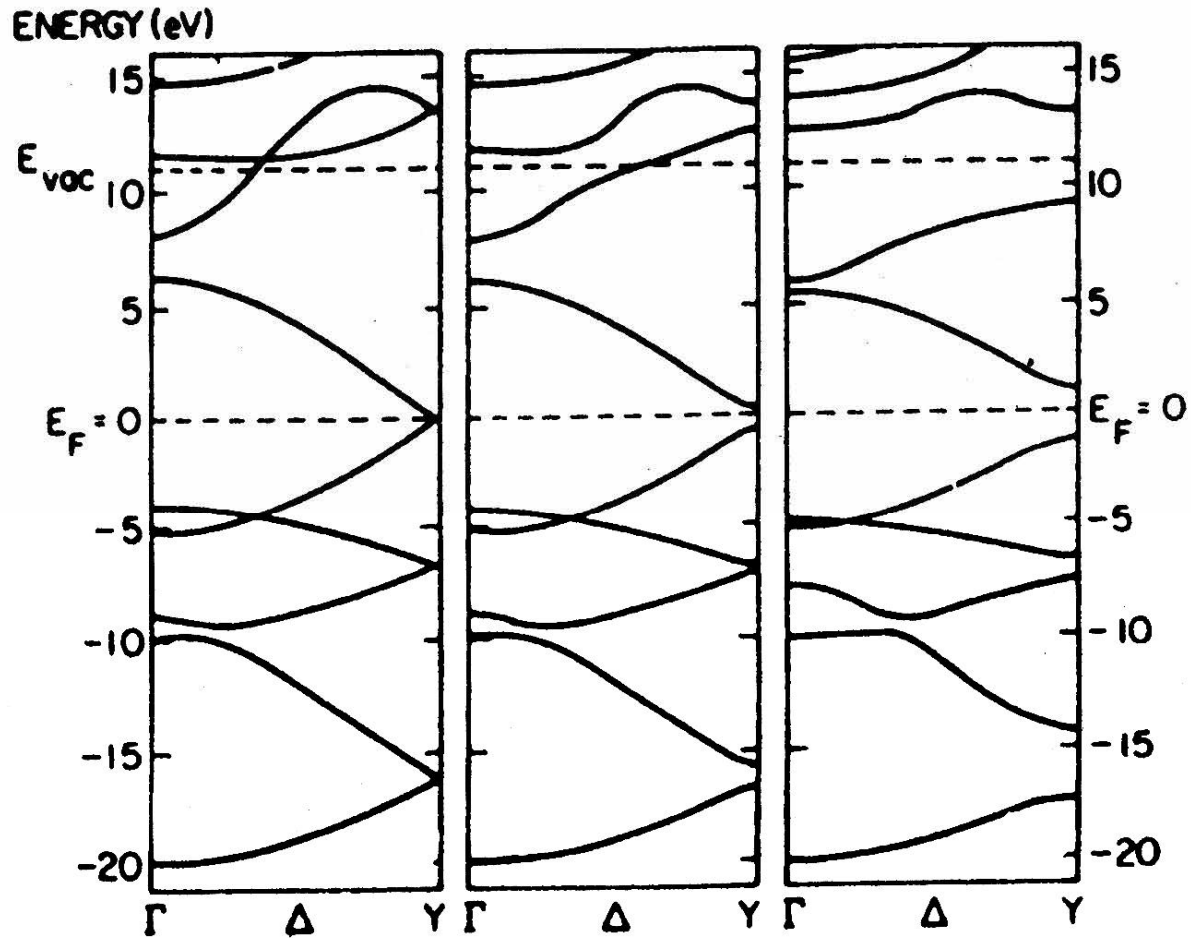
CIS



TRANS



Bandstrukturen für trans (CH)_x



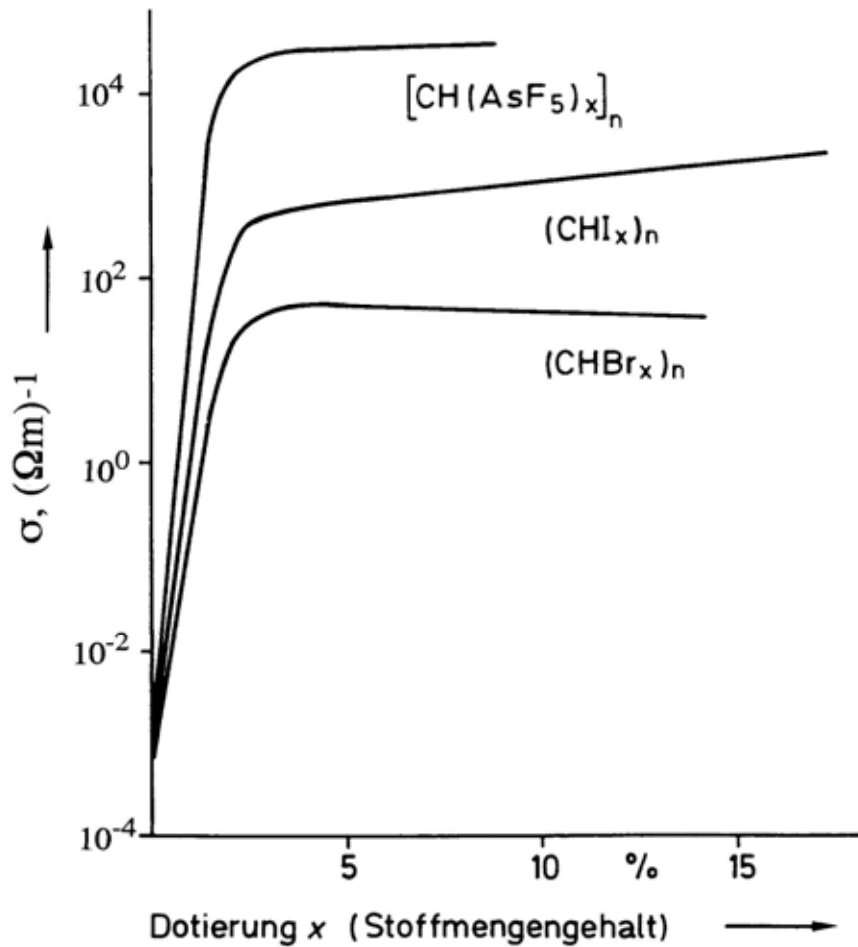
(a)

(b)

(c)

Bindungslänge	1.39Å	1.36Å C=C	1.34Å C=C
		1.43Å C-C	1.54Å C-C
Bandlücke	nein	ja	ja

Dotiereffekte



Material	$\rho_m, \text{g/cm}^3$	$\sigma, \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$	