

Kapitel 3

Grundlagen

In diesem Abschnitt werden die physikalischen Grundlagen erläutert, aus denen sich Anforderungen an die η -Solarzelle ableiten. Dazu gehört zunächst die Strahlungseinkopplung in absorbierende Materialien insbesondere unter Berücksichtigung der Streuung. Als Literatur sind zu diesem Thema neben dem Grundlagenwerk [Mie08] insbesondere Veröffentlichungen aus dem Bereich der Solarzellen aus amorphen Silizium, z.B. [Yab82] und der Farbstoffsolarzellen, z.B. [Fer99] zu nennen. Neben optischen Effekten steht die Verringerung der Transportdistanz in der η -Solarzelle im Mittelpunkt, wobei zur tiefergehenden Lektüre auf einschlägige Werke der Halbleiterphysik, z.B. [Sze81, Böe92], verwiesen sei. Neben den optischen und elektrischen Kriterien, die speziell für die Realisierung einer η -Solarzelle berücksichtigt werden müssen, ist allgemein für den Transport von Ladungsträgern über eine Grenzfläche zwischen zwei Halbleitern die Bandanpassung von zentraler Bedeutung. Daher wird im letzten Abschnitt eine Übersicht über die vorliegenden Theorien zur Halbleiter-Heterokontaktbildung gegeben.

3.1 Strahlungseinkopplung in absorbierende Materialien

In herkömmlichen Solarzellen werden vielfach Wege beschritten, um die Einkopplung des Lichts in den Absorber zu maximieren. Dazu werden größtenteils Antireflexschichten verwendet, die teilweise noch mit einer Oberflächenstrukturierung einhergehen. Diese Oberflächenstrukturierung vergrößert den optischen Lichtweg durch den Absorber durch einfache Brechung und Reflexion an Grenzflächen (siehe dazu Abb. 3.1). Die in Abb. 3.1 dargestellte Verlängerung des

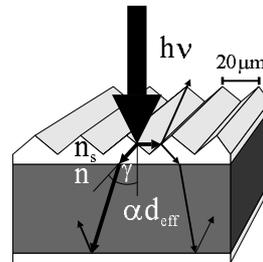


Abb. 3.1: Erhöhung der Absorption durch Einkopplung unter einem Winkel $\neq 90^\circ$.

Lichtweges läßt sich durch geometrische Ansätze optimieren.

Über rein geometrische Überlegungen hinaus geht der Ansatz, die Lichteinkopplung über Streueffekte zu verbessern [Dec83], wie es auch der Ansatz der η -Solarzelle verfolgt. Eine isotrope Streuung an Grenzflächen hängt dabei ganz ent-

scheidend von der charakteristischen Größe der verwendeten Struktur ab [Mie08]. Für Strukturgrößen, die klein gegenüber der Wellenlänge sind, zeigt sich eine starke Wellenlängenabhängigkeit der gestreuten Strahlung I_s :

$$I_s \propto \left(\frac{G}{\lambda}\right)^4 \quad (3.1)$$

G - Durchmesser der streuenden Partikel

Die Streuung in diesem Bereich, in dem die Strukturgrößen klein im Vergleich zur Wellenlänge sind, wird auch als Rayleigh-Streuung bezeichnet.

Die Streuung wird maximal, wenn die Strukturgröße in den Bereich der Wellenlänge ($G \approx \lambda$) kommt. Die Streuung in diesem Bereich wird als Mie-Streuung bezeichnet. Bei der Mie-Streuung kann die Winkelabhängigkeit der gestreuten Strahlung durch einen Lambertschen Strahler mit der Verteilung

