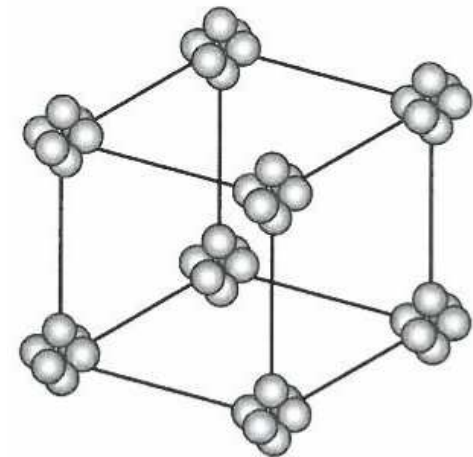
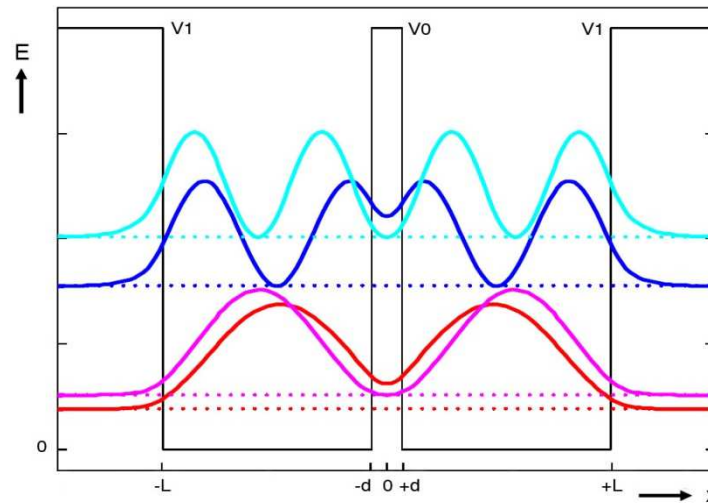
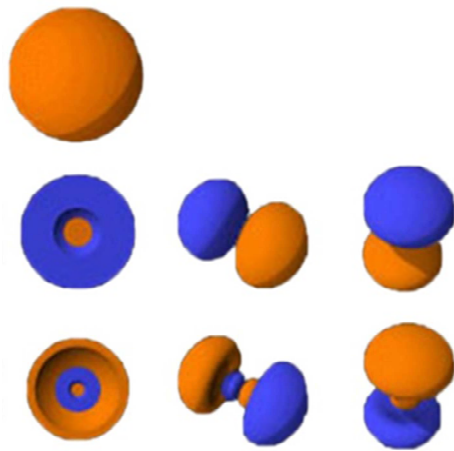


# Vom H-Atom zur Bandstruktur

## 4. Übung Festkörperelektronik

Lichttechnisches Institut (LTI)

Sommersemester 2016, Noah Strobel, Manuel Koppitz



# Terminplanung

| Tag/Monat | April            | Mai                 | Juni                        | Juli             |
|-----------|------------------|---------------------|-----------------------------|------------------|
| 1         |                  | 1. Mai Feiertag     |                             | V10              |
| 2         |                  | Ausgabe Ü2/T2       | V5                          |                  |
| 3         |                  |                     | Ü3 Ausgabe Ü4/T4            |                  |
| 4         |                  |                     |                             |                  |
| 5         |                  | Christi Himmelfahrt |                             |                  |
| 6         |                  | Brückentag          | Tut-Woche 3                 |                  |
| 7         |                  |                     |                             | V11              |
| 8         |                  |                     |                             | Ü6 Ausgabe Ü7/T7 |
| 9         |                  | Tut-Woche 1         | V6                          |                  |
| 10        |                  |                     | V7                          |                  |
| 11        |                  |                     |                             | Tut-Woche 6      |
| 12        |                  | U2                  |                             |                  |
| 13        |                  | V4                  |                             |                  |
| 14        |                  |                     |                             | V12              |
| 15        |                  | Pfingsten           |                             |                  |
| 16        |                  | Pfingstmontag       | Ü4                          |                  |
| 17        |                  |                     | Ausgabe Ü5/T5               |                  |
| 18        | VL-Beginn        |                     |                             | Tut-Woche 7      |
| 19        |                  |                     |                             |                  |
| 20        |                  |                     | Tut-Woche 4                 |                  |
| 21        | V1 Ausgabe Ü1/T1 |                     |                             | V13              |
| 22        | V2               |                     |                             | Ü7               |
| 23        |                  | Ausgabe Ü3/T3       | V8 anschl. Institutsführung | VL-Ende          |
| 24        |                  |                     | Ü5 Ausgabe Ü6/T6            |                  |
| 25        |                  |                     |                             |                  |
| 26        |                  | Fronleichnam        |                             |                  |
| 27        |                  | Brückentag          | Tut-Woch 5                  |                  |
| 28        | V3               |                     |                             |                  |
| 29        | Ü1               |                     |                             |                  |
| 30        |                  | Tut-Woche 2         | V9                          |                  |
| 31        |                  |                     |                             |                  |

Wochenende  
 Feiertag  
 Vorlesung  
 Übung  
 Tutorium  
 IF: Institutsführung  
 Brückentag  
 Ausgabe: Ü/T wird in ILIAS veröffentlicht

