

Name, Vorname:

Matrikelnummer:

E-Mail-Adresse:

Erreichte Punktzahl:

Note:

Aufgabe	1	2	3	4	5	6	Σ
Punkte							
Max	7	11	9	11	8	7	53

Bitte beachten Sie:

- Zugelassene Hilfsmittel: Nicht-programmierbarer Taschenrechner, 1 Blatt (2 DIN A4 Seiten) eigene handschriftliche Notizen, ausgeteiltes Blatt (letzte Seite Ihrer Klausur) mit Konstanten-, Formel- und Integralsammlung.
- Maximal erreichbare Punktzahl: 53, zum Bestehen hinreichende Punktzahl: 27.
- Eckige Klammern am Aufgabenende geben die maximal erreichbaren Punkte je (Teil-)Aufgabe an.
- Prüfungsdauer: 120 min.
- Schreiben Sie auf **jedes** Blatt Ihren Namen und Ihre Matrikelnummer. Blätter ohne Namen und Matrikelnummer können bei der Korrektur **keine** Berücksichtigung finden!
- Legen Sie Ihren Studierendenausweis während der Klausur bereit.
- Es werden nur Aufgaben gewertet, die auf vom KIT bereitgestelltem Papier bearbeitet wurden. Sollte Ihnen das ausgehändigte Papier nicht ausreichen, wenden Sie sich an die Betreuer.
- Nur mit dokumentenechten Stiften schreiben (kein Bleistift!).
- Versehen Sie jede Aufgabe, die Sie auf einem Zusatzblatt (weiter) bearbeiten, mit einem Hinweis. Sie erleichtern damit die Korrektur.
- Begründungen, Erklärungen und ähnliches können in Stichworten verfasst werden.
- Sofern nicht anders angegeben, ist der Rechenweg nachvollziehbar darzustellen.
- Bei allen Rechnungen ist das Ergebnis bis auf die zweite signifikante Nachkommastelle anzugeben.
- Skizzen sind grundsätzlich mit den notwendigen Beschriftungen zu versehen.

1. Grundlagen der Quantenmechanik [7P]

- a) Die Kaliumkathode einer Vakuumphotozelle werde mit monochromatischer UV-Strahlung ($\lambda = 200 \text{ nm}$) bestrahlt. Berechnen Sie die kinetische Energie der ausgelösten Photoelektronen, wenn die Austrittsarbeit $W_a = 2,25 \text{ eV}$ beträgt! Was sind die Folgen einer Änderung der Strahlintensität für die kinetische Energie und die Anzahl der ausgelösten Photoelektronen? Begründen Sie Ihre Antwort! [2P]

$$E_{\text{kin}} = hf - W_a = h \frac{c}{\lambda} - W_a$$

$$\Rightarrow E_{\text{kin}} = 6,33 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 3,95 \text{ eV}$$

Die Energie ergibt sich unabhängig von der Strahlintensität als Differenz aus der Photonenenergie und der Austrittsarbeit. Die Zahl der ausgelösten Photoelektronen ist proportional zur Zahl der einfallenden Photonen und diese wiederum proportional zur Strahlintensität.

- b) Abbildung 1 zeigt schematisch den Aufbau des Doppelspaltexperiments mit Elektronen. Skizzieren Sie die Auftreffwahrscheinlichkeiten für Elektronen! Was folgt daraus für die Natur der Elektronen? [1P]

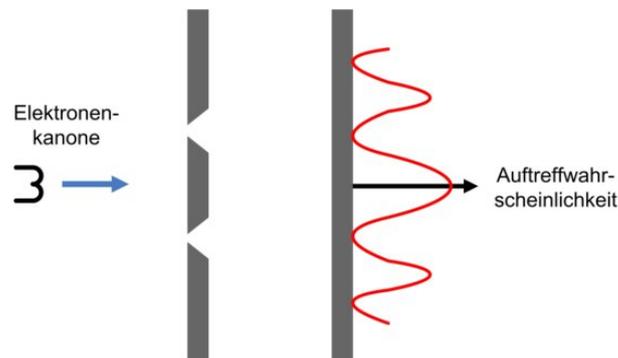


Abbildung 1: Lösung Doppelspalt-Experiment

Mit zwei offenen Spalten bilden sich Interferenzen aus. Diese Aspekte des Doppelspaltexperiments belegen die Wellennatur der Elektronen.

- c) Wie groß ist die kinetische Energie eines freien Protons, wenn seine De-Broglie-Wellenlänge $0,6 \text{ nm}$ beträgt? Gehen Sie von einem nicht-relativistischen Proton aus. [1P]

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m}$$

$$\Rightarrow p = 1,10 \cdot 10^{-24} \frac{\text{kgm}}{\text{s}}; \quad E_{\text{kin}} = 3,65 \cdot 10^{-22} \text{ J} = 2,28 \text{ meV}$$

Betrachten Sie für die folgenden Aufgabenteile d) und e) ein freies quantenmechanisches Teilchen mit der Wellenfunktion

$$\psi(x,t) = Ae^{j(kx-\omega t)}.$$

- d) Welche räumliche Abhängigkeit ergibt sich für die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(x,t)|^2$? Erklären Sie die physikalische Bedeutung Ihres Ergebnisses! [1P]

Die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion:

$$|\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t) = A^*e^{-j(kx-\omega t)}Ae^{j(kx-\omega t)} = |A|^2$$

Dieses ist konstant und somit ohne räumliche Abhängigkeit. Das freie Teilchen ist deshalb von $x = -\infty \dots + \infty$ vollständig delokalisiert.

- e) Bestimmen Sie den Erwartungswert der kinetischen Energie $\langle \hat{W}_{\text{kin}} \rangle$ für $\psi(x,t)$! [2P]

Herleitung des Operators für die kinetische Energie:

Klassisch gilt $W_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv_G^2 = \frac{p^2}{2m}$

Der Impulsoperator lautet $\hat{p} = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Setzt man diesen in die klassische Energie ein, so erhält man den quantenmechanischen Ansatz $\hat{W}_{\text{kin}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

$$\begin{aligned} \langle \hat{W}_{\text{kin}} \rangle &= \frac{\int \psi^*(x,t) \hat{W}_{\text{kin}} \psi(x,t) dx}{\int \psi^*(x,t) \psi(x,t) dx} \\ \langle \hat{W}_{\text{kin}} \rangle &= \frac{\int A^* e^{-j(kx-\omega t)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) A e^{j(kx-\omega t)} dx}{\int A^* e^{-j(kx-\omega t)} A e^{j(kx-\omega t)} dx} \\ \langle \hat{W}_{\text{kin}} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} jk \frac{\int A^* e^{-j(kx-\omega t)} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) A e^{j(kx-\omega t)} dx}{\int A^* e^{-j(kx-\omega t)} A e^{j(kx-\omega t)} dx} \\ \langle \hat{W}_{\text{kin}} \rangle &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{\int A^* e^{-j(kx-\omega t)} A e^{j(kx-\omega t)} dx}{\int A^* e^{-j(kx-\omega t)} A e^{j(kx-\omega t)} dx} \\ \langle \hat{W}_{\text{kin}} \rangle &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{aligned}$$

2. Potentialtopf und Potentialstufe [11P]

- a) Skizzieren Sie einen endlichen Potentialtopf der Höhe V_0 und Breite L für Elektronen (im Topf sei $V = 0$ und außerhalb $V = V_0$)! Achten Sie auf eine korrekte Achsenbeschriftung! Zeichnen Sie zusätzlich die Wellenfunktionen (Realteil) von zwei Eigenfunktionen mit Energien $W > V_0$ und die Wellenfunktionen (Realteil) von drei Eigenfunktionen mit den niedrigsten Energien $W < V_0$! [2P]

