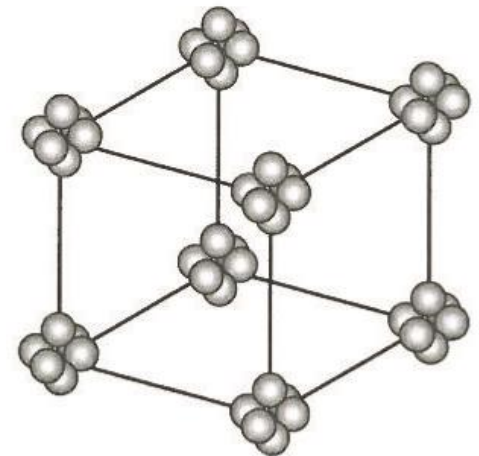
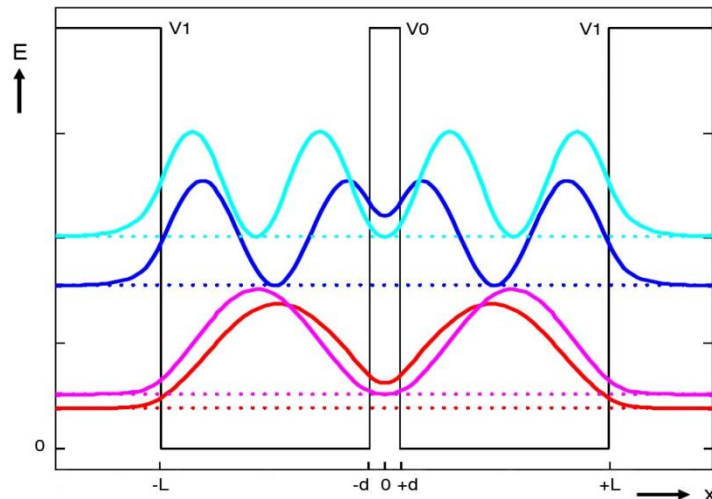
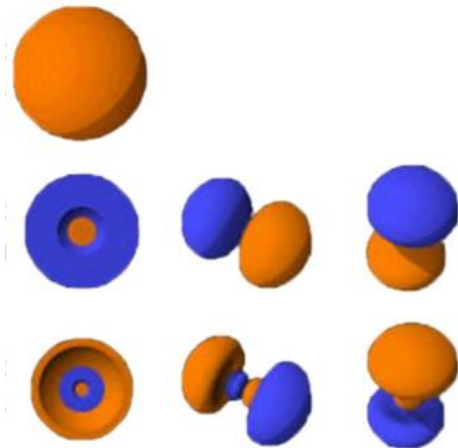


Vom H-Atom zur Bandstruktur

4. Übung Festkörperelektronik

Lichttechnisches Institut (LTI)

Sommersemester 2015, Nico Bolse, Manuel Koppitz



Terminplanung

Tag/Monat	April	Mai	Juni	Juli
1		Tag der Arbeit		
2				
3	Karfreitag		Ausgabe T3	Ü5, Ausgabe Ü6/T6
4		Tut-Woche 1	Fronleichnam	
5			Brückentag	
6	Ostermontag			Tut-Woche 6
7		V4		
8		Ü2	Tut-Woche 3	
9				V12
10				Ü6, Ausgabe Ü7/T7
11			V8	
12			V9, Ausgabe Ü4/T4	
13	Beginn VLZ, Ausgabe Ü1	Ausgabe Ü3/T2		Tut-Woche 7
14		Christi Himmelfahrt		
15		Brückentag	Tut-Woche 4	
16	Ü1			V13
17				Ü7
18		Tut-Woche 2		
19			Ü4	
20				
21		V5		
22		Ü3		
23	V1			
24	V2, Ausgabe Ü2/T1			
25		Pfingstmontag	V10, IF	
26			V11, Ausgabe Ü5/T5	
27				
28		V6		
29		V7	Tut-Woche 5	
30	V3			
31				

Wochenende
Feiertag
Vorlesung
Übung
Tutorium
IF: Institutsführung
Brückentag

Ausgabe: Ü/T wird in ILIAS veröffentlicht

Stand: 24.04.2015

alle Donnerstagstermine finden von 11.30 - 13.00 Uhr im MTI-Hörsaal (Geb. 30.33) statt
alle Freitagstermine finden von 11.30 - 13.00 Uhr im NTI-Hörsaal (Geb. 30.10) statt

Institutsführung

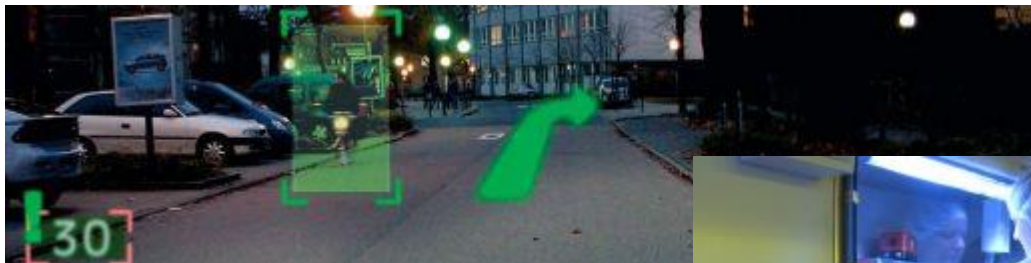
- Führung durch das LTI: Vorstellung des Instituts und der Forschungsaktivitäten

Donnerstag, 25. Juni, 13:45 Uhr, LTI-Hörsaal

- Anmeldung unter:

<http://doodle.com/vnnhtiyadefbq7hk>

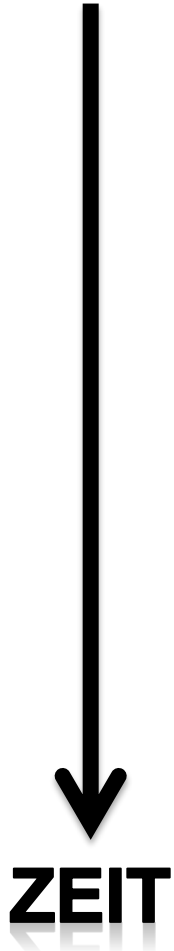
- Link auch in ILIAS unter „Organisatorisches“ zu finden



