

Kapitel 5

Einheitliches Modell für ballistischen und diffusiven Transport

Im vorangehenden Teil dieser Arbeit, wie auch in fast allen Veröffentlichungen zum Transport in Halbleitern, wurde der Transportmechanismus entweder als ballistisch oder als diffusiv angesehen. Der Ladungsträgertransport in halbleitenden Materialien ist *ballistisch*, wenn die mittlere freie Weglänge groß gegen die charakteristischen Dimensionen der Probe ist. Die Streuung der Ladungsträger an Verunreinigungen oder Phononen spielt in diesem Fall keine Rolle, und der Strom ist durch die ballistische Bewegung im elektrischen Feld bestimmt [55]. Wenn andererseits die mittlere freie Weglänge klein gegen die Probendimensionen ist, dominieren die Streuprozesse. Der Transport ist dann *diffusiv* und kann im Drift-Diffusion-Schema beschrieben werden [56, 57]. In vielen Fällen ist die mittlere freie Weglänge weder groß noch klein verglichen mit den Probendimensionen. In der Literatur [44, 58, 59, 60, 61, 62, 63] sind Formeln für die Strom-Spannungs-Charakteristik angegeben worden, in denen für spezielle Voraussetzungen, insbesondere hinsichtlich der Form des Bandkantenprofils, Eigenschaften des ballistischen und des diffusiven Transports kombiniert sind. In diesem Kapitel wird im Rahmen der semiklassischen Näherung eine einheitliche Beschreibung des (eindimensionalen) ballistischen und diffusiven Ladungsträgertransports entwickelt, die für beliebige Werte der mittleren freien Weglänge und für beliebige Form des Bandkantenprofils Gültigkeit hat. Die Beschreibung basiert auf der Voraussetzung, daß sich die Ladungsträger über ein Intervall, dessen Länge von der Größenordnung der mittleren freien Weglänge ist, im elektrischen Feld ballistisch bewegen und dann in einen Zustand lokalen Gleichgewichts thermalisieren, der durch ein Quasi-Fermi-Niveau (elektrochemisches Potential) charakterisiert ist. Die Länge der Probe wird durch Konfigurationen von solch ballistischen Intervallen überdeckt, deren Längen zufallsverteilt sind. Nach geeigneter Mittelung über diese Konfigurationen ergibt sich eine einheitliche Beschreibung des Ladungsträgertransports, in der rein ballistischer und rein diffusiver Transport als Grenzfälle auftreten.

Das wesentliche Ergebnis ist eine universelle Formel für die Strom-Spannungs-Charakteristik für *nichtentartete* Systeme (der entartete Fall wird an anderer Stelle diskutiert [64]). Diese Formel verallgemeinert von anderen Autoren angegebene Ausdrücke für eine einzelne Barriere. Ihr besonderes Merkmal ist das Auftreten eines “Strukturterms”, der von der detaillierten Struktur des Bandkantenprofils und auch explizit von der mittleren freien Weglänge abhängt.

Die einheitliche Beschreibung ist von besonderer Bedeutung für den Transport in mikro- und polykristallinen Materialien mit Korngrößen, die vergleichbar oder kleiner als die mittlere freie Weglänge sind. Die einzelnen Körner dürfen dann nicht getrennt betrachtet werden, sondern die Probe muß als Ganzes behandelt werden. Wir werden diesen Fall im Rahmen von numerischen Rechnungen für Ketten identischer Körner ausführlich untersuchen. Damit lassen sich der relative Einfluß von ballistischem und diffusivem Transport und die Abhängigkeit der Transportgrößen von der Zahl der Körner in einer Probe explizit demonstrieren.

Im folgenden werden wir der Einfachheit halber nur die *klassische* Bewegung von *Elektronen* im Potential der *Leitungsbandkante* betrachten.

5.1 Thermionische Emission und Diffusion über eine Barriere

Die separate Modellbeschreibung von ballistischem bzw. diffusivem Transport nichtentarteter Elektronen über eine Potentialbarriere ist bereits in Kapitel 3.2 bzw. 3.3 dargestellt worden. Zur Vorbereitung der einheitlichen Behandlung des Elektronentransports und im Interesse einer geschlossenen Darstellung dieses Kapitels wird diese Beschreibung hier zusammengefaßt und ergänzt.

Im ballistischen Fall (thermionische Emission) ist der Ladungsstrom j gegeben durch die (algebraische) Summe der Ströme $j_{l,r}(x_{l,r})$,

$$j = j_l(x_l) + j_r(x_r) , \quad (5.1)$$

die durch von links (rechts) “injizierte” Elektronen getragen werden. Dabei ist $x_{l,r}$ die Koordinate eines Punktes, an dem lokales Gleichgewicht herrscht und der links (rechts) vom Barrierenmaximum bei X_p liegt. Der Strom $j_{l,r}(x_{l,r})$ kann in der Form

$$j_{l,r}(x_{l,r}) = \mp e v_e \bar{T}(x_{l,r}) n_{l,r}(x_{l,r}) \quad (5.2)$$

geschrieben werden, wobei $v_e = (2\pi m^* \beta)^{-1/2}$ die Emissionsgeschwindigkeit ist ($\beta = 1/k_B T$). Die Größe

$$\bar{T}(x) = e^{-\beta[E_c(X_p) - E_c(x)]} \quad (5.3)$$

ist die thermisch gemittelte, klassische Transmissionswahrscheinlichkeit für nichtentartete Elektronen, die am Punkt x in Richtung auf die Barriere mit Höhe $E_c(X_p)$ injiziert werden, und die Funktion $E_c(x)$ ist das Profil der Leitungsbandkante (vgl. Abb. 5.1). Ferner ist

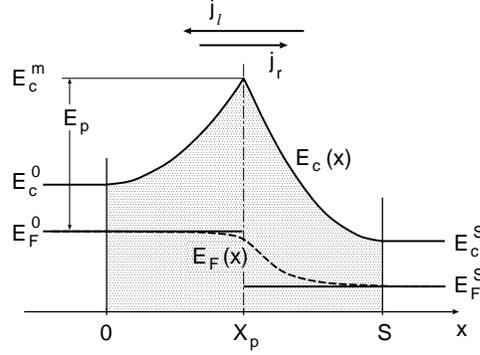


Abbildung 5.1: Transport über eine Barriere im ballistischen Bereich (Fermi-Niveaus E_F^0, E_F^S) und im diffusiven Bereich [Quasi-Fermi-Niveau $E_F(x)$].

$$n_{l,r}(x_{l,r}) = N_c e^{-\beta[E_c(x_{l,r}) - E_F^{0,S}]} \quad (5.4)$$

die Elektronendichte am Punkt $x_{l,r}$. Der Faktor $N_c = 2(2\pi m^*/\beta h^2)^{3/2}$ ist die effektive Zustandsdichte an der Leitungsbandkante, und das Fermi-Niveau bei $x_{l,r}$ ist gleich dem Fermi-Niveau am linken (rechten) Ende der Probe mit Länge S gesetzt worden. Einsetzen von Gl. (5.3) und (5.4) in Gl. (5.2) zeigt, daß der Strom $j_{l,r}(x_{l,r})$ unabhängig von der speziellen Wahl für $x_{l,r}$ links bzw. rechts vom Barrierenmaximum ist.

Der Ausdruck (5.1) kann jetzt in der Form

$$j = -ev_e N_c e^{-\beta E_c(X_p)} (e^{\beta E_F^0} - e^{\beta E_F^S}) \quad (5.5)$$

geschrieben werden. Mit der durch $E_F^0 - E_F^S = eV$ gegebenen (äußeren) Spannung V erhalten wir dann die Strom-Spannungs-Charakteristik

$$j = -ev_e N_c e^{-\beta E_p} (1 - e^{-\beta eV}), \quad (5.6)$$

wobei $E_p = E_c(X_p) - E_F^0$ die vom Fermi-Niveau auf der linken Seite der Barriere aus gerechnete Barrierenhöhe ist.

Im diffusiven Fall ist der Strom durch den Gradienten des Quasi-Fermi-Niveaus $E_F(x)$ bestimmt,

$$j = \mu n(x) \frac{d}{dx} E_F(x), \quad (5.7)$$

wobei die Elektronenmobilität μ durch die mittlere freie Weglänge l (von der angenommen ist, daß sie klein gegenüber den charakteristischen Dimensionen der Probe ist) in der Form

$$\mu = ev_e \beta l \quad (5.8)$$

ausgedrückt werden kann. Mit

$$n(x) = N_c e^{-\beta[E_c(x) - E_F(x)]} \quad (5.9)$$

erhalten wir durch Integration von Gl. (5.7)

$$j = -ev_d N_c e^{-\beta E_p} (1 - e^{-\beta eV}) . \quad (5.10)$$

Dabei haben wir die Diffusionsgeschwindigkeit

$$v_d = \frac{\mu}{e\beta\tilde{S}} = v_e \frac{l}{\tilde{S}} , \quad (5.11)$$

mit

$$\tilde{S} = \int_0^S dx e^{-\beta[E_c(X_p) - E_c(x)]} , \quad (5.12)$$

eingeführt. Wegen $E_c(X_p) - E_c(x) \geq 0$ erfüllt die Größe \tilde{S} die Bedingung $\tilde{S} \leq S$. Wir bezeichnen sie daher als “reduzierte Probenlänge”. Im feldfreien Fall, $E_c(x) = \text{const.}$, ist $\tilde{S} = S$; für ein ausgeprägtes Maximum im Bandkantenprofil gilt $\tilde{S} \ll S$. Das Verhältnis von v_d zu v_e ist gleich dem Verhältnis der mittleren freien Weglänge l zur reduzierten Probenlänge \tilde{S} .

