

Elektronische Eigenschaften von Halbleiteroberflächen und -grenzflächen (1987 – 1991)

Eberhard von Faber

August 2019

Hinweis: Nach einer ausführlichen, verständlichen Einführung in die Thematik fasst dieser Artikel die Ergebnisse meiner Forschungen in den Jahren 1987-1991 zusammen. Ich habe nach meiner Promotion im Jahre 1991 die Profession gewechselt und nie wieder auf dem Gebiet der Physik geschweige denn der theoretischen Festkörperphysik gearbeitet. Das alles liegt für mich also etwa 28 Jahre zurück. Daher bitte ich alle, die Physik studieren, als Physiker arbeiten oder die Gelegenheit haben, sich mit derlei Dingen intensiver zu beschäftigen um Nachsicht bzw. empfehle ihnen, die Original-Paper zu lesen. Ich habe bis heute noch nicht einmal die Zeit gefunden oder investiert, um zu recherchieren, ob meine Theorie positiv rezipiert und z.B. Eingang in die Lehrbücher gefunden hat. Zumindest damals zeichneten diese noch ein zu sehr vereinfachtes bzw. falsches Bild.

Null Formeln: Ich versuche, eine einfache Beschreibung der wichtigsten Ideen meiner Theorie zu geben, ohne eine einzige Formel zu verwenden.

1 Wie elektronische Geräte und Festkörperphysik zusammenhängen

Elektronik ist heutzutage fast überall verbaut. Bei der Konstruktion der elektronischen Bauelemente spielt die elektrische Leitfähigkeit eine entscheidende Rolle. Diese ist für Metalle und auch Halbleiter gut verstanden. Doch irgendwo hören Metalle und Halbleiter räumlich einmal auf. Sie bilden Oberflächen oder grenzen an einen anderen Stoff und bilden Grenzflächen. Oberflächen und Grenzflächen sind Störungen des regulären, unendlich ausgedehnten Kristalls, was zu starken Veränderungen der elektrischen Eigenschaften führt. Diese veränderten elektrischen Eigenschaften bilden die Grundlage für die speziellen Funktionen der vielfältigen elektronischen Bauelemente. Um elektronische Bauelemente mit speziellen Eigenschaften zu konstruieren, muss man verstehen, wie die elektrischen Eigenschaften von den Materialien, Dotierungen (gewollte Verunreinigungen) und der Geometrie abhängen und wie man sie ausnutzen kann. Solche Bauelemente werden zu komplexen Schaltungen kombiniert, die auf einem Chip oder zusammen mit anderen (passiven) Bauelementen auf einer Leiterkarte Platz finden.

Dabei gibt es, grob gesagt, drei verschiedene Disziplinen. Festkörperphysiker versuchen zu verstehen, unter welchen Bedingungen welche elektrischen Eigenschaften entstehen. Daraus entstehen physikalische Gleichungen, die Materialparameter und geometrische Informationen enthalten und aus denen man wichtige elektrische Größen berechnen kann. Ingenieure verwenden solche Gleichungen in Form von Kennlinien, um elektronische Bauelemente zu konstruieren und genau so zu dimensionieren, dass die Bauelemente wie gewünscht funktionieren. Die dritte Disziplin besteht darin, diese Bauelemente mittels aufwendiger chemischer Verfahren, in hohen Stückzahlen mit gleichbleibender Qualität zu produzieren. Dabei wird auch viel experimentiert und manche Bauelemente entstanden mehr aus Erfahrung als aus dem theoretischen Verständnis der Physik. Aber ganz ohne physikalische Theorie geht es nicht.

2 Was passiert an einer Oberfläche oder Grenzfläche?

Physiker stellen sich solche Fragen, wie die in der Überschrift, um Ansätze dafür zu finden, wie sie die „elektronische Struktur“ beschreiben und letztlich in Gleichungen gießen, die die Natur möglichst exakt wiedergeben und es gestatten, die physikalischen Effekte für die Konstruktion von Bauelementen auszunutzen. Dazu verwenden sie sogenannte Gedankenexperimente und anderer bekannte und gut verstandene

Phänomene. Nach langer Arbeit entstehen daraus die oben angesprochenen Gleichungen, die andere Physiker mit Hilfe von Experimenten zu bestätigen oder zu widerlegen versuchen. Auch hier arbeiten beide Disziplinen eng zusammen. Die Theoretiker nutzen Messwerte der Experimentalphysiker, um ihre Ideen zu testen, schlechte Ideen zu verwerfen und zu belastbaren Hypothesen zu kommen. Experimentalphysiker nutzen bestätigte Ideen der Theoretiker, um ihre Messergebnisse grundsätzlich zu erklären, mit Abweichungen auf Unzulänglichkeiten der Theorie hinzuweisen, neue Phänomene aufzuzeigen und natürlich dazu, ihre oft komplexen Experimente aufzubauen und durchzuführen.