Stand: 11.05.2016

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

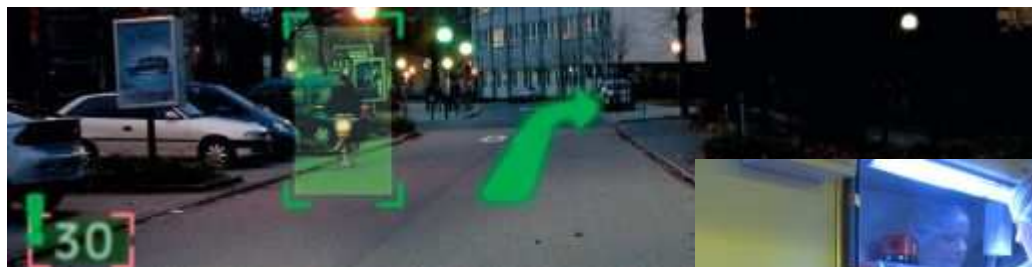
- Führung durch das LTI: Vorstellung des Instituts und der Forschungsaktivitäten

**Donnerstag, 23. Juni, 13:45 Uhr, LTI-Hörsaal**

- Anmeldung unter:

<http://doodle.com/poll/4yzerg7erp23mq66>

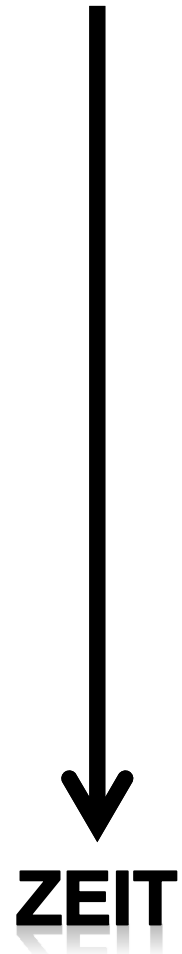
- Link auch in ILIAS unter „Organisatorisches“ zu finden



# Klausuranmeldung

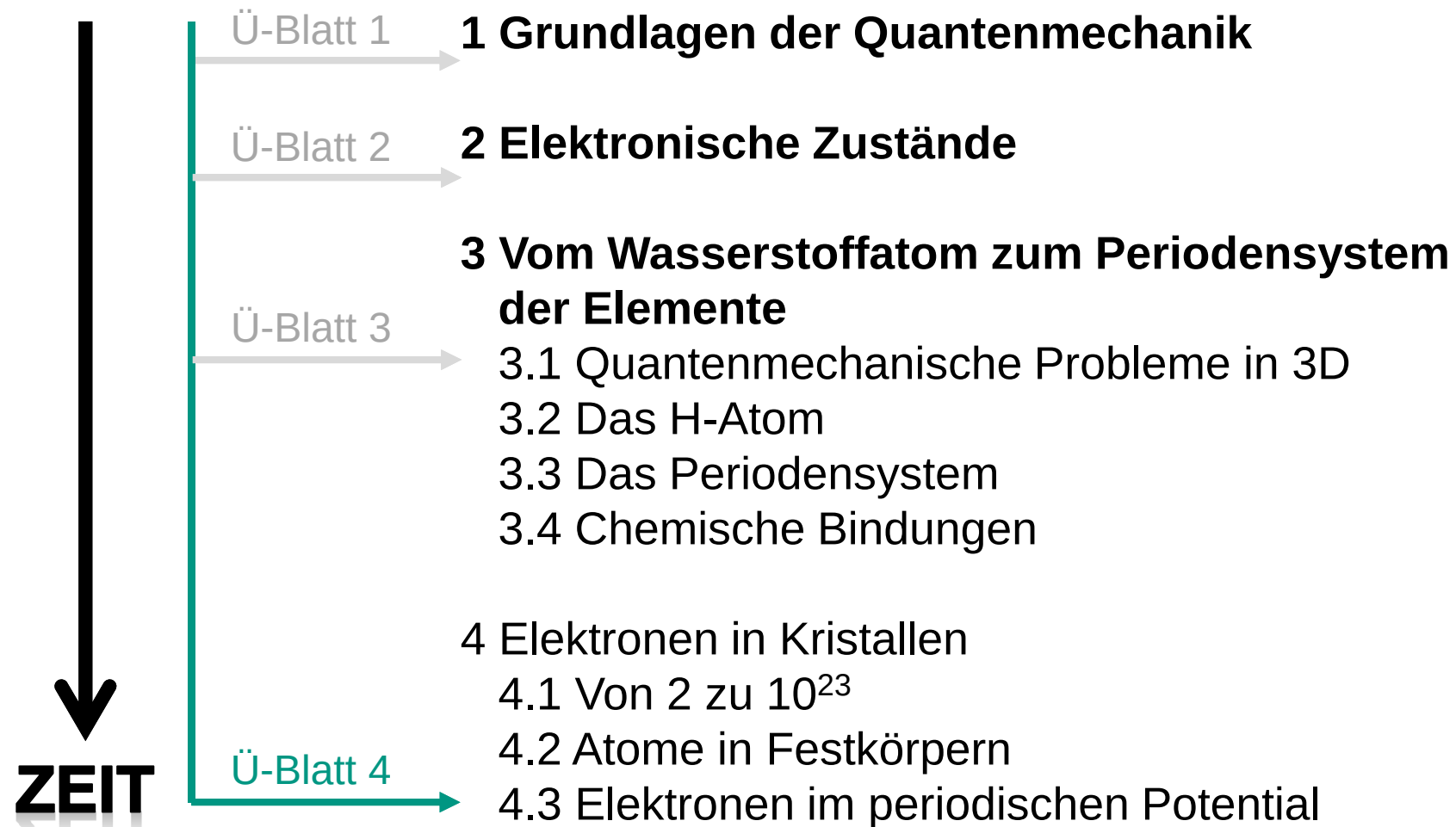
- Anmeldung über das Campus Management System
- Anmeldebeginn: 01.07.2016
- Anmeldeschluss: 19.09.2016
- Abmeldeschluss: 19.09.2016
- Prüfungstermin: 22.09.2016