Eine “gemischte” Formel für die Strom-Spannungs-Charakteristik ist seit langem bekannt [58, 21]; diese Formel interpoliert zwischen Gl. (5.6) und Gl. (5.10),

$$j = -e \frac{v_e v_d}{v_e + v_d} N_c e^{-\beta E_p} (1 - e^{-\beta eV}) . \quad (5.13)$$

Mit Hilfe von Gl. (5.11) können wir dies umschreiben zu

$$j = -ev_e N_c e^{-\beta E_p} \frac{l}{\tilde{S} + l} (1 - e^{-\beta eV}) . \quad (5.14)$$

Bei der Ableitung von Formel (5.13) in den Referenzen [58, 21] wurde ballistischer Transport in der unmittelbaren Umgebung des Barrierenmaximums und ansonsten diffusiver Transport angenommen, obwohl der Transportmechanismus für allgemeines l und $E_c(x)$ nirgendwo rein ballistisch oder rein diffusiv ist.

In dem nachfolgend entwickelten einheitlichen Transportmodell wird für die Strom-Spannungs-Charakteristik ein Ausdruck abgeleitet, der eine der Gl. (5.14) ähnliche Form hat. Dieser enthält jedoch im Nenner an Stelle von $\tilde{S} + l$ eine effektive Länge L , in der in konsistenter und expliziter Weise das Wechselspiel von ballistischem und diffusivem Transport berücksichtigt ist und die damit für beliebige Werte der mittleren freien Weglänge l und für beliebigen Verlauf des Bandkantenprofils $E_c(x)$ gültig ist.

5.2 Schema des einheitlichen Modells

Das einheitliche Modell basiert auf folgendem Schema (vgl. Abb. 5.2). Die Probe, die sich von $x = 0$ bis $x = S$ erstreckt, wird überdeckt mit einer Kette von Intervallen $\{i\}$, über die sich die Elektronen im Feld des Bandkantenpotentials $E_c(x)$ jeweils ballistisch bewegen. An den Endpunkten dieser “ballistischen

Intervalle” sollen die Elektronen sich im lokalen thermischen Gleichgewicht befinden. Im Rahmen dieser gedanklichen Konstruktion wird angenommen, daß die Punkte lokalen Gleichgewichts über dünne, ideal leitende Zuführungen mit Reservoiren verbunden sind, die sich im Gleichgewicht befinden und deren chemisches Potential gleich dem Quasi-Fermi-Niveau an diesen Punkten ist [65]. Der Strom in einem ballistischen Intervall resultiert aus der Injektion von Elektronen an den Endpunkten und anschließender klassischer Transmission über das Intervall.

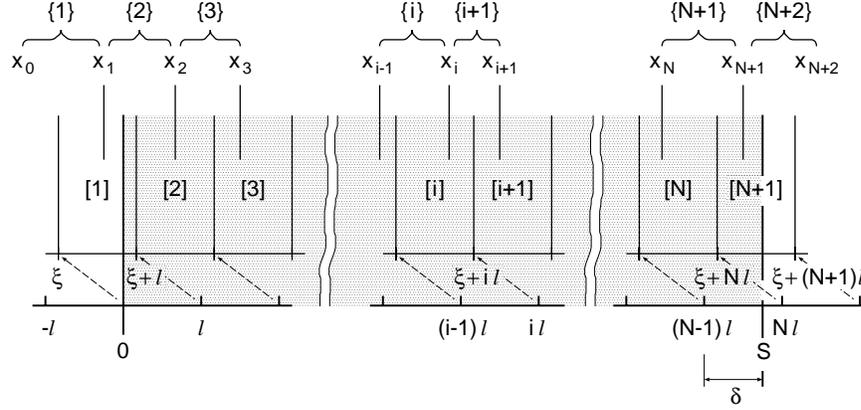


Abbildung 5.2: Verteilung von ballistischen Intervallen $\{i\}$ über die Länge der Probe.

Die Endpunkte der ballistischen Intervalle werden als zufallsverteilt angenommen, wobei der Mittelwert der Intervalllänge gleich der mittleren freien Weglänge l sei. In Abb. 5.2 ist eine spezielle Konfiguration von ballistischen Intervallen dargestellt. Es sei N die Zahl der Intervalle der Länge l , die nötig ist, um die Probe zu überdecken, d.h., $S = (N - 1)l + \delta$, $0 < \delta \leq l$. Der Punkt lokalen Gleichgewichts am rechten Ende des ballistischen Intervalls $\{i\}$ sei x_i und derjenige am linken Ende x_{i-1} ; die zugehörigen Quasi-Fermi-Niveaus sind $E_F(x_i)$ bzw. $E_F(x_{i-1})$. Die Position eines jeden Punktes x_i , $i = 1, \dots, N + 1$, sei zufallsverteilt über ein “Gitterintervall” $[i]$ zwischen den Punkten $\xi + (i - 1)l$ und $\xi + il$ eines Gitters mit fester Gitterkonstante l , das bei der Zufallsposition ξ in dem Intervall $(-l, 0)$ beginnt. Die Länge der ballistischen Intervalle genügt daher einer Zufallsverteilung mit Werten zwischen 0 und $2l$.

Das linke Ende des ballistischen Intervalls $\{1\}$ liegt immer am Punkt $x_0 < \xi$ außerhalb der Probe. Dieses Intervall hat physikalische Bedeutung nur dann, wenn sein rechtes Ende innerhalb der Probe liegt, d.h., wenn $x_1 > 0$. In diesem Fall wird angenommen, daß das linke Ende des Intervalls mit dem linken Ende der Probe bei $x = 0$ zusammenfällt, unabhängig von der nominellen Position des linken Endes des Intervalls $\{1\}$. Das zugehörige Fermi-Niveau ist gegeben durch E_F^0 , die Leitungsbandkante durch E_c^0 . Dies gilt auch für das linke Ende des ballistischen Intervalls $\{2\}$, wenn dieses außerhalb der Probe liegt, d.h., wenn $x_1 < 0$.

Eine ähnliche Situation liegt am rechten Ende der Probe vor. Das rechte Ende des ballistischen Intervalls $\{N+2\}$ liegt immer am Punkt $x_{N+2} > \xi + (N+1)l$ außerhalb der Probe (dieses Intervall hat physikalische Bedeutung nur dann, wenn sein linkes Ende innerhalb der Probe liegt, d.h., wenn $x_{N+1} < S$). Die rechten Enden der ballistischen Intervalle $\{N\}$ und $\{N+1\}$ können außerhalb der Probe liegen, wenn die entsprechenden Gitterintervalle $[N]$ und $[N+1]$ hinreichend weit rechts liegen, d.h., wenn der Betrag von ξ hinreichend klein ist. In all diesen Fällen wird das rechte Ende des ballistischen Intervalls bei $x = S$ angenommen, unabhängig von seiner nominellen Position ($> S$). Das zugehörige Quasi-Fermi-Niveau und die Leitungsbandkante sind dann gegeben durch E_F^S bzw. E_c^S .

Den Strom im ballistischen Intervall $\{i\}$ erhält man, indem man in Gl. (5.5) $E_c(X_p)$ durch $E_c^m(i)$, E_F^0 durch $E_F(x_{i-1})$ und E_F^S durch $E_F(x_i)$ ersetzt:

$$j(i) = -ev_e N_c e^{-\beta E_c^m(i)} \left[e^{\beta E_F(x_{i-1})} - e^{\beta E_F(x_i)} \right], \quad i = 1, \dots, N+2. \quad (5.15)$$

Dabei ist $E_c^m(i)$ der Maximalwert des Bandkantenprofils $E_c(x)$ im Intervall $\{i\}$; ferner ist $E_F(x_0) = E_F^0$ und $E_F(x_{N+2}) = E_F^S$. Im Gleichungssystem (5.15) fallen die erste oder die letzte Gleichung weg, wenn die entsprechenden Intervalls $\{1\}$ oder $\{N+2\}$ vollständig außerhalb der Probe liegen, und es gilt $E_F(x_1) = E_F^0$ bzw. $E_F(x_{N+1}) = E_F^S$. Von dieser Vereinbarung wird im folgenden durchweg Gebrauch gemacht.

