Zur Elektronen—Defektelektronen-Wechselwirkung in nichtpolaren Halbleitern

Von Dieter Dorn

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Technischen Hochschule Braunschweig

(Z. Naturforschg. **11 a**, 383—386 [1956]; eingegangen am 14. März 1956)

Nach Morin und Maita wird die Beweglichkeit der Ladungsträger in nichtpolaren Halbleitern bei hohen Temperaturen außer durch die thermische Gitterstreuung auch noch durch Wechselwirkungen zwischen Elektronen und Defektelektronen beeinflußt. Unter der Annahme, daß die thermische Gitterstreuung dominierend ist, wird die Elektronen—Defektelektronen-Wechselwirkung in einer Störungsrechnung ermittelt, wobei zwischen den Ladungsträgern ein abgeschirmtes Coulomb-Potential angenommen wird. Es werden Ausdrücke für die Anteile der beiden Ladungsträgerarten am Gesamtstrom angegeben und diskutiert.

Von Morin und Maita [1] wurden Messungen der elektrischen Leitfähigkeit von eigenleitendem Germanium veröffentlicht, die darauf schließen lassen, daß die Beweglichkeit der Ladungsträger bei hohen Temperaturen außer durch die thermische Gitterstreuung auch noch durch die Wechselwirkungen zwischen den Ladungsträgern beeinflußt wird. Wie aus der Gastheorie bekannt ist, brauchen hierbei lediglich Stöße zwischen Elektronen und Defektelektronen betrachtet zu werden, da Stöße zwischen gleichartigen Teilchen keine Änderung des Gesamtimpulses bewirken, also auch keinen wesentlichen Einfluß auf die Leitfähigkeit haben (vgl. Debye und Conwell [2]).

Die große Ähnlichkeit der Elektronen – Defektelektronen-Wechselwirkung mit der Streuung von Elektronen an ionisierten Störstellen veranlaßte Morin und Maita, diesen Einfluß durch eine modifizierte Brooks-Herring-Formel zu erfassen. Hierzu ersetzten sie die Dichte der ionisierten Störstellen durch die mittlere Ladungsträgerdichte und die Elektronenmasse durch die reduzierte Masse der Ladungsträger. Ein Vergleich der so erhaltenen Formel mit den gemessenen Daten ergab gute Übereinstimmung.

Im folgenden soll die Streuung der Elektronen an den Defektelektronen und umgekehrt unter der Voraussetzung bestimmt werden, daß die thermische Gitterstreuung dominierend ist und demgemäß die Elektronen – Defektelektronen-Wechselwirkung als Störung aufgefaßt werden kann. Eine spätere Verallgemeinerung der Rechnung auf den Fall, daß der Einfluß beider Streumechanismen von gleicher Größenordnung ist, kann durch Anwendung eines Variationsprinzips durchgeführt werden. In der vorliegenden Arbeit wurde hierauf verzichtet.

Zur Vereinfachung der Rechnung müssen wir uns auf den Gültigkeitsbereich der klassischen Statistik beschränken. Hierdurch vermeiden wir Schwierigkeiten, die bei der entsprechenden Rechnung von Baber [3] für Metalle auftraten.

In den beiden Boltzmann-Gleichungen für die Verteilungsfunktionen f_1 und f_2 der Elektronen und Defektelektronen berücksichtigen wir die Elektronen – Defektelektronen-Wechselwirkung neben der thermischen Gitterstreuung in Form zweier Störglieder, die in 1. Näherung vernachlässigt werden. Diese als klein vorausgesetzten Störglieder entnehmen wir den analogen Rechnungen der Gastheorie (vgl. Chapman und Cowling [4], §§ 3.5 und 17.2) und ersetzen die darin auftretenden Verteilungsfunktionen durch die aus den Boltzmann-Gleichungen ermittelten 1. Näherungen.

Die Wechselwirkungen zwischen den Ladungsträgern beschreiben wir durch ein abgeschirmtes Coulomb-Potential der Form $(-e/\varepsilon r) \exp(-q r)$. Die Abschirmungskonstante q läßt sich mit Hilfe einer Poisson-Gleichung bestimmen, wobei wir uns an die analogen Überlegungen von Dingle [5] und Mansfield [6] für die Streuung von Elektronen an ionisierten Störstellen halten.

