

Musterlösung zu Übungsblatt 1

Aufgabe 1) Galliumarsenid – Kristallgitter und Einheitszellen

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

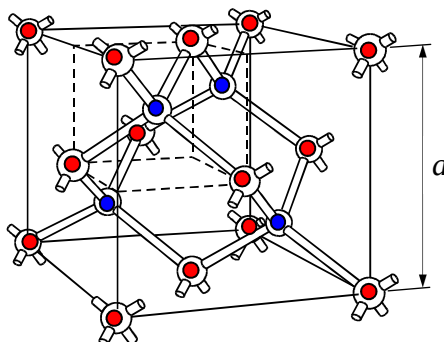


Fig. 1: Einheitszelle der Zinkblendestruktur eines GaAs-Gitters.

Legende		13	14	15	16	17	18
Ordnungszahl	1	5	6	7	8	9	10
Name	Wasserstoff	Bor	Kohlenstoff	Stickstoff	Sauerstoff	Fluor	Neon
Atomgewicht	1,0079	10,811	12,011	14,007	15,999	18,988	20,180
Elektronenkonfiguration	1	2/3	2/4	2/5	2/6	2/7	2/8
Serie	I	II	III	IV	V	VI	VII
28	29	30	31	32	33	34	35
Nickel	Kupfer	Zink	Gallium	Germanium	Arsen	Selen	Brom
58,693	63,546	65,38	69,723	72,64	74,922	78,96	79,904
2/8/16/2	2/8/18/1	2/8/18/2	2/8/18/3	2/8/18/4	2/8/18/5	2/8/18/6	2/8/18/7

Fig. 2: Ausschnitt aus dem Periodensystem der chemischen Elemente [de.wikipedia.org].

- a) Berechnen Sie die Anzahl der Ga- und As-Atome pro cm^3 . Dotierdichten in Halbleitern liegen typischerweise bei 10^{18} Fremdatomen pro cm^3 . Welchen Anteil der Halbleiteratome wird bei dieser Dichte durch Dotanden ersetzt?

Lösung:

Die Zinkblendestruktur entspricht zwei Kubisch-Flächenzentrierten Gittern, die sich durchdringen. Damit enthält eine Einheitszelle vier Ga- und vier As-Atome.

$$\frac{4}{(5.653 \text{ Å})^3} = \frac{4}{1.809 \cdot 10^{-28} \text{ m}^3} = 2.21 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3} \quad (1)$$

In GaAs sind jeweils $2.21 \cdot 10^{22}$ Ga- und As Atome pro cm^3 vorhanden.

Das entspricht $2.26 \cdot 10^{-5}$ Dotanden pro Basisgitteratom.

- 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.

Lösung:

Die Dichte der Dotieratome ist $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, der mittlere Abstand in einer kubischen Struktur berechnet sich dann zu

$$d = \frac{1}{\sqrt[3]{1 \cdot 10^{18}}} \text{ cm} = 10 \text{ nm}.$$

- c) Ermitteln Sie die Dichte von GaAs bei Raumtemperatur.

Lösung:

In einer Einheitszelle Galliumarsenid sind 4 Ga- und 4 As-Atome, mit den Atomgewichten aus dem PSE ergibt sich für die Dichte:

$$\rho = \frac{4(m_{\text{Ga}} + m_{\text{As}})}{a^3} = \frac{4(69.723 \text{ u} + 74.922 \text{ u})}{(5.653 \text{ \AA})^3} = 5.31 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \quad (2)$$

Aufgabe 2) Elektron in einem eindimensionalen Potential

Fig. 3 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:

$$W_{\text{Pot}} = \begin{cases} W_0, & \text{für } 0 < x < L \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases} \quad (3)$$

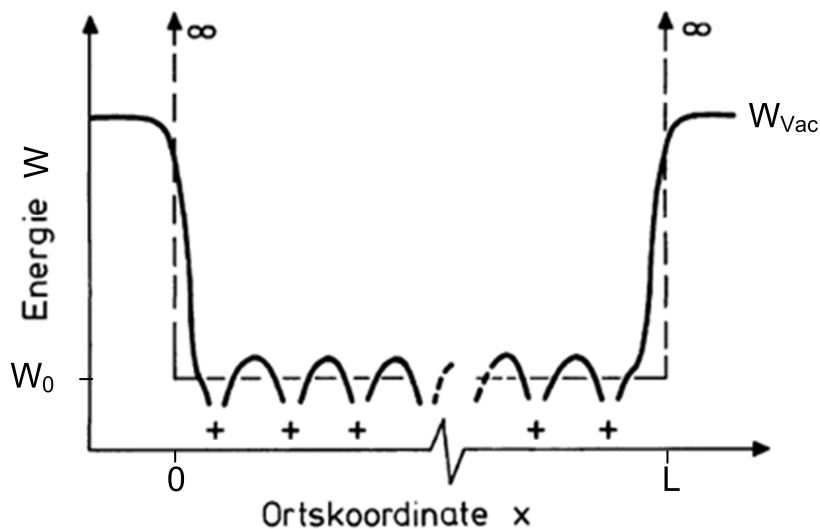


Fig. 3: Eindimensionales Kastenpotential als Näherung für das Coulombpotential eines Kristallgitters

- 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?