Im stationären Fall ist der Strom ortsunabhängig, $j(i) = j = \text{const.}$, und man kann schreiben

$$e^{\beta E_F(x_i)} = e^{\beta E_F(x_{i-1})} + \frac{j}{ev_e N_c} e^{\beta E_c^m(i)}, \quad i = 1, \dots, N+2. \quad (5.16)$$

Durch Iteration dieser Beziehung erhält man für eine Konfiguration der in Abb. 5.2 gezeigten Art

$$e^{\beta E_F^S} - e^{\beta E_F^0} = \frac{j}{ev_e N_c} \sum_{i=1}^{N+2} e^{\beta E_c^m(i)}. \quad (5.17)$$

Die Summe auf der rechten Seite muß über alle Zufallskonfigurationen der ballistischen Intervalle, d.h., über die Positionen ihrer Endpunkte x_i in den Gitterintervallen $[i]$ und über die Position ξ des Gitters, gemittelt werden. Mit der Abkürzung Ξ für das Produkt von $e^{-\beta E_F^0}$ mit dem Mittelwert der Summe,

$$\Xi = \left\langle \sum_{i=1}^{N+2} e^{\beta [E_c^m(i) - E_F^0]} \right\rangle_{\{\xi, x_i\}}, \quad (5.18)$$

ergibt sich

$$1 - e^{-\beta eV} = -\frac{j}{ev_e N_c} \Xi, \quad (5.19)$$

wobei $E_F^0 - E_F^S = eV$ gesetzt worden ist. Dabei wurde wiederum angenommen, daß die Probe bei $x = 0$ und $x = S$ über ideale Zuführungen mit großen, im Gleichgewicht befindlichen Reservoiren verbunden ist, deren Fermi-Niveaus und Bandkanten gegeben sind. Die Differenz der Fermi-Niveaus E_F^0 und E_F^S in den Reservoiren bestimmt dann die (äußere) Spannung V [66].

5.3 Mittelung über die ballistischen Konfigurationen

Zur Berechnung des Mittelwertes Ξ wird dem infinitesimalen Linienelement dx_i bei x_i der Gewichtungsfaktor dx_i/l zugeordnet und die Integration über das Gitterintervall $[i]$ ausgeführt. Das Ergebnis hängt im allgemeinen von der Gitterposition ab. Zur Mittelung über diese Position wird die ξ -Integration über das Intervall $(-l, 0)$ ausgeführt und das Ergebnis durch l dividiert. Um die Notation zu vereinfachen, wird im folgenden $E_F^0 = 0$ gesetzt.

5.3.1 Monotones Bandkantenprofil

Zunächst wird ξ als fest vorausgesetzt. Wenn das Bandkantenprofil $E_c(x)$ über die gesamte Probe monoton *anwächst*, wird der Maximalwert $E_c^m(i)$ in jedem ballistischen Intervall $\{i\}$ am rechten Ende des Intervalls angenommen, $E_c^m(i) = E_c(x_i)$ [vgl. Abb. 5.3]. Wir betrachten die in Abb. 5.2 dargestellte Situation. Der rechte Endpunkt x_1 des ballistischen Intervalls $\{1\}$ überdeckt innerhalb

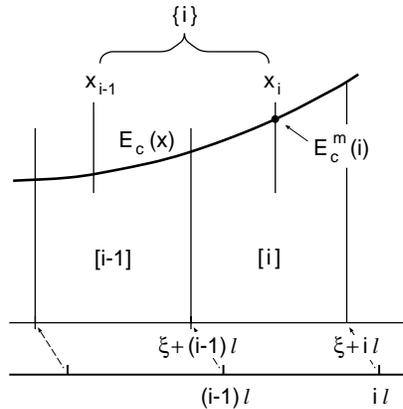


Abbildung 5.3: Mittelung über ballistische Konfigurationen: monotoneres Bandkantenprofil $E_c(x)$.

der Probe den Bereich zwischen 0 und $\xi + l$, so daß die Integration bei $x = 0$ beginnt. Die rechten Endpunkte x_i der ballistischen Intervalle $\{i\}$ (d.h., der Gitterintervalle $[i]$) mit $i = 2, \dots, N$ geben jeweils einen Beitrag

$$\Xi^{[i]} = \int_{\xi+(i-1)l}^{\xi+il} \frac{dx}{l} e^{\beta E_c(x)} \quad (5.20)$$

zum Mittelwert Ξ . Die rechten Endpunkte der ballistischen Intervalle $\{N\}$, $\{N+1\}$ können außerhalb der Probe liegen, d.h., $x_N, x_{N+1} > S$, wenn der Betrag von ξ hinreichend klein ist. Der rechte Endpunkt des letzten Intervalls, $\{N+2\}$, liegt immer außerhalb der Probe, d.h., $x_{N+2} > S$. Die Integration über den rechten Endpunkt x_{N+1} des ballistischen Intervalls $\{N+1\}$ endet bei $x = S$;

in dem restlichen Intervall der Länge $\xi + (N + 1)l - S$ gilt $E_c^m(N + 1) = E_c^S$. Das ballistische Intervall $\{N + 2\}$ überdeckt innerhalb der Probe eine Strecke der Länge $S - (\xi + Nl)$; der Maximalwert $E_c^m(N + 2)$ liegt am rechten Ende und ist gleich E_c^S . Als Ergebnis der Mittelung über alle Punkte x_i erhalten wir (mit einer geeigneten Verallgemeinerung der Definition von $\Xi^{[i]}$ auf die Fälle $i = 1, N + 1, N + 2$)

$$\Xi = \sum_{i=1}^{N+2} \Xi^{[i]} = S^*/l + e^{\beta E_c^S}, \quad (5.21)$$

wobei das ‘‘Probenintegral’’ S^* durch

$$S^* = \int_0^S dx e^{\beta E_c(x)} \quad (5.22)$$

definiert ist. Dieses Ergebnis ist unabhängig von ξ , d.h., von der Position des Gitters, und eine explizite Mittelung über ξ ist nicht erforderlich.

Wenn das Bandkantenprofil $E_c(x)$ über die gesamte Probe monoton *abfällt*, erhält man in ähnlicher Weise

$$\Xi = S^*/l + e^{\beta E_c^0}. \quad (5.23)$$

Der Mittelwert Ξ für monotonen $E_c(x)$ ist damit gegeben als Summe des durch l dividierten Probenintegrals S^* und einer Exponentialfunktion, die den größeren der beiden Werte des Bandkantenprofils an den Enden der Probe enthält.

5.3.2 Einzelne Kuppe im Bandkantenprofil

Die Kuppe liege an der Stelle X_p [$p = \text{peak}$ (Kuppe)] im Gitterintervall $[p]$ (vgl. Abb. 5.4). Im Fall (a) liegt das ballistische Intervall $\{p\}$ vollständig

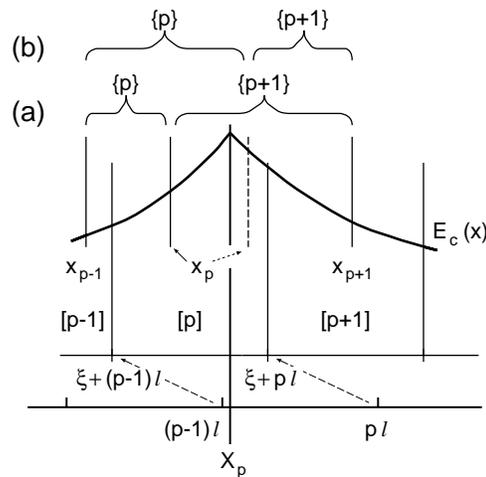


Abbildung 5.4: Mittelung über ballistische Konfigurationen: einzelne Kuppe im Bandkantenprofil $E_c(x)$.

links von der Kuppe, d.h., $x_p < X_p$ und daher $E_c^m(p) = E_c(x_p)$; das ballistische Intervall $\{p+1\}$ liegt teilweise links von der Kuppe, so daß $E_c^m(p+1) = E_c(X_p)$. Im Fall (b) liegt das ballistische Intervall $\{p\}$ teilweise rechts von der Kuppe, d.h., $x_p > X_p$, und das Intervall $\{p+1\}$ liegt vollständig rechts davon, so daß $E_c^m(p) = E_c(X_p)$ und $E_c^m(p+1) = E_c(x_p)$. Die Mittelung über den Punkt x_p ergibt daher zu Ξ den Beitrag

$$\begin{aligned} \Xi^{[p]} &= \underbrace{\int_{\xi+(p-1)l}^{X_p} \frac{dx_p}{l} [e^{\beta E_c(x_p)} + e^{\beta E_c(X_p)}]}_{(a)} + \underbrace{\int_{X_p}^{\xi+pl} \frac{dx_p}{l} [e^{\beta E_c(X_p)} + e^{\beta E_c(x_p)}]}_{(b)} \\ &= \int_{\xi+(p-1)l}^{\xi+pl} \frac{dx}{l} e^{\beta E_c(x)} + e^{\beta E_c(X_p)}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Das Integral in der letzten Zeile erstreckt sich über das Gitterintervall $[p]$; die anderen ballistischen Intervalle ergeben ein Integral, daß über die gesamte Probe mit Ausnahme des Gitterintervalls $[p]$ verläuft (eine Exponentialfunktion des Bandkantenprofils an den Enden der Probe tritt hier nicht auf, da das Profil keine Maxima an den Enden aufweist). Wir erhalten damit schließlich

$$\Xi = S^*/l + e^{\beta E_c(X_p)}. \quad (5.25)$$

Dieses Ergebnis ist wiederum unabhängig von ξ , so daß eine Mittelung über die Gitterposition nicht mehr erforderlich ist.

