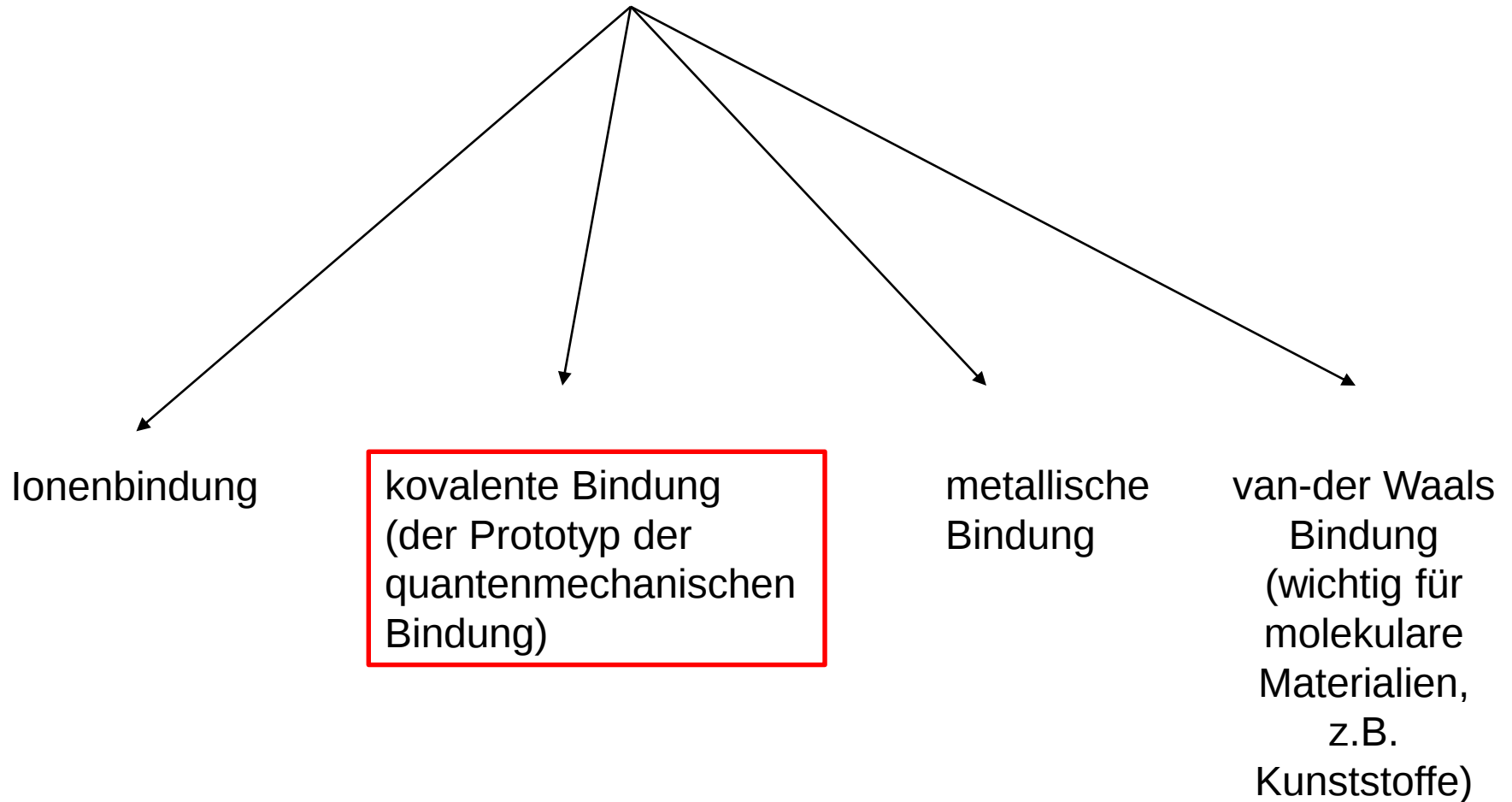


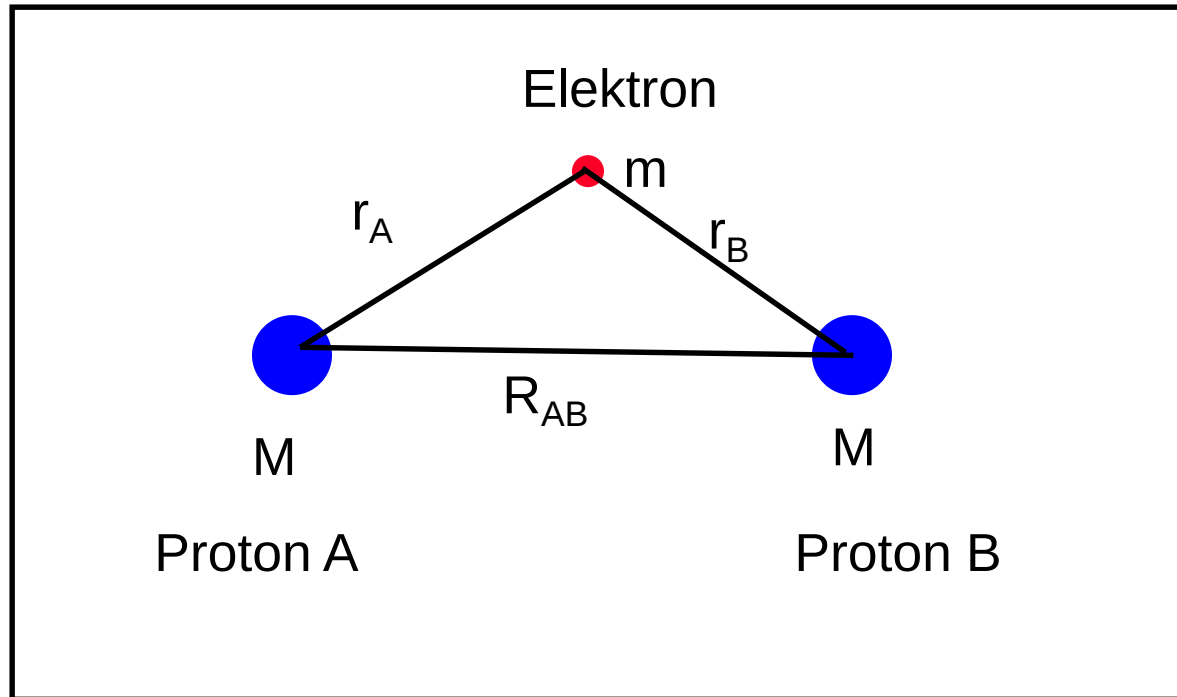
- 1. Grundlagen der Quantenmechanik**
- 2. Elektronische Zustände**
- 3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente**
 - 3.1 Quantenmechanische Probleme in drei Dimensionen
 - 3.2 Das Wasserstoffatom
 - 3.3 Das Periodensystem der Elemente
 - 3.4 Chemische Bindungen**
- 4. Elektronen in Kristallen**
- 5. Halbleiter**
- 6. Quantenstatistik für Ladungsträger**
- 7. Dotierte Halbleiter**
- 8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht**
- 9. Der pn-Übergang**

Festkörperelektronik
SS 2015
6. Foliensatz
21.05.2015

Verschiedene Arten der chemischen Bindung:



Das allereinfachste Molekül: Das Wasserstoffmolekülion H_2^+



..und wieder mal die S-Glg:
$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

