

Lichttechnisches Institut

Karlsruher Institut für Technologie

Prof. Dr. rer. nat. Uli Lemmer

M. Sc. Nico Bolse

M. Sc. Manuel Koppitz

Engesserstraße 13

76131 Karlsruhe

Festkörperelektronik

Lösungen zum 4. Tutorium

Tutorien: 15.-19. Juni 2015

1. Spin und Pauli-Prinzip

- a) Erklären Sie das Experiment von Stern und Gerlach. Welche Aussage macht es über den Eigendrehimpuls des Elektrons? Was ist ein Spin?

Das Experiment von Stern und Gerlach ist in Abbildung 1 dargestellt. Ein Strahl von Atomen wird durch ein extrem inhomogenes Magnetfeld geschossen, wobei die Flugrichtung senkrecht zu Magnetfeld und Magnetfeldgradient ist. Prinzipiell gilt, dass ein magnetischer Dipol, der parallel zum Magnetfeld steht, in Richtung des Magnetfeldgradienten abgelenkt wird. Ein antiparallel stehender Dipol wird in die entgegengesetzte Richtung, ein senkrecht zum Feld stehender Dipol gar nicht abgelenkt.

Stern und Gerlach fanden heraus, dass für Atome, die lediglich ein s-Elektron besitzen, jeweils zwei diskrete Punkte auf dem Schirm aufleuchten. Das bedeutet, dass jeweils genau zwei Einstellungen des magnetischen Dipols vorkommen müssen. Klassisch sollten hingegen alle Einstellungen zum Magnetfeld möglich sein, man sollte einen großen verschmierten Fleck auf dem Detektorschirm sehen.

Nun besitzt das s-Elektron die Quantenzahl $l = 0$, damit keinen Bahndrehimpuls und auch kein magnetisches Bahndrehmoment. Der beobachtete Effekt muss also von einem bis dahin unbekannten Eigendrehmoment, und damit einem Eigendrehimpuls des Elektrons verursacht sein. Diesen Eigendrehimpuls $\vec{S}$ bezeichnet man als Spin. Die Spinquantenzahl kann beim Elektron die Werte $s = \pm 1/2$ annehmen. Die Komponente parallel zum externen Magnetfeld, hier S_z genannt, hat dann die Werte $S_z = \hbar s = \pm \hbar/2$. Man spricht vom Elektron als einem Teilchen mit «halbzahligem» Spin. Beachten Sie, dass eigentlich nicht der Spin selbst, sondern die Spinquantenzahl halbzahlig ist.

- b) Wie lautet die Kernaussage des Pauli-Prinzips? Welche Teilchen sind dem Pauli-Prinzip unterworfen und welche nicht? Was folgt daraus für Systeme, die mehrere solcher Teilchen enthalten?

Das Pauli-Prinzip verbietet es zwei Elektronen, die denselben Raum belegen, identische Quantenzahlen zu haben. Das Pauli-Prinzip gilt allgemein für Fermionen, das sind Teilchen mit halbzahligem Spin. In diese Gruppe fallen auch Protonen und