Der Mittelwert Ξ für eine einzelne Kuppe im Bandkantenprofil ist gemäß Gl. (5.25) gegeben als Summe des durch l dividierten Probenintegrals S^* und einer Exponentialfunktion, deren Beitrag wir als “Nettobeitrag” Ξ^p der Kuppe bezeichnen. Im oben behandelten Fall des monotonen Bandkantenprofils ergaben sich entsprechende Nettobeiträge von den Maxima $E_c^{S,0}$ an den Enden der Probe [vgl. Gln. (5.21) und (5.23)]. Diese Maxima werden im folgenden zu den “Kuppen” des Profils gerechnet.

5.3.3 Einzelne Senke im Bandkantenprofil

Um den Formalismus überschaubar zu halten, betrachten wir den Fall, daß das Bandkantenprofil um das Minimum der Senke über einen Bereich der Breite $2l$ symmetrisch ist. Im folgenden ist angenommen, daß der Nullpunkt der Koordinate x mit der Position des Minimums zusammenfällt; dann gilt $E_c(-x) = E_c(x)$, $|x| \leq l$ (vgl. Abb. 5.5). Die Position des Gitters ist durch die Verschiebung ξ definiert, die im Intervall $(-l, 0)$ zufallsverteilt ist. Die beiden Fälle, wo ξ (a) links und (b) rechts von $-l/2$ liegt, müssen getrennt behandelt werden.

(a) $-l < \xi < -l/2$: Im ballistischen Intervall $\{1\}$ liegt das Maximum des Bandkantenprofils immer am linken Endpunkt $x_0 < \xi$. Im Intervall $\{2\}$ befindet es sich für $\xi + l < x_2 < -\xi$ am linken Endpunkt x_1 , wenn $x_1 < -x_2$ ist, und am rechten Endpunkt x_2 , wenn $x_1 > -x_2$ ist; für $-\xi < x_2 < \xi + 2l$ liegt das

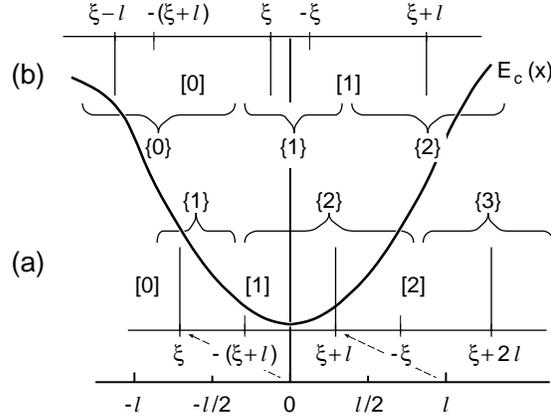


Abbildung 5.5: Mittelung über ballistische Konfigurationen: einzelne Senke im Bandkantenprofil $E_c(x)$.

Maximum am rechten Endpunkt x_2 . Im ballistischen Intervall $\{3\}$ liegt es immer am rechten Endpunkt x_3 . Die Mittelung über x_1 und x_2 ergibt den Beitrag

$$\begin{aligned}
\Xi_a^{[1,2]}(\xi) &= \int_{\xi}^{-(\xi+l)} \frac{dx_1}{l} e^{\beta E_c(x_1)} \cdot \frac{-x_1 - (\xi + l)}{l} \\
&+ \int_{\xi+l}^{-\xi} \frac{dx_2}{l} e^{\beta E_c(x_2)} \cdot \frac{\xi + l - (-x_2)}{l} + \int_{-\xi}^{\xi+2l} \frac{dx_2}{l} e^{\beta E_c(x_2)} \\
&= -2 \int_{\xi}^{-(\xi+l)} \frac{x dx}{l^2} e^{\beta E_c(x)} + \int_{-\xi}^{\xi+2l} \frac{dx}{l} e^{\beta E_c(x)}, \tag{5.26}
\end{aligned}$$

wobei die letzte Zeile aus der Symmetriebeziehung $E_c(-x) = E_c(x)$ folgt. Durch Subtraktion des durch l dividierten Beitrags der Gitterintervalle [1] und [2] zum Probenintegral,

$$\int_{\xi}^{\xi+2l} \frac{dx}{l} e^{\beta E_c(x)},$$

von dem Ausdruck (5.26) erhalten wir für den Nettobeitrag [v = valley (Senke)]

$$\Xi_a^v(\xi) = -2 \left(\int_{\xi}^0 \frac{dx}{l} + \int_{\xi}^{-(\xi+l)} \frac{x dx}{l^2} \right) e^{\beta E_c(x)}. \tag{5.27}$$

(b) $-l/2 < \xi < 0$: Im ballistischen Intervall $\{0\}$ liegt das Maximum des Bandkantenprofils immer am linken Endpunkt $x_{-1} < \xi - l$. Im Intervall $\{1\}$ befindet es sich für $\xi - l < x_0 < -(\xi + l)$ am linken Endpunkt x_0 ; für $-(\xi + l) < x_0 < \xi$ liegt es am linken Endpunkt x_0 , wenn $x_0 < -x_1$ ist, und am rechten Endpunkt x_1 , wenn $x_0 > -x_1$ ist. Im ballistischen Intervall $\{2\}$ liegt das Maximum am rechten Endpunkt x_2 . Die Mittelung über x_0 und x_1 ergibt den Beitrag

$$\Xi_b^{[0,1]}(\xi) = \int_{\xi-l}^{-(\xi+l)} \frac{dx_0}{l} e^{\beta E_c(x_0)} + \int_{-(\xi+l)}^{\xi} \frac{dx_0}{l} e^{\beta E_c(x_0)} \cdot \frac{-x_0 - \xi}{l}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{-\xi}^{\xi+l} \frac{dx_1}{l} e^{\beta E_c(x_1)} \cdot \frac{\xi - (-x_1)}{l} \\
& = \int_{\xi-l}^{-(\xi+l)} \frac{dx}{l} e^{\beta E_c(x)} - 2 \int_{-(\xi+l)}^{\xi} \frac{xdx}{l^2} e^{\beta E_c(x)} .
\end{aligned} \tag{5.28}$$

In ähnlicher Weise wie im Fall (a) ergibt sich dann für den Nettobeitrag

$$\Xi_b^v(\xi) = -2 \left(\int_{-(\xi+l)}^0 \frac{dx}{l} + \int_{-(\xi+l)}^{\xi} \frac{xdx}{l^2} \right) e^{\beta E_c(x)} . \tag{5.29}$$

Den gesamten Nettobeitrag der Senke zum Mittelwert Ξ erhalten wir nun durch Mittelung über die Gitterposition ξ :

$$\Xi^v = \int_{-l}^{-l/2} \frac{d\xi}{l} \Xi_a^v(\xi) + \int_{-l/2}^0 \frac{d\xi}{l} \Xi_b^v(\xi) , \tag{5.30}$$

wobei die Funktionen $\Xi_{a,b}^v(\xi)$ durch die Integrale (5.27) und (5.29) gegeben sind. Durch Transformation der Doppelintegrale in einfache Integrale mittels partieller Integration ergibt sich

$$\Xi^v = - \int_{-l}^l \frac{dx}{l} f_l(x) e^{\beta E_c(x)} , \tag{5.31}$$

wobei der l -abhängige Gewichtungsfaktor $f_l(x)$ durch

$$f_l(x) = \begin{cases} 1 - 2x^2/l^2 & \text{if } |x| < l/2 , \\ 2(|x| - l)^2/l^2 & \text{if } l/2 < |x| < l \end{cases} \tag{5.32}$$

gegeben ist (vgl. Abb. 5.6).