$$I \propto |\cos\theta| \quad (3.2)$$

θ - Winkel zwischen einfallendem und reflektiertem Strahl

beschrieben werden¹[Sch85]. Die Streuung erfolgt also im Falle der Mie-Streuung komplett isotrop. Eine solch isotropes Streuverhalten wird in dem Modell von [Yab82] vorausgesetzt, welches das Verhalten der Strahlungseinkopplung in ein Medium mit ideal streuenden Grenzflächen beschreibt. Es wird hier zunächst allgemein vorgestellt, bevor mit Hilfe einer einfachen Struktur eine Abschätzung der Absorptionserhöhung aufgrund von Streueffekten in der η -Solarzelle erfolgt. Ausgegangen wird von einem Medium mit dem Brechungsindex $n(\omega, x)$, das von allen Seiten mit Schwarz-Körperstrahlung beleuchtet wird, wie es in Abb. 3.2 skizziert ist.

Die Verlängerung des optischen Weges läßt sich dann aus Überlegungen zur statistischen Mechanik ableiten: Im elektromagnetischen Gleichgewicht beträgt die elektromagnetische Energie-

¹Die Verteilung der Intensität erfolgt gleichmäßig in alle Raumrichtungen.

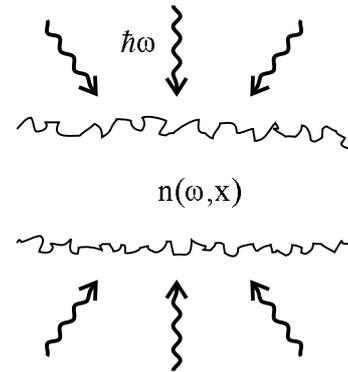


Abb. 3.2: Schicht mit einem ortsabhängigen Brechungsindex $n(\omega, x)$ mit texturierten Oberflächen unter allseitiger Schwarz-Körperstrahlung.

dichte U nach der Planckschen Formel

$$U = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \frac{d\Omega k^2 dk}{(2\pi)^3} \quad (3.3)$$

Für die Energiedichte in einem Medium kann diese Formel einfach adaptiert werden unter Verwendung von $k=n\omega/c$. Zusätzlich kann die Energiedichte in eine Intensität umgewandelt werden, indem Gl. 3.3 mit der Gruppengeschwindigkeit $v_g=d\omega/dk$ multipliziert wird. Man erhält dann:

$$I_{int} \equiv U \cdot v_g = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \frac{d\Omega n(\omega, x)^2 \omega^2}{(2\pi)^3 c^2} d\omega \quad (3.4)$$

Diese Gleichung unterscheidet sich von der Strahlungsintensität des schwarzen Strahlers (ss) nur durch den Faktor n^2 , so daß sich schreiben läßt:

$$I_{int}(\omega, x) = n^2(\omega, x) I_{ext}^{ss}(\omega) \quad (3.5)$$

I_{int} - Intensität im Medium am Orte x
 I_{ext} - einfallende Intensität

Um diese Aussage auf beliebige Strahlung abweichend vom schwarzen Strahler zu verallgemeinern, muß die Bedingung gegeben sein, daß die Lichtstrahlen beim Eintritt in das Medium isotrop gestreut werden und damit jegliche "Erinnerung" an den ursprünglichen Einfallswinkel verloren geht. Nimmt man dann noch an, daß eine ideal weiße Fläche auf der Rückseite die Strahlung

komplett reflektiert², ergibt sich eine Erhöhung der internen Strahlungsintensität I_{int} allgemein zu

$$I_{int}(\omega, x) = 2n^2(\omega, x)I_{ext} \quad (3.6)$$

Das heißt, daß in einer solchen Struktur ein einfallender Lichtstrahl den $2n^2$ -fachen Lichtweg zurücklegt wie in einer planaren Konfiguration, z.B. für TiO_2 mit $n(600\text{nm})=2.5$ ist damit eine maximale Verlängerung des Lichtweges um einen Faktor 12 denkbar. Dies gilt jedoch nur, wenn keine Absorption stattfindet, weder an den streuenden Oberflächen noch im Volumen.