[1] F. J. Morin u. J. P. Maita, Phys. Rev. **94**, 1525 [1954].
[2] P. P. Debye u. E. M. Conwell, Phys. Rev. **93**, 693 [1954].
[3] W. G. Baber, Proc. Roy. Soc., Lond. A **158**, 383 [1937].
[4] S. Chapman u. T. G. Cowling, The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases, Cambridge University Press, London 1953.
[5] R. B. Dingle, Phil. Mag. **46**, 831 [1955].
[6] R. Mansfield, Proc. Phys. Soc., Lond. B **69**, 76 [1956].

1. Bestimmung der Wechselwirkungsintegrale

Alle auf die Leitungselektronen bzw. das Leitfähigkeitsband bezogenen Größen werden fortan mit dem Index 1 gekennzeichnet, während alle auf Defektelektronen bzw. das Valenzband bezogenen Größen den Index 2 erhalten. $-e$ ist die Ladung eines Elektrons und m_1 dessen scheinbare Masse.

Wir nehmen ein elektrisches Feld in x-Richtung an und führen eine Stoßzeit τ_1 ein, welche die Streuung der Elektronen an den thermischen Gitterschwingungen beschreibt. Die BOLTZMANN-Gleichung für die Verteilungsfunktion f_1 der Elektronen lautet dann unter Benutzung des LORENTZschen Ansatzes

$$-\frac{e\,F_x}{m_1}\,\frac{\partial f_{10}}{\partial v_{1x}} = -\frac{f_1-f_{10}}{\tau_1} + \left(\frac{\partial_e f_1}{\partial t}\right)_2. \tag{1}$$

Hierbei wurde in üblicher Weise auf der linken Seite der BOLTZMANN-Gleichung die Verteilungsfunktion f_1 der Elektronen durch die ungestörte BOLTZMANN-Funktion f_{10} ersetzt, die wir in der Form benutzen

$$f_{10} = \frac{n_1}{2}\left(\frac{h^2}{2\,\pi\,m_1\,k\,T}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{m_1\,v_1^2}{2\,k\,T}\right),$$

wo $v_1 = |\mathfrak{v}_1|$ und v_{1x} die x-Komponente von $\mathfrak{v}_1$ ist. n_1 ist die Dichte der Elektronen im Leitfähigkeitsband.

Das Störglied in Gl. (1) beschreibt die zeitliche Änderung der Verteilungsfunktion f_1 der Elektronen infolge von Zusammenstößen mit Defektelektronen. Multipliziert mit dem Volumenelement des Phasenraumes

$$\mathrm{d}\Phi_1 = (m_1/h)^3\,\mathrm{d}\mathfrak{v}_1 = (m_1/h)^3\,\mathrm{d}v_{1x}\,\mathrm{d}v_{1y}\,\mathrm{d}v_{1z}$$

ist es gleich der Differenz der Zahl von Elektronen, die in der Zeit $\mathrm{d}t$ infolge von Zusammenstößen mit Defektelektronen in $\mathrm{d}\Phi_1$ gelangen und es verlassen.

Die analogen Überlegungen der Gastheorie (vgl. CHAPMAN und COWLING [4], § 17.2) liefern hierfür unter Berücksichtigung der Quantentheorie

$$\left(\frac{\partial_e f_1}{\partial t}\right) = 2\left(\frac{m_2}{h}\right)^3 \cdot \iiint (f_1'\,f_2' - f_1\,f_2)\;\alpha_{12}(v_\mathrm{r},\chi)\,\sin\chi\,\mathrm{d}\chi\,\mathrm{d}\varepsilon\,\mathrm{d}\mathfrak{v}_2\,. \tag{2}$$

Hierin ist $v_\mathrm{r} = |\mathfrak{v}_2 - \mathfrak{v}_1|$ der Betrag der Relativgeschwindigkeit zwischen zwei betrachteten Teilchen und χ der Ablenkwinkel der Relativgeschwindigkeit. ε ist ein weiterer Polarwinkel zur Festlegung von $\mathfrak{v}_\mathrm{r}'$ gegenüber $\mathfrak{v}_\mathrm{r}$, wobei sich $\mathfrak{v}_\mathrm{r}'$ und alle anderen gestrichenen Größen auf Zustände nach dem Stoß beziehen.