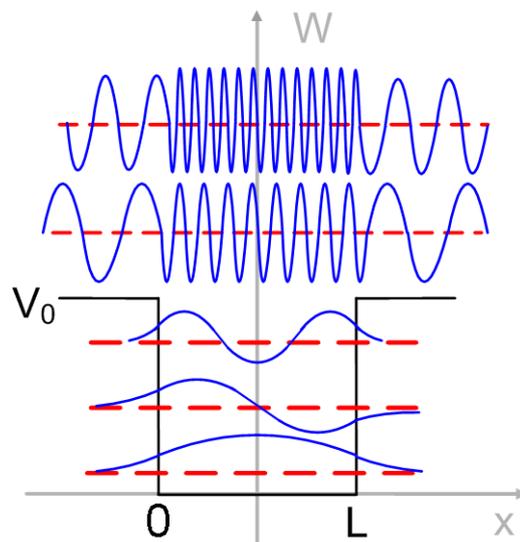


Abbildung L2

- b) Worin unterscheiden sich die Wellenfunktionen für $W > V_0$ und $W < V_0$? [1P]

$W > V_0$: Kontinuumslösung, Energiekontinuum, nicht normierbar, Eigenenergie des Elektrons reicht aus um den Topf zu verlassen, delokalisiert;

$W < V_0$: gebundene Lösung, diskrete Energieniveaus, normierbar, Elektron lokalisiert im Potentialtopf + exp. Abfall in der Barriere;

- c) Zeigen Sie anhand einer Skizze, wie sich das Aussehen der Lösungen für $V_0 \rightarrow \infty$ verändert. [1P]

Mit unendlich hohen Wänden wird der endliche zum unendlichen Potentialtopf. Dann ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in den Barrieren Null, die Wellenfunktion hat an der Grenze einen Knoten. Natürlich gibt es im unendlichen Potentialtopf auch keine ungebundenen Lösungen.

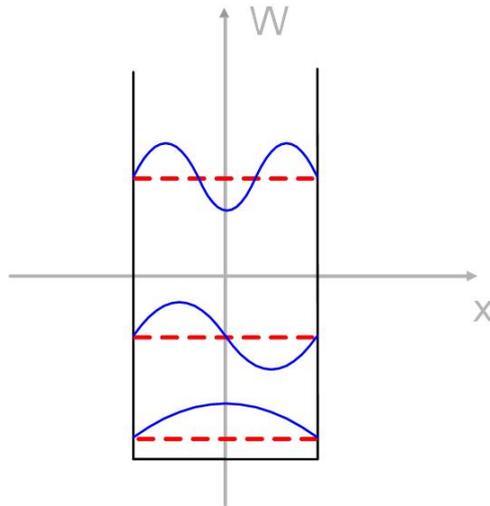


Abbildung L3

Wir betrachten im Folgenden eine Potentialstufe der Form:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x \geq 0 \text{ (Bereich I)} \\ V_0 & \text{für } x < 0 \text{ (Bereich II)} \end{cases}$$

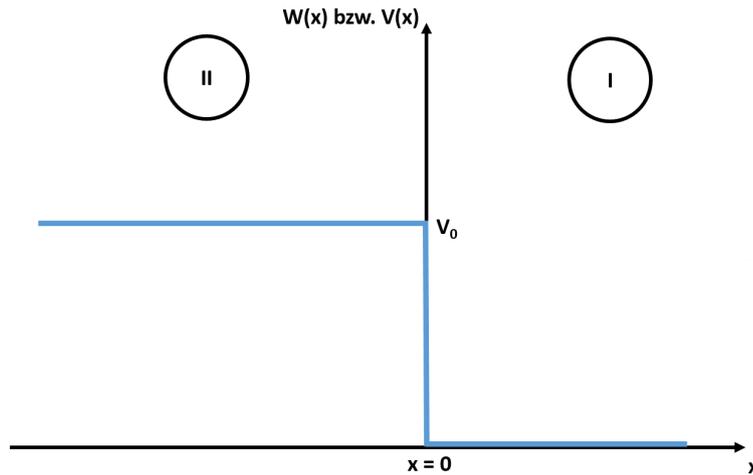
mit $V_0 > 0$. Von $x = +\infty$ kommend laufe eine ebene Welle mit der Energie $W < V_0$ ein. Wir wählen für die Welle den folgenden mathematischen Ansatz:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(x) &= e^{-jk_{\text{I}}x} + r e^{jk_{\text{I}}x} & \text{(Bereich I)} \\ \psi_{\text{II}}(x) &= t e^{-jk_{\text{II}}x} & \text{(Bereich II)} \end{aligned}$$

mit r der Reflexions- und t der Transmissionsamplitude (demnach hat der einlaufende Anteil der Welle die Amplitude 1). Die Wellenzahlen in den Bereichen I und II ergeben sich aus der Schrödingergleichung zu:

$$\begin{aligned} k_{\text{I}} &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mW} & \text{(Bereich I)} \\ k_{\text{II}} &= j \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - W)} =: j\kappa_{\text{II}} & \text{(Bereich II)} \end{aligned}$$

- d) Skizzieren Sie das Potential und achten Sie auf eine korrekte Achsenbeschriftung!
[0,5P]



- e) Beschreiben Sie stichwortartig das Verhalten an der Stelle $x = 0$, wenn man die Welle entweder als (i) klassisches Teilchen oder als (ii) quantenmechanisches Teilchen interpretiert! [1P]

(i) Das klassische Teilchen wird vollständig an der Barriere reflektiert.

(ii) Das quantenmechanische Teilchen kann mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit in die Barriere eindringen.

- f) Berechnen Sie mithilfe der Stetigkeitsbedingungen die Reflexions- und Transmissionsamplituden in Abhängigkeit der Wellenzahlen k_I und k_{II} ! [2P]

Stetigkeit der Welle in $x = 0$ liefert die Randbedingungen:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0)$$

Somit ergibt sich:

$$1 + r = t$$

$$-jk_I + jk_I r = -jk_{II} t$$

Schließlich folgt:

$$r = \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}$$

$$t = \frac{2k_I}{k_I + k_{II}}$$

- g) In der Übung wurde gezeigt, dass der Term $\frac{\hbar}{j2m} (\psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi)$ als eine Teilchenstromdichte \vec{J} interpretiert werden kann. Berechnen Sie diese für den

einlaufenden Anteil der Welle in Bereich I in Abhängigkeit von W ! [1P]

Für den einlaufenden Anteil der Welle in Bereich I gilt:

$$\psi(x) = e^{-jk_1x}$$

Somit ergibt sich:

$$\begin{aligned} J &= \frac{\hbar}{j2m} \left(\psi^* \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \psi \right) \\ J &= \frac{\hbar}{j2m} \left(e^{jk_1x} (-jk_1 e^{-jk_1x}) - (jk_1 e^{jk_1x}) e^{-jk_1x} \right) \\ \frac{\hbar}{j2m} (-jk_1 - jk_1) &= -\frac{\hbar k_1}{m} = -\frac{\sqrt{2mW}}{m} \end{aligned}$$