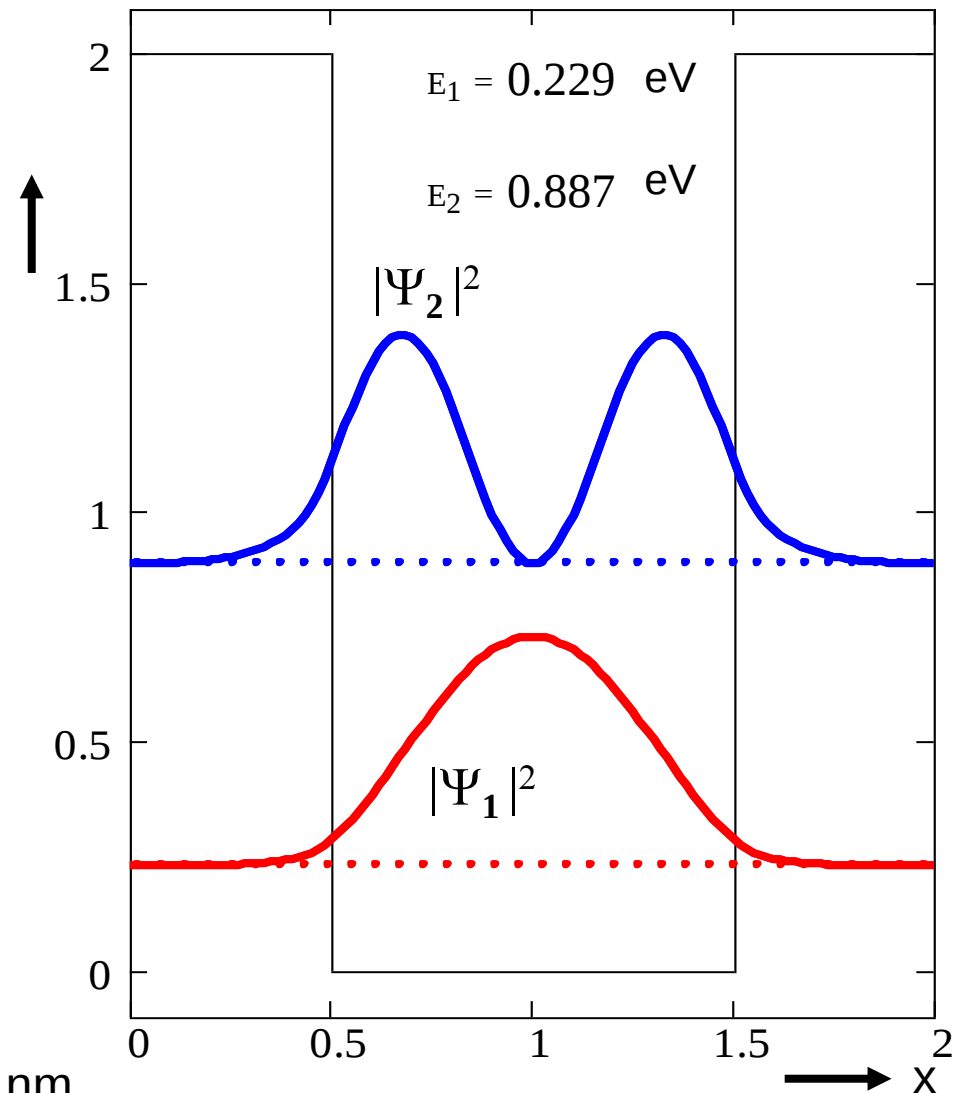
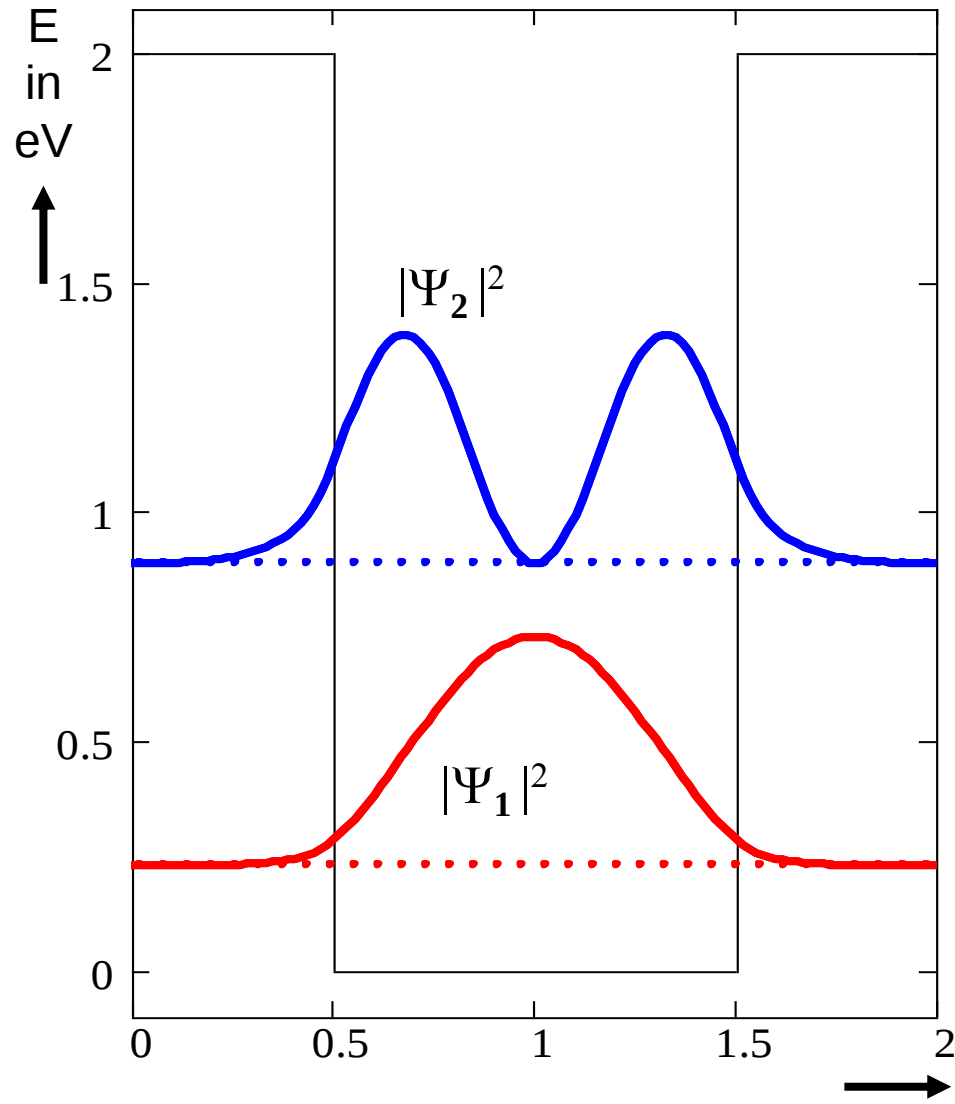
(...in der Atom- und Festkörperphysik wird die Energie typischerweise als E statt W bezeichnet)

... und wieder mal verdammt kompliziert, da 3 Teilchen und ein kompliziertes Potential

Zwei unendlich entfernte Potentialtöpfe

FE 6.4
SS 2015

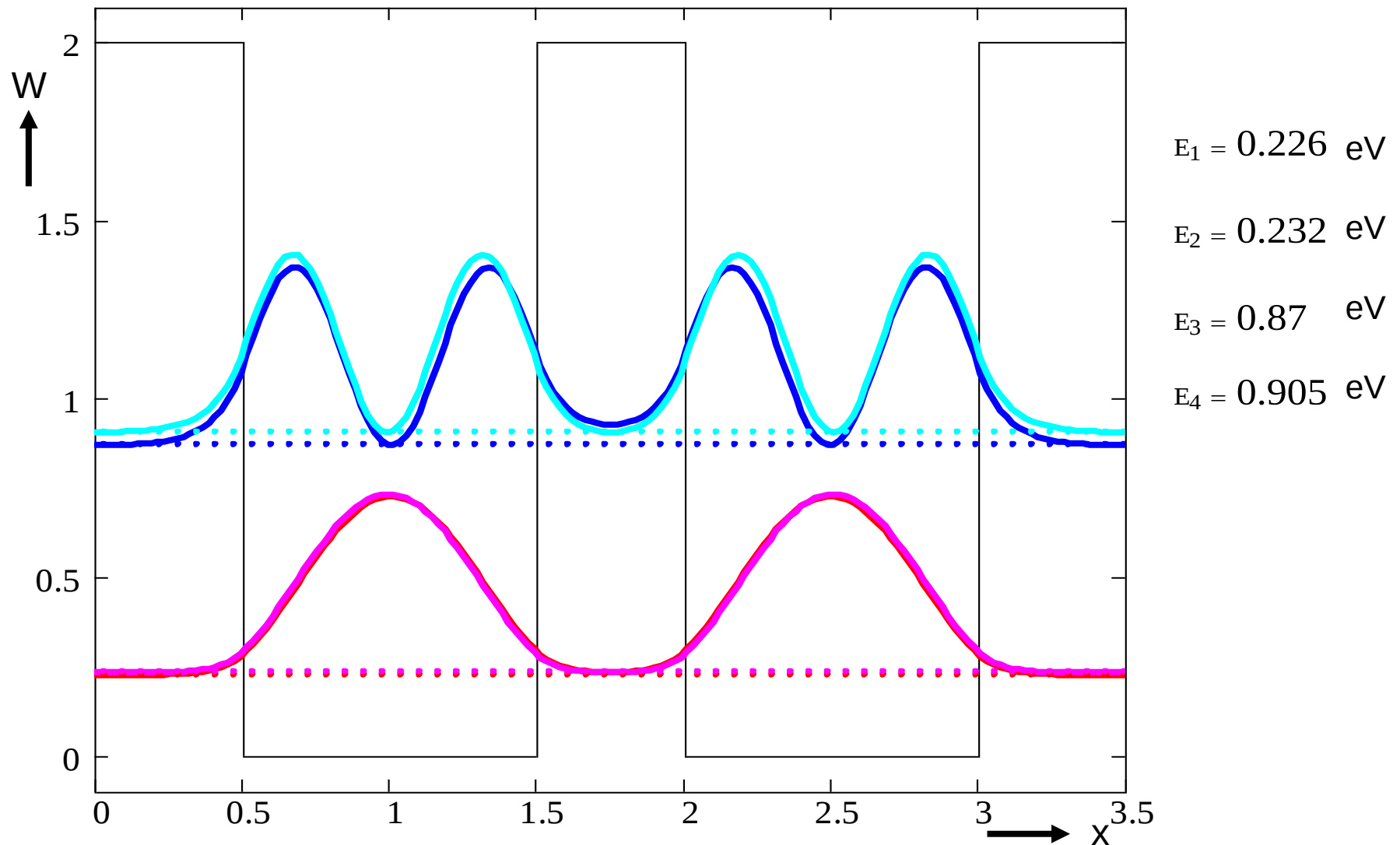
2 unendlich voneinander entfernte Potentialtöpfe haben dieselben Energiezustände (ihre Energien sind entartet).