# 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

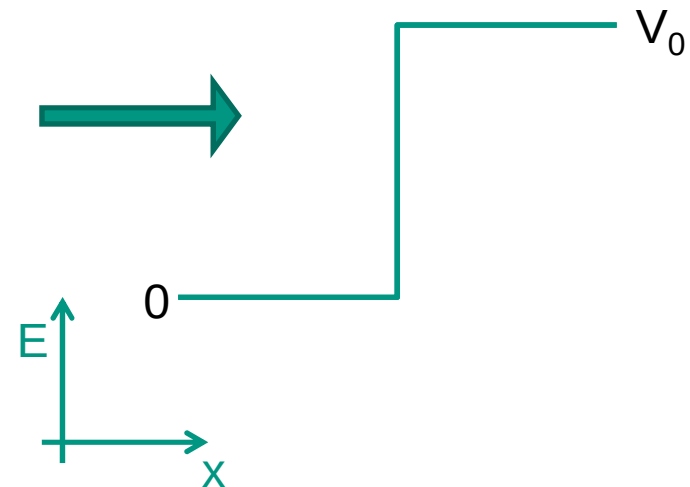
## Reflexion, Transmission & Tunneln

### ■ $W < V_0$ :

- 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  $\lambda$



# 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.

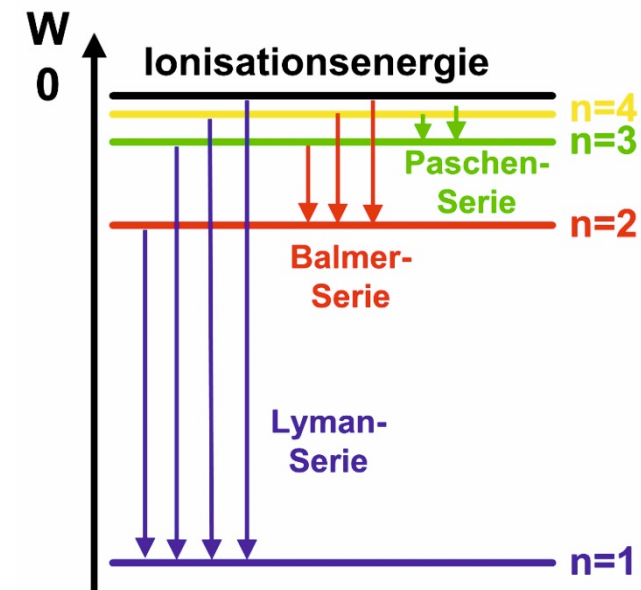
Stellen Sie eine Formel für die Wellenlängen des Lichtes auf, das emittiert wird, wenn ein Elektron ausgehend von einem höheren Zustand in den Zustand  $n = 2$  relaxiert.

### ■ Balmer-Serie:

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

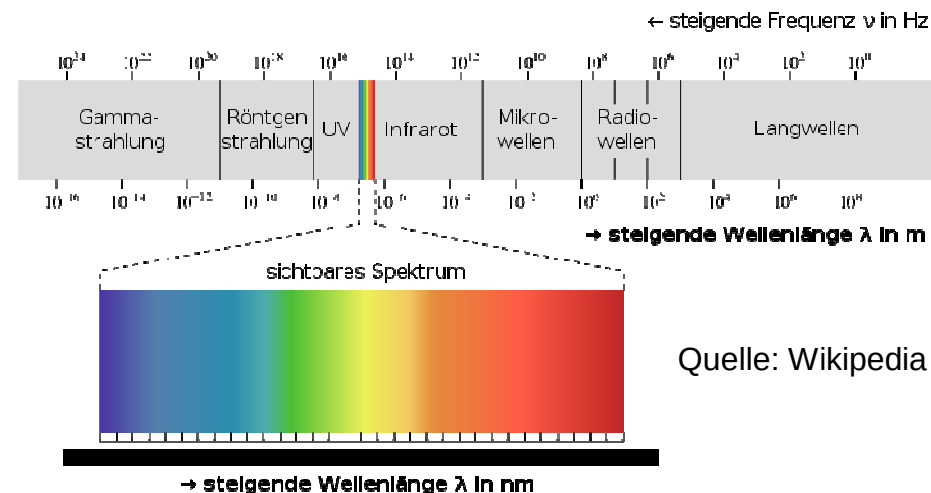
### ■ Mit Rydbergkonstante:

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



## A1 a) – Das Wasserstoffatom

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



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

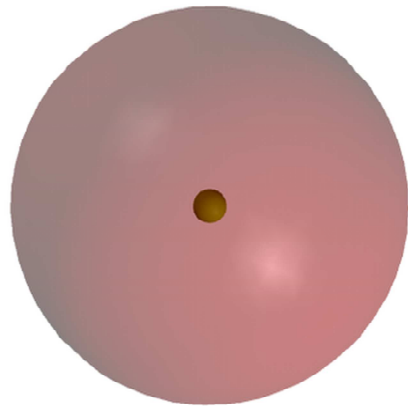
■ Mit:  $\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{W}$

| n | W[J]                    | W[eV] | $\lambda$ [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      |

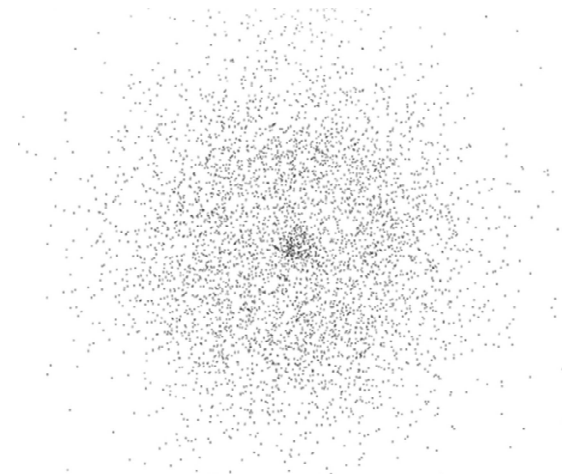
## A1 b) – Das Wasserstoffatom

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:

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

$l = 0, 1, 2, \dots (n - 1)$  (Nebenquantenzahl, Drehimpulsquantenzahl)

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

$s = \pm \frac{1}{2}$  (Spinquantenzahl)

■  $n = 5$ :

■  $l = 0, 1, 2, 3, 4$

■  $l = 0 \rightarrow m = 0 \mid l = 1 \rightarrow m = -1, 0, 1 \mid l = 2 \rightarrow m = -2, -1, 0, 1, 2 \mid \text{etc.}$

■ jeweils mit  $s = +1/2$  oder  $s = -1/2$

## A1 e) – Das Wasserstoffatom

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

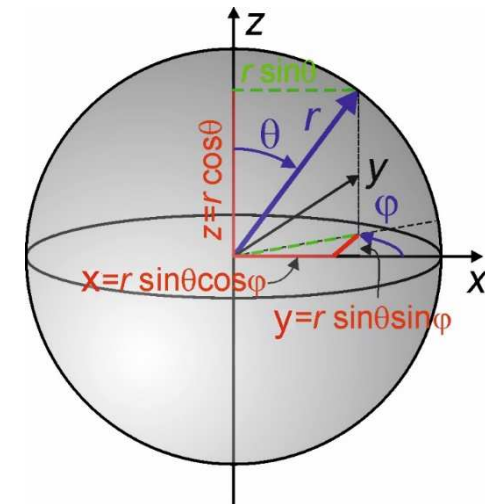
■ Anzahl der Zustände  $A_n$ :

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

## A1 f) – Das Wasserstoffatom

Recherchieren Sie, wie die Wellenfunktion für das Wasserstoffatom  $\psi$  lautet.

- Auf Grund der Symmetrie des H-Atoms werden Kugelkoordinaten verwendet
- Separation der Variablen ist möglich  
 $\rightarrow \psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\phi, \theta)$
- 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   | $\pm 1$ | $\mp \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{\pm j\phi}$ |
| 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:  $\langle r \rangle = \int_{r=0}^{\infty} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} r \frac{1}{\pi} a_0^{-3} e^{-2r/a_0} r^2 \sin \theta dr d\phi d\theta$

$$= \int_{r=0}^{\infty} \frac{4\pi}{\pi a_0^3} r^3 e^{-2r/a_0} dr$$

$$= \frac{4}{a_0^3} \underbrace{\int_{r=0}^{\infty} r^3 e^{-2r/a_0} dr}_{\text{Bronstein: } \int_{x=0}^{\infty} x^n e^{-ax} dx = n! / a^{n+1}}$$

$$= \frac{4}{a_0^3} \frac{3!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^4} = \frac{3}{2} a_0$$

