

FE Zusammenfassung

© Dominik Kiefer

Version 1.1 SS 2009

Quantenmechanik

Def.: Die Quantenmechanik ist eine Theorie die es uns erlaubt, Vorhersagen über die zeitliche Entwicklung eines Zustandes eines Systems zu machen. Quantenmechanische Betrachtung nicht notwendig, wenn gilt: $Energie \cdot Zeit \gg h$ [J s]

Newtons'sche Axiome:

1. Gleichförmige geradlinige Bewegung
2. $F = m a$
3. Actio - reactio

Bohr'sche Postulate:

1. Elektron auf Kreisbahn
2. $mvr = n\hbar$
3. Strahlung bei Übergang

Postulate der Quantenmechanik:

1. Schrödinger Gleichung
2. Wellenfkt. nicht observabel, d.h. keine Messgröße → Aufenthaltsw'keit
3. Operatoren
4. Wenn ψ Eigenfunktion zum Operator \hat{F} → Messung der Observablen F : gleichen Ergebnis (Eigenwert f_n).
Wenn ψ keine Eigenfunktion von \hat{F} → einzelne Messung von F → irgendeinem Eigenwerte von \hat{F} .
Misst man den Eigenwert f_n → quantenmechanische System unmittelbar nach Messung in zugehörigem Eigenzustand ψ_n .

EM-Wellen: $c = \lambda f$; $\lambda = \frac{2\pi}{k}$

Photon: $W = h\nu$

De-Broglie: $\lambda = \frac{h}{p}$; $W_{kin} = \frac{p^2}{2m}$

Compton-Effekt:

$$\Delta\lambda = \lambda_C(1 - \cos\phi); \lambda_C = \frac{h}{m_0c}$$

Elektronen-Interferenzexperiment Davisson und Germer: zwei Spalte mit Elektronen beschossen → Interferenz

Schrödingergleichung

$$j\hbar \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right) \psi(x,t)$$

Wellenfunktion linear → Superposition
Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

$$p(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$$

„freies Teilchen“ impliziert: kein Potential $V(x,t)$

Wellenansatz: $\psi(x,t) = A e^{j(kx - \omega t)}$

Dispersionsrelation: $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

Phasengeschwindigkeit:

$$\frac{\partial}{\partial t}(kx - \omega t) = 0 \rightarrow v_p = \frac{\omega}{k}$$

Gruppengeschwindigkeit:

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\hbar k_0}{m} = 2v_p$$

Fouriertransformation: Ortsraum → Impulsraum

Wellenpakete: Breite in k-Raum umkehrt proportional zu Ortsraum

Heisenberg'sche Unschärferelation:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$$

Erwartungswerte

$$\langle F \rangle = \frac{\int \psi^*(x,t) F(\hat{x}, \hat{p}) \psi(x,t) dx}{\int \psi^*(x,t) \psi(x,t) dx}$$

Operatoren:

Teilchenort: $\hat{x} = x$

Impuls: $\hat{p} = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Kin. Energie: $\hat{W}_{kin} = \hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Orthogonalität: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = 0$

Zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\hat{W}_{kin}} + \underbrace{V(x)}_{\hat{W}_{pot}} \right) \psi(x) = W \psi(x)$$

Potentialtöpfe

Unendlicher Potentialtopf:

- Überlagerung von rechts/links-laufender Welle

- Stetigkeit am Rand

- Ansatz: $\psi^\pm(x,t) = A^\pm e^{j(\pm kx - \omega_k t)}$

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \text{ (von 0 bis L)}$$

$$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; k = \frac{n\pi}{L}$$

- Nur diskrete Energieeigenwerte

- $W_1 \neq 0$

- Elektron ungleichmäßig „verschmiert“

- Abwechselnd symmetrische/ antisymmetrische Wellenfunktionen

Endlicher Potentialtopf

$$V(x) = -V_0 \quad \text{für } |x| \leq \frac{L}{2};$$

$$V(x) = 0 \quad \text{sonst}$$

1. gebundene Lösung:

- Wellenfunktion stetig, stetig d'bar

- Ansatz: $\psi^\pm(x,t) = A^\pm e^{j(\pm kx - \omega_k t)}$

- Für I & III: $k = j\kappa \rightarrow \kappa^2 = -\frac{2mW}{\hbar^2}$

- Für Bereich II: $k^2 = \frac{2m(W+V_0)}{\hbar^2}$

2. Kontinuumslösung

$$-k_{II} = \sqrt{\frac{2m(W+V_0)}{\hbar^2}}$$

$$-k_{I,III} = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}$$

- Transmissions-/Reflexionskoeffizient:

$$T = \frac{|A_{III}|^2}{|A_I|^2} \quad R = \frac{|A_{II}|^2}{|A_I|^2}$$

Potentialbarrieren

→ Tunneleffekt

Parabolisches Potential (harmonischer Oszillator – äquidistante Energieniveaus)