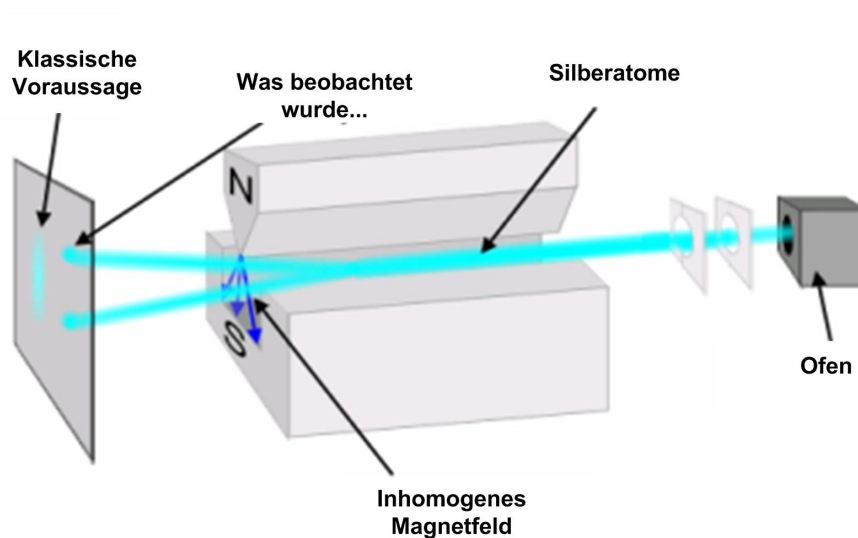


Abb. 1: Skizze zum Stern-Gerlach Experiment

Neutronen. Da die Quantenzahlen eines Zustands mit dessen Energie zusammenhängen, ist es folglich nicht möglich, alle Elektronen eines Atoms zum Beispiel in den gleichen Zustand zu bringen. Das hat das schon mehrfach vorgekommene „Auf-füllen“ der Energieniveaus mit Elektronen in Potentialtöpfen, Atomen, Molekülen oder Festkörpern zur Folge.

Ein gänzlich unterschiedliches Verhalten legen die Bosonen an den Tag, Teilchen mit ganzzahligem Spin. Zu dieser Gruppe gehören beispielsweise Photonen oder Phononen. Sie können in beliebiger Anzahl im selben Zustand den selben Ort einnehmen, ihre Statistik führt sogar zu einem Streben in diesen Zustand. Laserlicht besteht so gerade aus Photonen mit gleichen Quantenzahlen.

c) Vervollständigen Sie die folgende Tabelle!

Element	Elektronenkonfiguration
Bor	$1s^2 2s^2 2p^1$
Lithium	$1s^2 2s^1$
Aluminium	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
Schwefel	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
Stickstoff	$1s^2 2s^2 2p^3$
Calcium	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

2. Bindungen

- a) Welche unterschiedlichen Bindungstypen zwischen Atomen oder Molekülen gibt es? Erläutern Sie Ihre Charakteristika.

In der Vorlesung haben wir hauptsächlich die ionische und die kovalente Bindung kennen gelernt. Im Falle der kovalenten Bindung überlagern sich die Orbitale je eines Valenzelektrons der Bindungspartner und bilden so ein modifiziertes gemeinsames Orbital. Das hat Auswirkungen auf die Energieniveaus der Elektronen. In der Vorstellung der reinen ionischen Bindung dagegen geht man von einem Übergang eines Elektrons von einem zum anderen Bindungspartner aus. Hier gibt es kein gemeinsames Elektronenorbital. Viele Bindungen sind Mischformen und haben sowohl einen kovalenten, als auch einen ionischen Anteil. Die Grenze zwischen einer als kovalent und ionisch bezeichneten Bindung ist willkürlich, eine rein ionische Bindung ist ein idealisiertes Modell. Ob eine Bindung zwischen zwei Partnern einen starken oder schwachen ionischen Anteil hat, kann man an der Elektronegativitätsdifferenz der beiden erkennen.

Neben diesen beiden existieren noch einige andere wichtige Bindungstypen. Moleküle können ein signifikantes permanentes Dipolmoment aufweisen, d.h. die Ladung des Moleküls ist nicht gleichmäßig über diesem verteilt. Das tritt auf, wenn ein Wasserstoffatom an ein stark elektronegatives Atom gebunden ist. Zwei solcher Moleküle können in Wechselwirkung treten und durch elektrostatische Anziehung eine Bindung bilden. Solche Bindungen werden als Wasserstoff-Brückenbindungen bezeichnet. Ein Dipolmoment kann auch durch den Bindungspartner induziert werden. In diesem Fall spricht man von einer van-der-Waals-Bindung.

Die kovalente Bindung und die Ionenbindung haben die höchsten Bindungsenergien der vorgestellten Bindungen, sie sind somit am stabilsten. Die beiden anderen Bindungen sind dagegen sehr viel schwächer.

- b) Diskutieren Sie die Gemeinsamkeiten zwischen einer kovalenten Bindung (z.B. zwischen zwei Wasserstoffatomen) und zwei gekoppelten Potentialtöpfen.

Wie im letzten Aufgabenteil angesprochen, bilden die Einzelorbitale der Bindungspartner in der kovalenten Bindung ein gemeinsames Orbital. Damit einher gehen das

Aufspalten der jeweiligen Energieniveaus der isolierten Atome und eine Modifikation der Aufenthaltswahrscheinlichkeit, das Elektron ist zwischen beiden Bindungspartnern delokalisiert. Im kovalent gebundenen Festkörper sind auf diese Weise eine extrem große Anzahl an Atomen verbunden, so dass die Energieniveaus der einzelnen Atome sich zu quasikontinuierlichen Energiebändern auffächern.