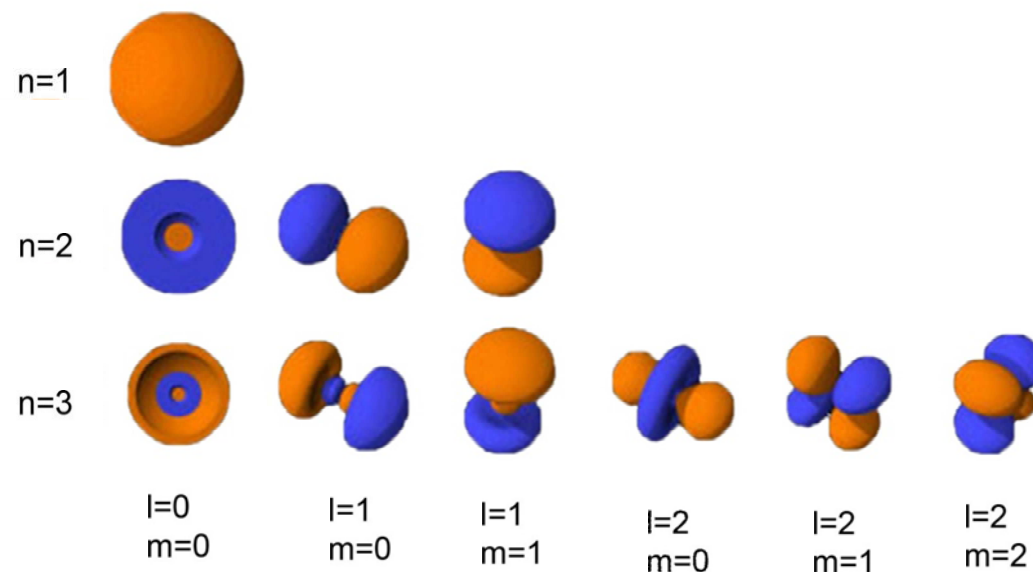
- Maximum von  $\psi$ :  $r = 0$



## 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 gehörenden Wellenfunktionen



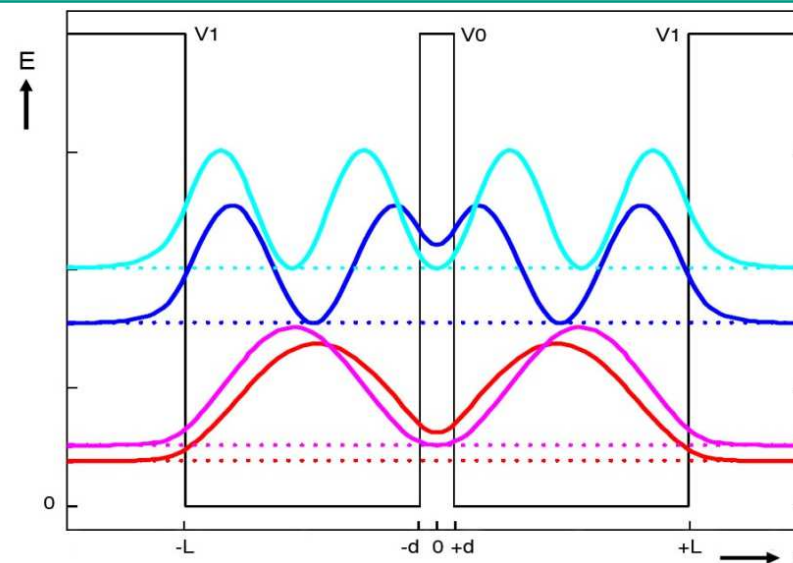
<http://csi.chemie.tu-darmstadt.de/ak/immelmisc/oc-scripts/orbitals.html>

## 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

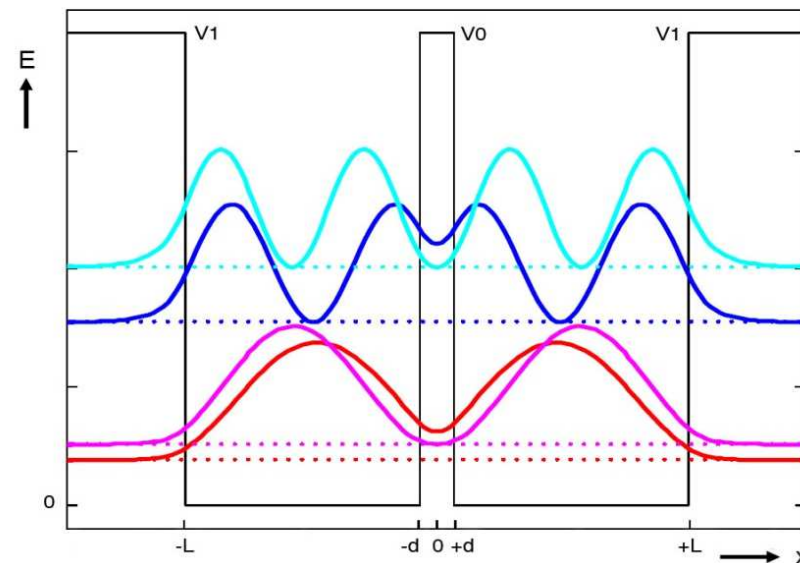
Ein Elektron der Energie  $W_{q1} > V_1$  laufe von links ein. Wie verhält es sich im angegebenen Potentialgebiet?

- 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  $W_{k2} > V_1$ ?