Für eine elektrische Leitfähigkeit und später einen Stromfluss benötigt man freie Ladungsträger im Metall bzw. Halbleiter (Elektronen, die nicht an ein Atom gebunden sind). Das sind die Elektronen mit der höchsten Energie. Sie „spüren“ nicht mehr nur die Anziehungskraft eines einzelnen Atomkerns, weil andere Elektronen (niedrigerer Energie) dessen Ladung abgeschirmt („neutralisiert“) haben. Ihr Energieniveau verschmiert wegen der großen Menge der Atome in einem Kristall zu einem Band, das Leitungsband heißt. Bei Metallen ist das Leitungsband immer besetzt, d.h., es gibt immer Elektronen deren Energie groß genug ist, um sich bewegen zu können. Legt man eine Spannung (Potentialunterschied zwischen den Enden des Festkörpers) an, können diese freien Ladungsträger dem Potential folgen, und es fließt ein Strom. Bei Halbleitern müssen Elektronen erst durch Zuführung von Wärmeenergie angeregt werden, um vom Valenzband in das Leitungsband zu gelangen.

Ein gedachtes Elektron im Leitungsband verspürt ein ortsabhängiges Potential durch die ortsveränderliche Ladungsdichte der Atomkerne und der Elektronen. Siehe links und rechts in Abb. 1 (schematische Darstellung). Tief im unendlich gedachten kristallinen Festkörper ist dieses Potential periodisch, weil die Atomkerne regelmäßig angeordnet sind und die sich ergebende Elektronendichte periodisch ist. Für einfachere Darstellungen insbesondere in Abbildungen mittelt man dieses Potential entlang Ebenen (x,y), die senkrecht zur Betrachtungsrichtung (z) liegen. Dadurch werden die Darstellungen und Gleichungen eindimensional. Abb. 1 ist eine solche eindimensionale Darstellung. Auf den Mittelteil der Abb. 1 gehen wir erst später in Kap. 4 ein.

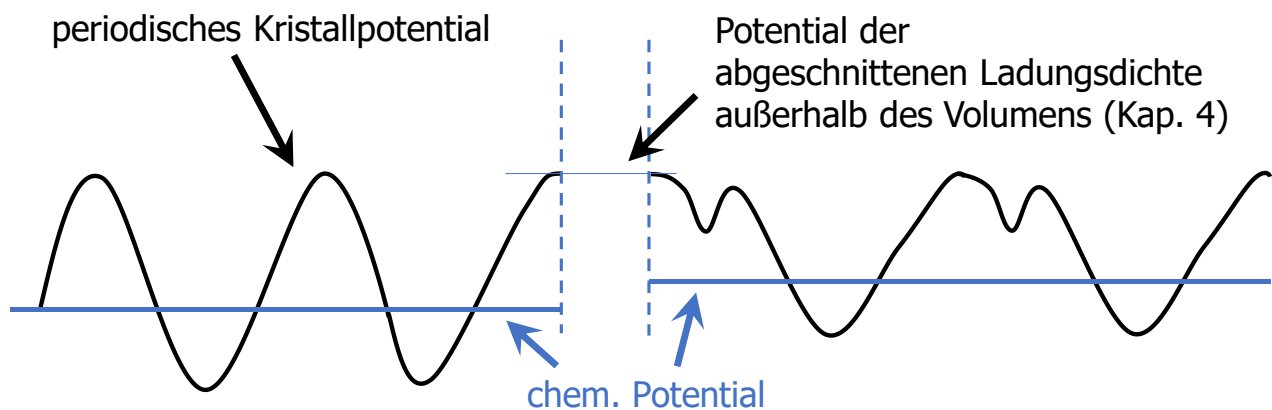


Abb. 1: Potentielle Energie für ein Elektron im Festkörper (links und rechts)

An einer Oberfläche (Festkörper-Vakuum) oder an einer Grenzfläche (Übergang Festkörper 1-Festkörper 2) wird die Periodizität der Atomkerne jäh beendet bzw. gestört. Entsprechend richten sich die Elektronen neu aus (evtl. verschieben sich auch Atome ein wenig), und der Potentialverlauf ändert sich entsprechend. Aber wie? Im Falle einer Grenzschicht kann das Potential z.B. eine Barriere bilden, die wie eine innere Gegenspannung wirkt und den Stromfluss behindert. Das sind zwar genau solche Effekte, die man für den Bau elektronischer Bauelemente benötigt; aber man wüsste natürlich gerne, wie sich die Barrieren bilden und welche Form und Höhe sie haben. Und dazu muss man den Verlauf der Ladungsdichte kennen bzw. die Gesamtmenge der Ladungsverschiebung (Kontaktdipol) und seine räumliche Verteilung.

Dazu gab es seit 1939 (Schottky), besonders aber seit Anfang der 1960er Jahre eine Unmenge von Arbeiten, deren Theorien fast alle recht ungenau mit dem Experiment übereinstimmten oder bestimmte Annahmen zur Grundlage hatten, die mehr oder minder gut belegt waren. In meinen Forschungen im Rahmen meiner Promotion kam ich zu dem Schluss, dass sie alle entweder unhaltbar waren oder Grenzfälle für bestimmte

Situationen darstellten. Das allein ist aber nicht ausreichend in der Wissenschaft. Glücklicherweise ist es mir gelungen, exakte Gleichungen aufzustellen und eine vollständige Theorie vorzustellen, die die meisten anderen als Grenzfälle ausweist. Doch am Ende zählt die innere Schlüssigkeit nicht allein. Doch ich konnte zeigen, dass meine Vorhersagen besser mit dem Experiment übereinstimmen als die anderer Theorien.