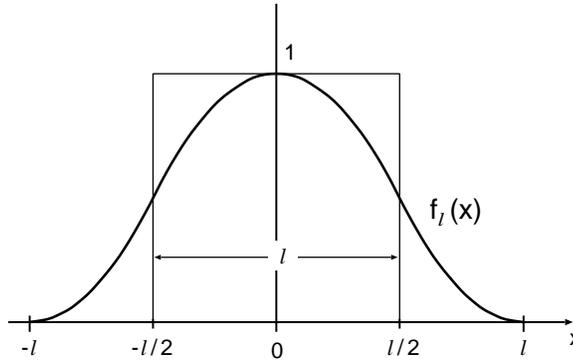


Abbildung 5.6: Der Gewichtungsfaktor $f_l(x)$ [vgl. Gl. (5.32)].

Nach Einführen der ursprünglichen Koordinate x (mit $x = 0$ am linken Ende der Probe) erhalten wir als Nettoeffekt einer Senke bei X_v einen *negativen* Beitrag,

$$-l_v^* = - \int_{X_v-l}^{X_v+l} dx f_l(x - X_v) e^{\beta E_c(x)} , \tag{5.33}$$

der zum Probenintegral S^* zu addieren ist. Dies ist gleichbedeutend mit dem Herausschneiden eines Gebietes aus dem Probenintegral, das um das Minimum bei X_v zentriert ist. Wegen

$$\int_{-l}^l \frac{dx}{l} f_l(x) = 1 \tag{5.34}$$

ist die effektive Länge dieses Gebietes von der Größenordnung l (vgl. Abb. 5.6). Wegen des komplizierten Formalismus werden wir den Fall einer allgemeinen (nicht-symmetrischen) Senke nicht behandeln. Es scheint allerdings plausibel, daß die hier abgeleiteten Formeln näherungsweise auch in jenem Fall angewendet werden können. Statt mit der durch das Minimum des Bandkantenprofils gegebenen Position der Senke müßte mit einer effektiven Position gerechnet werden, die die Asymmetrie der Senke berücksichtigt.

5.3.4 Benachbarte Senken und Kuppen im Bandkantenprofil

Wir betrachten nun eine Senke und eine Kuppe, die so eng benachbart liegen, daß die effektive Breite der Senke kleiner als das Doppelte der mittleren freien Weglänge ist (vgl. Abb. 5.7). Es wird wiederum angenommen, daß die Senke

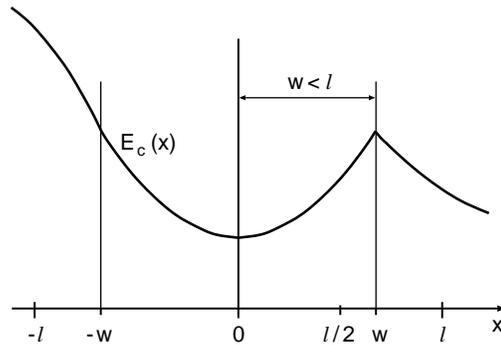


Abbildung 5.7: Mittelung über ballistische Konfigurationen: eng benachbarte Senken und Kuppen im Bandkantenprofil $E_c(x)$.

symmetrisch (mit dem Minimum bei $x = 0$) ist; die Kuppe liegt bei $x = w$ rechts von der Senke. Die Breite der Senke wird definiert als $2w$, und es gilt $w < l$. Ohne Ableitung geben wir hier den (positiven) Nettobeitrag zum Mittelwert Ξ an, der zu einem eng benachbarten Senke-Kuppe-Paar gehört:

$$\Xi^{v/p} = \int_{-w}^w \frac{dx}{l} f_l(x) \left[e^{\beta E_c(w)} - e^{\beta E_c(x)} \right]. \tag{5.35}$$

Ausgedrückt durch die ursprüngliche Koordinate x , wo die Senke bei X_v und die Kuppe bei $X_v + w_v$ liegen, ergibt sich ein Nettobeitrag

$$\lambda_v^* = \int_{X_v - w_v}^{X_v + w_v} dx f_l(x - X_v) \left[e^{\beta E_c(X_v + w_v)} - e^{\beta E_c(x)} \right], \tag{5.36}$$

der zum Probenintegral S^* zu addieren ist. Die Beiträge zum Integranden von der Kuppe, $e^{\beta E_c(X_v+w_v)}$, und von der Senke, $e^{\beta E_c(x)}$, heben sich teilweise gegeneinander auf, so daß die effektive Länge des im Probenintegral hinzugefügten Gebietes (im allgemeinen viel) kleiner ist als die Breite der Senke, $2w_v$. Für $w_v = l$ reduziert sich Gl. (5.36) auf

$$\lambda_v^* = e^{\beta E_c(X_v+l)} l - l_v^*, \quad (5.37)$$

d.h., der Beitrag $\Xi^{v/p}$ zum Mittelwert Ξ ist dann gegeben durch die Summe der Beiträge einer isolierten Kuppe und einer isolierten Senke.

5.4 Strom-Spannungs-Charakteristik

5.4.1 Die universelle Formel

Die bisherige Diskussion war beschränkt auf die Behandlung einzelner Kuppen, Senken und eng benachbarter Senke-Kuppe-Paare im Bandkantenprofil. Wenn das Profil nicht nur eine einzige, sondern eine beliebige Kombination solcher Strukturen aufweist, muß die *Summe* der Nettobeiträge dieser Strukturen zum Probenintegral addiert werden. Der gesamte Mittelwert Ξ für ein allgemeines Bandkantenprofil (vgl. Abb. 5.8) ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} \Xi &= e^{-\beta E_F^0} \left(\frac{S^*}{l} + \sum_{\text{Kuppen}} \Xi^p + \sum_{\text{Senken}} \Xi^v + \sum_{\text{benachb. S/K}} \Xi^{v/p} \right) \\ &= \frac{e^{-\beta E_F^0}}{l} \left(S^* + \sum_p^{\text{Kuppen}} e^{\beta E_c(X_p)} l - \sum_v^{\text{Senken}} l_v^* + \sum_v^{\text{benachb. S/K}} \lambda_v^* \right), \quad (5.38) \end{aligned}$$

wobei das Fermi-Niveau E_F^0 wieder eingeführt worden ist. Das Probenintegral S^* und die Integrale l_v^* und λ_v^* sind definiert in Gl. (5.22), (5.33) bzw. (5.36). Zu den Kuppen rechnen wir auch ein eventuelles Maximum von $E_c(x)$ am linken oder rechten Ende der Probe, wo $E_c(X_p) = E_c(0) = E_c^0$ bzw. $E_c(X_p) = E_c(S) = E_c^S$ ist.

Wir definieren nun eine effektive Länge L durch

$$L = e^{-\beta E_p} \Xi l; \quad (5.39)$$

dabei ist $E_p = E_c^m - E_F^0$ die größte Barrierenhöhe, die bestimmt ist durch den größten Wert, E_c^m , der Maxima des Bandkantenprofils. Mit Hilfe von Gl. (5.38) erhalten wir dann

$$L = \tilde{S} + \sum_p^{\text{Kuppen}} e^{-\beta[E_c^m - E_c(X_p)]} l - \sum_v^{\text{Senken}} \tilde{l}_v + \sum_v^{\text{benachb. S/K}} \tilde{\lambda}_v. \quad (5.40)$$

In diesem Ausdruck ist, in Verallgemeinerung von Gl. (5.12), die reduzierte Probenlänge \tilde{S} eingeführt worden durch

$$\tilde{S} = e^{-\beta E_c^m} S^* = \int_0^S dx e^{-\beta[E_c^m - E_c(x)]}. \quad (5.41)$$

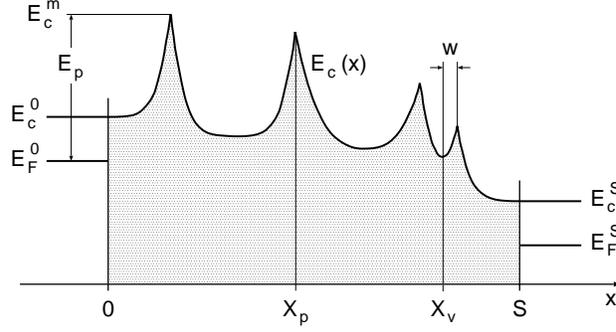


Abbildung 5.8: Ein allgemeines Bandkantenprofil $E_c(x)$.