- h) Es sei $V_0 = 1,0 \text{ eV}$. Betrachten Sie ein Elektron mit der Energie $W = 0,9 \text{ eV}$! Für die Masse des Elektrons können Sie die freie Elektronenmasse annehmen. Berechnen Sie das Verhältnis $\frac{P_1}{P_{\text{Rest}}}$, wobei P_1 die Wahrscheinlichkeit ist, mit der das Elektron im ersten Angström der Barriere anzutreffen ist! P_{Rest} ist die Wahrscheinlichkeit, mit der das Elektron im Rest der Barriere anzutreffen ist. Das Ergebnis ist als Zahlenwert anzugeben! (Hinweis: Integrieren Sie geeignet über das Betragsquadrat der Wellenfunktion!) [2,5P]

Laut Aufgabenstellung sind für den Bereich II Wahrscheinlichkeiten zu berechnen, da wir uns in der Barriere befinden. Die Wahrscheinlichkeit für das Antreffen des Elektrons im ersten Angström der Barriere ergibt sich mit $x_0 = -1 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ zu:

$$P_1 = \int_{x_0}^0 |\psi_{\text{II}}(x)|^2 dx = \int_{x_0}^0 |t|^2 e^{-2jk_{\text{II}}x} dx = \int_{x_0}^0 |t|^2 e^{2\kappa_{\text{II}}x} dx = \frac{|t|^2}{2\kappa_{\text{II}}} (1 - e^{2\kappa_{\text{II}}x_0})$$

Die Wahrscheinlichkeit für das Antreffen des Elektrons im Rest der Barriere ergibt sich analog zu:

$$P_{\text{Rest}} = \int_{-\infty}^{x_0} |\psi_{\text{II}}(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{x_0} |t|^2 e^{-2jk_{\text{II}}x} dx = \int_{-\infty}^{x_0} |t|^2 e^{2\kappa_{\text{II}}x} dx = \frac{|t|^2}{2\kappa_{\text{II}}} (e^{2\kappa_{\text{II}}x_0})$$

Daraus ergibt sich mit $x_0 = -1 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ das folgende Verhältnis:

$$\frac{P_1}{P_{\text{Rest}}} = \frac{1 - e^{2\kappa_{\text{II}}x_0}}{e^{2\kappa_{\text{II}}x_0}} = e^{-2\kappa_{\text{II}}x_0} - 1 = e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - W)} x_0} - 1 \approx 0,38$$

3. Wasserstoffatom [9P]

- a) Das Wasserstoffatom kann durch ein Zweiteilchensystem (Elektron e und Kern K) beschrieben werden. Die zugehörige Schrödingergleichung lässt sich wie folgt formulieren:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_K} \Delta_K - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r} \right) \psi(\vec{r}_e, \vec{r}_K) = W\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_K)$$

Kennzeichnen Sie, welcher Term im Rahmen der Born-Oppenheimer-Näherung zunächst vernachlässigt wird, und begründen Sie, warum dies zulässig ist! [1P]

Da der Kern laut Formelsammlung viel schwerer ist als das Elektron ($m_K \approx 1833m_e$), kann man die langsamen Bewegungen des Kerns gegenüber der schnellen Elektronenbewegung vernachlässigen), d.h. $\frac{\hbar^2}{2m_K} \Delta_K \approx 0$

- b) Der quantenmechanische Zustand eines Elektrons im Wasserstoffatom lässt sich durch die vier Quantenzahlen (n, l, m, s) beschreiben. Benennen Sie mindestens drei der vier Quantenzahlen und erklären Sie deren Bedeutung! [3P]

Von den hier aufgeführten vier Quantenzahlen müssen mindestens drei genannt und erklärt werden.

Hauptquantenzahl: Energieeigenwert, Kernabstand des Elektrons, Schale

Nebenquantenzahl/Drehimpulsquantenzahl: Form des Orbitals, Bahndrehimpuls des Elektrons

Magnetquantenzahl: räumliche Ausrichtung des Orbitals bezüglich eines äußeren Magnetfelds

Spinquantenzahl: Eigendrehimpuls des Elektrons

- c) Die Wellenfunktionen für das Wasserstoffatom lassen sich über einen Separationsansatz in Kugelkoordinaten berechnen. Ein Zustand wird dabei über das Tupel (n, l, m) räumlicher Quantenzahlen definiert. Geben Sie die Wellenfunktion $\psi_{n,l,m}$ des ersten angeregten Zustands im s-Orbital in Abhängigkeit vom Bohrschen Atomradius a_0 und vom Kernabstand r an! Verwenden Sie dazu die unten angegebenen normierten radialen Eigenfunktionen und Kugelflächenfunktionen, welche die Wellenfunktion bestimmen! (Hinweis: Beachten Sie, dass s-Orbitale eine kugelsymmetrische Form aufweisen!) [2P]

$$\psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

n	l	m	$R_{n,l}(r)$	$Y_{l,m}(\theta, \phi)$
1	0	0	$2Ne^{-x}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
2	0	0	$2Ne^{-x}(1-x)$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
2	1	0	$\frac{2}{\sqrt{3}}Ne^{-x}$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos(\theta)$
2	1	+1	$\frac{2}{\sqrt{3}}Ne^{-x}$	$-\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin(\theta)e^{j\phi}$
2	1	-1	$\frac{2}{\sqrt{3}}Ne^{-x}$	$\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin(\theta)e^{-j\phi}$

mit $N = \left(\frac{1}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}}$ und $x = \frac{r}{na_0}$

Der erste angeregte Zustand im s-Orbital wird durch $(n,l,m) = (2,0,0)$ repräsentiert. Daraus folgt direkt durch Einsetzen:

$$\psi_{2,0,0} = 2Ne^{-x}(1-x)\frac{1}{2\sqrt{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{2a_0}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)$$

- d) Berechnet man die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte für die Wellenfunktion des Grundzustands $\psi_{1,0,0}$ so erhält man den in Abbildung 2 dargestellten Verlauf über $\frac{r}{a_0}$. Bestimmen Sie aus der Zeichnung näherungsweise das Verhältnis $\frac{r}{a_0}$ für den wahrscheinlichsten Wert sowie für den Erwartungswert der radialen Wahrscheinlichkeitsdichte! Warum unterscheiden sich diese voneinander? [2P]

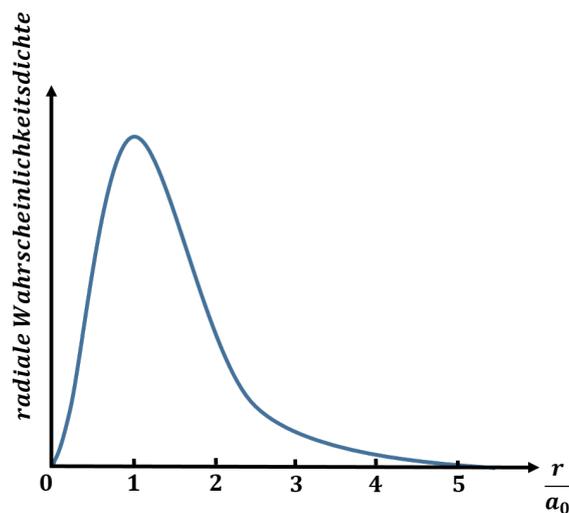


Abbildung 2

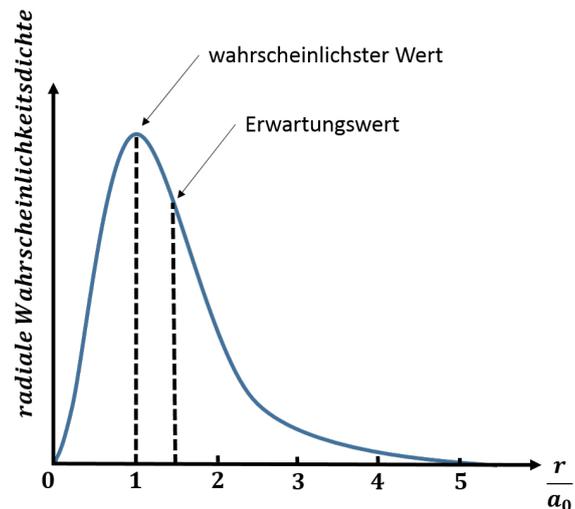


Abbildung 3

wahrscheinlichster Wert: $\frac{r}{a_0} \approx 1$

Erwartungswert: $\frac{r}{a_0} \approx 1,5$

Erwartungswerte basieren auf einer Mittelwertbildung bzw. geben den Schwerpunkt der Funktion an, wohingegen der wahrscheinlichste Wert lediglich aus dem Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte resultiert.