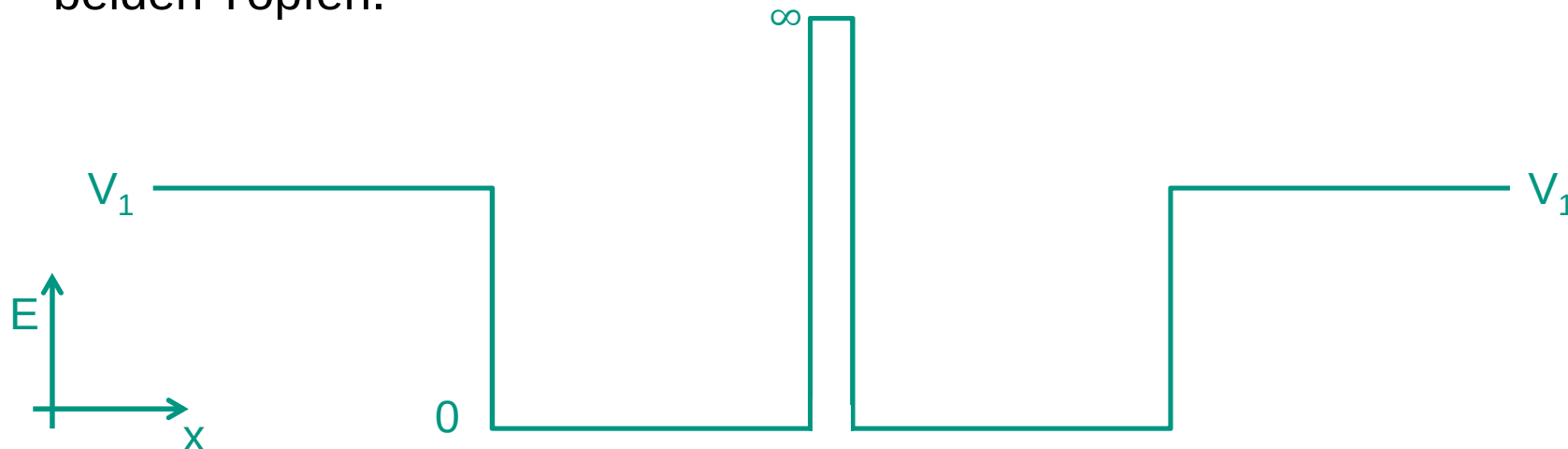
- $W_{k1} < V_1$ : Das Elektron bewegt sich wie ein Ball **entweder** im linken **oder** im rechten Topf hin und her.
- $W_{k2} > V_1$ : Das Elektron erhält an den Stellen  $\pm d$  und  $\pm L$  einen Kraftstoß, der das Elektron beschleunigt oder abbremst



## 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.)

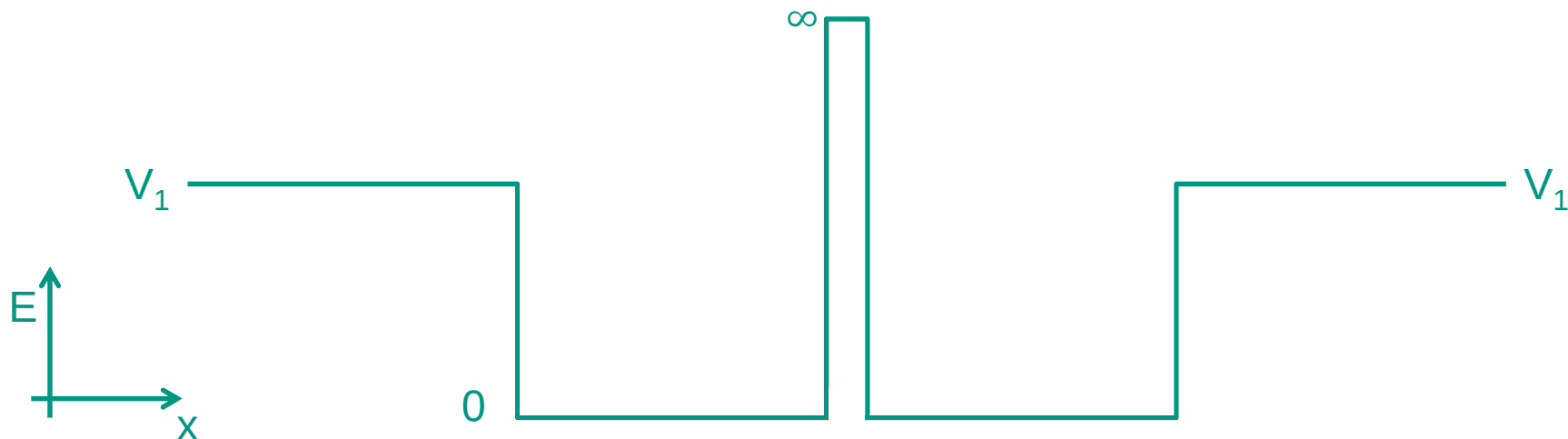
- $W_{q1} > V_1$ : Das Elektron wird am Gebiet  $V_0 = \infty$  reflektiert, kein Tunneln
- $W_{q1} < V_1$ : Das Elektron tunnelt nicht durch die Barriere zwischen den beiden Töpfen.