Klausuranmeldung

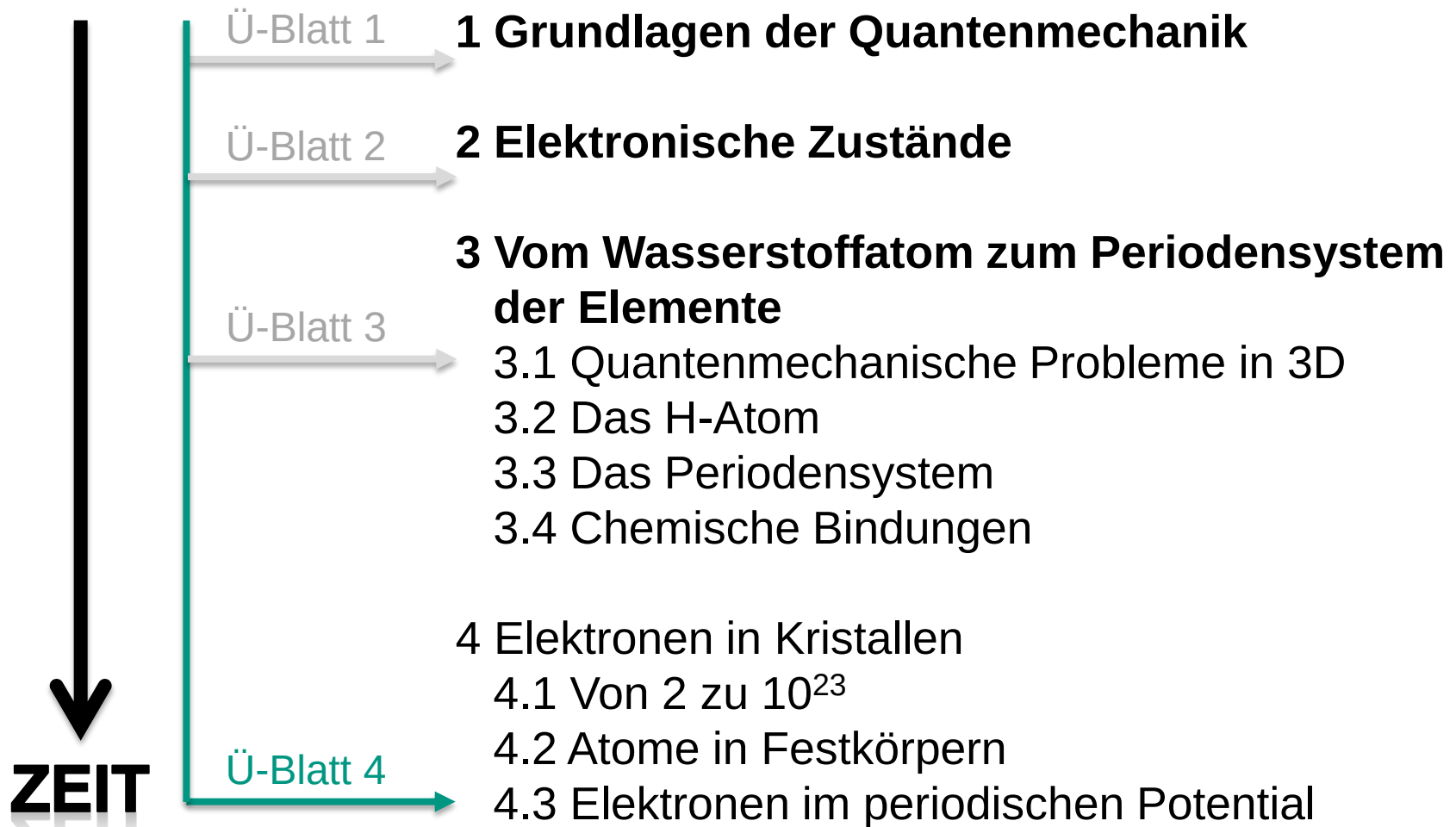
- Anmeldebeginn: 01.07.2015
- Anmeldeschluss: 27.08.2015
- Abmeldeschluss: 27.08.2015
- Für ETEC's: online im QISPOS
- Für MWT'ler: online für Kombiprüfung PB/FE anmelden und dann unbedingt eine E-Mail mit Anmeldewunsch an die Übungsleiter der Veranstaltung schicken, für die ihr die Klausur in diesem Semester schreiben woll

Stand der Dinge



1. Grundlagen der Quantenphysik
2. Elektronische Zustände
3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente
4. Elektronen im Kristall
5. Halbleiter
6. Quantenstatistik für Ladungsträger
7. Dotierte Halbleiter
8. Ladungsträgerdynamik im Halbleiter
9. Der pn-Übergang

Stand der Dinge



Wiederholung

Reflexion, Transmission & Tunneln

■ $W < V_0$:

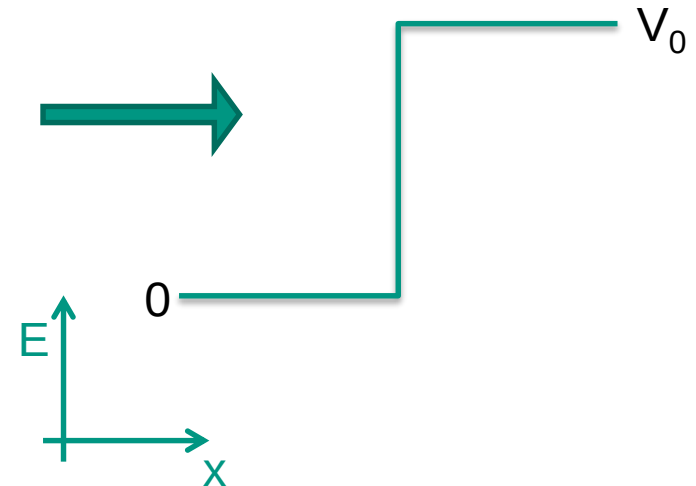
- Reflexion an Potentialstufe
- Ausbildung einer stehenden Welle
- kann in Potentialstufe eindringen (Aufenthaltswahrscheinlichkeit nimmt exponentiell mit Eindringtiefe ab)

■ $W > V_0$:

- Reflexion an der Potentialstufe
- Transmittierter Anteil der Welle besitzt größeres λ

■ Hinweis zum Applet von letzter Woche

- Die konstante Aufenthaltswahrscheinlichkeit nach der Barriere ergibt sich aus dem Ansatz einer ebenen Welle.