- e) Die Eigenenergien des Wasserstoff-Elektrons im Potential eines Protons lassen sich zu $W_n = -W_{\text{Ryd}} \frac{1}{n^2}$ mit $W_{\text{Ryd}} = 13,6 \text{ eV}$ und $n = 1, 2, \dots$ berechnen. Bestimmen Sie eine von n abhängige Formel zur Berechnung der Wellenlänge λ der Strahlung, die bei Übergängen der Balmer-Serie (Übergänge in Zustände mit $n = 2$) emittiert wird! [1P]

Die Balmer-Serie beschreibt die optischen Übergänge, bei denen ein Elektron ausgehend von einem höheren Zustand in den Zustand $n = 2$ relaxiert. Somit gilt:

$$W = W_n - W_2 = -W_{\text{Ryd}} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{4} \right)$$

Ferner gilt:

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{W}$$

Somit folgt:

$$\lambda = -\frac{hc}{W_{\text{Ryd}} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{4} \right)}$$

4. Zustandsdichte und Fermi-Dirac-Verteilung [11P]

- a) In Abbildung 4 sind vier Halbleiterstrukturen unterschiedlicher Dimensionalität abgebildet. Ein Volumen-Halbleiter (3-dimensional), ein Quantentopf (2-dimensional), ein Quantendraht (1-dimensional) und ein Quantenpunkt (0-dimensional). Die zu den Strukturen gehörigen Zustandsdichten $g(W)$ sind in Abbildung 5 a)-d) dargestellt. Ordnen Sie die Zustandsdichten a)-d) aus Abbildung 5 den jeweiligen Strukturen in Abbildung 4 zu! Nutzen Sie für eine eindeutige Zuordnung die Kästchen unter den Strukturen in Abbildung 4! [1,5P]

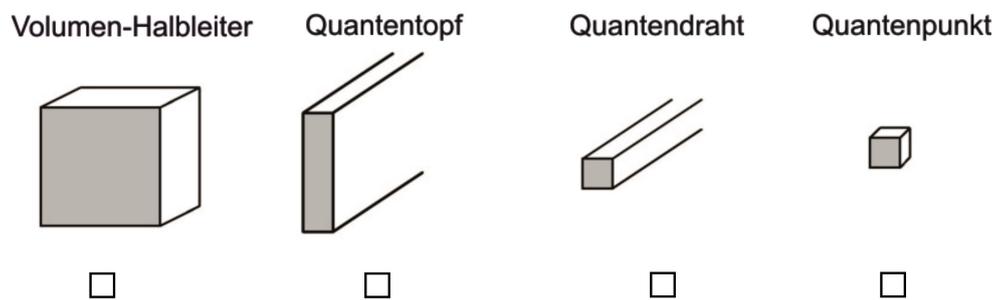


Abbildung 4: Quantenstrukturen vier verschiedener Halbleiterstrukturen.

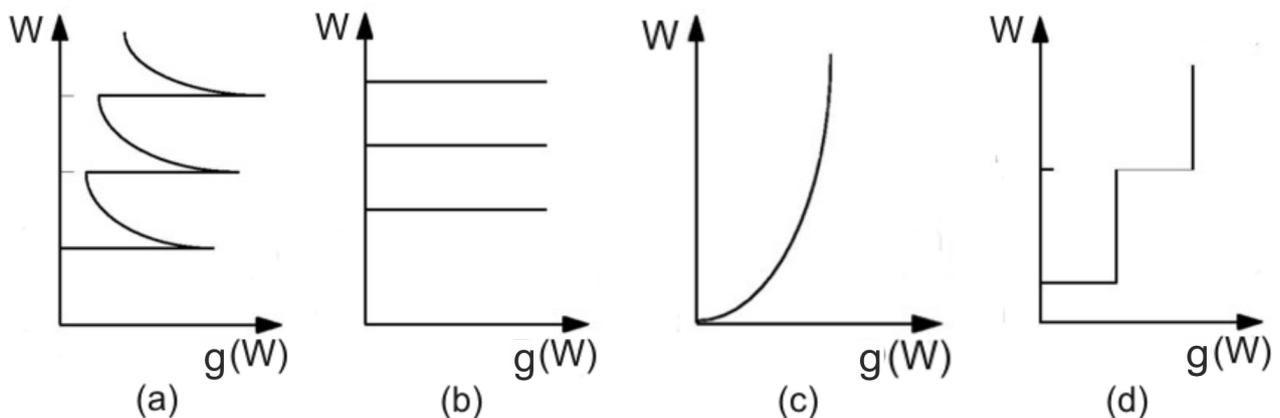


Abbildung 5: Zustandsdichten $g(W)$ vier verschiedener Halbleiterstrukturen.

Volumen-Halbleiter: (c)

Quantentopf: (d)

Quantendraht: (a)

Quantenpunkt: (b)

- b) Wie lautet die Formel für die Fermi-Dirac-Verteilung $f_{FD}(W,T)$ und was beschreibt diese? [1P]

$$f_{\text{FD}}(W, T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{W - W_F}{k_B T}\right)}$$

Die Fermi-Dirac-Verteilung beschreibt die Besetzungswahrscheinlichkeit eines Zustandes einer bestimmten Energie W in Abhängigkeit von der Temperatur und der Fermienergie.

- c) Für welche Fälle kann statt der Fermi-Dirac-Funktion die Boltzmann-Verteilung verwendet werden? [0,5P]

Die Boltzmann-Näherung ist gültig für $|W - W_F| \gg k_B T$.

- d) Wir gehen nun von einem intrinsischen **dreidimensionalen** Halbleiter mit gleichen effektiven Massen für Elektronen und Löcher bei Raumtemperatur aus. Zeichnen Sie folgende Zusammenhänge in die dafür vorgesehenen Schaubilder in Abbildung 6: [1,5P]

- Energieabhängige Zustandsdichte für Elektronen und Löcher $g_L(W)$ und $g_V(W)$
- Energieabhängige Fermi-Dirac-Verteilung $f_{\text{FD}}(W)$
- Energieabhängige Ladungsträgerdichte $\tilde{n}(W)$ und $\tilde{p}(W)$

- e) Leiten Sie die Zustandsdichte $g_{1D}(W)$ für einen **eindimensionalen** Quantendraht der Länge L her! Die parabolische Näherung für das Leitungsband sei gültig. [2,5P]

$$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$k^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}$$

$$k_R = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}$$

Länge eines Zustandes auf der k -Achse: $L_{\text{Zustand}} = \frac{2\pi}{L}$

$$N(W) = \frac{L_{\text{Strecke}}}{L_{\text{Zustand}}} = \frac{2k_R}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{\sqrt{2mW}L}{\hbar\pi}$$

$$D(W) = \frac{dN(W)}{dW} = \frac{\sqrt{m}L}{\hbar\pi\sqrt{2W}}$$

$$g(W) = 2 \frac{1}{L} D(W) = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar\pi} \frac{1}{\sqrt{W}}$$