Zwei 0,5 nm entfernte Potentialtöpfe

FE 6.5
SS 2015

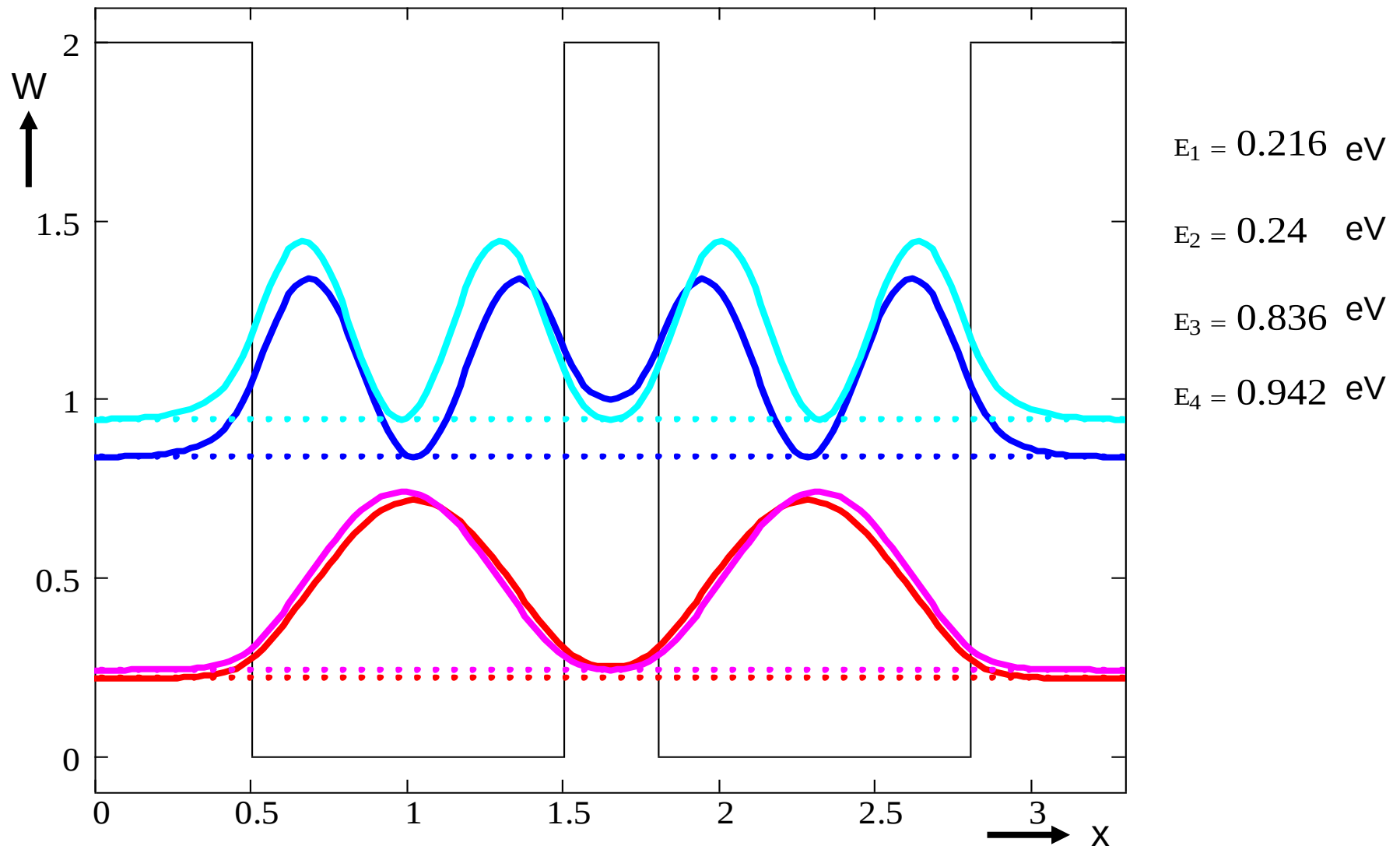
Werden die Potentialtöpfe einander näher gebracht, wechselwirken sie und die Energieentartung wird aufgehoben.



Zwei 0,3 nm entfernte Potentialtöpfe

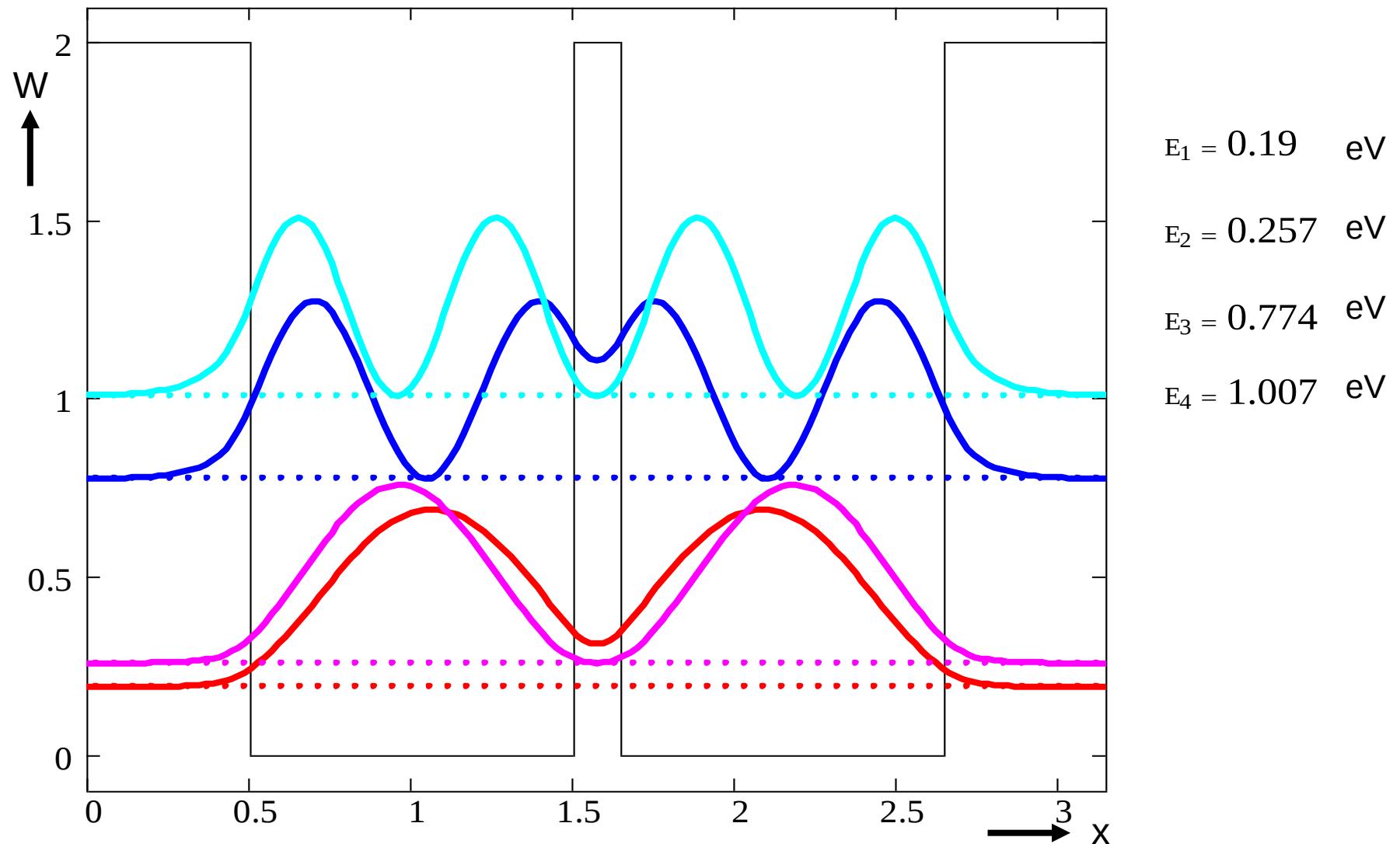
FE 6.6
SS 2015

Die Eigenfunktionen verändern sich ebenfalls.