## 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.)

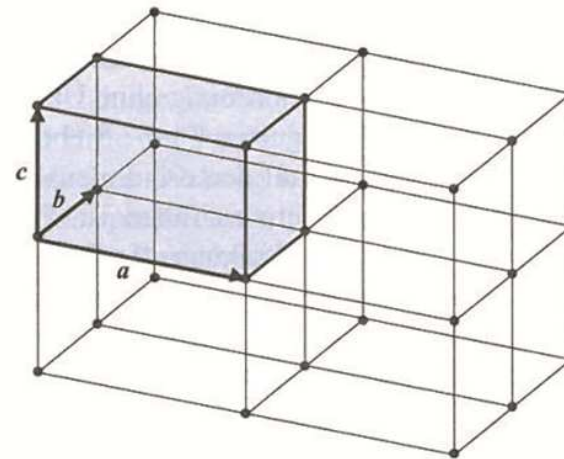
- Das Elektron bewegt sich im Topf mit der gleichen Wahrscheinlichkeit nach links bzw. rechts.  $\rightarrow \langle \hat{p} \rangle = 0$



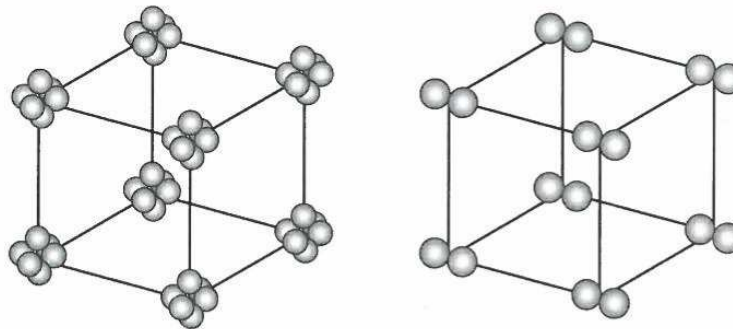
## A3 a) – Kristalle

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

- Translationssymmetrie → Kristallgitter:

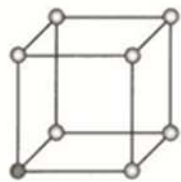


- Die Basis – Bausteine der Materie (Atome, Moleküle) an den Punkten des Kristallgitters:

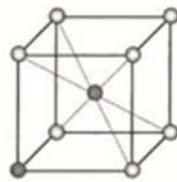


## A3 a) – Kristalle

### ■ 14 Möglichkeiten – die Bravais-Gitter:



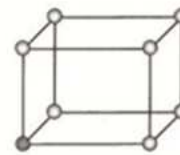
kubisch  
primitiv



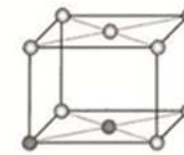
kubisch  
raumzentriert



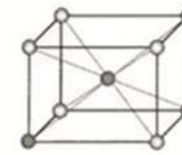
kubisch  
flächenzentriert



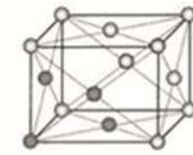
orthorhombisch  
primitiv



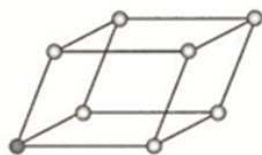
orthorhombisch  
basiszentriert



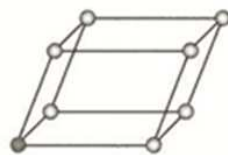
orthorhombisch  
raumzentriert



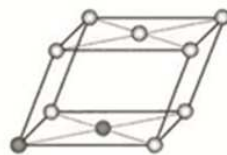
orthorhombisch  
flächenzentriert



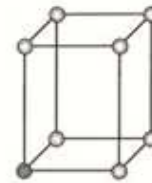
triklin



monoklin  
primitiv



monoklin  
basiszentriert



tetragonal  
primitiv



tetragonal  
raumzentriert



hexagonal



trigonal  
(rhomboedrisch)



## A3 b) – Kristalle

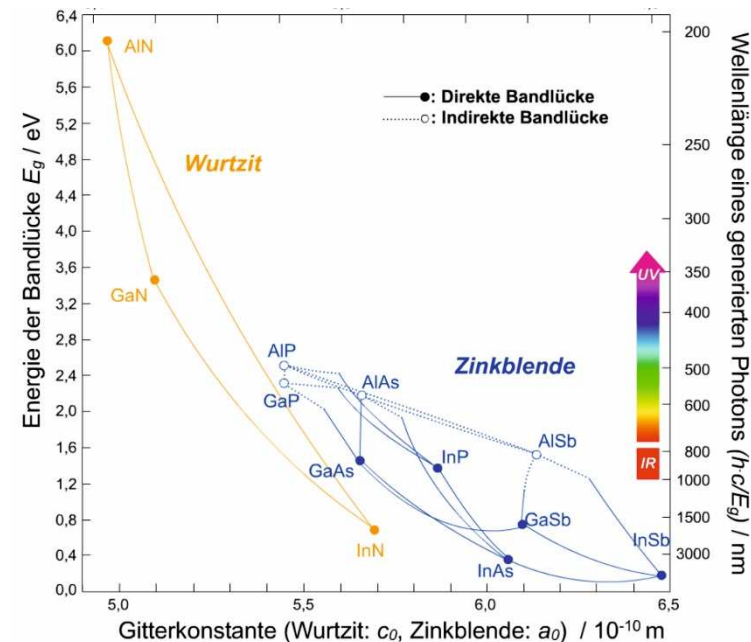
Welche Herstellungsmethoden von hochreinen kristallinen Festkörpern kennen Sie?