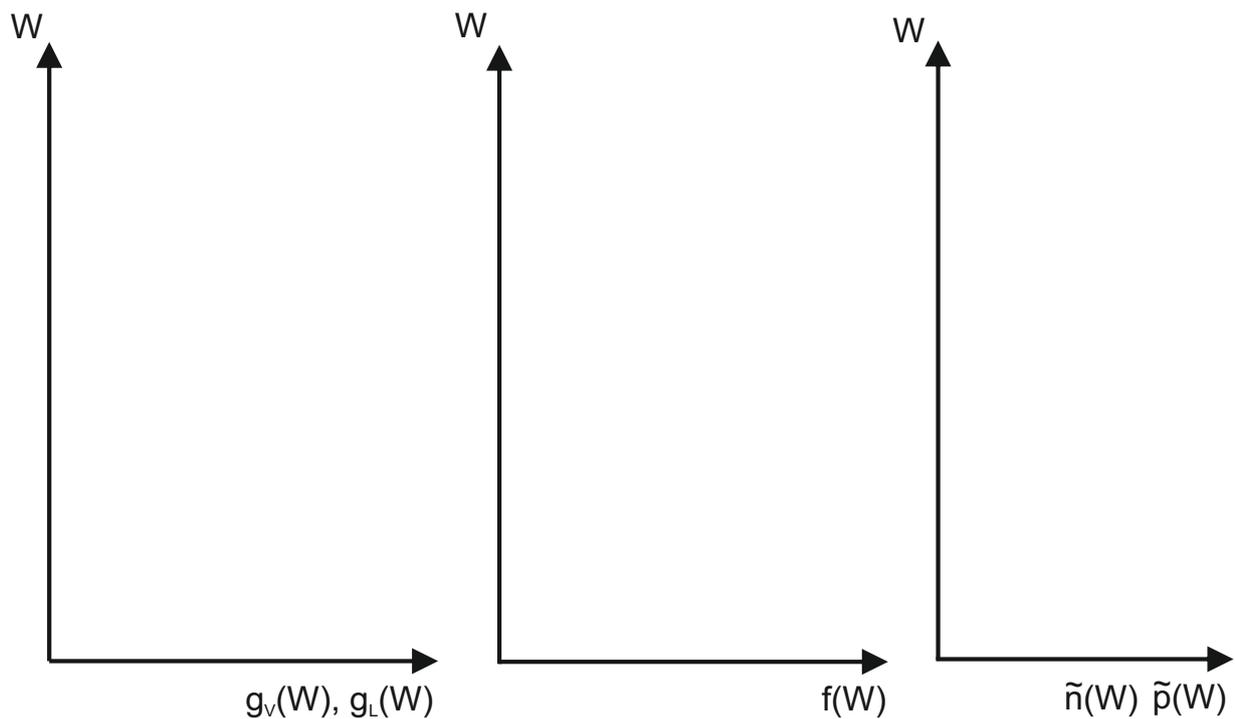


Abbildung 6: Koordinatensysteme für Aufgabe 4d)

- f) Die flächennormierte Zustandsdichte im Leitungsband eines **zweidimensionalen** Halbleiters lautet

$$g(W)_{2D} = \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum_n \theta(W - W_n) \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

mit

$$W_n = \frac{n^2}{2} \cdot 1 \text{ eV}$$

und

$$\theta(W - W_n) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } W - W_n \geq 0 \\ 0 & \text{wenn } W - W_n < 0 \end{cases}$$

- Zeichnen Sie $g(W)_{2D}$ in das vorgegebene Diagramm in Abbildung 8!
- Bei welcher Energie liegt der niedrigste mögliche Zustand im Leitungsband des Halbleiters?
- Wir betrachten nun den Energiebereich zwischen 2,49 eV und 2,51 eV. Wie viele Zustände sind in dem Halbleiter der Fläche $A = 2 \text{ mm}^2$ vorhanden? Es gelte $m = m_e$. [4P]

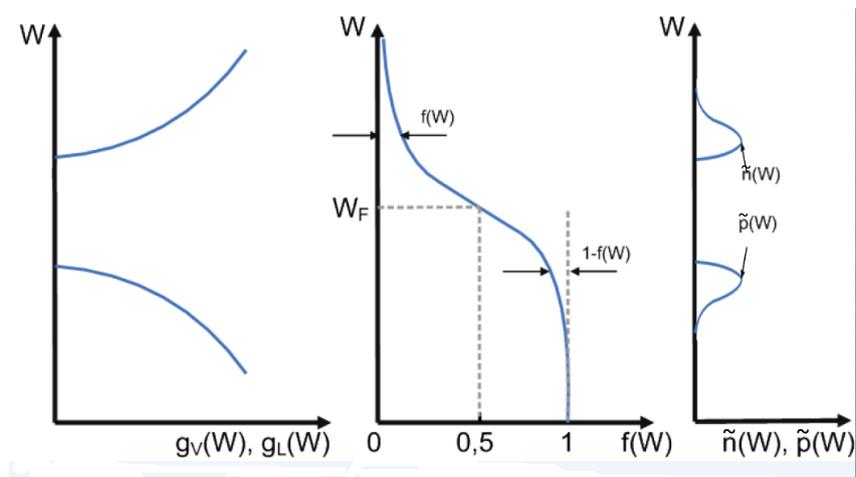


Abbildung 7: Energie über Zustandsdichte, Fermi-Dirac-Verteilung und Ladungsträgerdichte