$\sigma/\rho, \text{m}^2/\text{kg} \Omega$
Cu	8.9	$6.5 \cdot 10^7$	7300
$(\text{SN})_x$	2.3	$3.7 \cdot 10^5 (*)$	160
$[\text{CH}(\text{AsF}_5)_x]_n$	0.8	$5.6 \cdot 10^4$	70

(*) in Kettenrichtung

2.5 Ionenkristalle

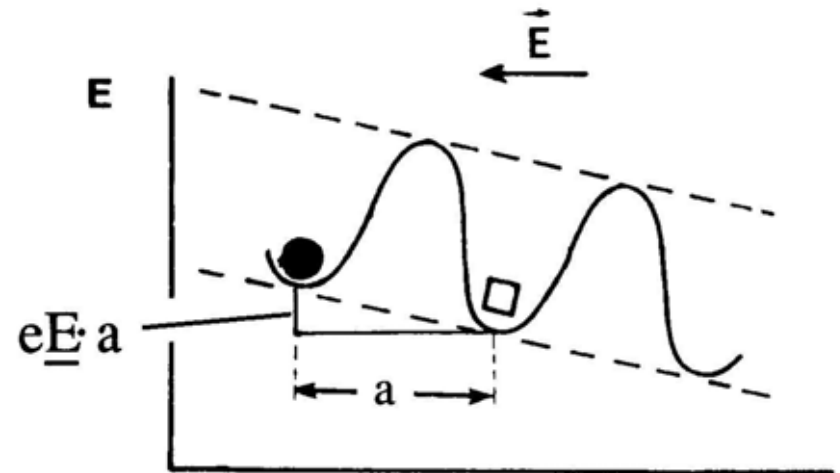
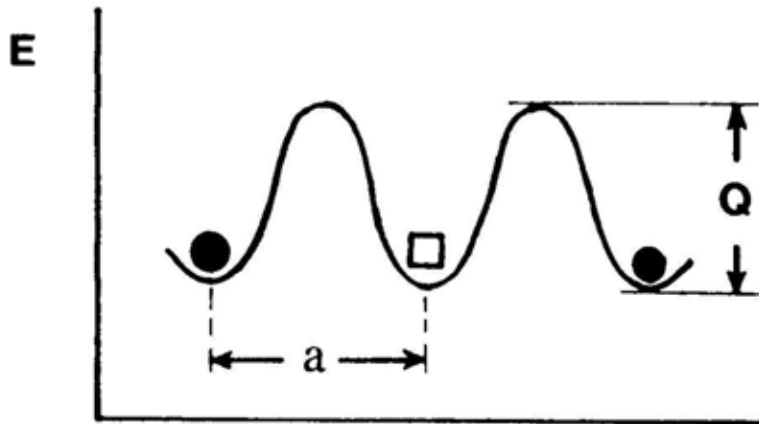
2.5.1 Ionenleitung