Wiederholung

Harmonischer Oszillator in 2D und 3D:

■ Erinnerung 1D: $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_x^2\hat{x}^2$

$$W = W_x = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right)$$

■ → 2D: $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_x^2\hat{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2\hat{y}^2$

$$W = W_x + W_y$$

■ → 3D: $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_x^2\hat{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2\hat{y}^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2\hat{z}^2$

$$W = W_x + W_y + W_z$$

A1 a) – Das Wasserstoffatom

Die Eigenenergien des Wasserstoff-Elektrons im Potential eines Protons lassen sich zu

$$W_n = -\frac{e^4 m_e}{8h^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

mit $n = 1, 2, \dots$ berechnen.

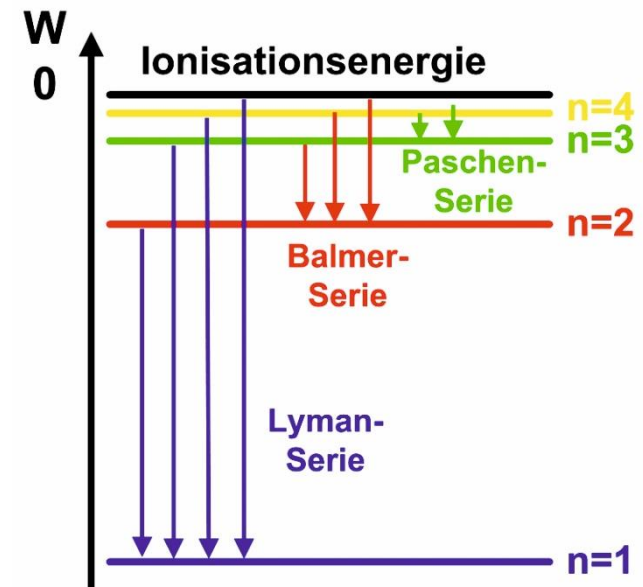
Stellen Sie eine Formel für die Wellenlängen des Lichtes auf, das emittiert wird, wenn ein Elektron ausgehend von einem höheren Zustand in den Zustand $n = 2$ relaxiert.

■ Balmer-Serie:

$$\begin{aligned} W &= W_n - W_2 = -\frac{e^4 m_e}{8h^2 \epsilon_0^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{4} \right) \\ &= -W_{\text{Ryd}} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{4} \right) \end{aligned}$$

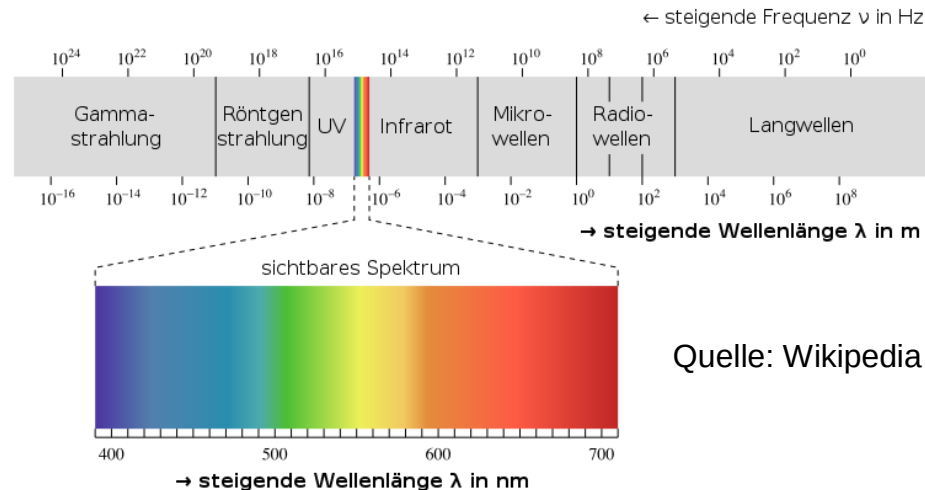
■ Mit Rydbergkonstante:

$$W_{\text{Ryd}} = 13.6 \text{ eV} = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J.}$$



A1 a) – Das Wasserstoffatom

Bestimmen Sie die Wellenlängen, die im sichtbaren Spektralbereich liegen. Welche Farbe hat das Licht?



Quelle: Wikipedia

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

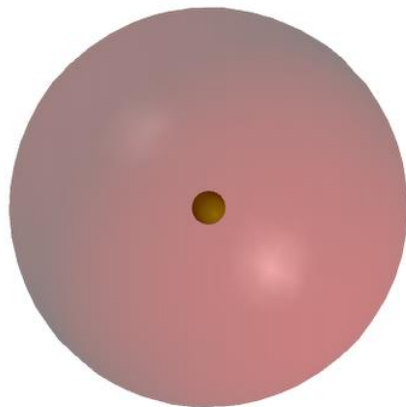
■ Mit: $\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{W}$

n	W[J]	W[eV]	λ [nm]	Farbe
3	$3.0263 \cdot 10^{-19}$	1.8	656	rot
4	$4.0855 \cdot 10^{-19}$	2.6	486	tuerkis
5	$4.5758 \cdot 10^{-19}$	2.9	434	blau
6	$4.8421 \cdot 10^{-19}$	3.0	410	violett
7	$5.0027 \cdot 10^{-19}$	3.1	397	UV
8	$5.1069 \cdot 10^{-19}$	3.2	388	UV

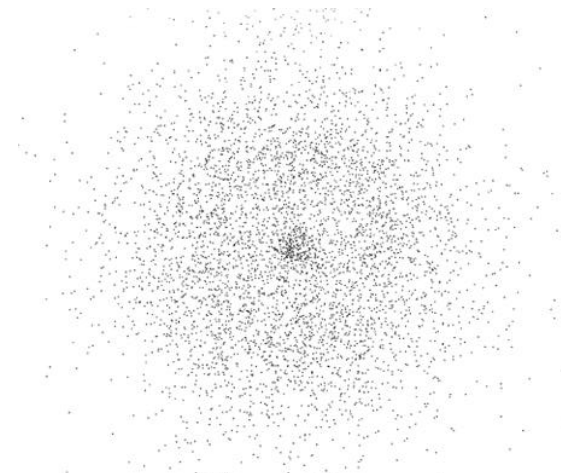
A1 b) – Das Wasserstoffatom

Was bezeichnet man als „Orbital“ eines Atoms? Was genau trägt man auf, wenn man Orbitale skizziert?