Wenn man die Lösungen von zwei Potentialtöpfen betrachtet, kann man ähnliche Veränderungen feststellen, sobald zwei oder mehr Töpfe nahe zusammenkommen. Auch hier bilden sich gemeinsame Wellenfunktionen, da die Elektronen von einem Topf in den nächsten tunneln können. Auch die Aufspaltung der Energieniveaus in zwei oder mehr identischen Potentialtöpfen, die miteinander wechselwirken, kann beobachtet werden. Man könnte abschließend sagen, dass auch ein Atom eine Art Potentialtopf für Elektronen darstellt.

- c) Berechnen Sie die Energie, die frei wird, wenn sich ein Natrium-Atom und ein Chlor-Atom zu Kochsalz verbinden. Die Ionisationsenergie von Natrium beträgt 5.14eV, die Elektronenaffinität von Chlor 3.71eV und die Bindungsenergie zwischen einem Natrium- und einem Chlor-Ion 7.9eV.

Die Ionisationsenergie des Natrium muss aufgewendet werden, um das äußerste Valenzelektron vom Atomrumpf zu trennen. Die Elektronenaffinität von Chlor wird gewonnen, wenn dem Chlor-Atom ein weiteres Elektron zur Verfügung gestellt wird. Gehen beide Ionen (Na^+ und Cl^-) eine Bindung ein, so wird die Bindungsenergie freigesetzt. Als Energie-Bilanz ergibt sich damit:

$$\Delta E = 3.71\text{eV} - 5.14\text{eV} + 7.9\text{eV} = 6.47\text{eV} \quad (1)$$

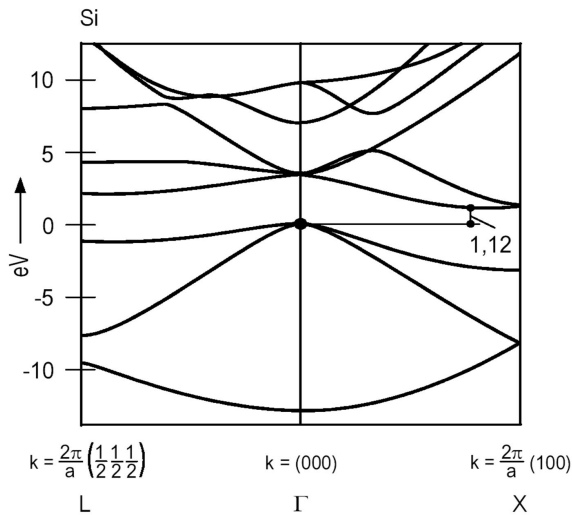
3. Die Bandstruktur I

- a) Welche physikalischen Größen sind in Bandstrukturen normalerweise gegeneinander aufgetragen? Welche Information steckt in diesen Größen?

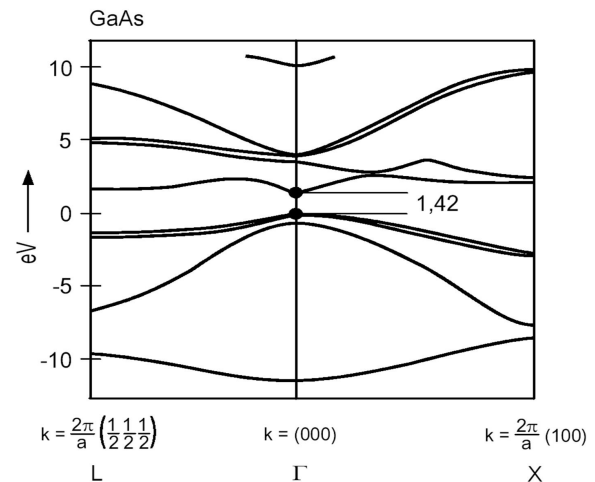
Üblicherweise wird die Energie über der Wellenzahl k aufgetragen. Zur Wellenzahl proportional ist der Gitterimpuls der Elektronen. Somit kann man aus der Bandstruktur ablesen, welche Energieniveaus für Elektronen mit einem bestimmten Gitterimpuls existieren. Diese Informationen haben Einfluss auf eine Vielzahl von Eigenschaften des Festkörpers wie Leitfähigkeit, Transparenz und Emissions-Eigenschaften.

