WS 2013/2014 Ausgabe am: 25.10.2013

Übungsblatt 1

Aufgabe 1) Galliumarsenid – Kristallgitter und Einheitszellen

Betrachtet wird ein monokristalliner Block Galliumarsenid. Das Kristallgitter von Galliumarsenid entspricht der Zinkblendestruktur, siehe Fig. 1a). Bei 300K beträgt die Gitterkonstante a = 5.653 Ångström.

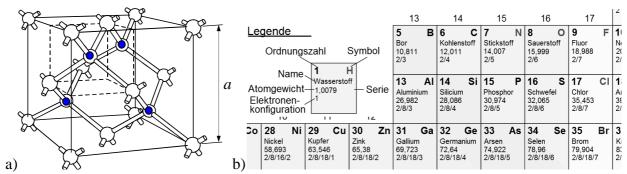


Fig. 1: a) Einheitszelle der Zinkblendestruktur eines GaAs-Gitters. b) Ausschnitt aus dem Periodensystem der chemischen Elemente [de.wikpedia.org].

- a) Berechnen Sie die Anzahl der Ga- und As-Atome pro cm³. Dotierdichten in Halbleitern liegen typischerweise bei 10¹⁸ Fremdatomen pro cm³. Welchen Anteil der Halbleiteratome wird bei dieser Dichte durch Dotanden ersetzt?
- b) Schätzen Sie den mittleren räumlichen Abstand *d* zweier benachbarten Dotieratome ab. Nehmen Sie dazu vereinfachend an, dass die Dotieratome auf einer regelmäßigen kubischen Struktur im Volumen verteilt sind.
- c) Ermitteln Sie die Dichte von GaAs bei Raumtemperatur.

Aufgabe 2) Elektron in einem eindimensionalen Potential

Fig. 2 zeigt den periodischen Potentialverlauf in einem Halbleiter endlicher Ausdehnung, sowie die kastenförmige Näherung für freie Elektronen. Im Folgenden sollen für den vereinfachten Fall eines eindimensionalen Potentials die Energiezustände und die Dispersionsrelation freier Elektronen berechnet werden. Zur Vereinfachung werden die Potentialwände als unendlich hoch angenommen:

$$W_{\text{Pot}} = \begin{cases} W_0, & \text{für } 0 < x < L \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases}$$
 (1)

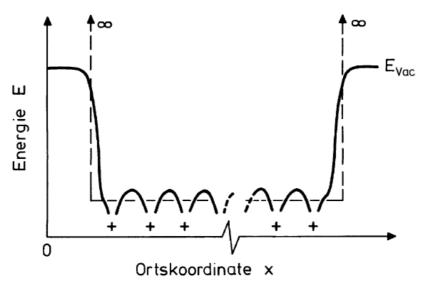


Fig. 2: Eindimensionales Kastenpotential als Näherung für das Coulombpotential eines Kristallgitters

- a) Stellen Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung für freie Elektronen im Bereich 0 < x < L auf. Welche Randbedingung müssen bei x = 0 und x = L erfüllt werden?
- b) Zeigen Sie, dass die in a) aufgestellte Gleichung Lösungen der Form $\Psi(x) = \Psi_0 \sin(k_x x)$ besitzt. Leiten Sie daraus die Dispersionsrelation ab, also den Zusammenhang zwischen der Wellenzahl k_x und der Gesamtenergie W des Elektrons.
- c) Welche der in b) berechneten Wellenzahlen k_x sind angesichts der Randbedingungen zulässig?

Die eindimensionale Betrachtungsweise lässt sich auf den dreidimensionalen Fall übertragen. Man erhält dann eine Dispersionsrelation der Form

$$W_{3\text{dim}}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + W_{\text{Pot}} = \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k}|^2 + W_{\text{Pot}}$$
 wobei $k_x = n_x \pi / L_x$, $k_y = n_y \pi / L_y$, $k_z = n_z \pi / L_z$, $n = 1, 2, 3...$ (2)

- d) Welches Volumen ΔV_k nimmt ein Zustand im k-Raum ein? Bestimmen Sie außerdem das k-Raum Volumen V_k , das von Elektronen mit Gesamtenergien $W < W_{\text{max}}$ eingenommen werden kann. Beachten Sie, dass k_x , k_y , k_z nur positive Werte annehmen dürfen, für das Volumen relevant ist also nur der im ersten Oktanten liegende Ausschnitt der sog. Fermikugel.
- e) Berechnen Sie die Anzahl $N(W_{\rm max})$ der verfügbaren Zustände, die von Elektronen mit einer maximalen Energie $W_{\rm max}$ eigenommen werden können. Beachten Sie, dass jedes Volumenelement im k-Raum mit zwei Elektronen unterschiedlichen Spins besetzt werden kann.
- f) Berechnen Sie die Zustandsdichte, also die Zahl der Zustände pro Volumen und Energieintervall, $\rho(W) = \frac{1}{V} \frac{dN(W_{\text{max}})}{dW_{\text{max}}}$, als Ergebnis sollten sie erhalten:

$$\rho(W) = 4\pi \frac{(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{W - W_0}$$
(3)