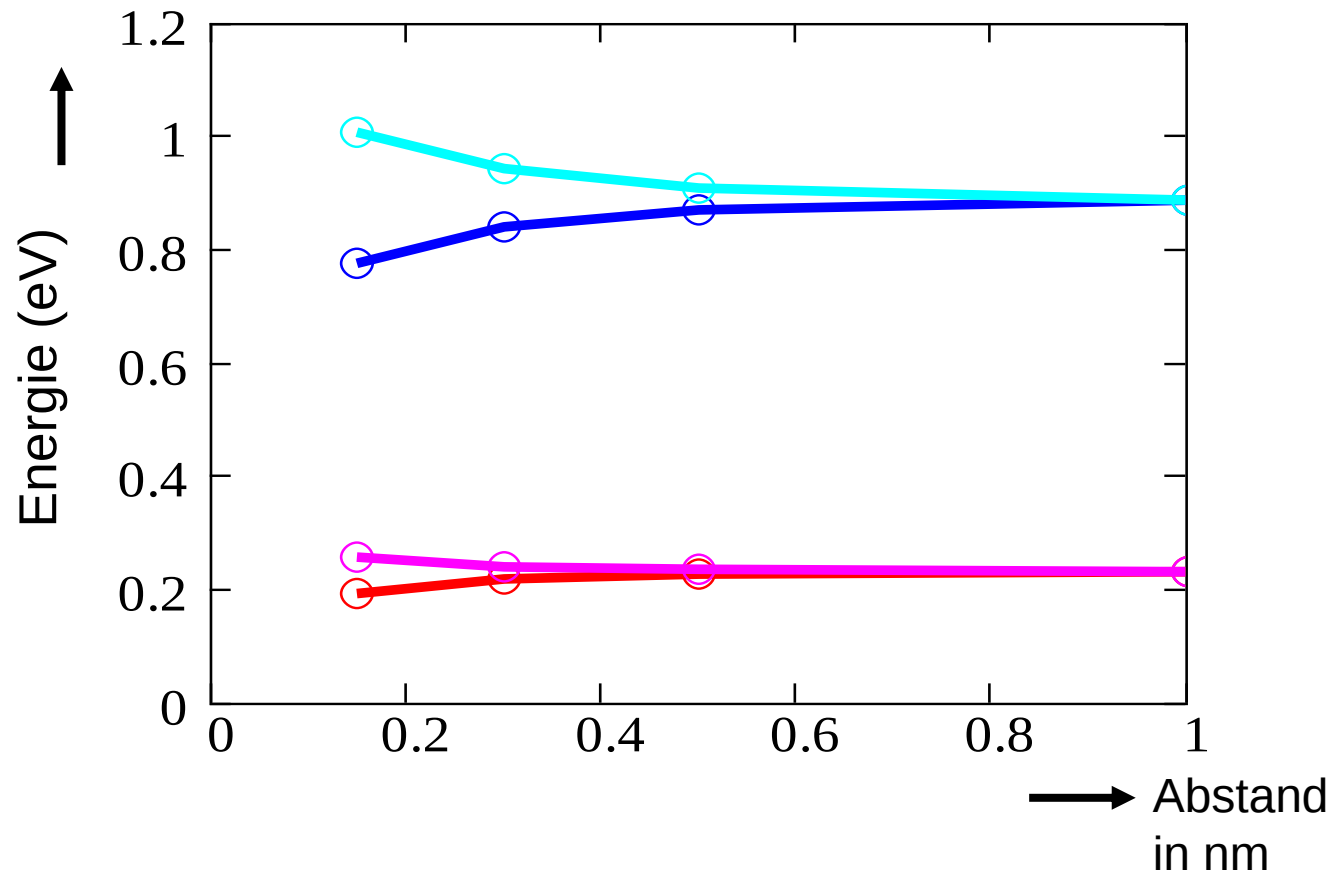
Zwei 0,15 nm entfernte Potentialtöpfe

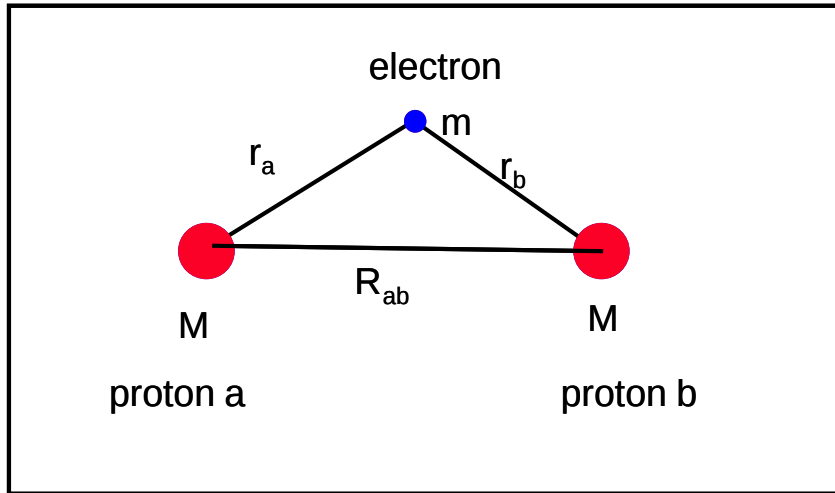
Je näher sich die Potentialtöpfe kommen, desto weiter spalten sich die Energieniveaus.



Aufspalten der Energiezustände

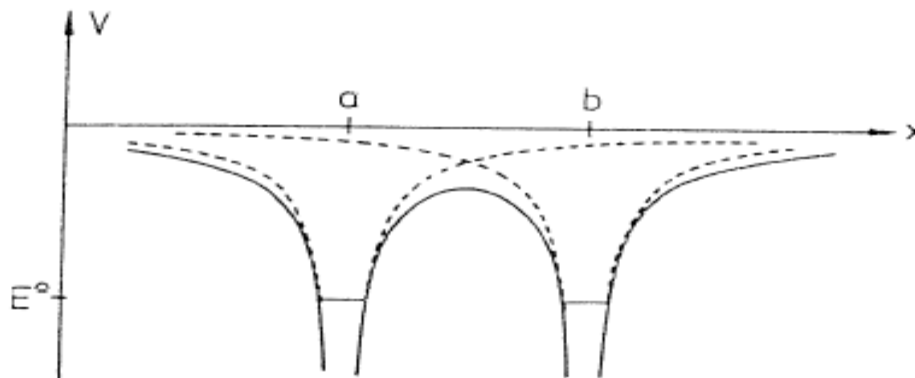
Trägt man die Energiezustände als Funktion des Abstandes zwischen den zwei Potentialtöpfen auf, erhält man den folgenden Graphen:





Wieder Born-Oppenheimer Näherung:
„Kerne an einer Position festhalten“

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b}$$

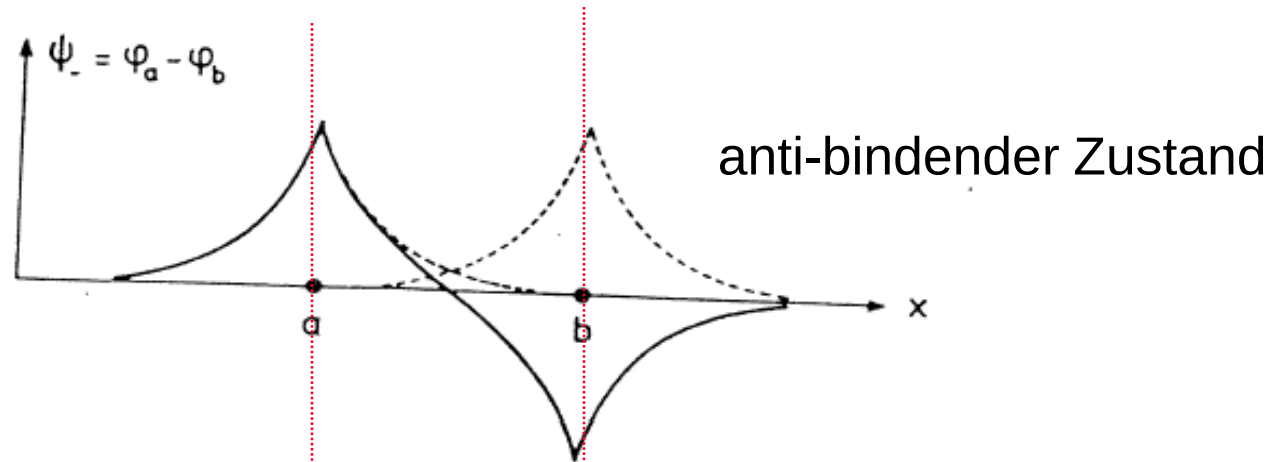


Gesamt-Coulombpotential

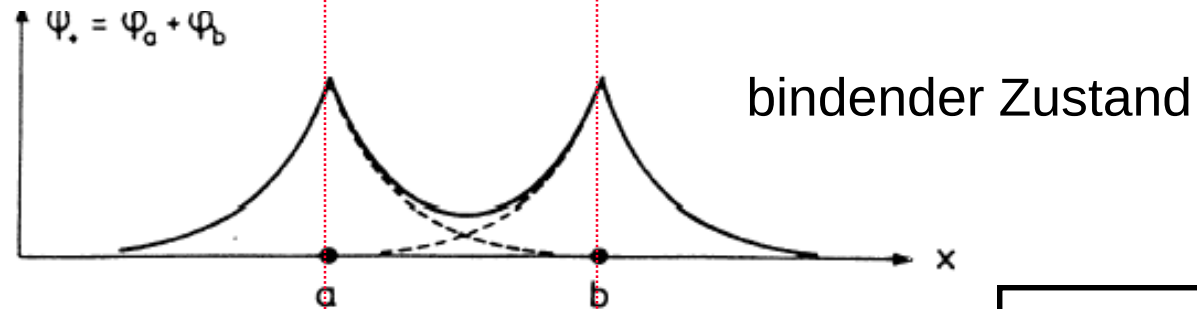
Vom Atom zum Material: Die kovalente Bindung

