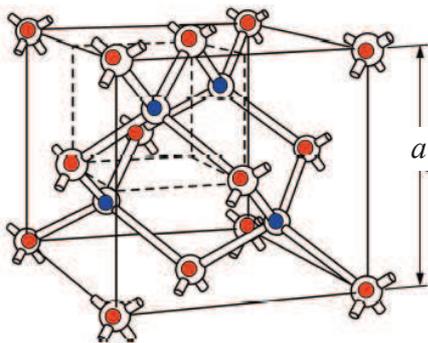


# Übungsblatt 1

## Aufgabe 1) Galliumarsenid – Kristallgitter und Einheitszellen

Betrachtet wird ein monokristalliner Block Galliumarsenid (GaAs). Das Kristallgitter von Galliumarsenid entspricht der Zinkblendestruktur, siehe Fig. 1a). Bei 300K beträgt die Gitterkonstante  $a = 5.653 \text{ \AA}$ .



Legende

Ordnungszahl	Symbol								
Name	1	H							
Atomgewicht	1,0079								
Elektronen-konfiguration	1								

		13	14	15	16	17	18
5	B	6	C	7	N	8	O
Bor	10,811	Kohlenstoff	12,011	Stickstoff	14,007	Sauerstoff	15,999
2/3		2/4		2/5		2/6	
13	Al	14	Si	15	P	16	S
Aluminium	26,982	Silicium	28,086	Phosphor	30,974	Schwefel	32,065
2/8/3		2/8/4		2/8/5		2/8/6	
20	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31
Nickel	58,693	Kupfer	63,546	Zink	65,38	Gallium	69,723
2/8/16/2		2/8/18/1		2/8/18/2		2/8/18/3	
32	33	As	34	Se	35	Br	3
Germanium	72,64	Arsen	74,922	Selen	78,96	Brom	79,904
2/8/18/4		2/8/18/5		2/8/18/6		2/8/18/7	

a) Einheitszelle der Zinkblendestruktur eines GaAs-Gitters. Die roten und blauen Punkte markieren die Gallium- und Arsen-Atome b) Ausschnitt aus dem Periodensystem der chemischen Elemente [de.wikipedia.org].

- Berechnen Sie die Anzahl der Ga- und As-Atome pro  $\text{cm}^3$ . Dotierdichten in Halbleitern liegen typischerweise bei  $10^{18}$  Fremdatomen pro  $\text{cm}^3$ . Welchen Anteil der Halbleiteratome wird bei dieser Dichte durch Dotanden ersetzt?
- 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.
- 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 zugehörige kastenförmige Näherung mit unendlich hohen Potentialbarrieren an den Halbleiteroberflächen,

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

Im Folgenden sollen für den vereinfachten Fall eines eindimensionalen Potentials die Energiezustände und die Dispersionsrelation von Elektronen berechnet werden, die sich im Innern des Potentialkastens frei bewegen können.

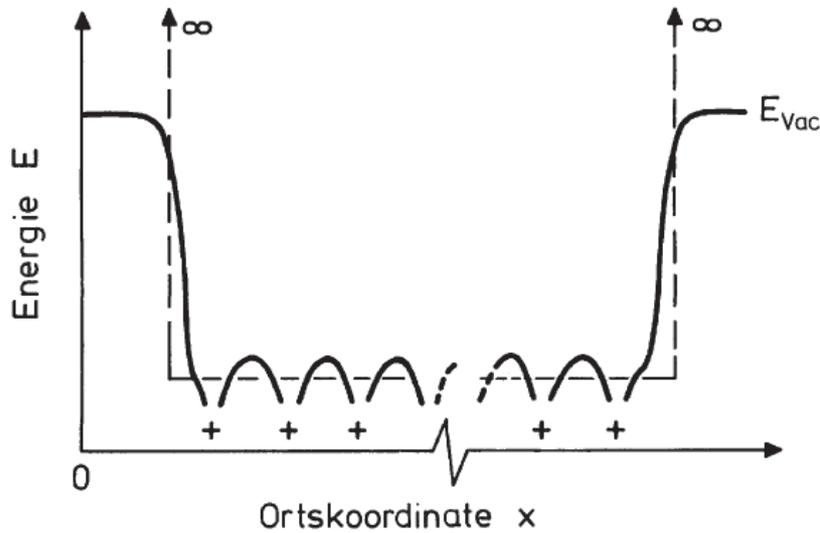


Fig. 2: Eindimensionales Kastenpotential als Näherung für das Coulombpotential eines Kristallgitters

- 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?
- 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.
- 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

$$W_{3\text{dim}}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + W_{\text{Pot}} = \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k}|^2 + W_{\text{Pot}} \quad (2)$$

wobei  $k_x = n_x \pi / L_x$ ,  $k_y = n_y \pi / L_y$ ,  $k_z = n_z \pi / L_z$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$

- Welches Volumen  $\Delta V_k$  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.
- Berechnen Sie die Anzahl  $N(W_{\text{max}})$  der verfügbaren Zustände, die von Elektronen mit einer maximalen Energie  $W_{\text{max}}$  eingenommen werden können. Beachten Sie, dass jedes Volumenelement im  $k$ -Raum mit zwei Elektronen unterschiedlichen Spins besetzt werden kann.
- 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:

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