Zur Verdeutlichung der angestellten Überlegungen läßt sich eine Abschätzung für ein einfaches geometrisches Modell annehmen. Dafür geht man davon aus, daß Teilchen eines absorbierenden Materials in ein nichtabsorbierendes, aber ideal streuendes Medium, wie in Abb. 3.3 gezeigt, eingebettet sind.

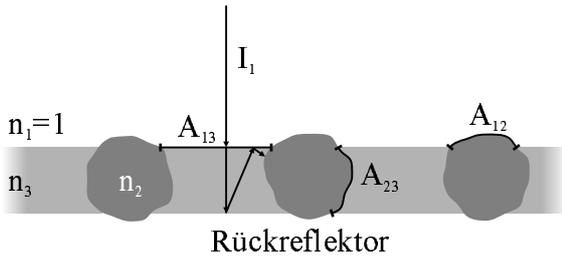


Abb. 3.3: Modell eines absorbierenden Materials mit dem Brechungsindex n_2 , das in eine ideal streuende Trägermatrix mit dem Brechungsindex n_3 eingebettet ist.

Tritt die einfallende Strahlung durch eine Grenzfläche A_{ij} , so erfolgt Transmission nur in einem Kegel erfolgt, der durch den Winkel der Totalreflexion an dieser Grenzfläche definiert wird:

$$\beta_{total} = \arcsin \frac{n_j}{n_i}. \quad (3.7)$$

Die Strahlung, die mit einem Einfallswinkel kleiner als der Winkel der Totalreflexion auf die Grenzfläche trifft, wird reflektiert. Der Durchtrittskegel ist in Abb. 3.4 skizziert.

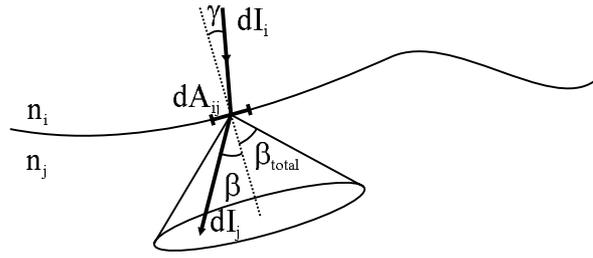


Abb. 3.4: Durchtritt des Lichts durch eine Grenzfläche A_{ij} und Durchtrittskegel aufgrund von Totalreflexion.

Damit läßt sich die Intensität, die durch die Grenzfläche A_{ij} tritt, schreiben als:

$$I_{ij} = 2\pi \int_0^{\beta_{total}} \frac{I_i}{2\pi} T_{ij} \cos\beta \sin\beta d\beta \quad (3.8)$$

Der Einfachheit halber wird angenommen, daß die Transmission T_{ij} unabhängig vom Einfallswinkel ist. Damit läßt sich die Integration ausführen und man erhält unter Verwendung von Gl. 3.7:

$$I_{ij} = I_i \cdot \frac{T_{ij}}{2 \left(\frac{n_i}{n_j}\right)^2} \quad (3.9)$$

Auf der Grundlage des Strahlungsdurchtritts durch Grenzflächen lassen sich Sowohl für das streuende Substrat als auch für das Absorbermaterial Bilanzgleichungen aufstellen. Für das Glas gilt:

$$\underbrace{\frac{A_{13}T_{13}I_1}{\text{Luft} \rightarrow \text{Substrat}}}_{\text{Luft} \rightarrow \text{Substrat}} + \underbrace{\frac{A_{23}T_{23}I_2}{2 \left(\frac{n_2}{n_3}\right)^2}}_{\text{Absorber} \rightarrow \text{Substrat}} = \left(\underbrace{\frac{A_{13}T_{13}}{2n_2^2}}_{\text{Substrat} \rightarrow \text{Luft}} + \underbrace{\frac{A_{23}T_{23}}{2}}_{\text{Substrat} \rightarrow \text{Absorber}} \right) \cdot I_3. \quad (3.10)$$

²Diese Bedingung ist durch den metallischen Rückkontakt oft annähernd gegeben.