$$\sigma_{ion} = N_{ion} \cdot e \cdot \mu_{ion}$$

N_{ion} ... Konzentration beweglicher Ionen [m^{-3}]

e ... Ladung des Ions [C]

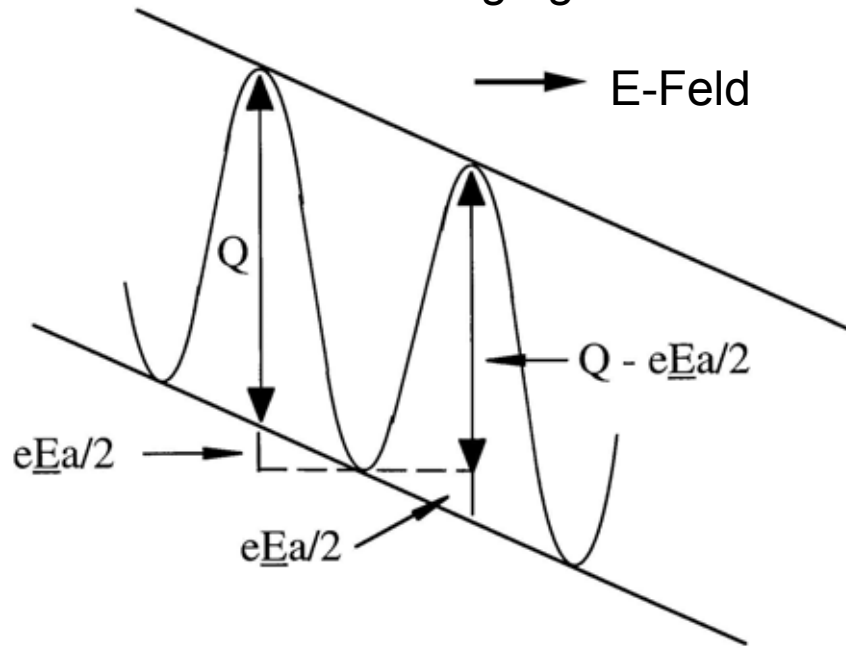
μ_{ion} ... Beweglichkeit [m^2/Vs]



Einstein-Gleichung: $\mu_{ion} = \frac{D \cdot e}{k_B \cdot T}$

$$\sigma_{ion} = \frac{N_{ion} \cdot e^2 \cdot D_0}{k_B \cdot T} \cdot \exp\left(-\frac{Q}{k_B \cdot T}\right)$$