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2; W_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\psi_n(x) = \frac{c_n}{\sqrt{b}} H_n\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}}; b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Orthonormierung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{x,n}^* \psi_{k,m} dx = \begin{cases} 1 & \text{für } n = m \\ 0 & \text{für } n \neq m \end{cases}$$

Periodensystem

3-D Schrödingergleichung

$$\psi(\vec{r}) = u(x)v(y)w(z)$$

$$W_{ges} = W_x + W_y + W_z$$

Entartung: Energiezustand mit mehr als einer Realisierungsmöglichkeit

Stern-Gerlach-Versuch: Silberatome durch inhomogenes H-Feld → Spinnachweis

Fermionen: Teilchen mit halbzahligem Spin, z.B: Elek-/Pro-/Neutronen

Bosonen: ganzzahliger Spin: Photonen, Phononen

Pauli-Prinzip: Fermionen können nicht in allen QZ übereinstimmen

Born-Oppenheimer-Näherung: H-Atom: $m_{kern} \gg m_{Elektron}$

Quantenzahlen:

Hauptquantenzahl (Radius, Energie) $n = 1, 2, 3, \dots$ KLMN

Nebenq.zahl (Drehimpuls) $l = 0, 1, 2, 3, \dots (n-1)$
 $|\vec{L}| = \hbar \sqrt{l(l-1)}$

Magnetquantenzahl $m = -l, (-l+1) \dots 0 \dots (l-1), l$
 $L_z = \hbar m$

Spinquantenzahl $s = \pm \frac{1}{2} \hbar$

H-Atom Energieeigenwerte:

$$W_n = -\frac{e^4 m}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2 n^2} = -\frac{W_{Ryd}}{n^2}$$

Bohr. Atomrad.: $a_0 = 5,29 \cdot 10^{-11} m$

Bindungen

Ionenbindung, metallische B., kovalente B. (bindend, anti-bindende Zustände), Van-der-Waals-B. (permanente Dipole), Wasserstoffbrückenb. (induzierte Dipole)

Kristalle

Kristalline Festkörper

Nah- und Fernordnung

polykristalline Festkörper

Nahordnung, keine Fernordnung

amorphe Festkörper

Nahordnung, keine Periodizität

14 Bravais-Gitter: mit 3 Vektoren darstellbar

Simple cubic (sc)

einfach kubisch

body-centred-cubic (bcc)

kubisch-raumzentriert

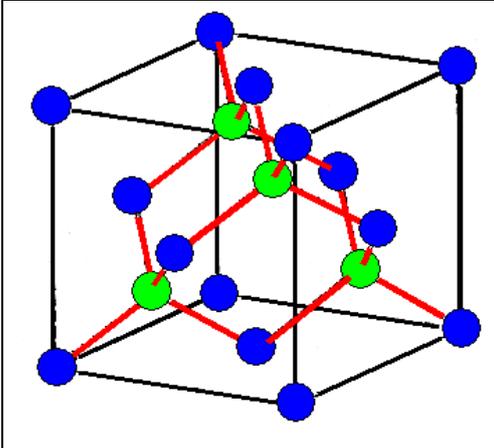
face-centred cubic (fcc)

kubisch-flächenzentriert

hexagonal close packed (hcp)

hexagonal-dichteste Packung

fcc-Gitter mit 2-atomiger Basis; Diamantgitter:



Elementhalb-leiter

4. Hauptgruppe Bsp.: Si

Binäre Halb-leiter

III-V HL: GaAs; II-VI HL: CdSe; IV-IV-HL: SiGe
--

Ternäre HL	3 Komponenten
Quaternäre HL	4 Komponenten
Kristallherstellung:	
<ul style="list-style-type: none"> - Czochralski-Verfahren: Ziehen aus Schmelze - Zonenziehprozess - Epitaxie: z.B.: Molekularstrahlepitaxie: HL aus Quellen verdampfen → Kondensation 	
Bandstrukturen	
Für $k \approx m \frac{\pi}{a} \rightarrow$ Reflexion an Gitteratomen → konstruktive Überlagerung → stehende Welle (2 Möglichkeiten)	
Bloch: $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{+j\vec{k}\vec{r}} \cdot \underset{\text{periodisch } h}{u_{n\vec{k}}(\vec{r})}$	
$\vec{k}_\Gamma = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \vec{k}_X = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \vec{k}_L = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	
Effektive Masse: $m_{eff} = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 W}{\partial k^2} \right)^{-1}$	
Gruppengeschwindigkeit: $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial W(k)}{\partial k}$	
Bloch-Oszillation: $k(t) = k(0) + \frac{F}{\hbar} t$	
Effekte zur Störung der Ausbreitung:	
<ul style="list-style-type: none"> - Verunreinigungen - Fehlstellen - Versetzungen - Gitterschwingung (Phononen) 	
$\langle \vec{v} \rangle = \frac{\vec{F}}{m_{eff}} \tau = \frac{-e\vec{E}\tau}{m_{eff}} = -\mu\vec{E} \rightarrow \mu = \frac{e\tau}{m_{eff}}$	
$\vec{j} = en\mu\vec{E} = \sigma\vec{E}$	
Gesamtleitfähigkeit: $\sigma = e(p\mu_p + n\mu_n)$	
$\mu_{Stör} \propto T^{\frac{3}{2}}; \mu_{Ph} \propto T^{-\frac{3}{2}}$	
Metalle: $\sigma > 10^6 \frac{S}{m}$	
Isolatoren: $\sigma < 10^{-8} \frac{S}{m}$	
Gunn-Effekt: großes E → Nebenminimum	
Quantenstatistik	
Würfelförmiger Halbleiterblock:	
$k_{x,y,z} = \frac{2\pi}{L} n_{x,y,z}$	
$V_{Zustand} = \frac{8\pi^3}{L^3} = \frac{8\pi^3}{V_{Kristall}}$	
$W = \frac{\hbar^2 \vec{k} ^2}{2m_{eff}}$	
$\rightarrow r_k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \sqrt{\frac{2Wm_{eff}}{\hbar^2}}$	
Anzahl Zustände:	
$N(W) = \frac{\text{V alle Zustände}}{\text{V ein Zustand}} = L^3 \frac{(2m_{eff})^{\frac{3}{2}}}{6\pi^2 \hbar^3} W^{\frac{3}{2}}$	
Energiedichte:	
$D(W) = \frac{dN(W)}{dW} = L^3 \frac{(2m_{eff})^{\frac{3}{2}}}{4\pi^2 \hbar^3} W^{\frac{1}{2}}$	
Zustandsdichte:	
$g_e(W) = 2 \frac{1}{V} \frac{dN(W)}{dW} = \frac{(2m_{eff})^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2 \hbar^3} W^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{j m^3} \right]$	
$g_e = \frac{4\pi(2m_{eff})^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{W - W_L}$	
$g_h = \frac{4\pi(2m_{eff})^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{W_V - W}$	
$N_L = 2 \left(\frac{2\pi m_{eff} k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = N_V$	
$g_L = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{N_L}{k_B T} \sqrt{\frac{W - W_L}{k_B T}}; g_V = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{N_V}{k_B T} \sqrt{\frac{W_V - W}{k_B T}}$	

$n_{th} = N_L e^{-\frac{W_L - W_F}{k_B T}}$																
Fermi-Dirac-Verteilung (für Fermionen)																
$\tilde{n}(W, T) = f(W, T) \cdot g_n(W)$ (W'keit)																
$\tilde{p}(W, T) = (1 - f(W, T)) \cdot g_p(W)$																
Boltzmann-Näherung																
Falls $e^{-\frac{W - W_F}{k_B T}} \gg 1$ (Leitungsband) und $e^{-\frac{W - W_F}{k_B T}} \ll 1$ (Valenzband):																
$f(W, T) = e^{-\frac{W - W_F}{k_B T}}$																
$1 - f(W, T) = e^{-\frac{W - W_F}{k_B T}}$																
Intrinsische Ladungsträgerdichte:																
$n_i = \sqrt{n_{th} p_{th}} = \sqrt{N_L N_V} e^{-\frac{W_G}{2k_B T}}$																
$W_F = \frac{1}{2}(W_L + W_V) + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_{eff,h}}{m_{eff,e}} \right)$																
Raumtemperatur: 10^{10} e/h pro cm^3																
Reines Si: 10^{10} bis 10^{12} Fremdatome/ cm^3																
Dotierte Halbleiter																
10^{15} bis 10^{20} Fremdatome/ cm^3 → Konz. $\sim 10^{-5}$																
Donatoren geben Elektronen ins LB ab																
Akzeptoren nehmen Elektronen vom VB auf																
Amphotere Dotanden: je nach Platz in (III-V)-HL: Akzeptor oder Donator																
<table border="1"> <tr> <td rowspan="5">Periodensystemauszug:</td> <td>III</td> <td>IV</td> <td>V</td> </tr> <tr> <td>B</td> <td>C</td> <td>N</td> </tr> <tr> <td>Al</td> <td>Si</td> <td>P</td> </tr> <tr> <td>Ga</td> <td>Ge</td> <td>As</td> </tr> <tr> <td>In</td> <td>Sn</td> <td>Sb</td> </tr> </table>	Periodensystemauszug:	III	IV	V	B	C	N	Al	Si	P	Ga	Ge	As	In	Sn	Sb
Periodensystemauszug:		III	IV	V												
		B	C	N												
		Al	Si	P												
		Ga	Ge	As												
	In	Sn	Sb													
Herstellung von Dotierungen:																
<ul style="list-style-type: none"> - Eindiffusion (schwierig besonderes Dotierprofil zu erreichen) - Ionenimplantation (Schaden an Kristall) 																
$n_D^+ = n_D (1 - f_D(W_D)) = \frac{n_D}{1 + 2e^{-\frac{W_F - W_D}{k_B T}}}$																
$n_A^- = n_A f_A(W_A) = \frac{n_A}{1 + 2e^{-\frac{W_A - W_F}{k_B T}}}$																
Ferminiveau: Besetzungswahrscheinlichkeit = 1/2																
Bei n-Leitung: Ferminiveau höher als im intrinsischen Fall																
Ladungsneutralität: $n + n_A^- = p + n_D^+$																
Massenwirkungsgesetz: $n_n p_n = n_i^2$																
$n = \sqrt{\left(\frac{n_D - n_A}{2} \right)^2 + n_i^2} + \frac{n_D - n_A}{2}$																
$p = \sqrt{\left(\frac{n_A - n_D}{2} \right)^2 + n_i^2} + \frac{n_A - n_D}{2}$																
Für n-Leiter: $n_i \ll \frac{n_D - n_A}{2}$																
Entartete HL: Ferminiveau in Band																