Analog gilt für die Bilanz des Absorbers:

$$\frac{A_{23}T_{23}I_3}{2} + A_{12}T_{12}I_1 = \left(\frac{A_{12}T_{12}}{2n_2^2} + \frac{A_{23}T_{23}}{2\left(\frac{n_2}{n_3}\right)^2} + 2\alpha d_{abs}A_{12} \right) \cdot I_2. \quad (3.11)$$

Für den Absorber kommt zu einfallender und aus-tretender Strahlung noch ein Term für die Absorp-tion im Material hinzu. Diesen Beitrag erhält man über Integration der Intensität über das absorbie-rende Volumen V:

$$\int \frac{\alpha I_i}{2\pi} dV d\omega \approx \alpha d_{abs} I_i A_i \int_0^\pi \sin\beta d\beta = 2\alpha d_{abs} I_i A_i \quad (3.12)$$

I_i - Intensität im Absorber
 A_i - Außenfläche des Absorbers
 d_{abs} - effektive Dicke des Absorbers

Durch Gl. 3.10 und 3.11 sind die Intensitäten I_3 im Substrat und I_2 im Absorber bestimmt. Für die in Abb. 3.3 gezeigte Geometrie läßt sich ver-einfachenderweise annehmen, daß die Hälfte der Luft/Material-Grenzfläche vom Absorber einge-nommen wird ($A_{12}=A_{13}$). Zusätzlich wird an-genommen, daß auch die Grenzfläche zwischen Absorber und Substrat die gleiche Größe auf-weist. Zur weiteren Berechnung werden für die Brechungsindizes die Werte für TiO_2 und CdTe die Literaturwerte $n_2=2.7$ und $n_3=2.5$ [Mad84b, Mad84c] angesetzt. Als typische Strukturgröße werden die im vorherigen Abschnitt bestimmten 100nm angenommen. Der Absorptionskoeffizient im CdTe sei $\alpha=1 \cdot 10^5 \text{cm}^{-1}$. Da beide Materia-lien einen ähnlichen Brechungsindex aufweisen, wird die Transmission an der Substrat/Absorber-Grenzfläche mit $T_{23}=1$ angenommen. Die Trans-mission an der Luft/Substrat-Grenzfläche T_{13} und an der Luft/Absorber-Grenzfläche T_{12} berechnet sich in erster Näherung aus der Fresnel-Formel für senkrechten Einfall:

$$T = 1 - \frac{(n_i - n_j)^2}{(n_i + n_j)^2} \quad (3.13)$$

Damit ergibt sich für T_{13} eine Transmission von 82% und für T_{12} eine Transmission von 79%. Die Intensität im Absorber läßt sich also beschreiben als:

$$I_2 = 0.01 \cdot 0.79 \cdot I_1 \quad (3.14)$$

Die Absorption im Absorber ist definiert als

$$2\alpha d_{abs} I_2 = 2.02 \cdot 0.79 \cdot I_1 \quad (3.15)$$

Das heißt, daß die Energie, die vom Absorber ab-sorbiert wird, um einen Faktor 2 höher ist, als die Energie die tatsächlich durch die Luft/Absorber-Grenzfläche eingekoppelt wird. 97% der Energie, die in das Glas eingekoppelt wird, findet durch Streuprozesse den Weg in den Absorber und wird dort zusätzlich absorbiert. Damit werden 98% der auf die Struktur einfallenden Energie auch im Absorber absorbiert, obwohl der Absorber nur 50% der Fläche bedeckt. Der Absorber erscheint also schon in diesem einfachen Beispiel optisch um einen Faktor 2 dicker als die wirkliche Dicke d_{abs} .