Ableitung: gerichtete Diffusion



Sprünge pro Zeit:

$$p = \nu \cdot \exp - \frac{Q - eE a/2}{kT}$$

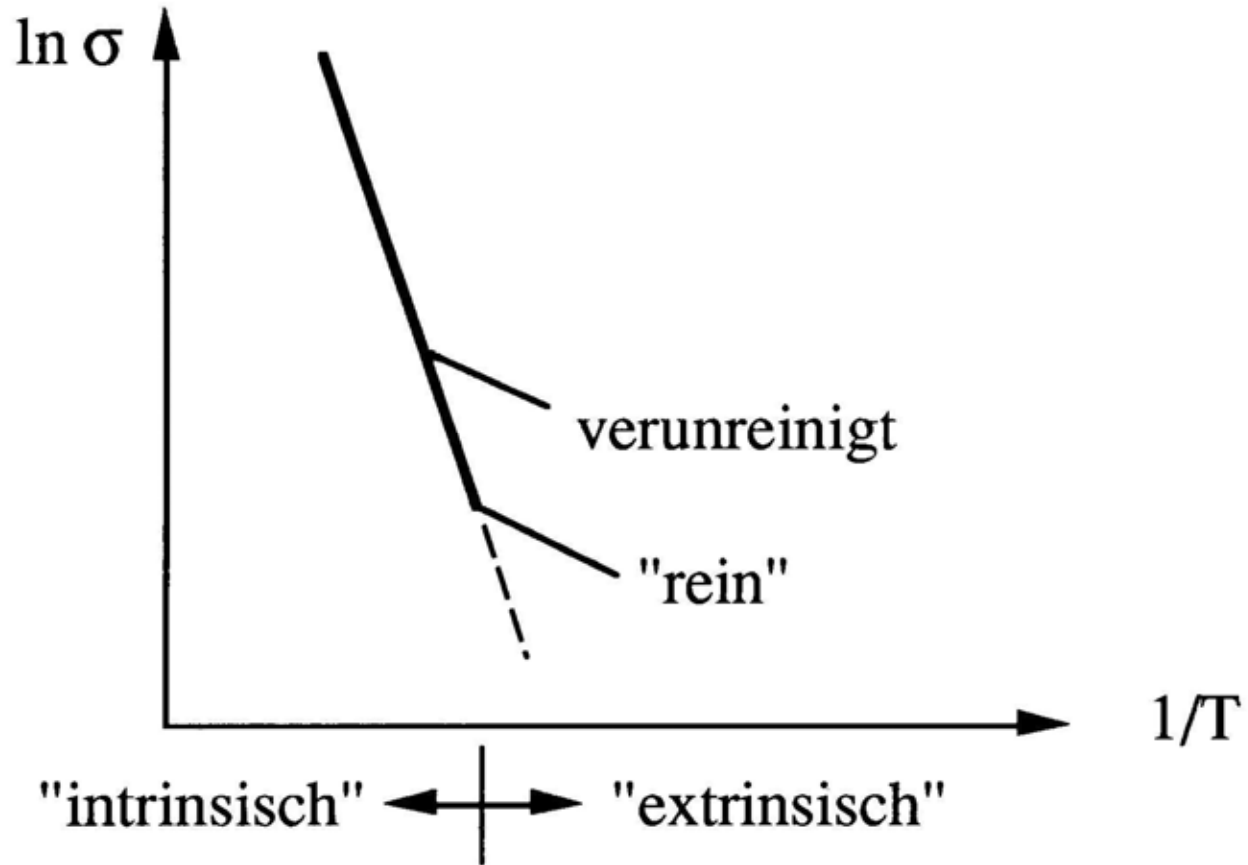
→

$$p = \nu \cdot \exp - \frac{Q + eE a/2}{kT}$$