Die der Gl. (1) entsprechende BOLTZMANN-Gleichung für die Verteilungsfunktion f_2 der Defektelektronen lautet

$$\frac{e\,F_x}{m_2}\,\frac{\partial f_{20}}{\partial v_{2x}} = -\frac{f_2-f_{20}}{\tau_2} + \left(\frac{\partial_e f_2}{\partial t}\right)_1. \tag{3}$$

Das Störglied ist analog zu Gl. (2) gebaut.

Wie schon eingangs betont wurde, soll die Elektronen – Defektelektronen-Wechselwirkung gegenüber der thermischen Gitterstreuung als Störung aufgefaßt werden. Wir können daher in den Integranden der Wechselwirkungsintegrale [z. B. Gl. (2)] die Verteilungsfunktionen durch die 1. Näherungen ersetzen, die wir aus den BOLTZMANN-Gleichungen (1) und (3) erhalten, wenn wir in ihnen die Wechselwirkungsintegrale vernachlässigen. Als weitere Vereinfachung führen wir konstante mittlere Stoßzeiten $\bar\tau_1$ und $\bar\tau_2$ für die thermische Gitterstreuung ein, die wir so wählen, daß sich die Ausdrücke für die elektrische Leitfähigkeit in 1. Näherung reproduzieren, also

$$\bar\tau_1 = \tfrac{1}{2}\,\alpha_1\,(h^2/2\,\pi\,m_1\,k\,T)^{3/2}, \tag{4}$$

und ein analoger Ausdruck für $\bar\tau_2$. α_1 und α_2 sind Abkürzungen, die außer universellen Konstanten das aus der BLOCHschen Theorie her bekannte Wechselwirkungsintegral C [vgl. SOMMERFELD und BETHE [7], Gl. (34.30)] enthalten. Beide Größen hängen nicht von der Temperatur T und den scheinbaren Massen m_1 und m_2 ab.

Unter diesen Annahmen wird unter Berücksichtigung des Energiesatzes

$$f_1'\,f_2' - f_1\,f_2 = f_{10}\,f_{20}\,\frac{e\,F_x}{k\,T}\,[\bar\tau_2(v_{2x}' - v_{2x}) - \bar\tau_1(v_{1x}' - v_{1x})].$$

Den Zusammenhang zwischen den Geschwindigkeitskomponenten v_{1x}' und v_{2x}' nach dem Stoß und den Geschwindigkeitskomponenten der Stoßpartner vor dem Stoß liefert eine elementare Betrachtung des Stoßvorganges. Man erhält

$$m_1(v_{1x}' - v_{1x}) = -m_2(v_{2x}' - v_{2x}) = m_\mathrm{red}\,[v_{\mathrm{r}x}(1-\cos\varepsilon) - \sqrt{v_\mathrm{r}^2 - v_{\mathrm{r}x}^2}\,\sin\chi\,\cos\varepsilon].$$

m_red ist die reduzierte scheinbare Masse der Ladungsträger.

Bei der Integration über ε fallen die zu $\cos\varepsilon$ proportionalen Glieder weg, während sich für die übrigen ein Faktor $2\,\pi$ ergibt.

[7] A. SOMMERFELD u. H. A. BETHE, Handbuch der Physik, Bd. 24/II, Springer, Berlin 1933.

Für $\alpha_{12}(v_r, \chi)$ übernehmen wir die WENTZELsche Streuformel in etwas abgewandelter Form

$$\alpha_{12}(v_r, \chi) = v_r \left[\frac{e^2/\varepsilon}{m_{red}\, v_r^2 (1-\cos\chi) + \gamma^2} \right]^2, \qquad (5)$$

wo $\gamma^2 = q_1^2\, h^2/(8\,\pi^2\, m_{red})$. q_1 ist die Abschirmungskonstante für die Abschirmung der Defektelektronen durch die sie umgebenden Elektronen. Ihre Bestimmung durch Lösung einer POISSON-Gleichung muß in analoger Weise wie bei MANSFIELD [6] u. a. für die Streuung der Ladungsträger an ionisierten Störstellen erfolgen. Wir übernehmen das Ergebnis für den klassischen Grenzfall

$$q_1^2 = (4\,\pi\, e^2/\varepsilon\, k\, T)\; n_2 .$$

n_2 ist die Dichte der Streuzentren, also in unserem Fall die Defektelektronendichte, ε die Dielektriziätskonstante.