FE 6.10
SS 2015

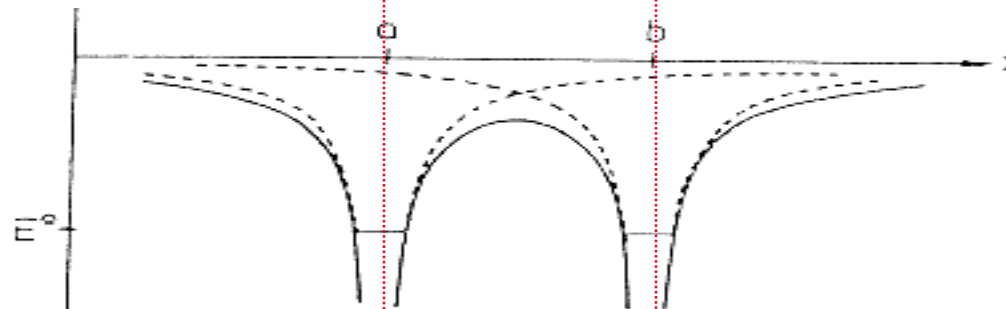
$$\psi_{\text{antibindend}} = B(\varphi_a - \varphi_b)$$



$$\psi_{\text{bindend}} = A(\varphi_a + \varphi_b)$$



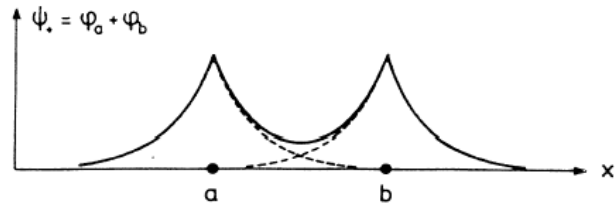
Gesamt-
Coulombpotential



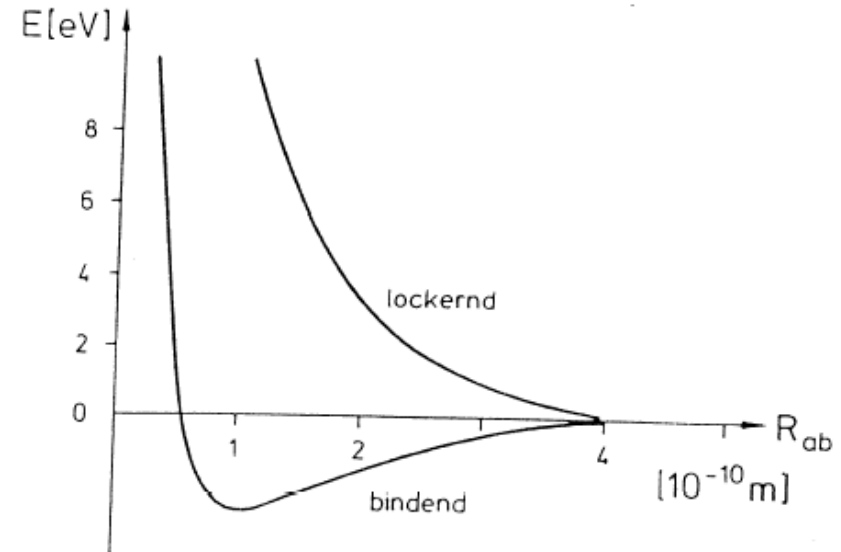
Es ergibt sich für den bindenden Zustand eine Absenkung der Energie, da das Elektron stärker delokalisiert ist.

Vom Atom zum Material: Die kovalente Bindung

FE 6.11
SS 2015



Variation des Kernabstandes:

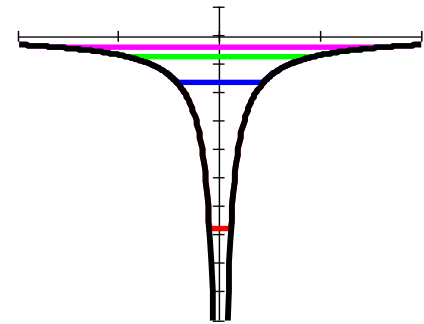
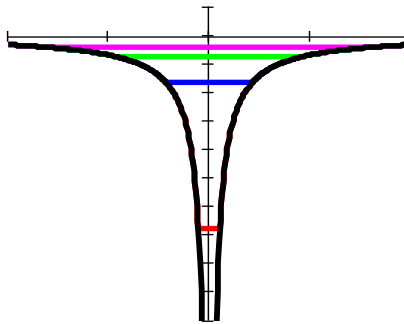
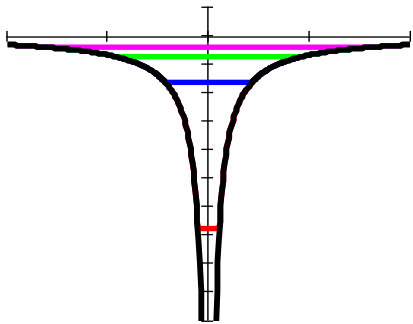


Gebundener Zustand beim Energieminimum

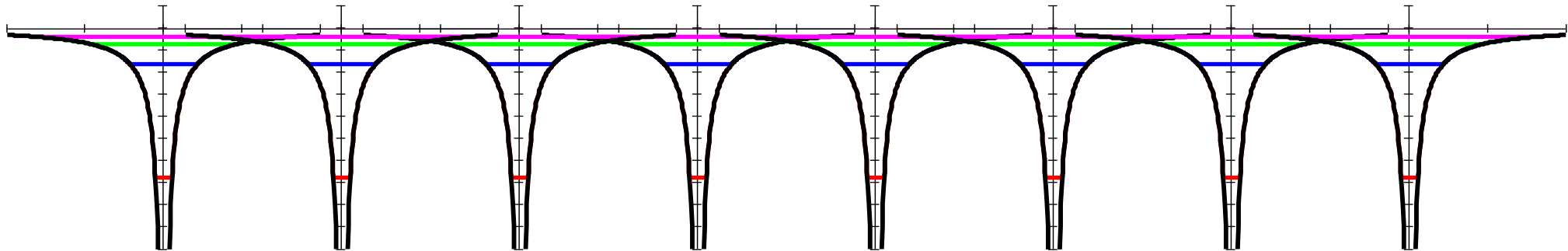
Energiegewinn pro Atom bei Si: 4.64 eV

1. Grundlagen der Quantenmechanik
2. Elektronische Zustände
3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente
4. Elektronen in Kristallen
 - 4.1 Von 2 zu 10^{23}
 - 4.2 Atome in Festkörpern
 - 4.3 Elektronen in periodischen Potentialen
5. Halbleiter
6. Quantenstatistik für Ladungsträger
7. Dotierte Halbleiter
8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht
9. Der pn-Übergang

Verallgemeinerung von zwei auf 10^{23} Atome



Verallgemeinerung von zwei auf 10^{23} Atome



Aufspaltung der
Energiezustände

Für N Atome Aufspaltung in
N Energiezustände

Diese energetisch nahe
zusammenliegenden
Zustände bilden "Bänder"
von erlaubten Zuständen.