3 Was bisher geschah und erste Schlussfolgerungen

3.1 Ein primitives Modell

Um die Potenzialverläufe bzw. deren Veränderung infolge der Kontaktbildung berechnen zu können, muss man die Vorgänge bei der Kontaktbildung verstehen können. Insbesondere geht es dabei um die Änderungen der Ladungsdichten, die für die Potentiale verantwortlich sind. Die Kontaktbildung und die Ladungsverschiebungen kann man sich wie in Abb. 2 dargestellt vorstellen. Links im Bild sieht man zwei Behälter mit einem Reservoir an Flüssigkeit. Der Behälter ist der jeweilige Festkörper; die Flüssigkeit veranschaulicht die Elektronen (bzw. die verschiebbaren Ladungen). Solange beide Behälter (Festkörper) voneinander getrennt sind (Fall a, links in der Abbildung), geschieht nichts. Verbindet man die Behälter (zu verbundenen Röhren, Fall b), so fließt die Flüssigkeit, bis sich ein Gleichgewicht einstellt. Verschieben sich Elektronen (wie die Flüssigkeit im Bild), lädt sich die eine Seite gegenüber der anderen auf, weil die Atome (Ionen) sich gar nicht oder nur wenig bewegen und im „Behälter“ bleiben. Die Folge ist eine „innere Spannung“ bzw. eine charakteristischer Potentialverlauf an der Grenzfläche.

Natürlich hinkt der Vergleich sehr, aber einen wichtigen Schluss kann man daraus ziehen. Die Vorhersage des Gleichgewichtszustandes (b) gelingt nur, wenn man den Flüssigkeitsspiegel beider Behälter (im Fall a) auf einer gemeinsamen Skala messen kann. Natürlich ist das jedem Physiker klar, aber den gemeinsamen Bezugspunkt zu finden, ist bis 1990 nicht gelungen. Das ist Problem Nummer 1.

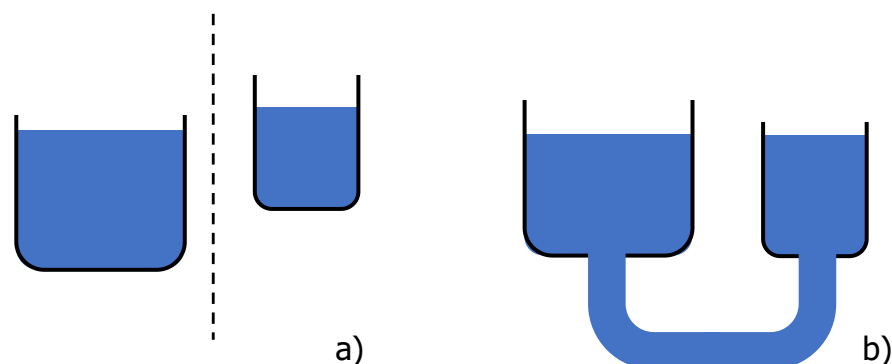


Abb. 2: Verbundene Röhren als „Modell“ für die Ladungsverschiebung bei der Kontaktbildung

Das Problem Nummer 2 ist auch ebenso einfach wie einleuchtend. Wenn Ladungen verschoben werden, ist der dadurch verursachte Potentialunterschied umso größer, je weiter positive und negative Ladung auseinander liegen. Das Problem ergibt sich daraus, dass es bei Halbleitern mikroskopische Effekte (atomare Entfernungen, sogenannte Gap-States an der Grenzfläche) und ausgedehnte Effekte (Debye-Länge, eine Raumladungszone) gibt. Beides ist hinlänglich bekannt. Allerdings betrachten sehr viele Theorien nur das Eine oder das Andere oder vermischen beides in unzulässiger Weise. Welche Effekte dominieren war bis 1990 oft sehr umstritten. In Wirklichkeit hängt beides miteinander zusammen. Bedenkt man dies nicht, kann es in Darstellungen des Typs von Abb. 1 zu dramatisch falschen Interpretationen kommen. Da die Darstellung eine atomare Skala hat, sind winzige Änderungen der Amplituden nicht sichtbar, die sich über größere Entfernungen aber zu beträchtlichen Barrieren aufsummieren können.

Problem Nummer 3 besteht darin, dass immer wieder Eigenschaften von Oberflächen herangezogen werden, um Eigenschaften der Grenzfläche zu berechnen. Das kann nicht gelingen, es sei denn die Oberflächen würden sich bei der Kontaktbildung einfach überlagern. Das ist aber nicht der Fall. Vielmehr unterliegt die Oberflächenbildung genauso komplizierten Mechanismen wie die Kontaktbildung. Beides zu vermischen verkompliziert die Theorie nur. Deshalb müssen Oberflächenbildung und Kontaktbildung getrennt

betrachtet werden, und man muss die beiden Phänomenen zugrunde liegenden Prinzipien verstehen und auf die jeweilige Situation anwenden.