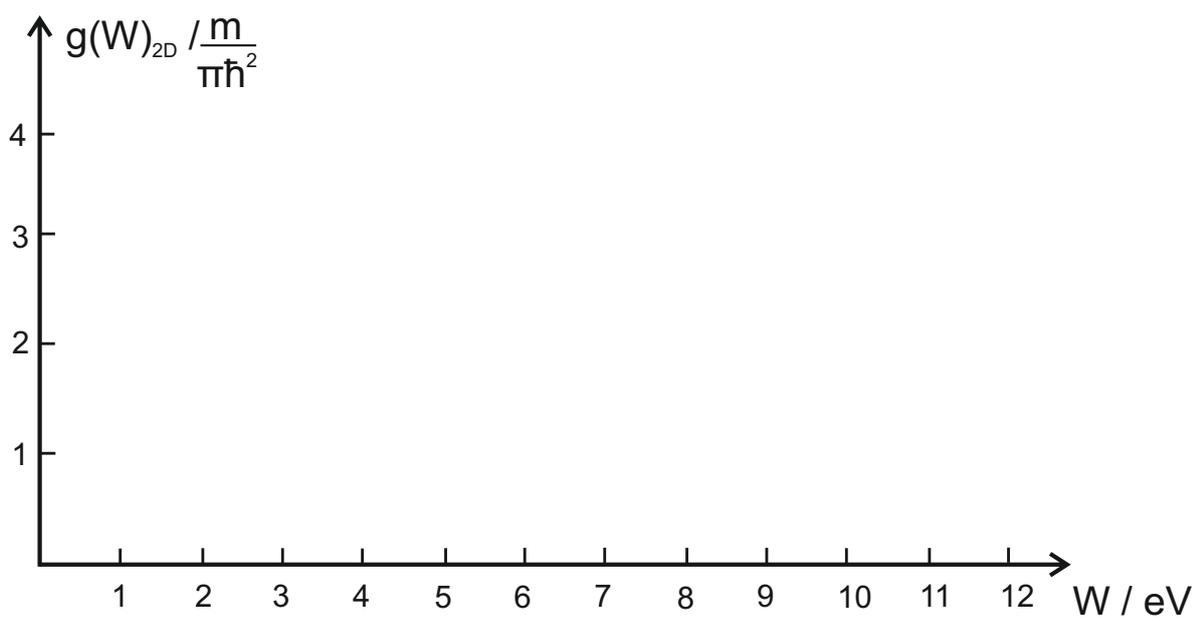


Abbildung 8: Vorlage für Zustandsdichte in 2D

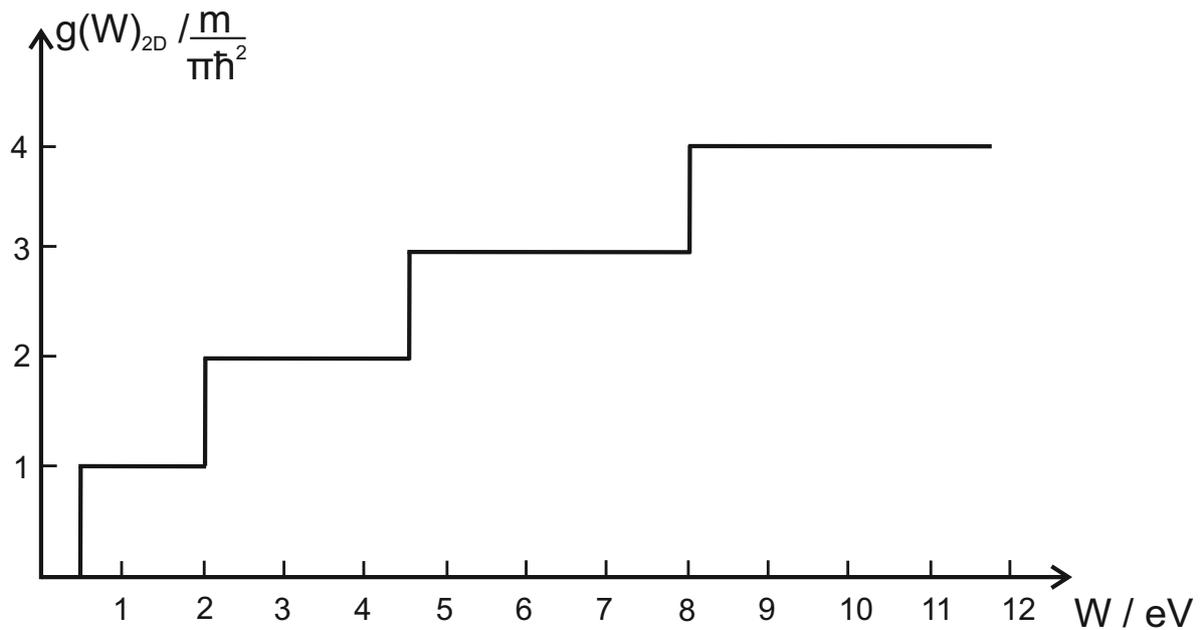


Abbildung 9: Vorlage für Zustandsdichte in 2D

Leitungsbandkante für $n=1$ bei $0,5 \text{ eV}$

$$\text{Zustandsdichte} = \frac{\text{Anzahl der Zustände}}{\text{Energieintervall} \cdot \text{Fläche}}$$

$$\text{Anzahl der Zustände} = \text{Zustandsdichte} \cdot \text{Energieintervall} \cdot \text{Fläche}$$

$$g(2 \text{ eV} < W < 4,5 \text{ eV})_{2\text{D}} = \frac{2m}{\pi \hbar^2} = 5,21 \cdot 10^{37} \frac{1}{\text{Jm}^2} \text{ (wegen Heavisidefunktion!)}$$

Energieintervall:

$$0,02 \text{ eV} = 3,2 \cdot 10^{-21} \text{ J}$$

$$\text{Anzahl der Zustände} = 5,21 \cdot 10^{37} \frac{1}{\text{Jm}^2} \cdot 3,2 \cdot 10^{-21} \text{ J} \cdot 2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 = 3,33 \cdot 10^{11}$$

5. Kristalle und Halbleiter [8P]

a) Wir betrachten eine konventionelle Einheitszelle eines kubisch-flächenzentrierten (fcc-) Kristallgitters mit zweiatomiger Basis. [1P]

- Wie viele Atome werden zur Einheitszelle gezählt?
- Welchem Kristallgitter entspricht das fcc-Gitter im reziproken Raum?

$$\text{Anzahl Atome} = \left(8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2}\right) \cdot 2 = 8$$

fcc im realen Raum ist bcc (kubisch-raumzentriert) im reziproken Raum.

b) Wir betrachten einen Festkörper entsprechend Aufgabe a), der in einem fcc-Gitter (mit Gitterkonstante a) mit zweiatomiger Basis kristallisiert. Er hat eine Dichte von $\rho = 2,336 \text{ g cm}^{-3}$ und eine molare Masse von $M = 28,09 \text{ g mol}^{-1}$. Berechnen Sie die Gitterkonstante a ! [1P]

Mit einer zweiatomigen Basis beträgt die Gitterkonstante a :

$$a = \sqrt[3]{\frac{m}{\rho}} = \sqrt[3]{\frac{8 \cdot M \cdot \frac{1}{N_A}}{\rho}} = \sqrt[3]{\frac{8 \cdot 28,09 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot \frac{1}{6,02 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}}}}{2,336 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}}} \approx 5,43 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 0,543 \text{ nm}$$

c) Nennen Sie mindestens zwei charakteristische Eigenschaften eines Halbleiters! [1P]
Zwei Stichpunkte müssen genannt werden. Z.B.:

- *Leitfähigkeit eines Halbleiters liegt zwischen der von elektrischen Leitern und der von Isolatoren*
- *Leitfähigkeit ist stark von der Temperatur abhängig*
- *Bandlücke ist gering genug, dass Ladungsträger bei genügend hoher Temperatur ins Leitungsband angehoben werden*

In der Übung haben Sie das Kronig-Penney-Modell kennen gelernt. Die Berechnungen der Wellenfunktionen in diesem Modell führen zu einem Gleichungssystem, das nur gelöst werden kann, wenn seine Determinante null beträgt. Ein ähnliches Modell mit einem unterschiedlichen Potentialverlauf (hier nicht näher beschrieben) bringt ebenfalls ein solches Gleichungssystem hervor. Für die Lösbarkeit des Gleichungssystems muss folgende Gleichung gelöst werden:

$$\cos(Gd) = f(kd) = \cos(kd) + \frac{dmD}{\hbar^2} \frac{\sin(kd)}{kd} \quad (1)$$

Diese Bedingung ist in der folgenden Abbildung graphisch dargestellt.