3.2 Parameter des elektronischen Transports

Eine Solarzelle besteht oft aus einem Übergang zwischen einem n- und einem p-Halbleiter. Das bei der Kontaktbildung entstehende elektrische Feld führt zu einer Bandverbiegung, die bei einer asymmetrischen Dotierung nahezu vollständig in einem der beiden Halbleiter erfolgt. Ein typisches Banddiagramm ist in Abb. 3.5 dargestellt.

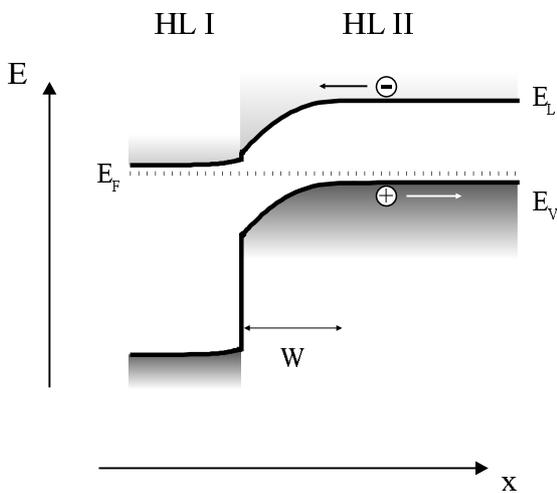


Abb. 3.5: Schematisches Banddiagramm eines asymmetrischen pn-Überganges³ zwischen zwei unterschiedlichen Halbleitern HL I und HL II. Mit eingezeichnet ist ein photogeneriertes Elektron/Loch-Paar.

Nach Abb. 3.5 läßt sich der Absorber HL II in zwei Bereiche aufteilen: einmal die Raumladungszone mit der Ausdehnung W und den feldfreien Raum des Absorbers. Im feldfreien Raum erfolgt der Transport der Ladungsträger durch Diffusion, wobei die Diffusionslänge L_D durch die Beweglichkeit μ und die Lebensdauer τ gegeben ist:

³Die asymmetrische Bandverbiegung kommt hier durch eine höhere Zustandsdichte im Leitungsband und eine höhere Dielektrizitätskonstante des n-Halbleiters gegenüber dem p-Halbleiters zustande und nicht über die Dotierung.

$$L_D = \sqrt{\mu\tau \cdot \frac{kT}{q}}. \quad (3.16)$$

k - Boltzmann-Konstante
 T - Temperatur
 q - Elementarladung

Im Bereich der Raumladungszone dagegen erfolgt der Transport feldunterstützt und man erhält die Driftlänge L_{Drift} aus

$$L_{Drift} = \mu_{Drift} \tau_{Drift} \cdot E. \quad (3.17)$$

μ_{Drift} - Driftbeweglichkeit
 τ_{Drift} - Lebensdauer in der Raumladungszone
 E - elektrisches Feld

Um der Solarzelle Strom zu entnehmen, müssen sowohl Löcher als auch Elektronen die Zelle verlassen können, d.h. es muß ambipolarer Transport vorliegen. Da z.B. für die ambipolare Beweglichkeit μ_{amb} gilt

$$\mu_{amb} = \frac{n - p}{n/\mu_h + p/\mu_e}, \quad (3.18)$$

n/p - Elektronen- bzw. Löcherkonzentration
 $\mu_{h/e}$ - Beweglichkeit der Löcher bzw. Elektronen

erhält man für das ambipolare $\mu\tau$ -Produkt ($\mu\tau_{amb}$):

$$(\mu\tau)_{amb} \approx (\mu\tau)_{Minor}. \quad (3.19)$$

Da sowohl die Diffusions- als auch die Driftlänge eine Funktion des $\mu\tau$ -Produktes sind, wird der Transport im Absorber durch den Transport der Minoritätsladungsträger⁴ bestimmt. I.A. ist in einem Halbleiter die Driftlänge L_{Drift} deutlich größer als die Diffusionslänge L_D , sofern nicht hohe Anforderungen an die Reinheit des Materials gestellt werden. Somit ist in einer herkömmlichen Solarzelle die Diffusionslänge L_D die limitierende Größe für den Transport und es läßt sich eine effektive Sammlungslänge L_{eff} definieren als

$$L_{eff} \approx L_D + W. \quad (3.20)$$

⁴In Abb. 3.5 sind das die Elektronen.