Lösung:

$$\text{In einer Dimension: } W\Psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + W_{\text{Pot}} \right] \Psi(x)$$

Da die Potentialwände als unendlich hoch angenommen wurden, muss die Wellenfunktion des Elektrons an den Potentialwänden verschwinden, so dass sich die Randbedingungen $\Psi(0) = 0$ und $\Psi(L) = 0$ ergeben.

- 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.

Lösung:

Wir wählen den allgemeinen Ansatz $\Psi(x) = A \exp(jk_x x) + B \exp(-jk_x x)$. Mit den Randbedingungen aus a) ergeben sich Beziehungen zwischen den Vorfaktoren A, B :

$$\Psi(0) = 0 \Rightarrow A + B = 0 \Rightarrow A = -B$$

$$\Psi(L) = 0 \Rightarrow A(\exp(jk_x L) - \exp(-jk_x L)) = 0$$

$$\Rightarrow j2A \sin(k_x L) = 0$$

$$\Rightarrow \Psi_0 \sin(k_x L) = 0, \text{ mit } \Psi_0 = j2A$$

(4)

Die Dispersionsrelation erhalten wir durch zweifache Ableitung von $\Psi_0 \sin(k_x x)$ und Einsetzen in die Schrödingergleichung:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_0 \sin(k_x x) = -k_x^2 \Psi_0 \sin(k_x x)$$

$$\Rightarrow W(k_x) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + W_{\text{Pot}}$$

(5)

- c) Welche der in b) berechneten Wellenzahlen k_x sind angesichts der Randbedingungen zulässig?

Lösung:

Aus Gleichung 4 wurde mit den Randbedingungen hergeleitet, dass $\Psi_0 \sin(k_x L) = 0$ gelten muss. Aufgrund der Periodizität des Sinus folgt somit für die Wellenzahl: $k_x L = n\pi$, mit $n, n = 1, 2, 3, \dots$

Die eindimensionale Betrachtungsweise lässt sich auf den dreidimensionalen Fall übertragen. Betrachtet wird ein quaderförmiger Potenzialtopf mit Seitenlängen L_x, L_y, L_z . Man erhält dann eine Dispersionsrelation der Form

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

(6)

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

- 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.

Lösung:

Aufgrund der Quantisierung im k -Raum ist die Differenz zwischen zwei nebeneinanderliegenden Energiezuständen in jede Raumrichtung $\Delta k_{x,y,z} = \pi / L_{x,y,z}$. Für einen dreidimensionalen Potentialtopf mit $L_x = L_y = L_z$ erhält man dann für das Volumen eines

$$\text{einzelnen Zustandes } \Delta V_k = \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \frac{\pi^3}{L^3}.$$

Das Volumen V_k ergibt sich aus dem Volumen der Fermikugel, die bis zum Impuls $|\vec{k}_{\max}| = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(W_{\max} - W_{\text{Pot}})}$ gefüllt ist. Da nur Wellenzahlen $k_x, k_y, k_z > 0$ beitragen können beschränken wir uns auf einen Oktanten der Fermikugel und drücken das Volumen direkt durch die Energie aus:

$$V_k = \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi |\vec{k}_{\max}|^3 = \frac{1}{6} \pi \left(\frac{2m}{\hbar^2} (W_{\max} - W_{\text{Pot}}) \right)^{3/2} \quad (7)$$

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

Lösung:

Um die Anzahl $N(W_{\max})$ zu erhalten, wird das in d) berechnete Volumen der Fermikugel durch das Volumen eines einzelnen Zustandes geteilt. Der zusätzliche Faktor 2 berücksichtigt, dass jeder Zustand von je zwei Elektronen mit unterschiedlichem Spin besetzt werden kann:

$$N(W_{\max}) = 2 \frac{V_k}{\Delta V_k} = \frac{L^3}{\pi^2} \frac{1}{3} \left(\frac{2m}{\hbar^2} (W_{\max} - W_{\text{Pot}}) \right)^{3/2} \quad (8)$$

- f) Berechnen Sie die Zustandsdichte, also die Zahl der Zustände pro Volumen und Energieintervall, $\rho(W) = \frac{1}{V} \frac{dN(W_{\max})}{dW_{\max}}$ als Ergebnis sollten sie erhalten:

$$\rho(W) = 4\pi \frac{(2m)^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{W - W_0} \quad (9)$$

Lösung:

Aus den vorhergehenden Überlegungen ergibt sich dann für die Zustandsdichte

$$\rho(W) = \frac{1}{V} \frac{dN(W_{\max})}{dW_{\max}} = \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{W_{\max} - W_{\text{Pot}}} = 4\pi \frac{2m^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{W_{\max} - W_{\text{Pot}}} .$$