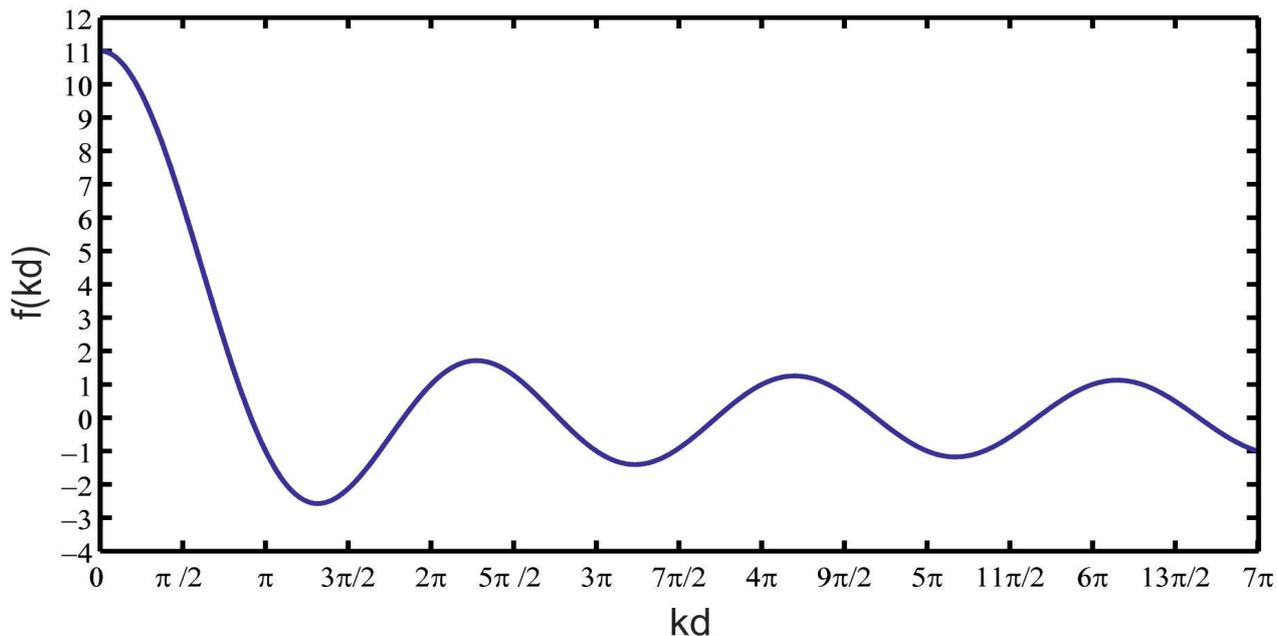
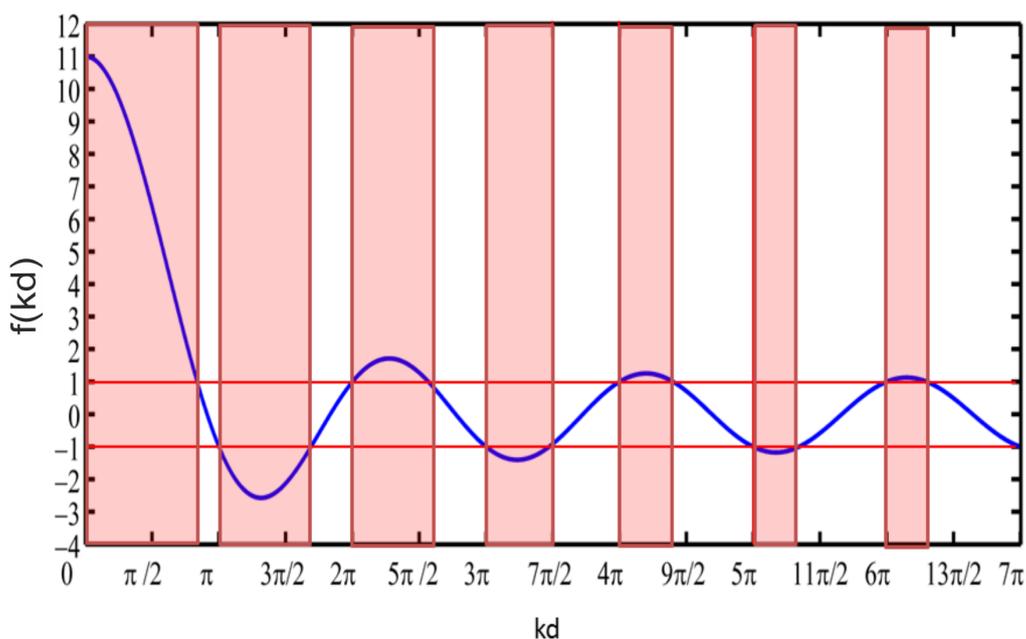


Abbildung 10: $f(kd) = \cos(kd) + \frac{dmD}{\hbar^2} \frac{\sin(kd)}{kd}$ für $\frac{dmD}{\hbar^2} = 10$

- d) Kennzeichnen Sie im Graphen in Abbildung 10 die Bereiche für kd , in denen Gleichung (1) analytisch gelöst werden kann und somit eine Lösung für das oben genannte Gleichungssystem existiert! Hinweis: Beachten Sie den Wertebereich der Cosinus-Funktion! [2P]

Nur k , für die die linke Seite Werte zwischen -1 und 1 annimmt (wegen Wertebereich des Cosinus)



- e) Bei welchen Werten für kd beginnt jeweils der Bereich, in dem keine Lösung existiert? Welchen Energiewerten entsprechen diese Werte? Gehen Sie für die Bestimmung der Energiewerte zunächst von der Dispersionsrelation des freien Elektrons aus! [2P]

Entweder durch Ablesen aus der Zeichnung oder durch Beachtung der trigonometrischen Funktionen auf der rechten Seite von Gleichung (1) ($\sin(n\pi) = 0$ und $\cos(n\pi) = (-1)^n$) ergibt sich:

$$kd = n\pi$$

Auflösen nach k :

$$k = \frac{n\pi}{d}$$

Einsetzen in Dispersionsrelation des freien Elektrons:

$$W_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2md^2}$$

- f) Wie werden in einem Banddiagramm die Bereiche genannt, in denen keine Lösung für Gleichung (1) existiert? [1P]

Bandlücken

6. Halbleiter im Nichtgleichgewicht [7P]

- a) Geben Sie die Gleichung an, mit der Sie die Entwicklung der Ladungsträgerdichten in Abhängigkeit der verschiedenen Beiträge in Abbildung 11 berechnen können! Beschreiben Sie zusätzlich die Bedeutung der einzelnen Terme! [1,5P]

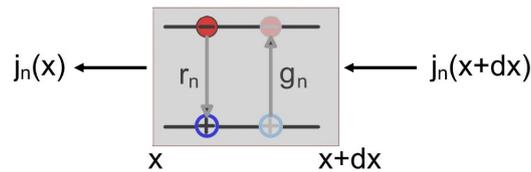


Abbildung 11

Die gesuchte Gleichung ist die Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x} + g_n - r_n$$

Bedeutung der einzelnen Terme:

$\frac{\partial n}{\partial t}$: zeitliche Änderung der Ladungsträgerdichte,

$\frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x}$: Einfluss durch Ladungsträgerströme,

g_n : Einfluss durch Generationsprozesse,

r_n : Einfluss durch Rekombinationsprozesse.

- b) Geben sie die allgemeinen formalen Zusammenhänge für Drift- und Diffusionsströme in drei Dimensionen an und beschreiben Sie jeweils deren Ursache! [2P]

Die Ursache für einen Driftstrom ist ein angelegtes elektrisches Feld:

$$j_{\text{Drift}} = e (n\mu_n + p\mu_p) E$$

Die Ursache für einen Diffusionsstrom ist ein Gradient in der Ladungsträgerdichte

$$j_{\text{Diff}} = e (D_n \nabla n - D_p \nabla p)$$

Betrachten Sie für die folgenden Aufgabenteile c), d) und e) einen stark n-dotierten Halbleiter (mit Donatorenkonzentration n_D) bei Raumtemperatur. Der Halbleiter wird konstant beleuchtet, so dass im gesamten Halbleiter Elektron-Lochpaare ($\hat{=}$ Überschussladungsträgerdichte $\Delta p \ll n_D$) räumlich homogen mit der Generationsrate

g_p erzeugt werden. Nehmen Sie für die Rekombinationsrate $r_p = \Delta p / \tau_p$ an, wobei τ_p die Lebensdauer der Elektron-Lochpaare ist. Weiterhin sei kein äußeres elektrisches Feld angelegt.