Sie gibt die maximale Distanz an, die die Minoritätsladungsträger im Absorber zurücklegen können, um noch zu den Kontakten zu gelangen.

In einer herkömmlichen Solarzelle wird die Dicke d der Solarzelle jedoch nicht über die effektive Sammlungslänge, sondern vielmehr über die möglichst komplette Absorption der einfallenden Strahlung definiert:

$$d > \frac{1}{\alpha}, \quad (3.21)$$

α - Absorptionskoeffizient des Absorbers

wobei demnach für eine effektive Solarzelle gelten sollte

$$d \approx L_{eff}, \quad (3.22)$$

damit die photogenerateden Ladungsträger auch möglichst komplett an den Kontakten gesammelt werden können.

Mit typischen Werten von α von $1 \cdot 10^5 \text{cm}^{-1}$ und damit notwendigen Zelldicken von $1\text{-}2 \mu\text{m}$ und einer typischen Ausdehnung der Raumladungszone von 200nm erhält man nach Gl. 3.2 für Halbleiter, die in herkömmlichen Solarzellen als Absorber Verwendung finden sollen, die Anforderung, daß das $\mu\tau$ -Produkt um $2 \cdot 10^{-3} \text{cm}^2/\text{V}$ liegen muß. Viele Halbleiter zeigen jedoch eher $\mu\tau$ -Produkte unterhalb von $10^{-4} \text{cm}^2/\text{V}$ (z.B. für amorphes Si $\mu\tau < 10^{-7} \text{cm}^2/\text{V}$ [Böe89]). Eine Lösung, um diese Halbleiter trotzdem für Solarzellen nutzbar zu machen, wäre eine Verringerung der effektiven Sammlungslänge etwa um einen Faktor 10 auf $100\text{-}200 \text{nm}$. Diese Reduktion der effektiven Sammlungslänge ist in dem vorgestellten η -Konzept aufgrund der Entkopplung von Absorption und Transport durch eine 10fache Faltung der Substratoberfläche möglich.

3.3 Halbleiter-Heterokontaktbildung

Bringt man zwei Halbleiter I und II mit unterschiedlichen Bandlücken E_G^I und E_G^{II} miteinander in Kontakt, so werden sich aufgrund der unterschiedlichen Bandlücken Valenz- und Leitungsband nicht kontinuierlich verhalten und es werden sich Banddiskontinuitäten einstellen. Diese Problematik ist in Abb. 3.6 dargestellt.

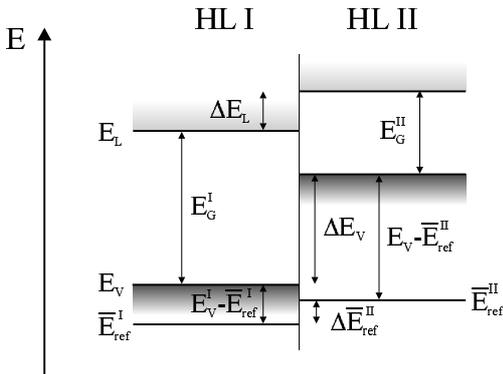


Abb. 3.6: Schematische Darstellung der Kontaktbildung zwischen zwei Halbleitern I und II. Der Unterschied zwischen den Bezugsniveaus $\Delta\bar{V}$ bestimmt die Bandanpassung.