3.2 Ein paar unzulängliche Theorien

Wir werden uns im Folgenden auf Halbleiter-Halbleiter-Kontakte (Hetero-Kontakte; engl. Heterojunction) konzentrieren. Ganz am Ende werde ich kurz darauf eingehen, wie das Ganze auch auf Metall-Halbleiter-Kontakte (Schottky-Kontakte; engl. Schottky contact) und auf Oberflächen (engl. Surface) angewendet werden kann. Die charakteristischen Größen sind Band-Offset, Schottky-Barriere und Austrittsarbeit. Im Folgenden geht es also zunächst um den Band-Offset.

Die meisten Theorien basieren darauf, dass sie, wie anhand des Modells der verbundenen Röhren diskutiert, ein „absolutes“ Bezugsniveau „bestimmen“. Aus der Differenz der Energien der Leitungsbandkanten von Halbleiter 1 und Halbleiter 2 ergibt sich dann der sogenannte Band-Offset. Er ist für die elektrischen Eigenschaften entscheidend.

Theorietyp 1: Eine Theorie, die in allen Lehrbüchern zu finden war, geht bei der Kontaktbildung von zwei Oberflächen des Halbleiters 1 und des Halbleiters 2 aus. Weit außerhalb (im Vakuum) ist das Potential konstant, weil der Halbleiter als Ganzes natürlich neutral ist. Die Differenz zwischen dem Vakuum-Potential und dem (elektro-)chemischen Potential (etwa gleichbedeutend mit der Fermi-Energie) ist gleich der minimalen Energie, die man benötigt, um ein Elektron tief aus dem Inneren herauszulösen und (unendlich) weit vom Halbleiter zu entfernen. Das ist per Definitionen die sogenannte Austrittsarbeit, die messtechnisch bestimmbar ist. Die Differenz der Austrittsarbeiten ergibt die sogenannte Kontaktspannung und ist nach dieser Theorie ein Maß für den Band-Offset, da der Abstand zwischen chemischem Potential und den Bandkanten bekannt ist. Der Begriff Kontaktspannung ist allerdings schon missverständlich, und es ergibt sich auch nicht der richtige Band-Offset. Die Austrittsarbeit enthält nämlich den Potentialunterschied infolge von Ladungsverschiebungen durch den Bruch der periodischen Kristallstruktur an der Oberfläche und den Übergang ins Vakuum. Bei der Kontaktbildung erfolgt kein Übergang ins Vakuum, sondern zu einem anderen Kristall, so dass die Austrittsarbeiten keine wirkliche Hilfe sind. Es sei denn, man könnte Oberflächen vollständig verstehen und berechnen, was aber nicht der Fall ist/war.

Theorietyp 2: Eine andere Theorie setzt statt der Austrittsarbeiten auf die Differenz der Elektronenaffinitäten. Ihre Differenz bestimmt nach dieser Theorie den Band-Offset. Die Elektronenaffinität wird messtechnisch mittels Fotoemission bestimmt. Das herausgelöste Elektron stammt aber aus dem Valenzband direkt an der Oberfläche (und nicht tief aus dem Inneren des Festkörpers). Die Übereinstimmung zwischen berechneten Band-Offsets und dem Experiment ist ebenfalls mäßig. Der Grund liegt darin, dass die Elektronenaffinität auch eine Oberflächengröße ist. Dies ahnend wurden flache Bänder (keine Bandverbiegung) für die vermessenen Oberflächen gefordert. Doch die Bandverbiegung ist nicht das Problem, sondern die Oberflächenzustände. Zwei Oberflächen überlagern sich eben nicht einfach, wenn eine Grenzfläche zwischen zwei Halbleitern entsteht.

Theorietyp 3: Schon im ersten Beispiel wurde das chemische Potential bzw. die Fermi-Energie verwendet. Sie ist diejenige Energie, bis zu der die Elektronenzustände aufgefüllt sind. Dies gilt beim Metall buchstäblich und auch Temperaturunterschiede ändern daran nur äußerst wenig (Größenordnung kT). Bei Halbleitern liegt das Fermi-Niveau in der Regel innerhalb der Energielücke, die Valenzband und Leitungsband trennt. Es muss bei Halbleitern also statistisch interpretiert werden. Tief im Halbleiter hat das Fermi-Niveau einen festen und bekannten Abstand zu den Bandkanten. Im Folgenden wird nur der Begriff chemisches Potential verwendet. Denken wir an das Bild der verbundenen Röhren (Abb. 2), so sollte das chemische Potential bei der Kontaktbildung auf beiden Seiten übereinstimmen. Dann ist es sehr naheliegend, die Bandkanten relativ zum chemischen Potential zu gemessen und deren Differenz als Maß für den Band-Offset zu verwenden. Leider ist die Übereinstimmung mit dem Experiment schlecht (auch wenn man noch Oberflächenzustände hinzunimmt). Das liegt daran, dass es bei dieser rein mikroskopischen Betrachtung keine Bandverbiegungen gibt.