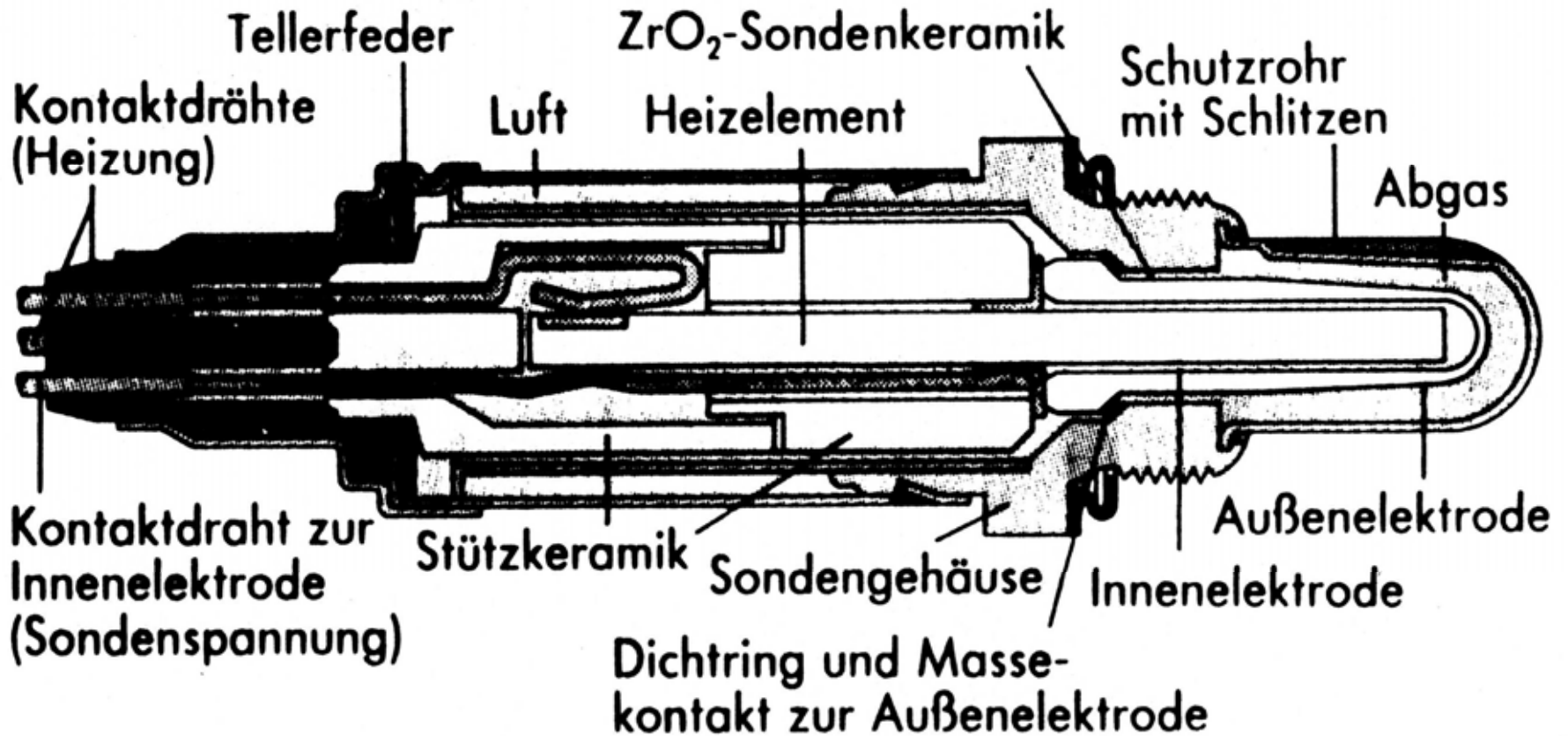
←

$$\mu_{ion} = \frac{v_d}{E} = \frac{D \cdot e}{kT}$$

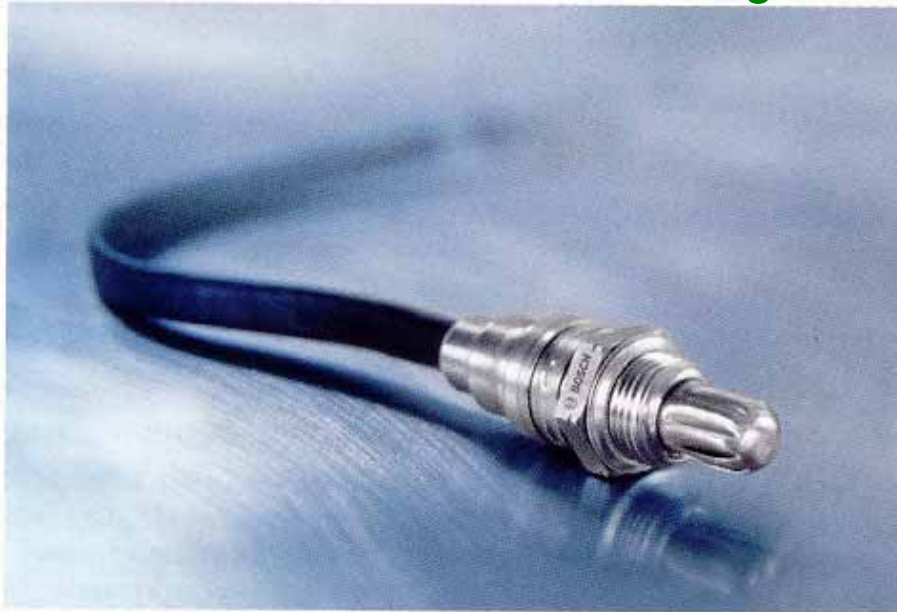
Temperaturabhängigkeit der Ionenleitfähigkeit