- QM-Lösung des physikalischen Problems „einzelnes Elektron im Atom“ → Wellenfunktionen
- Orbital entspricht Aufenthaltswahrscheinlichkeit in 3D → Schwierig darzustellen:



Flächen gleicher
Aufenthaltswahrscheinlichkeit



Räumlich variierende
Punktdichte

Quelle: Wikipedia

A1 c) – Das Wasserstoffatom

Zählen Sie die Quantenzahlen auf, die den Zustand eines Elektrons im Wasserstoffatom definieren, und beschreiben Sie diese.

■ Hauptquantenzahl $n \rightarrow$ Energie des Zustands, Abstand zum Kern

■ Drehimpulsquantenzahl $l \rightarrow$ Form der Wellenfunktion/Orbitals

$$|\vec{L}| = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

■ Magnetquantenzahl $m \rightarrow$ Ausrichtung des Orbitals

$$L_z = \hbar m$$

■ Spinquantenzahl $s \rightarrow$ Eigendrehimpuls des Elektrons

$$s_z = \pm \frac{\hbar}{2}$$

A1 d) – Das Wasserstoffatom

Welche Quantenzahlen können im Wasserstoffatom für einen Zustand mit $n = 5$ auftreten?

■ Allgemein gilt:

$$\begin{array}{ll}
 n = & 1, 2, 3, \dots \quad (\text{Hauptquantenzahl}) \\
 l = & 0, 1, 2, \dots (n-1) \quad (\text{Nebenquantenzahl, Drehimpulsquantenzahl}) \\
 m = & -l, (-l+1), \dots 0, \dots l \quad (\text{Magnetquantenzahl}) \\
 s = & \pm \frac{1}{2} \quad (\text{Spinquantenzahl})
 \end{array}$$

■ $n = 5$:

- $l = 0, 1, 2, 3, 4$
- $l = 0 \rightarrow m = 0 \mid l = 1 \rightarrow m = -1, 0, 1 \mid l = 2 \rightarrow m = -2, -1, 0, 1, 2 \mid \text{etc.}$
- jeweils mit $s = +1/2$ oder $s = -1/2$

A1 e) – Das Wasserstoffatom

Berechnen Sie die Anzahl der verschiedenen elektronischen Zustände zu einer Hauptquantenzahl n .

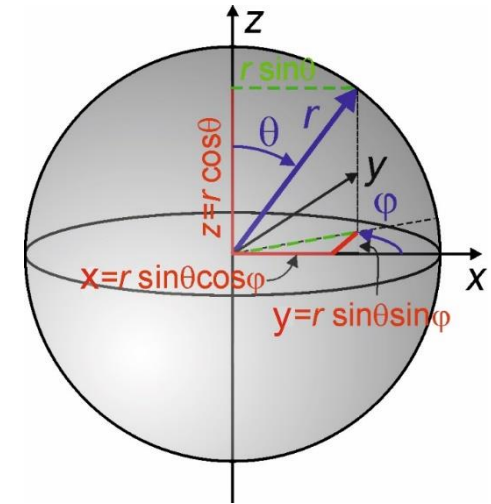
■ Anzahl der Zustände A_n :

$$A_n = 2 \sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 \underbrace{=}_{l'=l+1} 2 \sum_{l'=1}^n 2l' - 1 \underbrace{=}_{\text{arithm. Reihe}} 2 \left(2 \frac{n(n+1)}{2} - n \right) = 2n^2$$

A1 f) – Das Wasserstoffatom

Recherchieren Sie, wie die Wellenfunktion für das Wasserstoffatom ψ lautet.

- Auf Grund der Symmetrie des H-Atoms werden Kugelkoordinaten verwendet
- Separation der Variablen ist möglich
→ $\psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\phi, \theta)$
- Mit den normierten radialen Eigenfunktionen $R_{n,l}$ und den Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}$



n	l	$R_{n,l}(r)$
1	0	$2Ne^{-x}$
2	0	$2Ne^{-x}(1 - x)$
2	1	$\frac{2}{\sqrt{3}}Ne^{-x}$

$$N = \left(\frac{1}{na_0}\right)^{3/2}$$

$$x = \frac{r}{na_0}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$$

l	m	$Y_{l,m}(\theta, \phi)$
0	0	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
1	± 1	$\mp \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{\pm j\phi}$
1	0	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$

A1 g) – Das Wasserstoffatom

Berechnen Sie den mittleren Abstand zwischen dem Elektron und dem Proton im Grundzustand und vergleichen Sie diesen mit dem Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte sowie dem Bohr'schen Radius a_0

■ Grundzustand der Wellenfunktion:

$$\psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}$$

■ Ortserwartungswert:

$$\begin{aligned}
 \langle r \rangle &= \int_{r=0}^{\infty} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} r \frac{1}{\pi} a_0^{-3} e^{-2r/a_0} r^2 \sin \theta dr d\phi d\theta \\
 &= \int_{r=0}^{\infty} \frac{4\pi}{\pi a_0^3} r^3 e^{-2r/a_0} dr \\
 &= \frac{4}{a_0^3} \underbrace{\int_{r=0}^{\infty} r^3 e^{-2r/a_0} dr}_{\text{Bronstein: } \int_{x=0}^{\infty} x^n e^{-ax} dx = n! / a^{n+1}} \\
 &= \frac{4}{a_0^3} \frac{3!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^4} = \frac{3}{2} a_0
 \end{aligned}$$