Theorietyp 4: Man kann aber auch ganz mikroskopische Betrachtungen anstellen bzw. solche, die sich als solche herausstellen. Es ist z.B. vorgeschlagen worden, das mittlere Potential in der Mitte zwischen den

Atomen (mean interstitial potential) als Bezugspunkt zu verwenden. Der Band-Offset ist dann die Differenz der darauf bezogenen Bandkanten. Die Idee ist sehr gut, denn an der Grenze der Zelle (einige Atome und die dazugehörigen Elektronen), die sich periodisch im Kristall wiederholt, herrscht Neutralität und das Potential sollte flach verlaufen. (Das ist allerdings nicht der Fall, weswegen ein Mittelwert verwendet wird.) Leider liefert die Theorie nur eine mäßige Übereinstimmung mit dem Experiment. Auch die Annahme eines weiteres mikroskopischen Grenzflächendipols, der durch die Differenz der gemittelten Elektronegativitäten bestimmt wurde, verbessert die schlechte Übereinstimmung mit dem Experiment nicht.

Theorietyp 5: Eine andere rein mikroskopische Theorie betrachtet die sogenannten Gap-States. Im ausgedehnten, ungestörten Halbleiterkristall gibt es zwischen dem Valenz- und dem Leitungsband eine Energielücke (gap). Ihr verdanken Halbleiter ihre charakteristischen Eigenschaften. An einer Oberfläche oder Grenzfläche wird die Struktur aber so gestört, dass es Energiezustände innerhalb der Energielücke gibt. Das sind die Gap-States, die, ausreichende Energie vorausgesetzt, von Elektronen besetzt werden. Die im Übrigen sehr erfolgreiche Theorie argumentiert, dass diese Zustände auf beiden Seiten bis zum Neutralitätsniveau besetzt werden und dass beide Neutralitätsniveaus übereinstimmen sollen, was den Band-Offset bestimmt. Das Neutralitätsniveau liegt eher in der „Mitte“ der Energielücke (bzw. bei spiegelbildlichen Valenz- und Leitungsbandern genau dort). Werden Zustände unterhalb des Neutralitätsniveaus nicht besetzt, führt das zu einem lokalen Ladungsmangel. Werden solche oberhalb besetzt, führt das zu einem lokalen Ladungsüberschuss. Da die beiden Halbleiter an der Grenzschicht zusammenstoßen, können Ladungen ausgetauscht werden. Würden die Neutralitätsniveaus nicht übereinstimmen, so würde ein Ladungsdipol entstehen, der die energetische Lage der beiden Halbleiter (den Band-Offset) wieder zurück in die neutrale Lage verschiebt, so dass die Neutralitätsniveaus übereinstimmen. Der Effekt heißt „Pinning“, und das Neutralitätsniveau spielt eine ähnliche Rolle, wie das chemische Potential bzw. Fermi-Niveau bei Metallen. Aber auch das stimmt nicht.

Diese „Theorietypen“ können als typisch gelten; aber in Wirklichkeit gab und gibt es viele Kombinationen davon, die in einer schier unüberschaubaren Fülle von Arbeiten beschrieben sind.

4 Die neue Theorie

Dann wollen wir einmal versuchen, alles richtig zu machen! Dabei helfen die drei oben aufgeführten Beobachtungen bzw. Probleme (Nummer 1-3), sowie die Diskussion der fünf Typen von Theorien, in deren Bewertung natürlich auch schon die Erkenntnisse der neuen Theorie eingeflossen sind. Die Beobachtungen bzw. Probleme helfen dabei darauf zu achten, was wichtig ist und anders als bei den bisherigen Theorien zu machen ist. Hier eine kurze Zusammenfassung: Problem Nummer 1: Bei der Kontaktbildung und allgemein beim Vergleich zweier Größen (Energien) wird ein gemeinsamer, „absoluter“ Bezugspunkt benötigt. (Bildet man eine Differenz, so müssen die beiden Größen relativ zu dieser dritten Größe gemessen werden.) Problem Nummer 3 erinnert uns daran, dass diese Größe nicht von der Oberflächen- oder Kontaktbildung abhängig sein darf. Für alle Betrachtungen wird eine Aufspaltung in einen Volumenanteil und einen von Oberflächen- bzw. Kontaktbildung abhängigen Anteil benötigt. Dazu passt Problem Nummer 2: Bei der Berechnung von Anteilen, die von der Oberflächen- bzw. Kontaktbildung abhängen, müssen (bei Halbleitern) ausgedehnte und mikroskopische Effekte berücksichtigt werden, auch wenn es sich später herausstellen könnte, dass einer der beiden vernachlässigt werden kann.

4.1 Das benötigte Bezugspotenzial

Bei der Betrachtung der Bildung von Oberflächen und Grenzflächen gehen wir von folgendem Gedankenexperiment aus: In einem ersten Schritt bringen wir den oder die Festkörper in eine Form, dass sie eine Oberfläche bzw. eine Grenzfläche bilden könnten. Aber wir unterbinden jede Form der Verschiebung von Elektronen oder Ionen. Erst im zweiten Schritt geben wir den Startschuss und erlauben, dass sich nun ein Gleichgewichtszustand einstellt, indem sich die vorher festgehaltene Ladungsdichte ändert und innere Spannungen (Potentialunterschiede auf atomarer und weit ausgedehnter Skala) und dergleichen erzeugt.