Komplexes Verhalten durch
Überkreuzungen

Temperatur = 0 K:

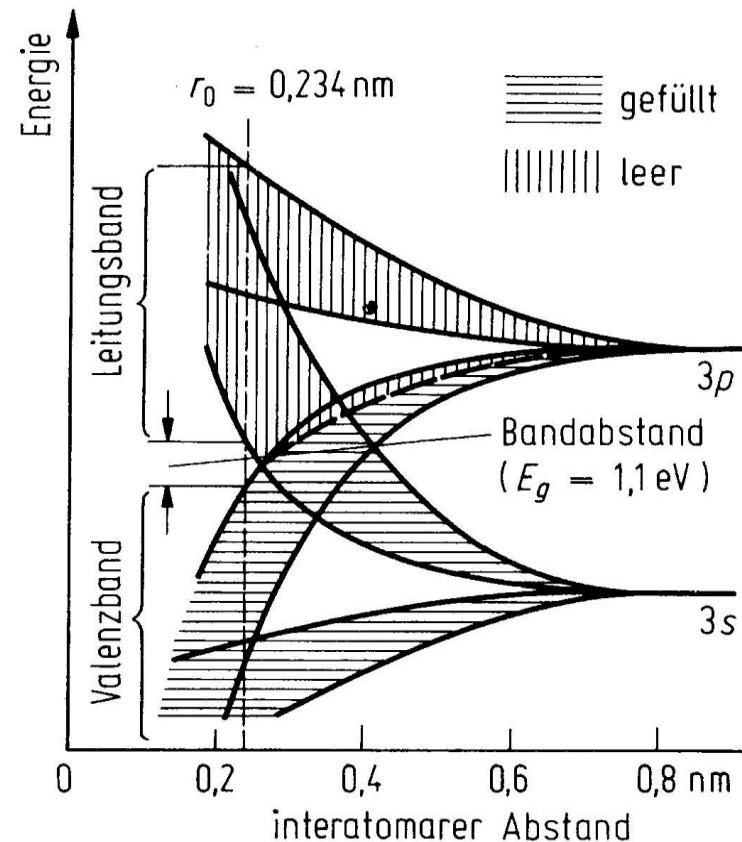
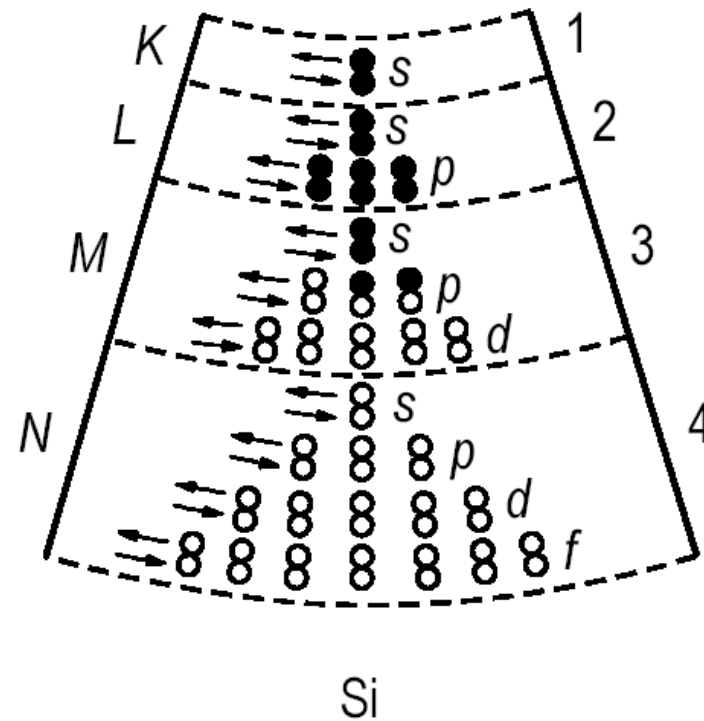
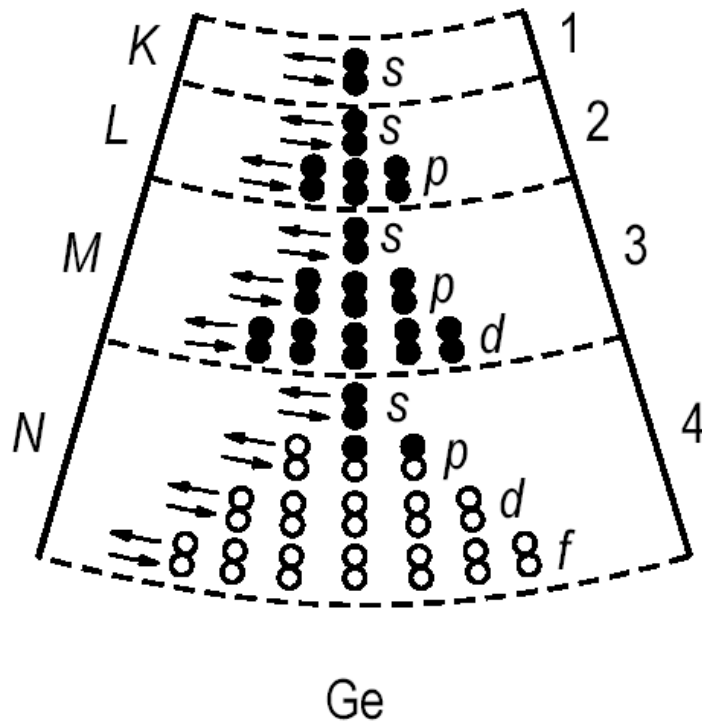


Abb.: Schema der Energieniveaus, wenn (fiktiv) aus unabhängigen Si-Atomen durch Verringerung des atomaren Abstandes ein Kristall gemacht wird.

1. Grundlagen der Quantenmechanik
2. Elektronische Zustände
3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente
4. Elektronen in Kristallen
 - 4.1 Von 2 zu 10^{23}
 - 4.2 Atome in Festkörpern
 - 4.3 Elektronen in periodischen Potentialen
5. Halbleiter
6. Quantenstatistik für Ladungsträger
7. Dotierte Halbleiter
8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht
9. Der pn-Übergang

4.2 Atome in Festkörpern

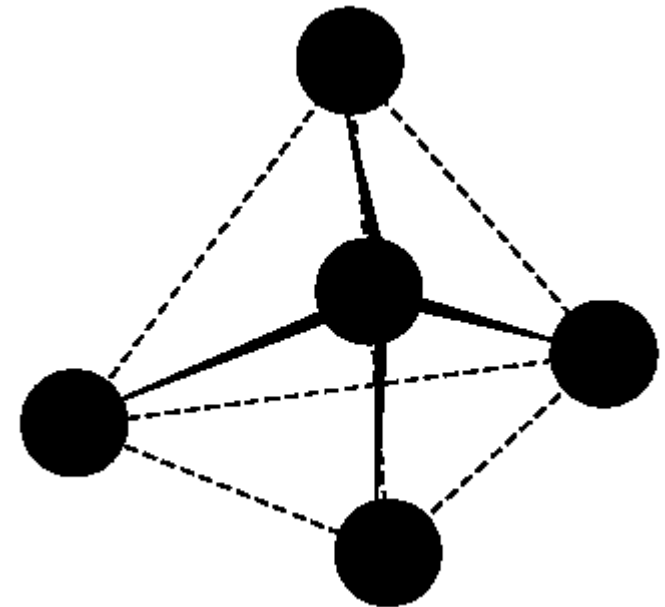
- chemische und physikalische Eigenschaften der Elemente sind durch ihre Elektronenkonfiguration im Grundzustand sowie durch naheliegende angeregte Zustände bestimmt
- z.B. Germanium Ge (32 Elektronen) und Silizium Si (14 Elektronen):
- jeweils vier Elektronen in der äußersten Schale



- Elektronen in der äußersten Schale gehen Verbindungen mit anderen Atomen ein (kovalente Bindung, teilweise ionisch bei unterschiedlichen Atomen, z.B. GaAs)
- Anordnung der Atome erfolgt so, dass die Gesamtenergie minimal wird

Dies ist oft gegeben, wenn eine Unterschale gefüllt wird.

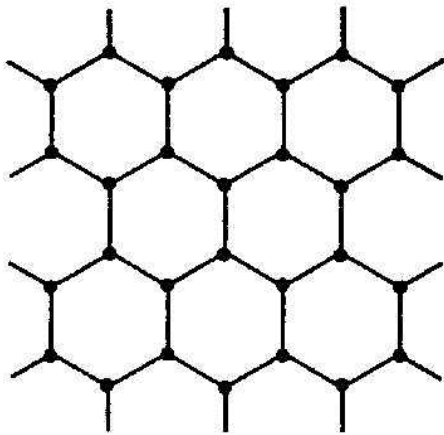
Jedes Si- oder Ge-Atom geht Verbindungen mit vier weiteren Atomen ein.



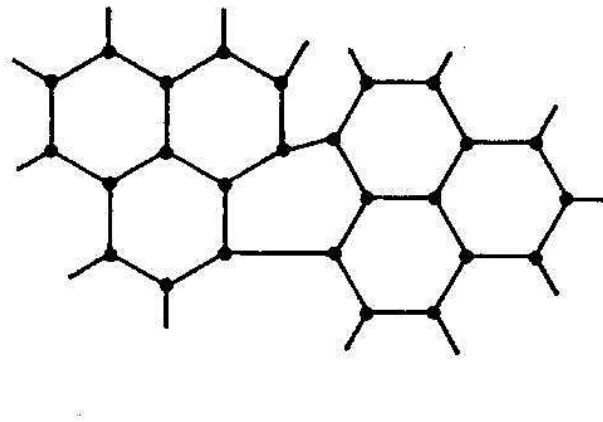
Je nach Art der Herstellung können sich die Atome verschieden geordnet zu Festkörpern zusammenschliessen.

- ⇒ Kristalle: Die Atome sind periodisch angeordnet.
- ⇒ Polykristalline Festkörper: Kristalline Bereiche, aber keine Fernordnung
- ⇒ Amorphe Festkörper: nur Nahordnung, keine Periodizität, keine Fernordnung.