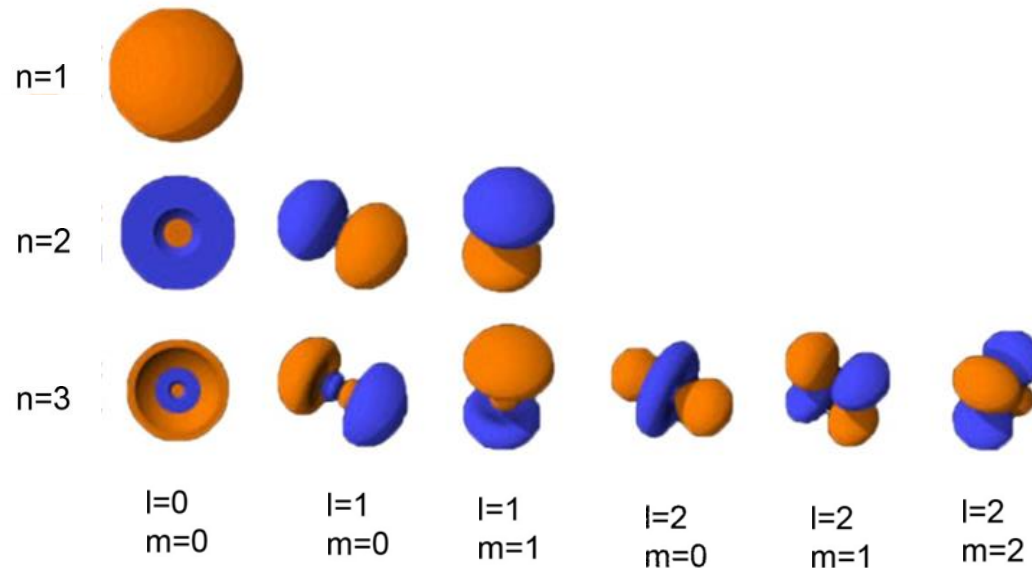
■ Maximum von ψ :

$$r = 0$$

A1 h) – Das Wasserstoffatom

Skizzieren Sie die Orbitale des Wasserstoffs für die niedrigsten drei Hauptquantenzahlen.

- Orbitale sind die zu einem bestimmten Satz (n, l, m) von Quantenzahlen gehörigen Wellenfunktionen



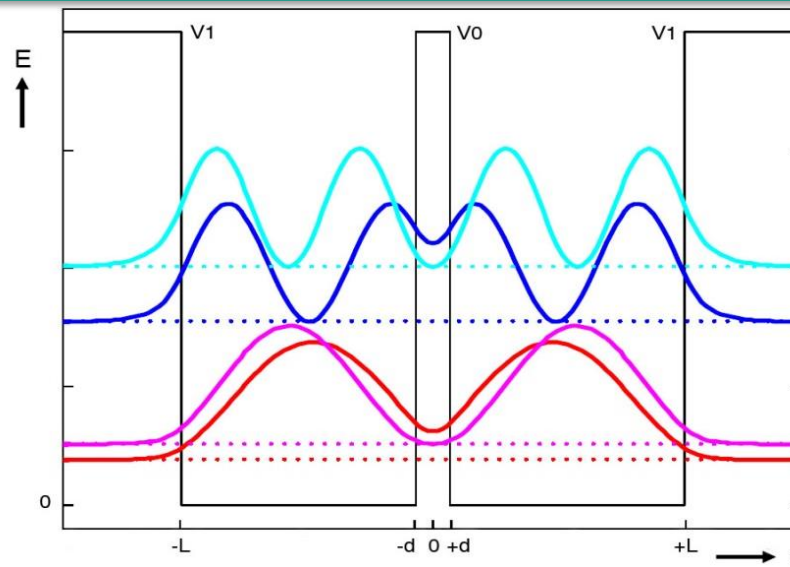
<http://csi.chemie.tu-darmstadt.de/ak/immell/misc/oc-scripts/orbitals.html>

A2 a) – Gekoppelte Potentialtöpfe

Seien $V_1 > 0, L > 0, d > 0$ und $L > d$. Betrachten Sie den gekoppelten Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & : |x| > L \\ 0 & : L > |x| > d \\ V_0 & : d > |x| \end{cases}$$

Sei $V_0 = V_1$. Skizzieren Sie zwei eigentliche Zustände in diesem Potential.



<http://phet.colorado.edu/en/simulation/bound-states>

A2 b) + c) – Gekoppelte Potentialtöpfe

Was verändert sich, wenn die Länge d sehr groß oder sehr klein wird?

- d sehr groß: Töpfe können in Näherung als zwei einzelne, voneinander unabhängige Töpfe betrachtet werden
- d sehr klein: Kopplung zwischen den Töpfen ist sehr stark. Energieniveaus spalten weiter auf

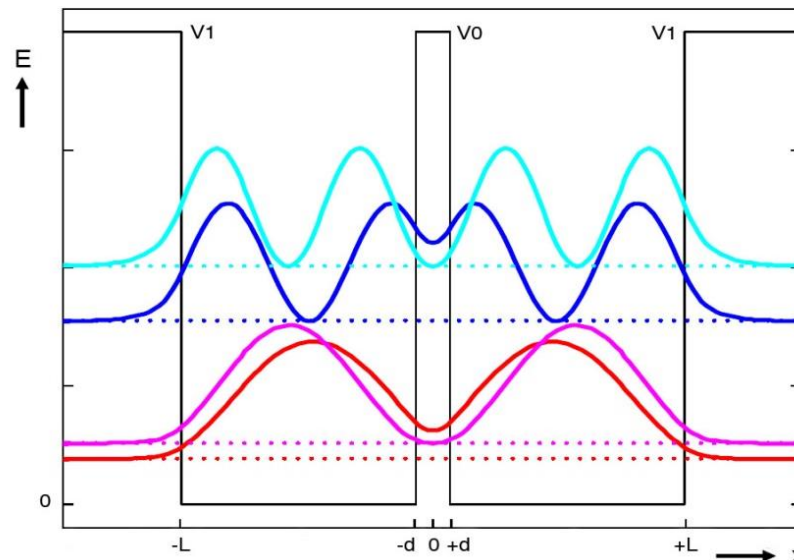
Ein Elektron der Energie $W_{q1} > V_1$ laufe von links ein. Wie verhält es sich im angegebenen Potentialgebiet?