Es ist klar, dass wir das von uns gesuchte gemeinsame Bezugspotential nur im Schritt 1 finden können. Daraus berechnen wir den „Bedarf“ für den Ausgleich, der in Schritt 2 erfolgt. Die Frage lautet nun: Wie könnte ein Festkörper aussehen, der für eine Oberflächen- oder Kontaktbildung vorbereitet ist, ohne dass es dazu schon gekommen ist? Eigentlich ist die Antwort nicht schwer: Es ist die „abgeschnittene Ladungsdichte“: auf der einen Seite der unversehrte Festkörper mit seiner für den unendlichen Kristall charakteristischen Ladungsverteilung und auf der anderen Seite nichts bzw. das reine Vakuum. Über das Konstrukt der „abgeschnittene Ladungsdichte“ weiß man folgendes. Sie ist periodisch und neutral. Doch damit das Potential weit außerhalb des Festkörpers konstant ist (die Feldstärke verschwindet), muss das erste Moment der angeschnittenen Ladungsdichte ebenfalls verschwinden. Man kann zeigen, dass diese Bedingung auch festlegt, an welcher Position das Abschneiden erfolgt. Das ist ein wichtiges Ergebnis! Wir haben nur Eigenschaften des unendlichen Festkörpers verwendet und erhalten das Potential weit außerhalb des Festkörpers, der für die Oberflächen- bzw. Kontaktbildung vorbereitet ist. Dieses Potential kann man berechnen.

Wir können uns nun endlich dem Mittelteil der Abb. 1 zuwenden. Dort ist das Ergebnis dargestellt. Man sieht das Potential der abgeschnittenen Ladungsdichten (Schritt 1) und den (in Schritt 2) bei der Kontaktbildung auszugleichenden Unterschied der chemischen Potentiale.

4.2 Oberflächen- bzw. Kontaktbildung

Wir wissen weiterhin (siehe auch Theorietyp 3), dass das (elektro-)chemische Potential nach der Kontaktbildung auf beiden Seiten übereinstimmen muss. Deshalb messen wir das gerade ermittelte Potential weit außerhalb der abgeschnittenen Ladungsdichte relativ zum jeweiligen chemischen Potential. Die Differenz der so gemessenen Potentiale weit außerhalb (Schritt 1) ergibt den „Kontaktpotentialunterschied“, den wir Kontaktdipol nennen wollen. Die Änderungen der Ladungsdichten bei der Kontaktbildung (Schritt 2) müssen genau diesen Kontaktdipol erzeugen, damit die chemischen Potentiale der beiden Festkörper in Übereinstimmung kommen. Nur dann ist ein thermodynamisches Gleichgewicht erreicht.

Bei Metallen sind alle Zustände bis zum chemischen Potential mit Elektronen aufgefüllt. Daher ist das chemische Potential selbst ein guter Bezugspunkt, um eine Metalloberfläche oder einen Metall-Halbleiterübergang zu studieren. Letzterer bildet (in der Regel) eine sogenannte Schottky-Barriere aus. Ziel der Theorie ist es deren Höhe zu berechnen.

Bei Halbleitern sind die Zustände nahe dem chemischen Potential nicht besetzt. Deshalb verwendet man anstelle des chemischen Potentials rein rechnerisch besser die Valenzbandkante (tief im Festkörper) als Bezugspunkt. D.h., das Potential weit außerhalb der abgeschnittenen Ladungsdichte wird relativ zur Valenzbandkante und nicht zum chemischen Potential gemessen. Beides unterscheidet sich um einen festen Betrag, der von der Dotierung und der Temperatur abhängt, für einen bestimmten Halbleiter bei bestimmter Temperatur also fix (und immer noch unabhängig von Kontakteigenschaften) ist.

Zu meinem Glück erweist sich das mittlere Potential zwischen den Atomen der Kristallzellen (mean interstitial potential), das in Theorietyp 4 eine wichtige Rolle spielt, als erste Näherung für die Potentiale weit außerhalb der abgeschnittenen Ladungsdichten relativ zur Valenzbandkante im Volumen. Damit konnte ich den Kontaktdipol abschätzen. Denn ohne einen Vergleich mit dem Experiment ist die eleganteste Theorie nichts wert.

4.3 Ladungsumverteilung auf atomarer und ausgedehnter Ebene

Im letzten Abschnitt wurde der gesamte, „benötigte“ Kontaktdipol berechnet. Seine Größe hängt nur von Eigenschaften der ungestörten Festkörper und der bzw. den Orientierungen der Ober- bzw. Grenzflächen ab. Bei Metallen erfolgt der Potential- bzw. Ladungsausgleich vollständig auf atomarer Skala (Bohr-Radius, ca. $0,5 \text{ \AA}$). Der Zusammenhang zwischen Potential und Ladung ist also einfach zu berechnen. Es gibt hier nur einen mikroskopischen Anteil.

Bei Halbleitern gibt es zwei Effekte: die sogenannten Ober- oder Grenzflächenzustände und die Raumladungszone. Um exakte Gleichungen erhalten zu können, kommt es hier erst einmal darauf an, beide Beiträge zu berücksichtigen. Wir betrachten immer noch Energien (Potentiale). Die Ladungen in der

Raumladungszone mögen zwar betragsmäßig gering sein, aber die Ladungen liegen weit auseinander, so dass ihr Beitrag zum Kontaktdipol beträchtlich sein kann. Deshalb ist es so wichtig, stets beide Maßstäbe im Blick zu behalten. Die meisten Energiediagramme in der Literatur berücksichtigen diesen Umstand nicht. Stellt man den Verlauf des Kristallpotentials dar (vgl. Abb. 1), so ist die Bandverbiegung grundsätzlich nicht zu sehen. Hier kann man nur atomar ausgedehnte Dipole erkennen.