Ferner haben wir definiert

$$\tilde{l}_v = e^{-\beta E_c^m} l_v^* = \int_{X_v-l}^{X_v+l} dx f_l(x - X_v) e^{-\beta[E_c^m - E_c(x)]} \quad (5.42)$$

und

$$\tilde{\lambda}_v = e^{-\beta E_c^m} \lambda_v^* = \int_{X_v-w_v}^{X_v+w_v} dx f_l(x - X_v) \left\{ e^{-\beta[E_c^m - E_c(X_v+w_v)]} - e^{-\beta[E_c^m - E_c(x)]} \right\}. \quad (5.43)$$

In dem Ausdruck (5.40) für die effektive Länge L können wir einen Term l separieren, der dem größten Wert der Bandkantenmaxima, $E_c(X_p) = E_c^m$, entspricht. Weil in einem allgemeinen Bandkantenprofil die Zahl der Kuppen immer um Eins größer ist als die Zahl der Senken, kann jeder Senke nun eine der ihr benachbarten Kuppen zugeordnet werden. Unter Benutzung von Gl. (5.34) können wir L daher in der Form

$$L = \tilde{S} + l + \tilde{\Lambda} \quad (5.44)$$

schreiben, wobei in dem ‘‘Strukturterm’’

$$\tilde{\Lambda} = \sum_v^{S/K} \tilde{\lambda}_v \quad (5.45)$$

die Summation über alle Senken läuft, unabhängig davon, ob diese isoliert sind oder nicht. Die einzelnen Strukturterme $\tilde{\lambda}_v$ sind durch Gl. (5.43) gegeben. Kuppe und Senke eines mit v indizierten Paares liegen in einem Abstand w_v zueinander. Für $w_v > l$ sind Kuppe und Senke isoliert, und in Gl. (5.43) muß w_v in den Integrationsgrenzen durch l sowie $E_c(X_v + w_v)$ durch $E_c(X_p)$ (wobei X_p die Position der isolierten Kuppe ist) ersetzt werden. Die Terme $\tilde{\lambda}_v$ genügen der Bedingung $\tilde{\lambda}_v < \min(2w_v, l)$ und verschwinden im feld-freien Fall $E_c(x) = \text{const.}$ Daher gilt $\tilde{\Lambda} < S$.

Aus Gln. (5.19) und (5.39) ergibt sich nun die Strom-Spannungs-Charakteristik für nichtentartete Systeme in der Form

$$j = -ev_e N_c e^{-\beta E_p} \frac{l}{L} (1 - e^{-\beta eV}). \quad (5.46)$$

Diese universelle Formel stellt das wesentliche Ergebnis des einheitlichen Modells dar.

Die Eigenschaften der Strom-Spannungs-Charakteristik (5.46) sind bestimmt durch die Barrierenhöhe E_p und durch das Verhältnis l/L . In Gl. (5.44) für die effektive Länge L beschreibt die mittlere freie Weglänge l den ballistischen Beitrag zum Strom. Die übrigen Terme geben ein quantitatives Maß für den Einfluß jenes Teils der Elektronenbewegung über die Probe, der nicht rein ballistisch ist. Ihr Beitrag beläuft sich auf höchstens das Doppelte der Probenlänge S . Die durch Gl. (5.41) gegebene reduzierte Probenlänge \tilde{S} stellt einen Beitrag dar, der das Bandkantenprofil $E_c(x)$ in einer pauschalen Weise charakterisiert; sie hängt nicht explizit von l ab, sondern nur indirekt über das Profil (vgl. unten). Dagegen hängt der durch Gl. (5.45) definierte Strukturterm sowohl von der detaillierten Struktur des Bandkantenprofils als auch explizit von der mittleren freien Weglänge ab und spiegelt somit das Wechselspiel von ballistischem und diffusivem Transport wider. Dieser Term ist ein charakteristisches Merkmal von Formel (5.46).

Es muß hier betont werden, daß die in der effektiven Länge L auftretenden Integrale, und insbesondere die reduzierte Probenlänge \tilde{S} , ihren Ursprung nicht darin haben, daß l als so klein vorausgesetzt ist, daß die Summe über die Intervalle durch ein Integral ersetzt werden könnte. Dies wird im diffusiven Bereich gemacht, wo \tilde{S} ebenfalls auftritt [vgl. Gln. (5.10) und (5.11)]. Die Integrale in L sind vielmehr das Ergebnis der Mittelung über ballistische Konfigurationen für beliebiges l .

5.4.2 Berechnung des Bandkantenprofils

Die Barrierenhöhe E_p und die effektive Länge L sind durch das Bandkantenprofil $E_c(x)$ bestimmt, das eine Lösung der Poisson-Gleichung

$$E_c''(x) = \frac{e}{\epsilon_s}[-en(x) + Q(x)] \quad (5.47)$$

ist. Dabei ist $Q(x)$ die Dichte der raumfesten Ladungen, wie z.B. der Donorionen und der besetzten Trap-Zustände an Korngrenzen. Die Donordichte bestimmt nicht nur das Bandkantenprofil, sondern auch die mittlere freie Weglänge l (ein einfacher Zusammenhang zwischen l und der Donordichte N_d kann mit Hilfe von Gl. (5.8) aus dem analytischen Ausdruck für die N_d -Abhängigkeit der Elektronenmobilität μ , der in Ref. [67] angegeben ist, abgeleitet werden). Es existiert daher ein indirekter Zusammenhang zwischen $E_c(x)$ und l , der eine indirekte l -Abhängigkeit der Barrierenhöhe E_p und auch der reduzierten Probenlänge \tilde{S} und des Strukturterms $\tilde{\Lambda}$ zur Folge hat [wie oben schon erwähnt, hängt der Strukturterm auch explizit von l ab, nämlich über die Gewichtsfunktion f_l und die Integrationsgrenzen $w_v \leq l$ in Gl. (5.43)].

Wenn keine äußere Spannung anliegt, hat die Elektronendichte $n(x)$ ihre Gleichgewichtsform

$$n(x) = N_c e^{-\beta[E_c(x) - E_F^0]} \quad (5.48)$$

und man erhält eine nichtlineare Differentialgleichung für $E_c(x)$. Im Fall einer endlichen äußeren Spannung muß die Poisson-Gleichung (5.47) zusammen mit einer Gleichung für den Strom j gelöst werden. Im diffusiven Grenzfall ist dies Gl. (5.7), die zusammen mit Gl. (5.9) zu dem bekannten Drift-Diffusions-Ausdruck

$$j = \frac{\mu}{\beta} \frac{d}{dx} n(x) + \mu n(x) \frac{d}{dx} E_c(x) \quad (5.49)$$

für den Strom führt. über diese Beziehung ist die Dichte $n(x)$ durch $E_c(x)$ und den konstanten Parameter j bestimmt. Wenn dagegen der Strom in einem Intervall (x_l, x_r) ballistisch ist [vgl. Gln. (5.1)–(5.3)], gehen nur die Gleichgewichtsdichten $n_{l,r}(x_{l,r})$ an den Endpunkten der ballistischen Intervalle in die Beschreibung ein. Es muß dann ein Formalismus entwickelt werden, der es einem erlaubt, aus diesen diskreten Werten der Dichte eine stetige physikalische Dichte abzuleiten, die in die Poisson-Gleichung eingeht. In Ref. [64] wird ein Ansatz für solch einen Formalismus im Rahmen des einheitlichen Transportmodells diskutiert.

5.5 Anwendungen

5.5.1 Einzelne Barriere

Im Fall einer einzelnen Korngrenze oder eines Schottky-Kontaktes weist das Bandkantenprofil eine einzige Kuppe und keine Senken auf, so daß der Strukturterm verschwindet, $\tilde{\Lambda} = 0$, und Gln. (5.44) und (5.46) ergeben

$$j = -ev_e N_c e^{-\beta E_p} \frac{l}{\tilde{S} + l} (1 - e^{-\beta eV}). \quad (5.50)$$

Für eine Korngrenze ist die Barrierenhöhe E_p durch die Differenz des Profilmaximums an der Korngrenze und des Fermi-Niveaus im Volumen des Korns gegeben. Die Barrierenhöhe eines Schottky-Kontaktes ist gleich der Differenz des Profilmaximums im Halbleiter und des Fermi-Niveaus im Metall.

Gleichung (5.50) stimmt formal mit Gl. (5.14) überein, die schon in Ref. [58] angegeben wurde. Allerdings wird diese Gleichung, wie wir schon früher erwähnt haben, in unserem einheitlichen Modell auf andere Weise hergeleitet als in Ref. [58]; der wesentliche Unterschied liegt in der Mittelung über ballistische Konfigurationen im einheitlichen Modell.

Wenn die mittlere freie Weglänge viel größer ist als die reduzierte Probenlänge, $l \gg \tilde{S}$, dominiert der ballistische Mechanismus der thermionischen Emission, und man erhält aus Gl. (5.50), in Übereinstimmung mit Gl. (5.6),

$$j = -ev_e N_c e^{-\beta E_p} (1 - e^{-\beta eV}). \quad (5.51)$$

Im entgegengesetzten Fall, $l \ll \tilde{S}$, ist der Transportmechanismus diffusiv, und aus Gl. (5.50) ergibt sich mit Hilfe von Gl. (5.8)

$$j = -\frac{\mu N_c e^{\beta E_p}}{\beta \tilde{S}} (1 - e^{-\beta eV}). \quad (5.52)$$

Die differentielle Form des diffusiven Grenzfalls erhalten wir aus Gl. (5.15) zusammen mit Gl. (5.9), indem wir den diskreten Index i durch die Koordinate x ersetzen (d.h., $x = il$, $S = Nl$ mit $l \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$),

$$\begin{aligned} j &= \beta e v_e N_c e^{\beta[-E_c(x)+E_F(x)]} [dE_F(x)/dx] \cdot l \\ &= \mu n(x) \frac{d}{dx} E_F(x). \end{aligned} \quad (5.53)$$

Dies stimmt mit Gl. (5.7) überein.