- Energiegewinn über dem Gebiet mit $V=0$, d.h. Verkürzung der Wellenlänge an diesen Stellen

A2 d) – Gekoppelte Potentialtöpfe

Wie verhält sich ein klassisches Elektron mit der Energie $W_{k1} < V_1$ bzw. der Energie $W_{k2} > V_1$?

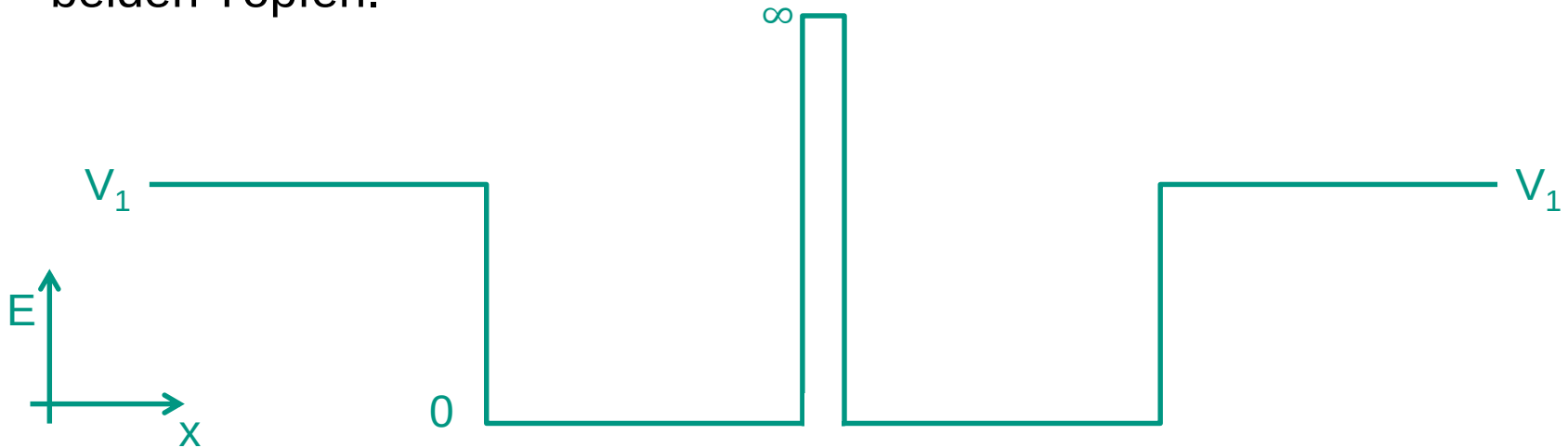
- $W_{k1} < V_1$: Das Elektron bewegt sich wie ein Ball **entweder** im linken **oder** im rechten Topf hin und her.
- $W_{k2} > V_1$: Das Elektron erhält an den Stellen $\pm d$ und $\pm L$ einen Kraftstoß, der das Elektron beschleunigt oder abbremst



A2 e) – Gekoppelte Potentialtöpfe

Sei nun $V_0 = \infty$. Wie verhält sich nun ein quantenmechanisches Elektron der Energie $W_{q1} > V_1$ und wie ein quantenmechanisches Elektron mit $W_{q2} < V_1$? (Keine Rechnung nötig.)

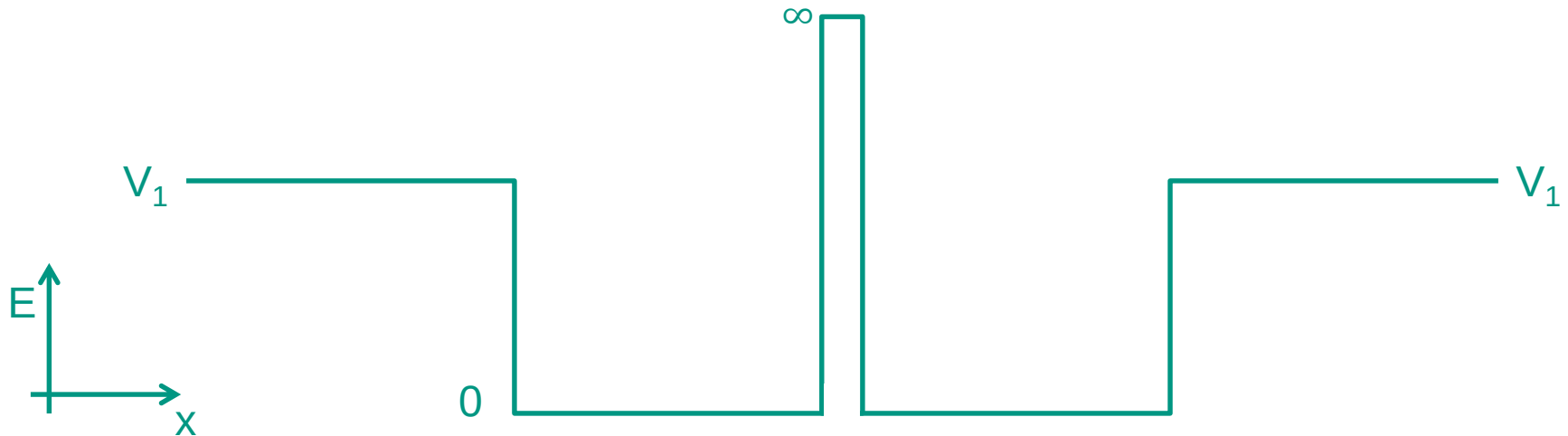
- $W_{q1} > V_1$: Das Elektron wird am Gebiet $V_0 = \infty$ reflektiert, kein Tunneln
- $W_{q1} < V_1$: Das Elektron tunnelt nicht durch die Barriere zwischen den beiden Töpfen.