- c) Leiten Sie aus einer vereinfachten Kontinuitätsgleichung für Δp einen Ausdruck für Δp in Abhängigkeit von g_p und τ_p ab! Beachten Sie hierbei die Annahmen aus der Aufgabenstellung! [1P]

Die Kontinuitätsgleichung für Δp lautet:

$$\frac{\partial \Delta p}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial j_p}{\partial x} + g_p - r_p.$$

Es gilt $\frac{\partial \Delta p}{\partial t} = 0$, da konstant beleuchtet wird. Außerdem räumlich homogene Beleuchtung. Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} 0 &= g_p - \frac{\Delta p}{\tau_p} \\ \Rightarrow \Delta p &= g_p \tau_p = \text{const.} \end{aligned}$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ werde die Beleuchtung des Halbleiters schlagartig abgeschaltet.

- d) Leiten Sie aus einer vereinfachten Kontinuitätsgleichung für Δp eine Differentialgleichung für $\Delta p(t)$ für $t > 0$ her! [1P]

Ohne Beleuchtung werden keine Überschussladungsträger mehr generiert und es folgt $g_p = 0$. Verbleibende Überschussladungsträger Δp rekombinieren mit Majoritätsträgern und ändern sich zeitlich ($\frac{\partial \Delta p}{\partial t} \neq 0$). Es folgt:

$$\frac{\partial \Delta p(t)}{\partial t} = -\frac{\Delta p(t)}{\tau_p}$$

- e) Berechnen Sie den zeitlichen Verlauf der Überschussladungsträgerdichte $\Delta p(t)$ für $t > 0$ durch Lösen der Differentialgleichung aus Teilaufgabe d) und unter Beachtung der Randbedingungen für $\Delta p(t = 0)$ und $\Delta p(t \rightarrow \infty)$! [1,5P]

Die Kontinuitätsgleichung lautet:

$$\frac{\partial \Delta p(t)}{\partial t} = -\frac{\Delta p(t)}{\tau_p}$$

Dies ist eine homogene lineare Differentialgleichung 1. Ordnung mit konstanten Koeffizienten. Auf Grundlage der Randbedingung $\Delta p(t \rightarrow \infty) = 0$ wählen wir folgenden Lösungsansatz:

$$\Delta p(t) = A e^{-bt}.$$

Mithilfe der Randbedingung $\Delta p(t = 0) = g_p \tau_p$ und der Kontinuitätsgleichung lassen sich die Koeffizienten wie folgt bestimmen. Aus der Randbedingung $\Delta p(t = 0) = g_p \tau_p$ ergibt sich durch Einsetzen in den Ansatz:

$$\begin{aligned}\Delta p(t = 0) &= g_p \tau_p = A e^{-b \cdot 0} \\ \Rightarrow A &= g_p \tau_p\end{aligned}$$

Einsetzen von $\Delta p(t)$ in die Kontinuitätsgleichung liefert:

$$\begin{aligned}-b g_p \tau_p e^{-bt} &= -\frac{1}{\tau_p} g_p \tau_p e^{-bt} \\ \Rightarrow b &= \frac{1}{\tau_p}\end{aligned}$$

Daraus folgt schliesslich:

$$\Delta p(t) = g_p \tau_p e^{-t/\tau_p}$$

Alternativer Lösungsweg über Integration:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Delta p}{\partial t} &= -\frac{\Delta p}{\tau_p} \\ \int_{g_p \tau_p}^{\Delta p} \frac{1}{\Delta p^*} d\Delta p^* &= \int_0^t -\frac{1}{\tau_p} dt \\ \ln \Delta p - \ln g_p \tau_p &= -\frac{t}{\tau_p} \\ \ln (\Delta p / g_p \tau_p) &= -\frac{t}{\tau_p} \\ \Delta p(t) &= g_p \tau_p e^{-t/\tau_p}\end{aligned}$$

Name:

Matrikel-Nr.:

Konstanten

Planck'sches Wirkungsquantum	h	$= 6,63 \cdot 10^{-34}$	Js
	\hbar	$= \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34}$	Js
Avogadro-Konstante	N_A	$= 6,02 \cdot 10^{23}$	mol ⁻¹
Bohr'scher Radius	a_0	$= 5,29 \cdot 10^{-11}$	m
Elementarladung	e	$= 1,6 \cdot 10^{-19}$	As
Atomare Masseneinheit	u	$= 1,66 \cdot 10^{-27}$	kg
Elektronenmasse	m_e	$= 9,11 \cdot 10^{-31}$	kg
Protonenmasse	m_p	$= 1,67 \cdot 10^{-27}$	kg
Neutronenmasse	m_n	$= 1,67 \cdot 10^{-27}$	kg
Dielektrizitätskonstante	ϵ_0	$= 8,85 \cdot 10^{-12}$	As/Vm
Permeabilitätskonstante	μ_0	$= 4\pi \cdot 10^{-7}$	Vs/Am
Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	c	$= 3,0 \cdot 10^8$	m/s
Boltzmann-Konstante	k_B	$= 1,38 \cdot 10^{-23}$	J/K
Kreiszahl	π	$= 3,14$	
Euler'sche Zahl	e	$= 2,72$	
Imaginäre Einheit	j	$= \sqrt{-1}$	

Konversion von Einheiten

Atomare Masseneinheit → Kilogramm	$1 \text{ u} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Elektronenvolt → Joule	$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

Fortsetzung auf Rückseite!

Formeln und Integrale

$$\exp(jkx) + \exp(-jkx) = 2 \cos(kx)$$

$$\exp(jkx) - \exp(-jkx) = 2j \sin(kx)$$

$$\int (\sin ax)^2 dx = \frac{1}{2}x - \frac{1}{4a} \sin 2ax$$

$$\int (\cos ax)^2 dx = \frac{1}{2}x + \frac{1}{4a} \sin 2ax$$

$$\int \sin ax \cos ax dx = \frac{1}{2a} (\sin ax)^2$$

$$\int x (\sin ax)^2 dx = \frac{1}{4}x^2 - \frac{1}{4a}x \sin 2ax - \frac{1}{8a^2} \cos 2ax$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-ax^2} dx = 0$$

$$\int_0^{\infty} x e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{4a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^3 e^{-ax^2} dx = 0$$

$$\int_0^{\infty} x^3 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a^2}$$

$$\int x^2 e^{ax} dx = e^{ax} \left(\frac{x^2}{a} - \frac{2x}{a^2} + \frac{2}{a^3} \right)$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (a > 0, n = 0, 1, 2, \dots)$$

13 III. Hauptgruppe	14 IV. Hauptgruppe	15 V. Hauptgruppe
5 10,81 2,0 B Bor	6 12,01 2,5 C Kohlenstoff	7 14,007 3,0 N Stickstoff
13 26,98 1,5 Al Aluminium	14 28,09 1,8 Si Silicium	15 30,97 2,1 P Phosphor
31 69,72 1,6 Ga Gallium	32 72,59 1,8 Ge Germanium	33 74,92 2,0 As Arsen
49 114,82 1,7 In Indium	50 118,69 1,8 Sn Zinn	51 121,75 1,9 Sb Antimon
81 204,38 1,8 Tl Thallium	82 207,2 1,8 Pb Blei	83 208,98 1,9 Bi Bismut