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



Silizium-Einkristall  
Czochralski-Verfahren

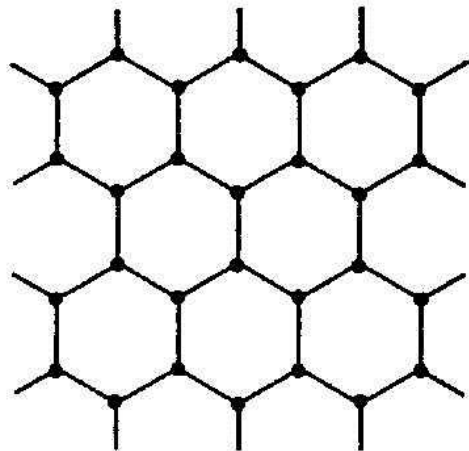
Quelle: Wikipedia



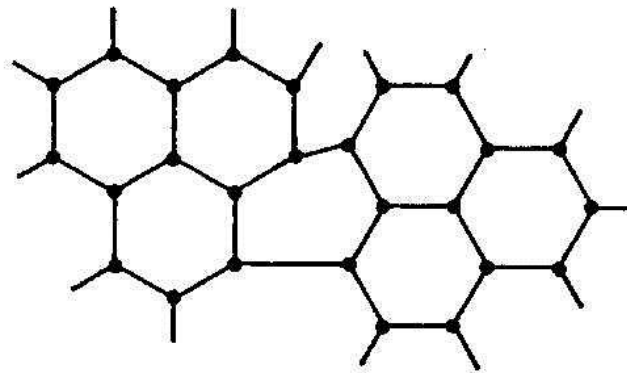
„Landkarte der III/V-Verbindungs-Halbleiter“  
→ wichtig für das Wachstum von Schichtstrukturen

## A3 c) – Kristalle

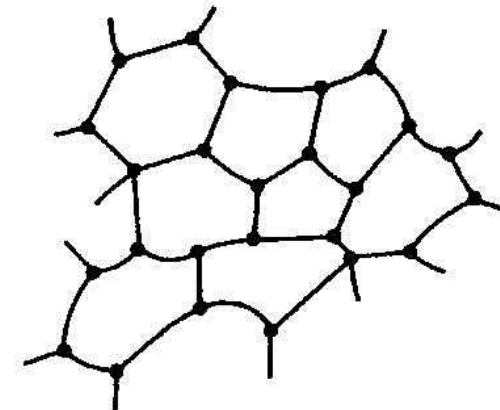
Wann spricht man von polykristallinen, wann von amorphen Festkörpern?



kristallin



polykristallin



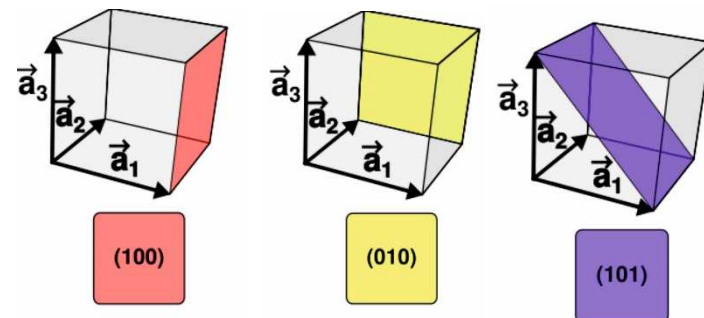
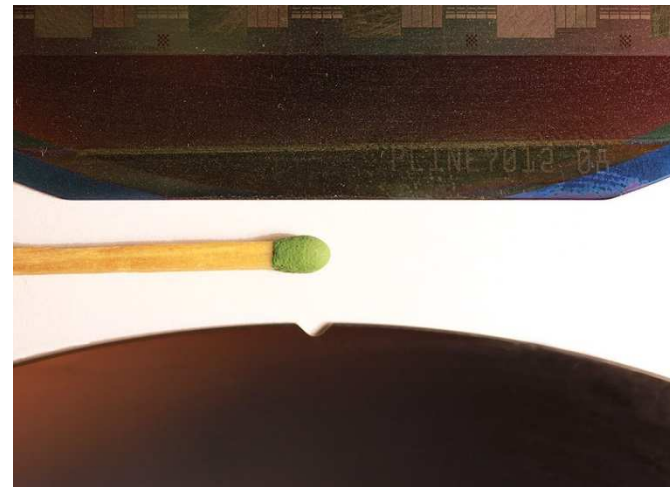
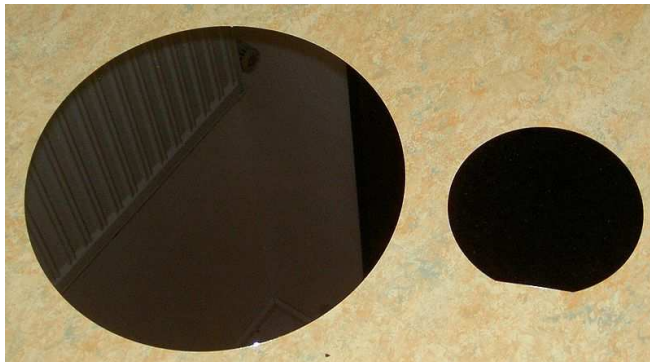
amorph

- 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: 20. – 24. Juni 2016

■ Lösungen zur 4. Übung: 16. Juni 2016

---

■ Nächste Übung (Ü5): 24. Juni 2016