Die Integration über den Ablenkwinkel χ läßt sich relativ einfach durchführen und ergibt

$$\int_{\chi=0}^{\pi} \alpha_{12}(v_r, \chi)\,(1-\cos\chi)\,\sin\chi\, d\chi = \frac{e^4}{\varepsilon^2\, m_{red}^2\, v_r^3} \left\{ \log(1+x) - \frac{x}{1+x} \right\}, \qquad (6)$$

wo $x = 16\,\pi^2\, m_{red}^2\, v_r^2/(q_1^2\, h^2)$. Der analoge Ausdruck für die Berechnung des zweiten Wechselwirkungsintegrals ergibt sich formell durch Vertauschung der Indizes 1 und 2. Wir beschränken uns jedoch weiterhin auf die Berechnung des Einflusses der Elektronenstreuung an den Defektelektronen auf die Leitfähigkeit.

2. Übergang zur elektrischen Leitfähigkeit

Die in Gl. (2) verbleibende Integration über $\mathfrak{v}_2$ läßt sich in dieser Form nicht durchführen. Es ist daher zweckmäßig, schon jetzt zur elektrischen Leitfähigkeit überzugehen, wodurch noch eine Integration über $\mathfrak{v}_1$ hinzukommt. Der Beitrag der Elektronen zur Leitfähigkeit ist

$$\sigma_1 = -\frac{2\,e}{F_x} \left(\frac{m_1}{h}\right)^3 \iiint (f_1 - f_{10})\, v_{1x}\, d\mathfrak{v}_1 .$$

Für die Verteilungsfunktion setzen wir den sich aus der BOLTZMANN-Gleichung (1) ergebenden Wert ein und benutzen an Stelle der Stoßzeit τ_1 wieder den konstanten mittleren Wert $\bar{\tau}_1$ von Gleichung (4). Gehen wir nun zu Relativ- und Schwerpunktsgeschwindigkeiten $\mathfrak{v}_s$ und $\mathfrak{v}_r$ über, so läßt sich die Integration über $\mathfrak{v}_s$ sofort durchführen. Die verbleibende Integration über $\mathfrak{v}_r$ ist etwas schwieriger, jedoch ebenfalls exakt möglich, da in diesem Fall die Funktion $f(x)$, die in der geschweiften Klammer von Gl. (6) enthalten ist, im Zähler des Integranden auftritt (vgl. im Gegensatz hierzu MANSFIELD [6], DINGLE [5] u. a.). Die etwas umständliche Rechnung führt auf Exponentialintegrale, soll aber hier übergangen werden.

Zur Vereinfachung führt man zweckmäßigerweise die Beweglichkeiten der Elektronen und Defektelektronen infolge ihrer Streuung an den thermischen Gitterschwingungen ein. Für Elektronen ist

$$\mu_{L1} = \frac{\alpha_1\, e}{2\, m_1} \left(\frac{h^2}{2\,\pi\, m_1\, k\, T} \right)^{3/2} = \frac{e\,\bar{\tau}_1}{m_1}$$

und analog μ_{L2}.

Hiermit ergibt sich der Beitrag der Elektronen zur Leitfähigkeit unter Berücksichtigung ihrer Wechselwirkung mit den Defektelektronen zu

$$\sigma_1 = n_1\, e\, \mu_{L1} \left\{ 1 - \frac{2^{3/2}\,\pi^{1/2}\, e^3}{3\,\varepsilon^2\,(k\,T)^{3/2}}\, m_{red}^{1/2}\, n_2 (\mu_{L1} + \mu_{L2}) [(1+\beta_1)\, e^{\beta_1}(-1)\, \mathrm{Ei}(-\beta_1) - 1] \right\} \qquad (7)$$

mit der Abkürzung $\quad \beta_1 = (q_1^2\, h^2/32\,\pi^2\, m_{red}\, k\, T) = (h^2\, e^2\, n_2/8\,\pi\,\varepsilon\, m_{red} (k\,T)^2)$.

Als Beitrag der Defektelektronen zur Leitfähigkeit unter Berücksichtigung ihrer Wechselwirkung mit den Elektronen erhält man

$$\sigma_2 = n_2\, e\, \mu_{L2} \left\{ 1 - \frac{2^{3/2}\,\pi^{1/2}\, e^3}{3\,\varepsilon^2\,(k\,T)^{3/2}}\, m_{red}^{1/2}\, n_1 (\mu_{L1} + \mu_{L2}) [(1+\beta_2)\, e^{\beta_2}(-1)\, \mathrm{Ei}(-\beta_2) - 1] \right\} \qquad (8)$$

mit der zu β_1 analogen Abkürzung β_2.