Unter **Bandstruktur** bzw. **Bandstruktur-Diagramm** versteht man die Auftragung der Energie über dem Wellenvektor $\vec{k}$, während man unter dem Begriff **Banddiagramm** die Auftragung der Energie über dem Ort versteht. Diese wird uns später beim pn-Übergang begegnen.

- b) In Abbildung 2 ist ein Teil der Bandstruktur von Silizium gegeben. Was bedeuten die Bezeichnungen Γ , X und L an der x-Achse?



(a) Silizium



(b) Gallium-Arsenid

Abb. 2: Reale Bandstrukturen von Silizium und Gallium-Arsenid.

Schaut man von einem bestimmten Punkt im Kristall in verschiedene Richtungen, so wird sich je nach Richtung und Kristall normalerweise ein unterschiedliches Bild bieten. Somit sind auch die Kristall-Eigenschaften nicht isotrop, sondern hängen von der Richtung im Kristall ab. Zur Darstellung der kompletten Information in einem Bandstruktur-Diagramm müsste somit die Energie über dem Wellenvektor in allen drei Raumrichtungen aufgetragen werden. Da das schwierig ist und auch nicht jede Richtung im Kristall interessiert, werden üblicherweise nur bestimmte Richtungen gezeichnet. Zur Orientierung im Kristall sind bestimmte Punkte der ersten Brillouinzone mit Buchstaben gekennzeichnet. Es gilt die Konvention, dass Punkte innerhalb der ersten Brillouinzone mit griechischen Großbuchstaben bezeichnet werden. So bezeichnet der Γ -Punkt immer das Zentrum der Brillouinzone mit dem Gittervektor $\vec{k} = (0, 0, 0)$. Lateinische Großbuchstaben dagegen stehen für Punkte, die auf der Oberfläche der ersten Brillouinzone liegen. Im eindimensionalen Gitter galt am Rand der 1. Brillouinzone $k = \pi/a$, nun finden wir zum Beispiel den X-Punkt mit $\vec{k} = 2\pi/a(1, 0, 0)$ oder den L-Punkt mit $\vec{k} = 2\pi/a(1/2, 1/2, 1/2)$. In der Abbildung 2 sieht man folglich die Energieniveaus für eine Wellenzahl im Bereich von $\Gamma \rightarrow X$, also einer Wellenzahl, deren erste Komponente von 0 bis $2\pi/a$ variiert (Wellenvektor zwischen $\vec{k} = (0, 0, 0)$ und $\vec{k} = 2\pi/a(1, 0, 0)$). Außerdem ist die Richtung $\Gamma \rightarrow L$ gezeichnet, in der sich alle drei Komponenten des Wellenvektors gleichförmig von 0 nach π/a verändern.

- c) Identifizieren Sie das Valenzband und das Leitungsband in den entsprechenden Diagrammen. Ergänzen Sie die parabolische Näherung für das Leitungsband im Diagramm.

In Abbildung 3 sind die Leitungs- und Valenzbänder aus Abbildung 3 schematisch dargestellt. Die parabolische Näherung für Leitungs- und Valenzband ist jeweils ein-