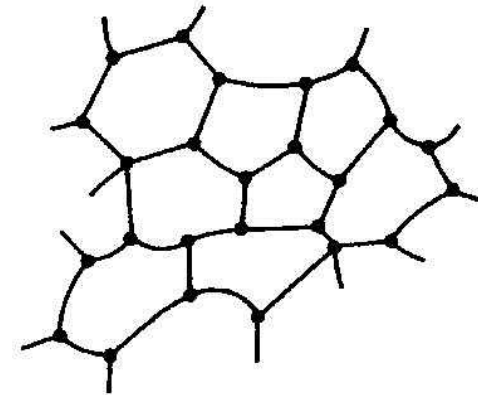
- Halbleitermikroelektronik wird dominiert durch kristalline Siliziumchips
- Halbleiteroptoelektronik wird dominiert durch Verbindungshalbleiter (mehr als ein Element)
- polykristalline und amorphe Halbleiter bei großflächiger und kostengünstiger Elektronik



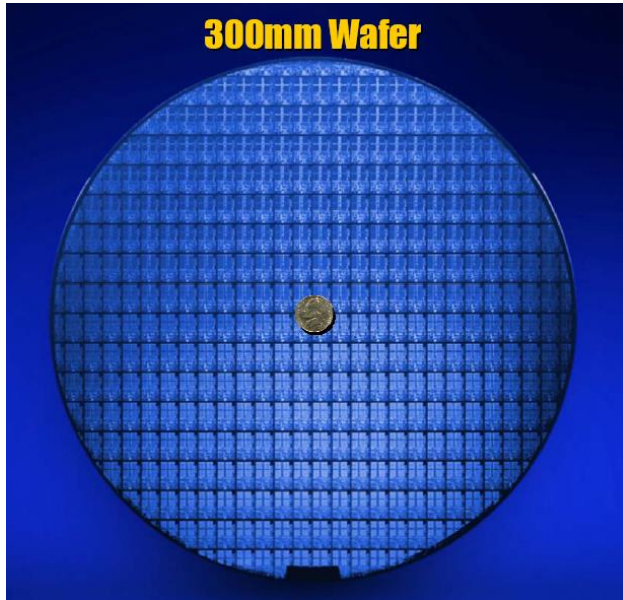
kristallin



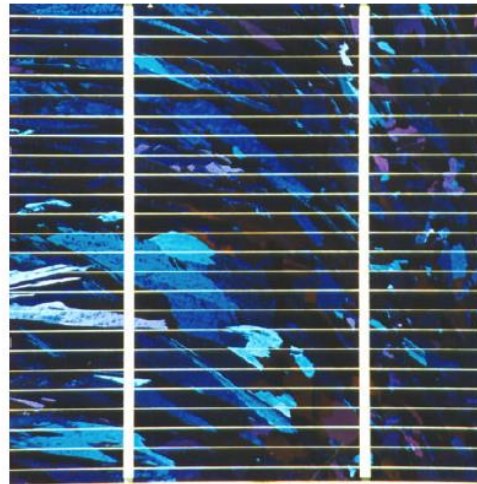
polykristallin



amorph



Kristalliner Wafer
→ Si-Mikroelektronik



Polykristalline
Si-Solarzelle



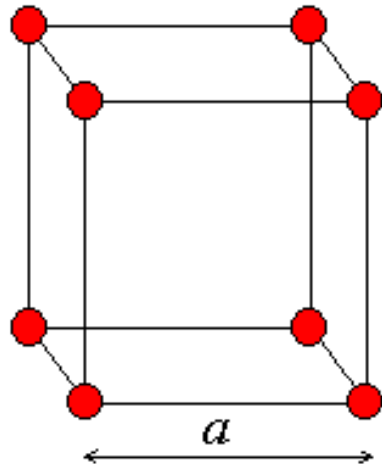
Amorphe
Dünnschichttransistoren

In 3D wird die Anordnung durch drei Gittervektoren a_1 , a_2 und a_3 eindeutig beschrieben.

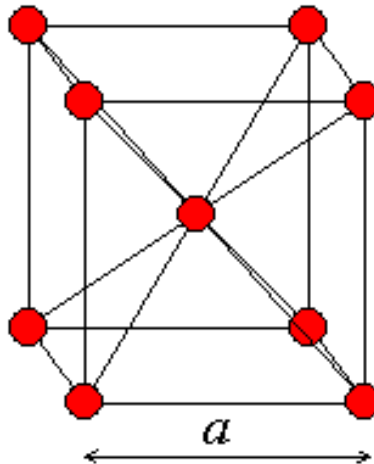
In 3D gibt es 14 verschiedene Kristallgitter.

Die Grundeinheit  muss nicht ein einzelnes Atom sein.

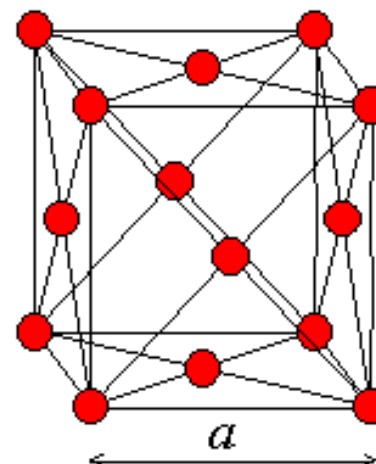
Sie kann auch eine kompliziertere Einheit  aus mehreren Atomen sein.



simple cubic
einfach kubisch
(sc)



body-centered cubic
kubisch raumzentriert
(bcc)



face-centered cubic
kubisch flächenzentriert
(fcc)

Verbindungshalbleiter bilden sich ebenfalls nach der Regel, möglichst die Unterschalen zu füllen.

Dadurch entstehen IV-IV, III-V und II-VI Halbleiter.

Halbleiter aus zwei Elementen nennt man **binäre** Halbleiter.

Element-HL	Verbindungs-HL		
C, Si, Ge	IV-IV-Verbindungen	III-V-Verbindungen	II-VI-Verbindungen
	SiC	AlP, AlAs, GaN, GaP	ZnS, ZnO, ZnSe, ZnTe
	SiGe	AlSb, GaAs, InP, GaSb, InAs, InSb	CdS, CdSe, HgS, CdTe, HgSe, HgTe

Halbleiter aus drei Elementen nennt man **ternäre** Halbleiter.

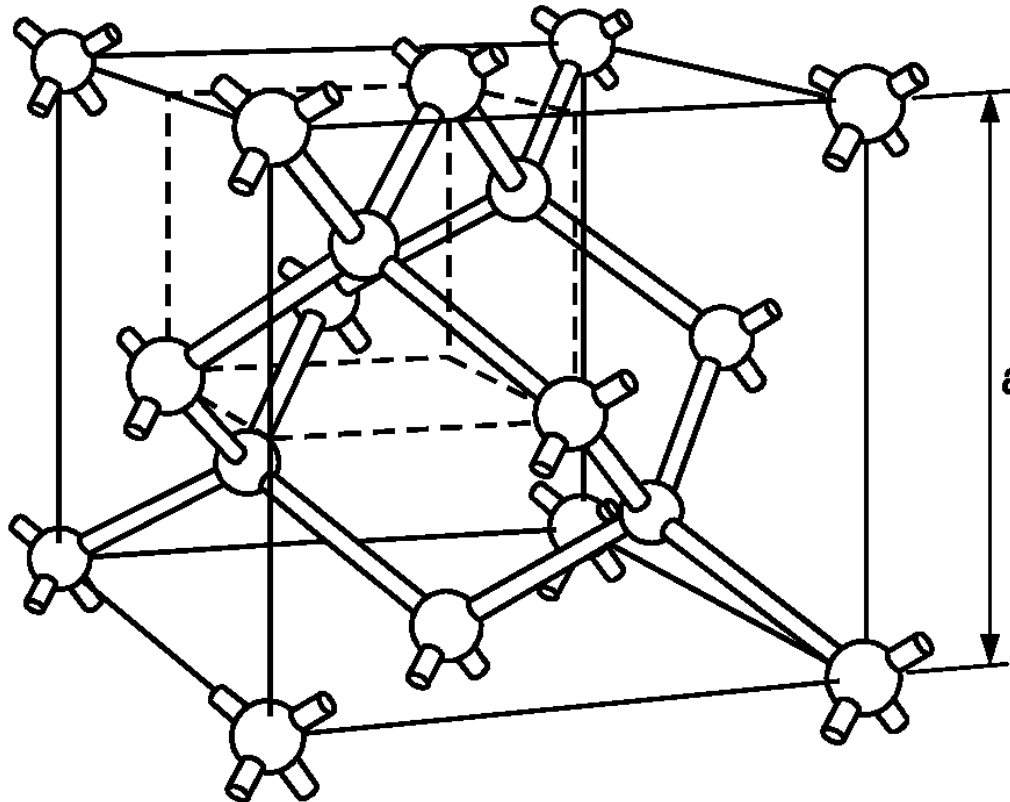
⇒ z.B. $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$