Der Zusammenhang zwischen Bandverbiegung (Energiebeitrag) und Gesamtladung in einer Raumladungszone ist einfach und bekannt. Für die Ladung der Ober- bzw. Grenzflächenzustände gibt es ebenfalls Abschätzungen. Hier entsteht ein Dipolanteil durch die Anpassung der Valenzbandzustände beim Halbleiter-Halbleiter-Fall. Es gibt Abschätzungen dafür, doch dieser Anteil kann vernachlässigt werden. Der andere Dipolanteil wird durch die Besetzung- oder Nichtbesetzung der Gap-Zustände erzeugt. Nutzt man ermittelte Werte für die Dichte der Gap-Zustände und ihre effektive Ausdehnung, so kann man den Dipolanteil (für jede Lage des chemischen Potentials) berechnen. Als notwendige Essenz benötigen wir jedoch das Neutralitätsniveau, das in der Regel nicht in der Gap-Mitte liegt.

Zu meinem Glück erweist sich das Neutralitätsniveau aus Theorietyp 5 als sehr gute Näherung. Damit sind alle Größen bekannt um die Ladungsverschiebungen im Halbleiter in Abhängigkeit von der Lage des chemischen Potentials bzw. der Bandkanten berechnen zu können. Natürlich sind das alles Näherungen, aber sie funktionieren sehr gut. – Raumladungszone und Ober- bzw. Grenzflächenzustände (Gap-Zustände) sind nicht unabhängig voneinander. Die Raumladungszone führt zu einer Bandverbiegung und die Bandverbiegung verschiebt das chemische Potential innerhalb der Energielücke zwischen Valenz- und Leitungsband, wodurch die Gap-Zustände entladen oder geladen werden. Das unterstreicht, dass beide Skalen (atomar und ausgedehnt) immer zusammen zu berücksichtigen sind.

4.4 Von den exakten Gleichungen zu überprüfbareren Hypothesen

Bevor man mit Näherungen arbeitet und Werte berechnet, um sie mit dem Experiment zu vergleichen, sollte man versuchen, alles aus den exakten Relationen herauszuholen. An exakten Beziehungen haben wir unter anderem folgendes: Das Potential weit außerhalb der abgeschnittenen Ladungsdichte ist das benötigte Bezugspotential. Für eine gewählte Oberflächenorientierung ist die Abschnide-Ebene eindeutig bestimmt. (Bei komplizierten Festkörpern muss man allenfalls noch wählen, welche Atome die oberste Schicht bilden sollen.) Die Potentiale der beiden Halbleiter weit außerhalb der abgeschnittenen Ladungsdichte müssen übereinstimmen, wenn wir zunächst keine Kontaktbildung und keine Ladungsverschiebungen zulassen. Da nach der Kontaktbildung und der damit verbundenen Ladungsverschiebungen die chemischen Potentiale der beiden Halbleiter übereinstimmen müssen (thermodynamisches Gleichgewicht), muss während der Kontaktbildung ein Kontaktdipol aufgebaut werden, der gleich der Differenz der beiden Potentiale weit außerhalb der abgeschnittenen Ladungsdichte (relativ zum chemischen Potential) ist.

Bei Metallen haben die Ladungsverschiebungen eine atomare Ausdehnung ($0,5 \text{ \AA}$). Bei Halbleitern gibt es zwei Anteile. Die Raumladungszone, die zu einer Bandverbiegung führt, erstreckt sich über die Debye-Länge (einige Hundert \AA). Sie ist etwa 1000-mal so ausgedehnt, wie die Ladungsverschiebung beim Metall. Der zweite Anteil entsteht zum einen durch die Anpassungen der Valenzbandzustände und zum anderen durch die für eine Oberfläche bzw. Grenzfläche charakteristischen Gap-Zustände.

Hat man den treibenden Faktor und die genannten Effekte verstanden, so muss man nun den ausgleichenden Faktor bzw. den Feedback-Mechanismus verstehen. Der Zustand am Kontakt soll stabil sein. Dafür wird eine Rückwirkung benötigt, die eine eventuelle kleine Abweichung zurück in den Ausgangszustand treibt. Für den Halbleiter-Halbleiterkontakt ist dies der folgende. Der gesuchte Band-Offset ist proportional zur Differenz der Bandverbiegungen. Dies kann man sich anhand von Abb. 3 zumindest vorstellen oder nachvollziehen. Wenn nun beide Größen leicht ansteigen würden, dann würden sich die beiden Neutralitätsniveaus vom chemischen Potential entfernen. Das würde dazu führen, dass die Grenzfläche des rechten Halbleiters (2) positiver und die des linken Halbleiters (1) negativer aufgeladen würde. Das würde den mikroskopisch ausgedehnten Grenzflächendipol verringern und bewirken, dass der Band-Offset wieder geringer würde. Das ist der Rückkopplungsmechanismus; den man natürlich anhand von Formeln viel besser verstehen kann.