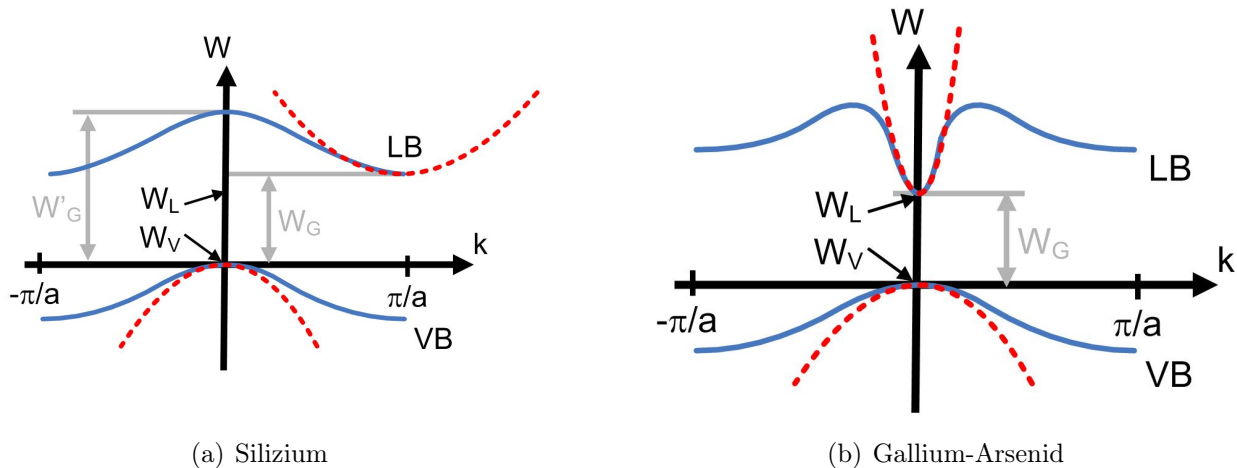


Abb. 3: Eindimensionale schematische Darstellung der Leitungsbänder (LB) und Valenzbänder (VB) von Silizium und Gallium-Arsenid inklusive parabolischer Näherung.

getragen.

- d) Welchen der beiden Halbleiter empfehlen Sie, wenn ein möglichst schnelles Bauelement mit Elektronen als Ladungsträgern realisiert werden soll?

Die Elektronen halten sich hauptsächlich in Zuständen nahe des Minimums des Leitungsbandes auf. Man sieht deutlich, dass an dieser Stelle die Krümmung des Bandes im Galliumarsenid deutlich stärker ist als im Silizium. Damit wird die effektive Masse im Silizium größer als im Galliumarsenid, was eine niedrigere Beweglichkeit zur Folge hat. Die Beweglichkeit wiederum ist ein entscheidender Parameter dafür, wie schnell man die Ladungsträger im Bauteil manipulieren kann. Also sollte man für das schnelle Bauteil auf GaAs zurückgreifen.

- e) Nun sei die parabolische Näherung für das Leitungsband gegeben als $W_L(k) = \frac{W_G}{2} + ak^2$, wobei $a = \hbar^2/0,033 m_0$. Berechnen Sie die effektive Masse der Elektronen im Leitungsband.

$$m_{\text{eff}} = \hbar^2 \frac{1}{\partial^2 W / \partial k^2} = \hbar^2 \frac{1}{2a} = 0,0165 m_0 = 1,50 \cdot 10^{-32} \text{ kg} \quad (2)$$

- f) Beschreiben Sie, wie es zur Ausbildung einer Bandlücke im Halbleiterkristall kommt. Stellen Sie die Bedingung für das Auftreten einer stehenden Elektronenwelle im Kristall auf.

Im eindimensionalen Fall bestehe unser Gitter aus einer Reihe von Gitteratomen, die den Abstand a aufweisen. In der Näherung des beinahe freien Elektrons werden nun, wie im freien Raum, ebene Wellen als Ansatz für die Kristallelektronen benutzt. Allerdings besteht die Möglichkeit, dass das Elektron an den Gitteratomen gestreut wird. Besonders groß wird die Streuwahrscheinlichkeit für den Fall, dass die halbe Wellenlänge in der Nähe der Gitterperiode a liegt. Dann kann die einlaufende

Elektronenwelle e^{jkx} in eine rücklaufende e^{-jkx} koppeln:

$$\psi_{\pm} = Ae^{jkx} \pm Be^{-jkx} \quad (3)$$

Für den besagten Wert $k = \pi/a$ sind die Anteile in vorwärts und rückwärtslaufender Welle gleich, wir erhalten eine stehende Welle:

$$\psi_{\pm} = A(e^{j\pi x/a} \pm e^{-j\pi x/a}) \quad (4)$$

Die Vorzeichen ergeben sich je nach Phase der sich überlagernden Wellen. Berechnet man nun für die beiden Fälle die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Elektronen, so ergibt sich:

$$|\psi_+|^2 = 4A^2 \cos^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right) \quad (5)$$

$$|\psi_-|^2 = 4A^2 \sin^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right) \quad (6)$$

Im Falle der ψ_- -Lösung werden die Elektronen somit zwischen den Atomen, für die ψ_+ -Lösung am Ort der Atomrümpfe angehäuft. Letztere verfügen daher über eine niedrigere Energie. Damit entsteht für Energien zwischen denen der beiden stehenden Wellen eine Bandlücke. Das bedeutet, dass Elektronen mit dieser Energie im Kristall weder existieren noch propagieren können.