5.5.2 Nullspannungs-Leitwert einer Kette identischer Körner

Aus Gl. (5.46) ergibt sich für den Nullspannungs-Leitwert pro Flächeneinheit, $g = (|j|/V)_{V \rightarrow 0}$,

$$g = \beta e^2 v_e N_c e^{-\beta E_p} \frac{l}{L} = \frac{4\pi e^2 m^*}{\beta h^3} e^{-\beta E_p} \frac{l}{L}. \quad (5.54)$$

Das Bandkantenprofil $E_c(x)$ ist im Fall verschwindender Spannung durch seine Gleichgewichtsform gegeben und läßt sich als Lösung der Poisson-Gleichung (5.47) berechnen.

Wir betrachten nun eine Kette von M identischen Körnern der Länge s (vgl. Abb. 5.9). Das zugehörige Bandkantenprofil hat M identische Kuppen (Korn-grenzen) und $M - 1$ identische Senken. Mit $\tilde{S} = M\tilde{s}$ erhalten wir dann aus

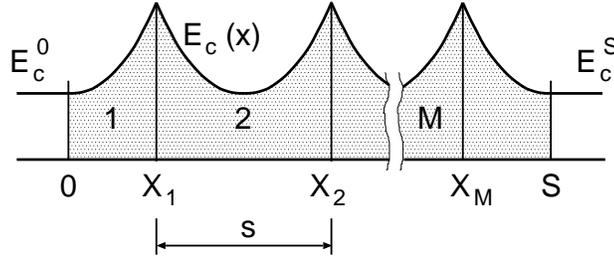


Abbildung 5.9: Gleichgewichts-Bandkantenprofil $E_c(x)$ für eine Kette von M identischen Körnern der Länge s , die eine Probe der Gesamtlänge S bilden.

Gl. (5.44)

$$L = M\tilde{s} + l + (M - 1)\tilde{\lambda}. \quad (5.55)$$

Wie wir schon früher erwähnt haben, existiert eine indirekte Abhängigkeit des Bandkantenprofils $E_c(x)$, und damit auch der Barrierenhöhe E_p , der reduzierten Kornlänge \tilde{s} und des Strukturterms für ein Korn, $\tilde{\lambda}$, von der mittleren freien Weglänge l über deren Zusammenhang mit der Donordichte. Die l -Abhängigkeit der Barrierenhöhe kann abgelesen werden aus der l -Abhängigkeit der Leitfähigkeit g für den Fall eines *einzelnen* Kornes im ballistischen Bereich, für den $L = l$

in Gl. (5.54) ist (d.h., aus dem Negativen der Steigung der mit TE bezeichneten Kurve in Abb. 10 weiter unten). Der Term l in Gl. (5.55) stellt den ballistischen Beitrag zum Strom dar. Im Grenzfall rein ballistischer Bewegung, $l \gg 2Ms$, ist von den Barrieren der Kette effektiv nur eine (die “vorderste”) von Bedeutung, weil diese Barriere alle anderen “abschattet” (vgl. auch die Diskussion in Abschn. II von Ref. [68]).

Zum Zweck der Illustration betrachten wir zwei Silizium-Proben mit Kornlängen $s = 20$ nm bzw. $s = 100$ nm, die repräsentativ für mikrokristallines bzw. polykristallines Material sind. An Stelle des Nullspannungs-Leitwertes g führen wir die Nullspannungs-Leitfähigkeit σ , definiert als Produkt aus Leitwert und Probenlänge, ein:

$$\sigma = gS = gMs \quad (5.56)$$

(im diffusiven Grenzfall ist σ unabhängig von der Anzahl der Körner M). Wir haben die Leitfähigkeit bei der Temperatur $T = 300$ K mit Hilfe von Gln. (5.54) und (5.55) als Funktion der Donordichte N_d berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.10 als Funktion der *mittleren freien Weglänge* l dargestellt, wobei der in Ref. [67] angegebene Zusammenhang zwischen l und N_d benutzt wurde. Die rein diffusive Leitfähigkeit und die rein ballistische Leitfähigkeit für ein einzelnes Korn werden ebenfalls gezeigt (vgl. auch Ref. [69]). Die Resultate in Abb. 5.10 demonstrieren, daß die Leitfähigkeiten des einheitlichen Modells beträchtlich von den Grenzfällen abweichen können. Weiterhin stellt sich heraus, daß im einheitlichen Modell die Zahl der Körner einen erheblichen Einfluß auf die Leitfähigkeit haben kann.

Um ein besseres Verständnis der in Abb. 5.10 gezeigten Ergebnisse zu erreichen, zeigen wir in Abb. 5.11 die l -Abhängigkeit des Verhältnisses

$$\frac{Ml}{L} = \frac{l}{\tilde{s} + l/M + [(M-1)/M]\tilde{\lambda}} \quad (5.57)$$

Da der dominierende Effekt der Barrierenhöhe, der für den steilen Abfall von σ als Funktion von l verantwortlich ist, in diesem Verhältnis nicht enthalten ist, ist dieses besser geeignet, den Einfluß des Transportmechanismus allein zu veranschaulichen. Weil für ein einzelnes Korn im ballistischen Bereich (thermionische Emission) $Ml/L = 1$ gilt, ist das Verhältnis (5.57) gleich dem Faktor, um den sich die Leitfähigkeit des einheitlichen Modells von der des ballistischen Grenzfalles für ein Korn unterscheidet.

Das Verhalten der effektiven Länge L als Funktion von l läßt sich mit Hilfe des Verhaltens ihrer Komponenten \tilde{s} und $\tilde{\lambda}$ verstehen, deren l -Abhängigkeit in Abb. 5.12 dargestellt ist. Es zeigt sich, daß die Minima in der reduzierten Kornlänge \tilde{s} und das Annähern des Strukturterms $\tilde{\lambda}$ an den Wert l zusammenhängen mit Maxima in der Höhe der Korngrenzenbarriere, die bei $l \approx 25$ nm für den Fall von Abb. 5.12a und bei $l \approx 60$ nm für den Fall von Abb. 5.12b auftreten (vgl. Abb. 3 in Ref. [69]).

Für die Kornlänge $s = 20$ nm (vgl. Abb. 5.12a) sind sowohl \tilde{s} als auch $\tilde{\lambda}$ im allgemeinen viel kleiner als l . Für ein einzelnes Korn ($M = 1$) ist der Transport

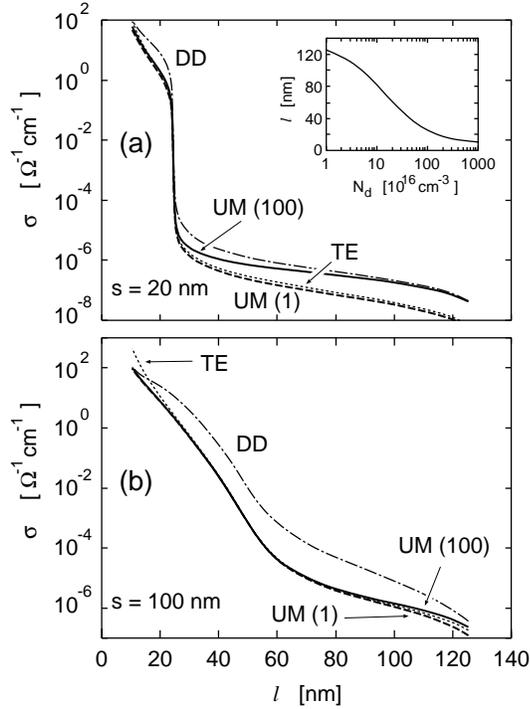


Abbildung 5.10: Nullspannungs-Leitfähigkeit σ für Silizium-Proben mit (a) Kornlänge $s = 20$ nm und (b) Kornlänge $s = 100$ nm, aufgetragen als Funktion der mittleren freien Weglänge l für Temperatur $T = 300$ K, Dichte der Trap-Zustände $N_t = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ und ein einzelnes Trap-Niveau bei 0.56 eV oberhalb der Valenzbandkante. UM(1): einheitliches Modell für ein einzelnes Korn ($M = 1$); UM(100): einheitliches Modell für eine Kette von 100 Körnern ($M = 100$); DD: Drift-Diffusions-Modell; TE: ballistisches Modell (thermionische Emission). Rechts oben in (a) ist der Zusammenhang zwischen l und der Donordichte N_d bei $T = 300$ K gezeigt, der sich aus dem in Ref. [67] angegebenen analytischen Ausdruck für die Elektronenmobilität ergibt.