In Abb. 3.6 ist eine sog. Typ II Bandanpassung dargestellt, d.h. sowohl das Valenz- als auch das Leitungsband des Halbleiters II liegt über dem jeweiligen Band des Halbleiters I. Die Typ II Bandanpassung ist die nach Kapitel 6.1 zu erwartende für eine Metalloxid/Chalkogenid-Grenzfläche. Die Banddiskontinuitäten hängen vom Unterschied der Referenzniveaus $\Delta\bar{E}_{ref}$ der beiden Halbleiter ab. Die Referenzniveaus $\Delta\bar{E}_{ref}^I$ und $\Delta\bar{E}_{ref}^{II}$ sind normalerweise ein Mittel des elektrostatischen Potentials in diesem Material. Sie definieren die Valenzbanddiskontinuität ΔE_V und über die Bandlücken E_G die Leitungsbanddiskontinuität ΔE_L . Die zentrale Frage ist nun, ob die Referenzniveaus und damit die Bandanpassung durch Volumeneigenschaften der Halbleiter beschrieben und abinitio berechnet werden können, oder ob zusätzlich Annahmen über die Grenzbedingungen gemacht werden müssen.

Zur Berechnung aus den Volumeneigenschaften nimmt man einen unendlich ausgedehnten Halbleiter an. Die im folgenden vorgestellten Theorien unterscheiden sich im wesentlichen durch die Definition der zu verwendenden Referenzniveaus.

Das erste Modell zur Ausbildung einer Grenzfläche zwischen zwei Halbleitern wurde von Anderson entwickelt [And62]. Er benutzt die Größe der Elektronenaffinität χ , um ein Referenzniveau für einen Halbleiter zu definieren. Diese Größe bezieht sich auf die Differenz zwischen der Energie der Elektronen im Leitungsband E_L und dem Vakuumniveau E_{Vak} , welches als gemeinsames Referenzniveau fungiert. Damit stellt die Elektronenaffinität χ eine experimentelle Größe dar, die z.B. von der Orientierung, der Relaxation und der Rekonstruktion der Oberfläche abhängt. Die Leitungsbanddiskontinuität ergibt sich dann zu

$$\Delta E_L = \chi^I - \chi^{II} \quad (3.23)$$

Die auch als Elektronenaffinitäts-Regel kann, da sie auf einer empirischen Größe aufbaut, höchstens einen groben Richtwert für die Lage der Bandkanten liefern [Zur83, Nil86]. Andere theoretische Konzepte versuchen daher, auf der Basis von Referenzniveaus zu arbeiten, die sich aus den Volumeneigenschaften bestimmen lassen. Dabei können prinzipiell zwei Ansätze unterschieden werden: die linearen Theorien, die die Kommutativität

$$\Delta E_V(I/II) = -\Delta E_V(II/I) \quad (3.24)$$

und die Transitivität

$$\Delta E_V(I/II) + \Delta E_V(II/III) = \Delta E_V(I/III) \quad (3.25)$$

der Grenzflächeneigenschaften fordern, und die der Ladungsneutralitätsniveaus, die zusätzlich zu den Volumeneigenschaften auch die Eigenschaften der Grenzfläche berücksichtigen. In Hinblick auf die linearen Theorien ist der Ansatz von Frensley und Kroemer [Fre77] und der von Harrison und Tersoff [Har86] hervorzuheben.

Frensley und Kroemer bestimmten zunächst mit Pseudo-Potential-Rechnungen die Bandstruktur von Volumenhalbleitern. Das daraus berechnete energetische Maximum des Valenzbandes muß noch um einen Korrekturterm erweitert werden, um auf eine absolute Energieskala zu kommen. Dieser Korrekturterm wurde als Dipolanteil identifiziert. Die Valenzbanddiskontinuität ΔE_V bestimmt sich daher aus der Differenz der Leitungsbandmaxima E_V und einem Dipolterm δ :

$$\Delta E_V = E_V^I - E_V^{II} + \delta \quad (3.26)$$

Die Genauigkeit der vorhergesagten Banddiskontinuitäten ist jedoch gering [dW87].