Anwendung: Lambda-Sonde

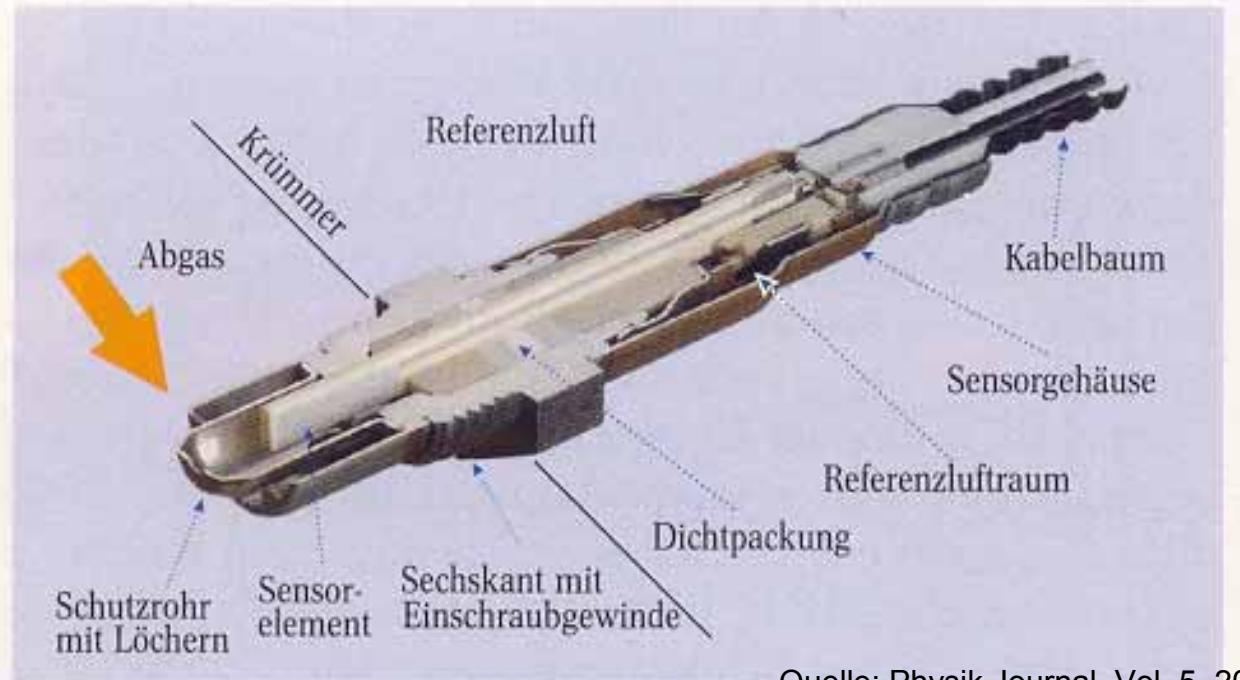


Anwendung: Lambda-Sonde



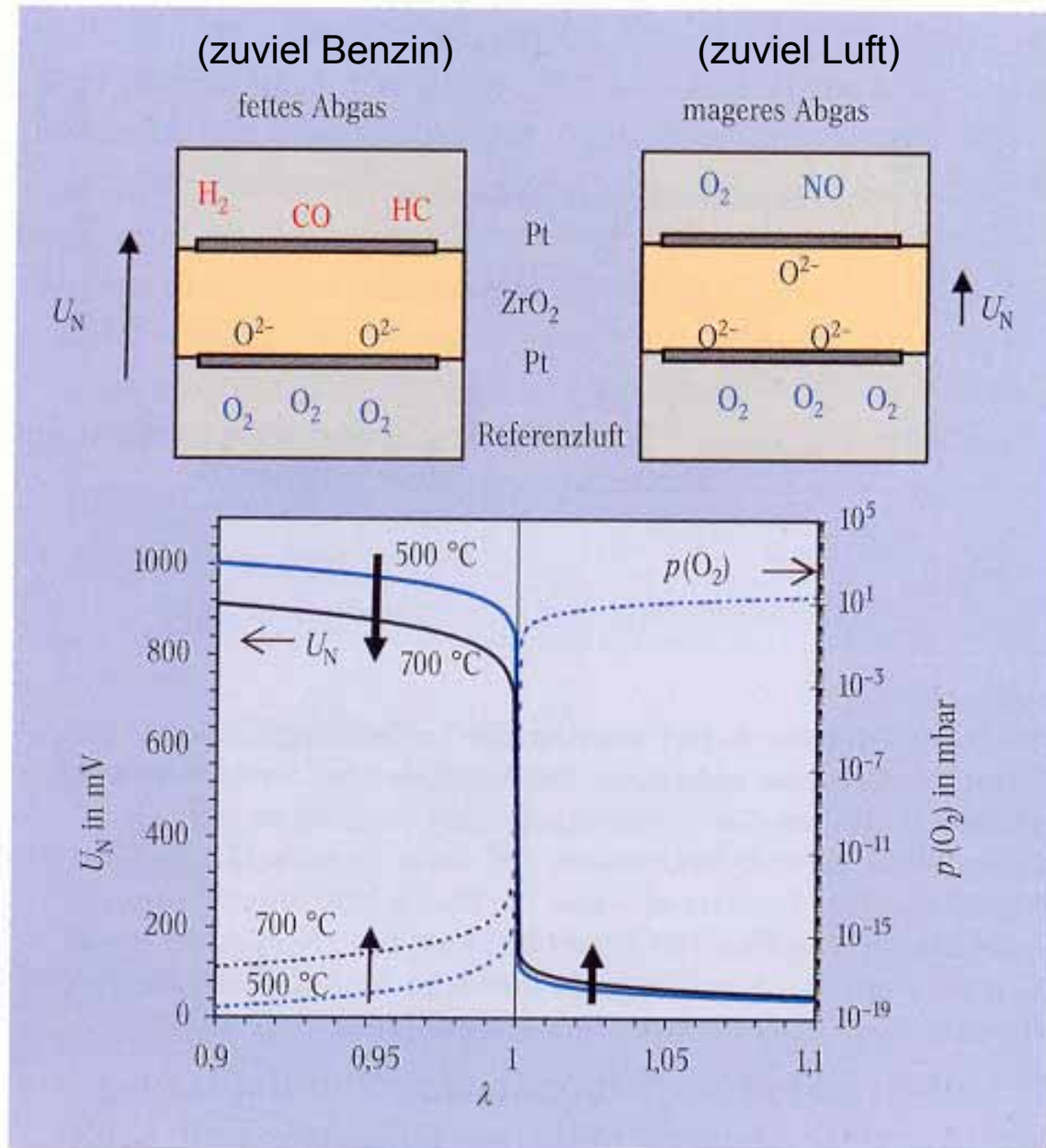
Ohne die 1976 eingeführte Lambdasonde sind moderne Fahrzeuge mit umweltfreundlichen Benzinmotoren nicht denkbar. (Foto: Bosch)

Abb. 9:
Das keramische Sensorelement der Lambdasonde wird mit einer Dichtpackung in das Sondengehäuse gepresst, sodass keine Abgase in das Innere des Sensorgehäuses diffundieren können.



Anwendung: Lambda-Sonde

Abb. 5:
 Wenn das Abgas vom fetten (links) zum mageren Gemisch (rechts) übergeht, ändert sich bei der Sprungsonde die Nernst-Spannung U_N (dicke Linien unten) sprunghaft. Bei $\lambda=1$ ist der Sprung unabhängig von der Temperatur des Sensorelements. Die punktierten Linien zeigen den Gleichgewichtspartialdruck des Sauerstoffs $p(O_2)$ in Abhängigkeit von λ und dem Parameter T .



Bei „lambda eins“ vollständige Verbrennung des Treibstoff-Luft Gemisches

Zusammenfassung: Leitfähigkeit nach Werkstoffgruppen