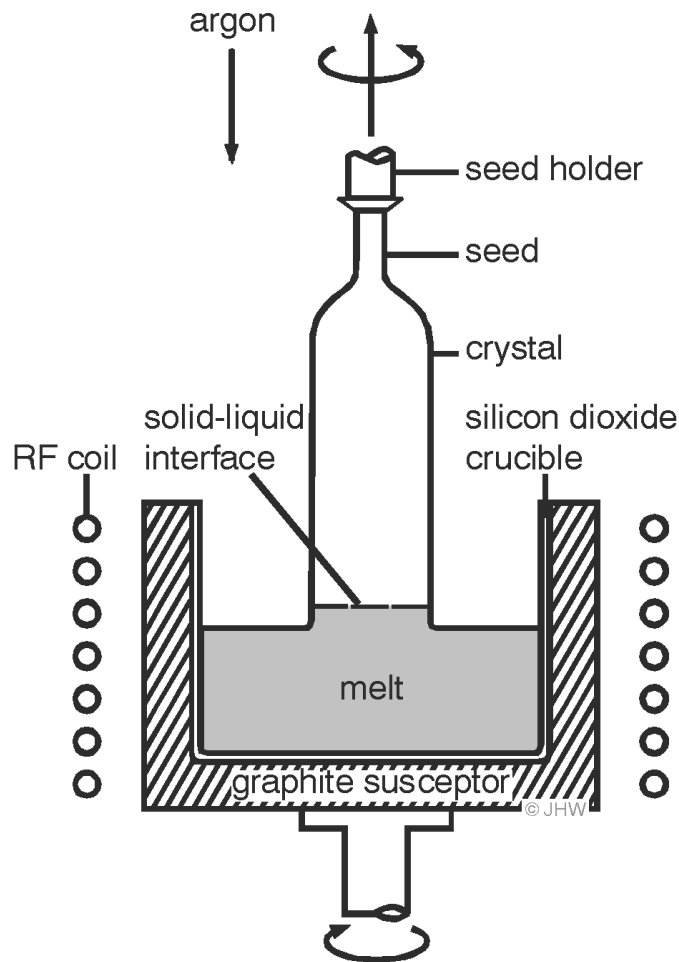
Halbleiter aus vier Elementen nennt man **quarternäre** Halbleiter.

⇒ z.B. $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_{1-y}\text{P}_y$

Si und Ge bilden Diamantgitter

Die Diamantstruktur hat ein fcc-Gitter mit einer Einheitszelle, die aus zwei Atomen bei $(0,0,0)$ und $(1/4,1/4,1/4)a$ besteht. a ist die Länge der Einheitszelle.





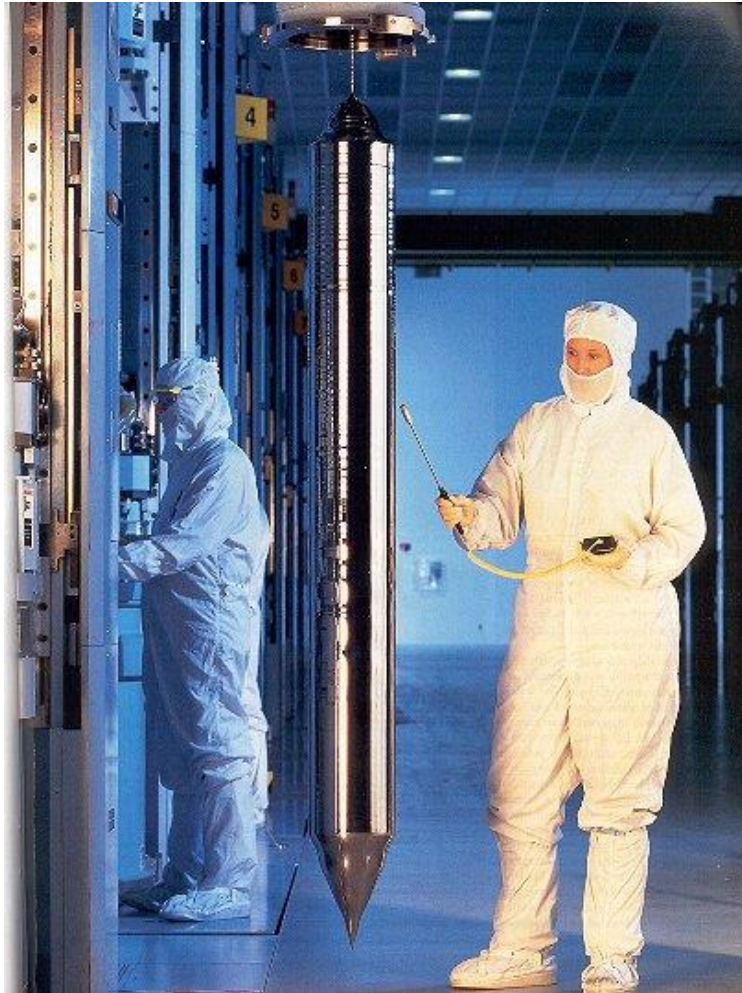
-für gute Transporteigenschaften ist einkristallines Material erforderlich

Bruchstücke von poly-Si werden unter Schutzgas aufgeschmolzen ($T_S = 1415\text{ °C}$)

Eintauchen eines einkristallinen Keims

einkristallines Wachstum unter Zieh- und Drehbewegungen

Wachstum von einkristallinen Stäben



-für gute Transporteigenschaften ist einkristallines Material erforderlich

Bruchstücke von poly-Si werden
unter Schutzgas aufgeschmolzen
($T_s = 1415\text{ °C}$)



Eintauchen eines einkristallinen Keims



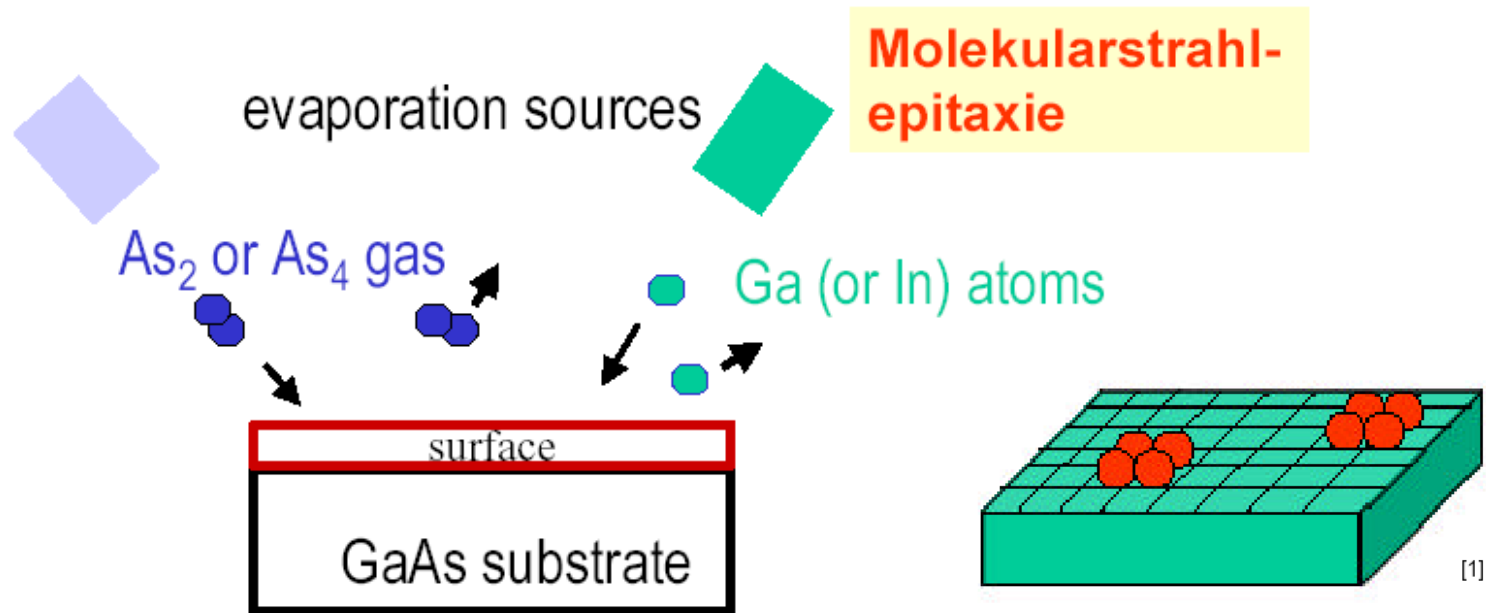
einkristallines Wachstum unter
Zieh- und Drehbewegungen



Wachstum von einkristallinen Stäben

(Foto: Wacker Siltronic Burghausen)

Molekularstrahlepitaxie (molecular beam epitaxy, MBE)



Verdampfung der Elemente aus fester Quelle im Ultrahochvakuum (10^{-10} mbar)

- ist für Verbindungshalbleiter interessant
- Methode für die Erforschung neuer Materialien