Harrison berechnet die Lage der Valenzbandmaxima durch eine lineare Superposition der Atomeigenfunktionen (LCAO⁵, tight binding) direkt auf einer absoluten Energieskala. Hier ergibt sich die Leitungsbanddiskontinuität ΔE_V direkt aus der Lage der zugehörigen, aus den Atomeigenfunktionen berechneten Valenzbandkanten. Insbesondere für II-VI-Halbleiter, die aufgrund der tetraedrischen Struktur ihre Bindung hauptsächlich über die s- und p-Orbitale aufbauen, liefert die Berechnung der Valenzbandmaxima aus diesen Atomeigenfunktionen eine gute Übereinstimmung mit Meßdaten.

Die bisher vorgestellten Theorien können isovalente Halbleitergrenzflächen sowohl mit kleinen als auch mit großen Potentialunterschieden gut beschreiben [Byl87, Bar89]. Allerdings sind die Abweichungen insbesondere für polare, nicht-tetraedrische Halbleiter, wie sie in dieser Arbeit mit den Metalloxiden Verwendung finden, recht hoch [Bal93]. Daher müssen in diesen Fällen Effekte berücksichtigt werden, daß sich die Wellenfunktionen von Halbleiter I und Halbleiter II an der Grenzfläche überlappen und so an der Grenzfläche Zustände in der Bandlücke der Materialien entstehen (VIGS - Virtual induced gap states) [Ter87]. Diese induzierten Zustände klingen in den Halbleiter hinein exponentiell ab und können,

je nach Besetzung, Ladung an der Grenzfläche hervorrufen. Daher wird zur Beschreibung das Ladungsneutralitätsniveau eingeführt, das analog zum Fermi-Niveau die Besetzungswahrscheinlichkeit dieser virtuelle Zustände definiert. Bei Kontaktbildung müssen sich die Ladungsneutralitätsniveaus beider Halbleiter angleichen, da ansonsten Ladungsaustausch stattfinden würde. Es liegen also an der Grenzfläche Polarisationsladungen vor, die zu einer lokalen Potentialfluktuation führen und damit zu einer deutlichen Leitungsbanddiskontinuität, wie es in Abb. 3.7 schematisch dargestellt ist.

⁵linear combination of atomic orbitals

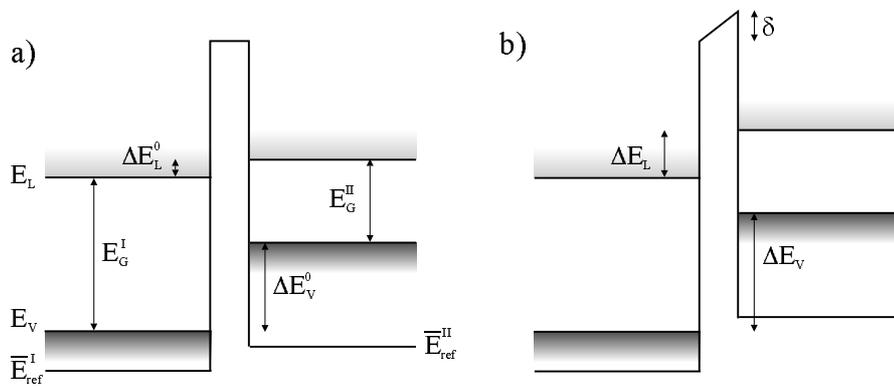


Abb. 3.7: Qualitativer Einfluß eines Grenzflächendipols auf die Bandanpassung bei Kontaktbildung: a) nicht wechselwirkende Oberflächen, b) wechselwirkende Oberflächen mit Grenzflächendipol δ . Zur Verdeutlichung des Grenzflächendipols sind die Oberflächen, obwohl sie miteinander in Kontakt stehen, mit einem Zwischenraum gezeichnet.