daher ballistisch, $l/L \approx 1$ (vgl. Abbn. 5.11a und 5.10a). Für $M = 100$ wird der ballistische Grenzfall dagegen erst erreicht werden, wenn $l \approx 100s \approx 2 \mu\text{m}$ ist. In dem in den Abbildungen dargestellten l -Bereich kann der Term $l/100$ gegenüber den anderen Termen im Nenner der rechten Seite von Gl. (5.57) vernachlässigt werden, so daß $Ml/L \approx l/(\tilde{s} + \tilde{\lambda})$ gilt. Für $l < 50$ nm sind \tilde{s} und $\tilde{\lambda}$ von vergleichbarer Größe, d.h., der Transportmechanismus ist von gemischtem Charakter. Für $l > 50$ nm ist $\tilde{s} \gg \tilde{\lambda}$, so daß der diffusive Mechanismus dominiert. Es zeigt sich hier, daß der für ein einzelnes Korn geltende Transportmechanismus sich nicht ohne weiteres auf die gesamte mikrokristalline Probe überträgt. Letztere muß als ganzes betrachtet werden; es gibt dann keine kornspezifische Leitfähigkeit. Es sei bemerkt, daß die Summe der Terme \tilde{s} und $\tilde{\lambda}$ in Abb. 5.12a nahezu unabhängig von l und näherungsweise gleich s ($= 20$ nm) ist; dies spiegelt sich auch in dem linearen Anstieg von Ml/L für $M = 100$ in Abb. 5.11a wider. Der Grund dafür liegt darin, daß der Gewichtsfaktor f_i

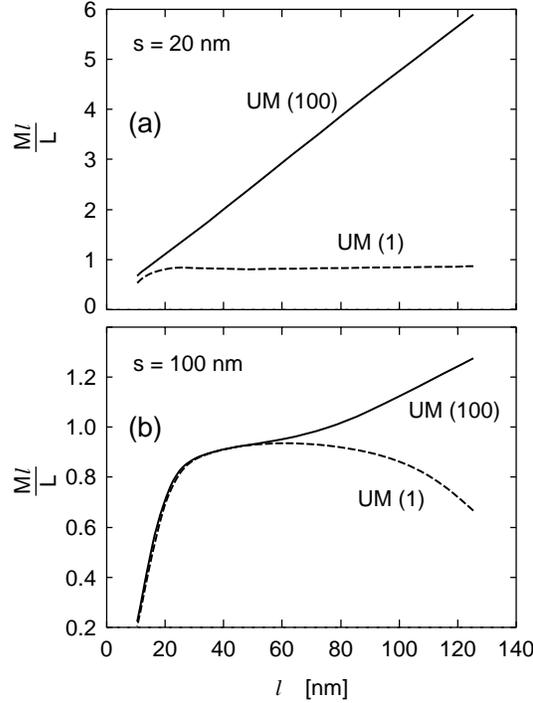


Abbildung 5.11: Das Verhältnis Ml/L als Funktion der mittleren freien Weglänge l für die Fälle von Abb. 5.10.

in dem Ausdruck (5.43) für $\tilde{\lambda}$ in dem betrachteten Parameterbereich effektiv durch Eins ersetzt werden kann.

Für die Kornlänge $s = 100$ nm (vgl. Abb. 5.12b) ist \tilde{s} viel kleiner als l für $l > 20$ nm, und $\tilde{\lambda}$ ist näherungsweise gleich l im Bereich $l = 20 \dots 60$ nm. Während $Ml/L \approx 1$ sowohl für $M = 1$ als auch für $M = 100$ gilt, ist der Transport ballistisch für $M = 1$, aber von gemischtem Charakter für $M = 100$. Für $l < 20$ nm (wo $\tilde{s} > l$ und daher $Ml/L \approx l/\tilde{s}$ ist), wird der Transport diffusiv, wie man auch aus Abb. 5.10b ersieht. Diese Abbildung zeigt, daß im Bereich $l = 20 \dots 100$ nm die Leitfähigkeit des einheitlichen Modells um bis zu einem Faktor 20 von der diffusiven Leitfähigkeit abweicht. Die Tatsache, daß das Verhältnis Ml/L in Abb. 5.11b für l -Werte zwischen 20 und 60 nm unabhängig von M ist, sollte nicht als Indiz für einen diffusiven Transportmechanismus genommen werden; man muß auch die absolute Größe dieses Verhältnisses berücksichtigen. Im einheitlichen Modell ist $Ml/L \approx l/(\tilde{s} + l) \approx 1$, wohingegen für den diffusiven Mechanismus $Ml/L = l/\tilde{s} \approx 5 \dots 20$ (unabhängig von M) ist.

5.6 Diskussion

In diesem Kapitel ist ein einheitliches Modell für den Ladungsträgertransport in Halbleitermaterialien entwickelt worden, aus dem sich die Modelle für rein ballistischen und rein diffusiven Transport als Grenzfälle ergeben. Das wesentliche

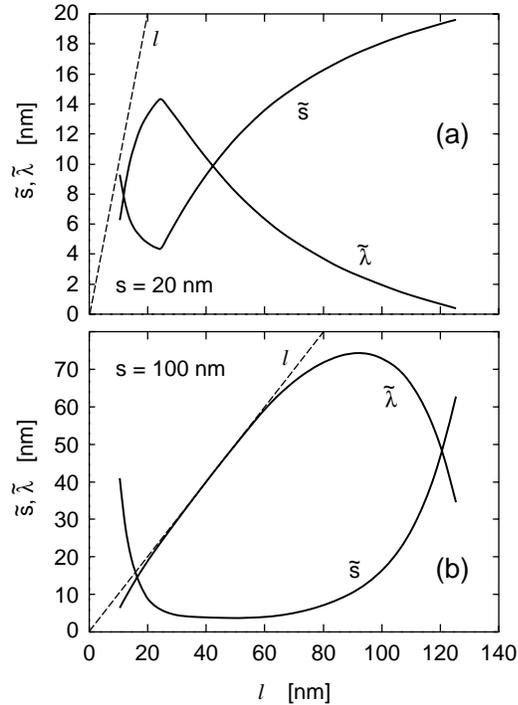


Abbildung 5.12: Reduzierte Kornlänge \tilde{s} und Strukturterm $\tilde{\lambda}$ für ein einzelnes Silizium-Korn als Funktion der mittleren freien Weglänge l für die Fälle von Abb. 5.10.

Element des einheitlichen Modells besteht in der Mittelung über zufallsverteilte ballistische Konfigurationen, die die Probenlänge überdecken. Als wesentliches Ergebnis haben wir eine universelle Formel für die Strom-Spannungs-Charakteristik nichtentarteter Systeme erhalten, in der das Wechselspiel von ballistischem und diffusivem Transportmechanismus direkt sichtbar ist.

Im Rahmen von numerischen Rechnungen für mikro- bzw. polykristallines Silizium haben wir Gleichgewichts-Bandkantenprofile bestimmt und daraus die Nullspannungs-Leitfähigkeit des einheitlichen Modells für Ketten identischer Körner berechnet. Die Ergebnisse zeigen deutliche Abweichungen von denen der rein ballistischen und rein diffusiven Modelle. Ferner hängt die Leitfähigkeit des einheitlichen Modells empfindlich von der Zahl der Körner in der Probe ab.

Um bei Anwendungen des einheitlichen Modells in der Photovoltaik den Effekt der Beleuchtung zu berücksichtigen, ist eine selbst-konsistente Berechnung von Nichtgleichgewichts-Bandkantenprofilen für Elektronen und Löcher unter Einbeziehung der Mittelung über ballistische Konfigurationen in den Ladungsträgerdichten nötig. Dies bedeutet ein extrem kompliziertes numerisches Problem. Ein einfacherer Weg, um den Effekt von Beleuchtung im einheitlichen Modell (näherungsweise) zu untersuchen, kann darin bestehen, daß man Nichtgleichgewichts-Bandkantenprofile für Elektronen und Löcher im Drift-Diffusions-Modell

ausrechnet. Diese Profile können benutzt werden, um *effektive* Leitfähigkeiten für Elektronen und Löcher mit Hilfe der Formeln des einheitlichen Modells zu bestimmen.

Das hier formulierte einheitliche Modell ist auf eine eindimensionale Beschreibung beschränkt. Eine Verallgemeinerung auf mehrere Dimensionen dürfte mit sehr großen Aufwand verbunden sein, wenn auch die wesentlichen Resultate erhalten bleiben sollten. Einfacher zu untersuchen sein wird z.B. die Frage, ob quantenmechanisches Tunneln bei der Ladungsträgerbewegung innerhalb der ballistischen Intervalle eine Rolle spielt.