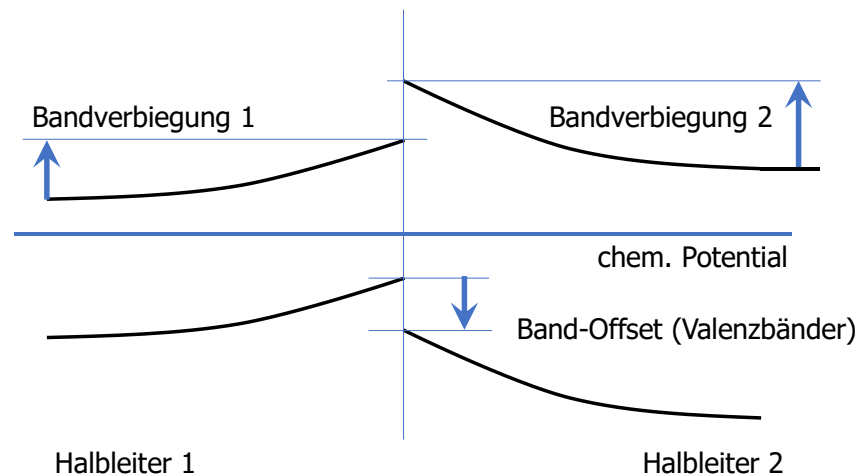


Abb. 3: Energiediagramm eines Halbleiter-Halbleiterkontaktes (Skala: Debye-Länge)

4.5 Weitere Anwendungen

Die Erklärungen haben bisher den Fall eines Kontaktes zwischen zwei verschiedenen Halbleitern in den Vordergrund gestellt. Man spricht von Heterokontakten (engl. Heterojunction). An der Grenzfläche stoßen ganz unterschiedliche Stoffe mit unterschiedlichen Gittern aufeinander. Eine andere Form eines Halbleiter-Halbleiterkontaktes ist der sogenannte Homoübergang. Hier ändert sich an der Grenzfläche lediglich die Dotierung des Halbleiters. Die entwickelten exakten Gleichungen der neuen Theorie sind hier viel einfacher und erklären die Effekte ebenfalls.

Doch man kann die dargestellten Prinzipien und Phänomene auch auf Oberflächen (engl. Surface) und Metall-Halbleiter-Kontakt (engl. Schottky contact) anwenden. Am Anfang stehen die exakten Gleichungen und das Verständnis der Wechselwirkungen. Erst danach kommen Näherungen. So habe ich auch Metall-Halbleiter-Kontakte untersucht und die Schottky-Barriere (engl. Schottky barrier) berechnet. Die Vorhersagen sind auch hier sehr gut. Dies gilt auch für Trends, wann z.B. der Kontakt in einem ohmschen Kontakt ohne Barriere übergeht.

Insgesamt gibt es sehr viele Effekte und je mehr Möglichkeiten (und physikalische Größen) berücksichtigt werden, desto komplexer sind die Gleichungen, so dass es nicht einfach ist, die primären Wirkzusammenhänge zu erkennen. Hier können dann schon Größenabschätzungen helfen.

5 Schlussbemerkung

Meine Arbeit entwickelt die neue Theorie. Sie fasst den Stand der Wissenschaft zusammen und setzt sich kritisch mit einer Vielzahl von Theorien auseinander. Das Literaturverzeichnis umfasst 171 Artikel bzw. Bücher. Die Anzahl der Gleichungen/Formeln beträgt je nach Zählweise zwischen 254 und etwa 300. Die Zusammenfassung am Schluss beschreibt 55 wichtige Ergebnisse in der gegebenen Kürze. Es darf also nicht erwartet werden, dass der vorliegende kurze Artikel der Komplexität des Themas gerecht wird und eine vollständige Darstellung gibt.

Über den Autor

Spätestens nach Erreichen des Teenager-Alters habe ich angefangen, elektronische Geräte zu „basteln“. Anfangs half mein Vater mit Bauplänen, oder ich nutzte Bausätze. Doch schon bald stand die Entwicklung eigener Geräte im Vordergrund. Schon in der 7. Klasse war mir klar, dass ich Elektrotechnik studieren und dann in der Forschung und Entwicklung (F&E) arbeiten wollte. Allerdings hat mich auch die Physik interessiert, so dass ich beides studierte und danach auf dem Gebiet der Theoretischen Physik promovierte. Während meines Studiums baute ich mir einen Computer (Lotus 2000) aus Einzelteilen zusammen und programmierte auch das Betriebssystem. Das hat mir den Job verschafft, wo ich drei Jahre überwiegend am CryptCard-Sicherheitssystem arbeitete, wobei ich zuletzt vor allen Firmen bei dessen Einsatz half. Danach habe ich als Berater und Gutachter für IT-Sicherheit gearbeitet. Ganz zu Anfang dieser Zeit habe ich den DES gebrochen. Heute entwickle ich für einen großen IT-Konzern Methoden, Prozesse und Standards zur Absicherung einer großtechnischen, weit verteilten und komplexen IT-Produktion.

Prof. Dr. Eberhard von Faber