3. Spezialisierung und Anwendung der Ergebnisse

Beide Ausdrücke (7) und (8) lassen sich durch Spezialisierung des Modells auf reine Eigenleitung in einfacher Weise zur Gesamtleitfähigkeit $\sigma = \sigma_1 + \sigma_2$ zusammenfassen, da nun $n_1 = n_2 = n$ und damit $\beta_1 = \beta_2 = \beta$ ist:

$$\sigma = n\, e (\mu_{L1} + \mu_{L2}) \left\{ 1 - \frac{2^{3/2}\,\pi^{1/2}\, e^3}{3\,\varepsilon^2\,(k\,T)^{3/2}}\, m_{red}^{1/2}\, n (\mu_{L1} + \mu_{L2}) [(1+\beta)\, e^{\beta}(-1)\, \mathrm{Ei}(-\beta) - 1] \right\}. \qquad (9)$$

Eine weitere Vereinfachung ergibt sich für den Fall $\beta \ll 1$. Am Beispiel des Germaniums läßt sich zeigen, daß diese Bedingung bis etwa 1000° K recht gut erfüllt ist. Wir können dann die Funktionen in der eckigen Klammer der Gl. (9) entwickeln und erhalten stattdessen

$$\left[\log \frac{1}{\gamma \beta} - 1\right],$$

wo $\gamma = 1{,}781$ die EULER-MASCHERONIsche Konstante ist.

Eine andere Form der obigen Ergebnisse erhalten wir, wenn wir die Wechselwirkungen zwischen Elektronen und Defektelektronen durch Einführen von Beweglichkeiten μ_{12} und μ_{21} beschreiben. Definieren wir Gesamtbeweglichkeiten $\mu_1 = (\sigma_1/n_1\, e) = \mu_{\mathrm{L}1}(1 - \delta_1)$ und $\mu_2 = (\sigma_2/n_2\, e) = \mu_{\mathrm{L}2}(1 - \delta_2)$, so gilt näherungsweise

$$\frac{1}{\mu_1} = \frac{1}{\mu_{\mathrm{L}1}} + \frac{1}{\mu_{12}} \quad \text{und} \quad \frac{1}{\mu_2} = \frac{1}{\mu_{\mathrm{L}2}} + \frac{1}{\mu_{21}}.$$

Daraus folgt für $\delta_1, \delta_2 \ll 1$

$$\frac{1}{\mu_{12}} = \frac{\delta_1}{\mu_{\mathrm{L}1}} \quad \text{und} \quad \frac{1}{\mu_{21}} = \frac{\delta_2}{\mu_{\mathrm{L}2}}.$$

Die δ_1 und δ_2 sind die Korrekturglieder in den geschweiften Klammern der Gln. (7) und (8). Für Eigenleitung wird $\delta_1 = \delta_2$, d. h. die Elektronen- und die Defektelektronenbeweglichkeit werden durch die Berücksichtigung der Elektronen – Defektelektronen-Wechselwirkung beide im selben Verhältnis herabgesetzt.

Im Verlauf der bisherigen Überlegungen wurde stets von der Streuung von Elektronen an Defektelektronen und umgekehrt gesprochen. Diese Spezialisierung ist jedoch in keiner Weise in der Rechnung begründet. Vielmehr können wir die vorliegenden Ergebnisse ohne Änderung auf die Streuung beliebiger Teilchen der Ladung $\pm e$ und der Masse m_1 an anderen Teilchen der Masse m_2 und gleicher oder entgegengesetzter Ladung übertragen. Voraussetzung ist allerdings, daß zwischen ihnen dasselbe Wechselwirkungsgesetz wie oben angenommen werden darf.

Wir können daher z. B. Teilchen 2 als fest im Kristall eingebaute Störstelle betrachten, wozu wir nur $\mu_{\mathrm{L}2} = 0$ und $m_2 = \infty$ zu setzen brauchen. An die Stelle von n_2 tritt dann die Dichte N der ionisierten Störstellen. Das Ergebnis unterscheidet sich von dem von BROOKS und HERRING außer im Logarithmus lediglich durch Zahlenfaktoren der Größenordnung Eins.

Zum Schluß möchte ich Herrn Prof. Dr. M. KOHLER für die Anregung zu dieser Arbeit und zahlreiche wertvolle Diskussionen herzlichst danken.