A2 f) – Gekoppelte Potentialtöpfe

Geben Sie den Impulserwartungswert des Elektrons mit der Energie $W_{q2} < V_1$? an und begründen Sie Ihre Antwort. (Keine Rechnung.)

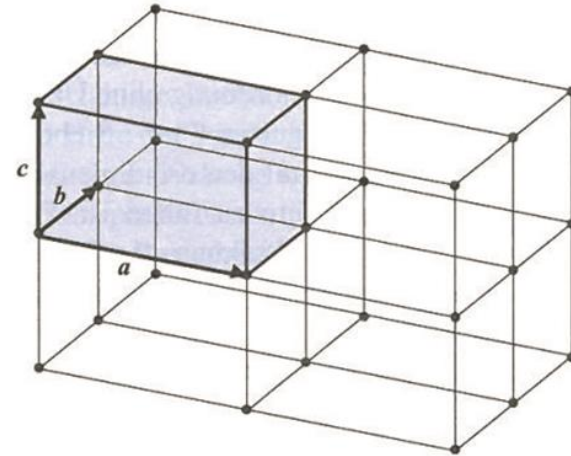
- Das Elektron bewegt sich im Topf mit der gleichen Wahrscheinlichkeit nach links bzw. rechts. $\rightarrow \langle \hat{p} \rangle = 0$



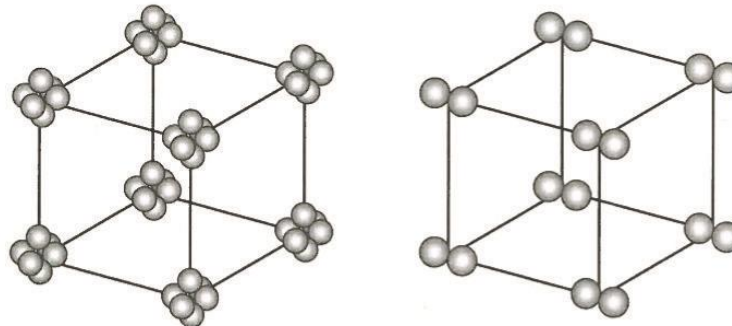
A3 a) – Kristalle

Wann ist ein Festkörper kristallin? Welche Informationen benötigt man, um einen Kristall eindeutig zu beschreiben?

■ Translationssymmetrie → Kristallgitter:

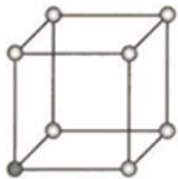


■ Die Basis – Bausteine der Materie (Atome, Moleküle) an den Punkten des Kristallgitters:



A3 a) – Kristalle

■ 14 Möglichkeiten – die Bravais-Gitter:



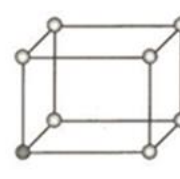
kubisch
primitiv



kubisch
raumzentriert



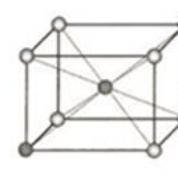
kubisch
flächenzentriert



orthorhombisch
primitiv



orthorhombisch
basiszentriert



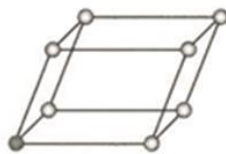
orthorhombisch
raumzentriert



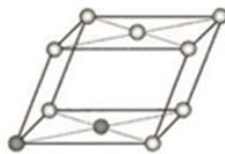
orthorhombisch
flächenzentriert



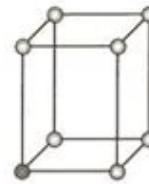
triklin



monoklin
primitiv



monoklin
basiszentriert



tetragonal
primitiv



tetragonal
raumzentriert



hexagonal



trigonal
(rhomboedrisch)

A3 b) – Kristalle

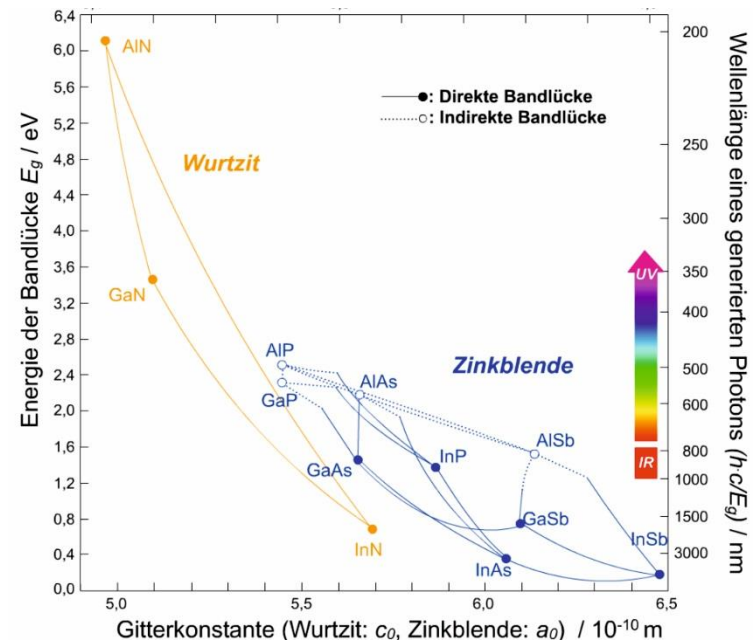
Welche Herstellungsmethoden von hochreinen kristallinen Festkörpern kennen Sie?

- Schmelzverfahren (z.B. Czochralski-Verfahren), Epitaxie (z.B. MOVPE), u.v.a.m.