Temp.abhängigkeit Ferminiveau: Bsp. n-Leitung:	
T klein: Ferminiveau zw. Dotierniveau und Leitungsband	
T größer: Ferminiveau → Bandmitte	
$n(T)$: Störstellenreserve – Störstellener-schöpfung – intrinsischer Bereich	
HL im Nichtgleichgewicht	
Diffusionsstrom:	$J_{n,D} = +eD_n \frac{dn}{dx}$ $J_{p,D} = -eD_p \frac{dp}{dx}$
Einstein-Relation:	$D = \frac{k_B T}{q} \mu$
Photon: $W = h\nu$	
Silizium: Max (VB) liegt im k-Raum nicht unter Min(LB) → indirekter Halbleiter	
GaAs: direkter Halbleiter	
Spontane Emission	$r_{sp} = Bnp$
Thermische Generation	$g_{th} = Bn_i^2$
Stimulierte Emission	$r_{st} = AN_{ph} np$
Indirekte (Re)kombination: über Störstelle (Katalysator) in Bandlücke: $r_T = CN_T$	
Oberflächenprozesse → Katalysator	
Auger-Prozesse: Dreiteilchenprozesse	
Kontinuitätsgleichung (n-Leitung)	
$-e \frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \vec{J}_n$	
$\vec{J}_n = en\mu_n \vec{E} + eD_n \nabla n$	
$\frac{\partial n}{\partial t} = g_n - r_n$	
$\rightarrow -e \frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \vec{J}_n - e(g_n - r_n)$	
pn-Übergang	
Ladungsdichte $\neq 0 \rightarrow$ Bandkrümmung	
Bandstruktur = stetig	
Diffusionsspannung:	
$eU_D = W_L(-\infty) - W_L(+\infty)$	
$U_D = U_T \ln \left(\frac{n_A n_D}{n_i^2} \right); U_T = \frac{k_B T}{e}$	
Mit wachsender Dotierung: $U_D \rightarrow \frac{W_G}{e}$	
Raumladung: $n_D l_n = n_A l_p$	
$\Delta\phi = -\frac{dE}{dx} = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_r}$	
Schottky-Näherung: abrupte Raumladungsübergänge: $\frac{en_A}{2\epsilon\epsilon_0} l_p^2 = -\frac{en_D}{2\epsilon\epsilon_0} l_n^2 + U_D$	
Sperrstrom nicht stark von der angelegten Spannung abhängig	
$J(U) = e \left(\frac{D_p}{L_p} p_n + \frac{D_n}{L_n} n_p \right) \left(\exp \left(\frac{eU}{k_B T} \right) - 1 \right)$	
$I(U) = I_S \left(\exp \left(\frac{eU}{k_B T} \right) - 1 \right)$	

Gelb: wichtige Formeln (subjektiv)

Fehler und Verbesserungsvorschläge bitte an dk@dominik-kiefer.de