Silizium-Einkristall
Czochralski-Verfahren

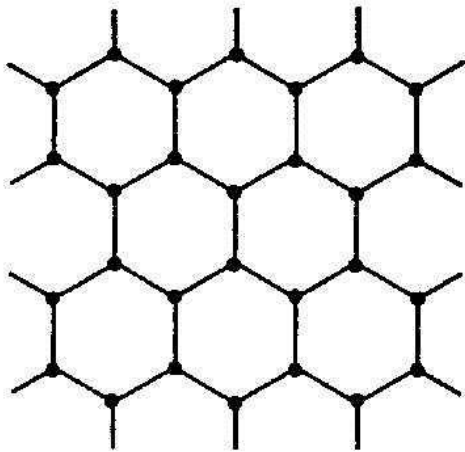
Quelle: Wikipedia



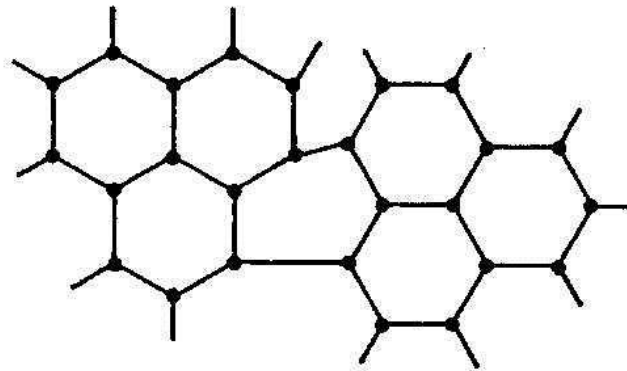
„Landkarte der III/V-Verbindungs-Halbleiter“
→ wichtig für das Wachstum von Schichtstrukturen

A3 c) – Kristalle

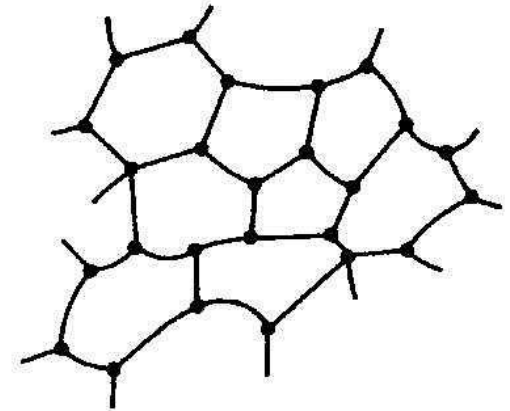
Wann spricht man von polykristallinen, wann von amorphen Festkörpern?



kristallin



polykristallin



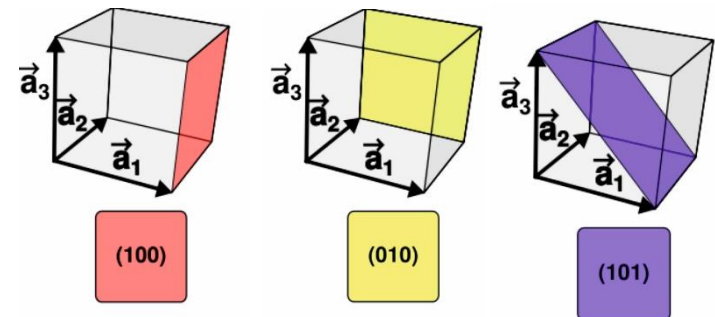
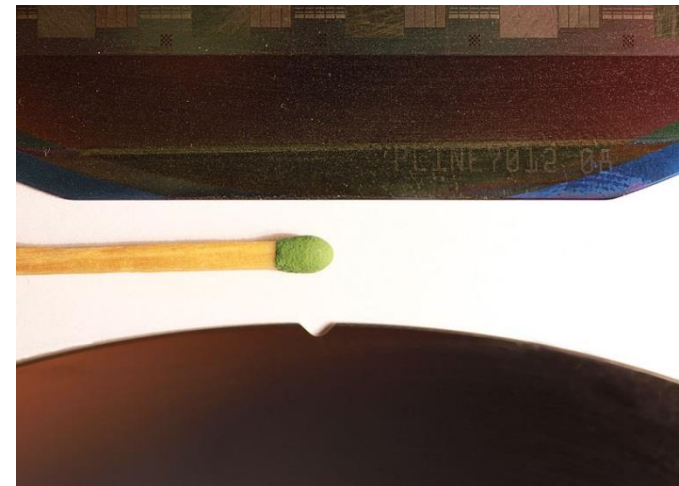
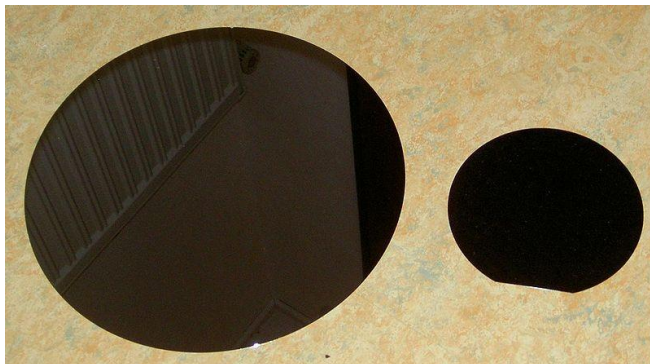
amorph

- Polykristallin: einzelne kristalline Bereiche, getrennt durch Korngrenzen
- Amorph: keine kristallinen Bereiche, nur Nahordnung

A3 d) – Kristalle

Kauft man einen Siliziumwafer, so ist genau gekennzeichnet, entlang welcher Kristallebene der Schnitt verläuft. Warum ist das in Kristallen wichtig?

- Physikalische Eigenschaften können von der Raumrichtung abhängen
- Kennzeichnung mit einem *flat* bei kleinen und mit einem *notch* bei größeren Wafern



Zusammenfassende Fragen (inkl. Tutorium)

- Wie lassen sich Probleme in mehreren Dimensionen lösen?
- Welche Quantenzahlen beschreiben die Orbitale des H-Atoms eindeutig?
- Welcher Effekt lässt sich bei der Annäherung zweier Potentialtöpfe beobachten?
- Wie sieht die Gitterstruktur von Silizium aus?
- Auf welche Arten lassen sich Halbleiterstrukturen herstellen?
- Was ist eine Bandstruktur, wie lässt sich die Ausbildung einer Bandlücke erklären?

Ankündigungen

■ Tutorien zur 4. Übung: 15. – 19. Juni 2015

■ Lösungen zur 4. Übung: 19. Mai 2015

■ Nächste Übung (Ü5): 3. Juli 2015