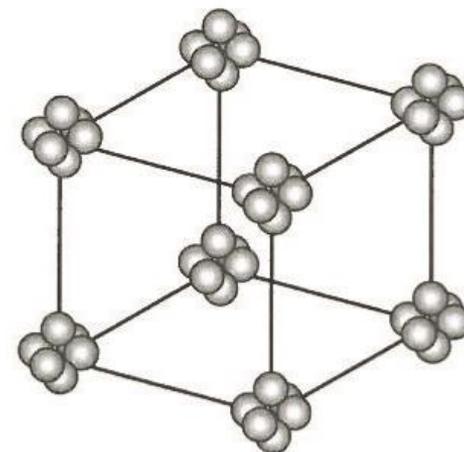
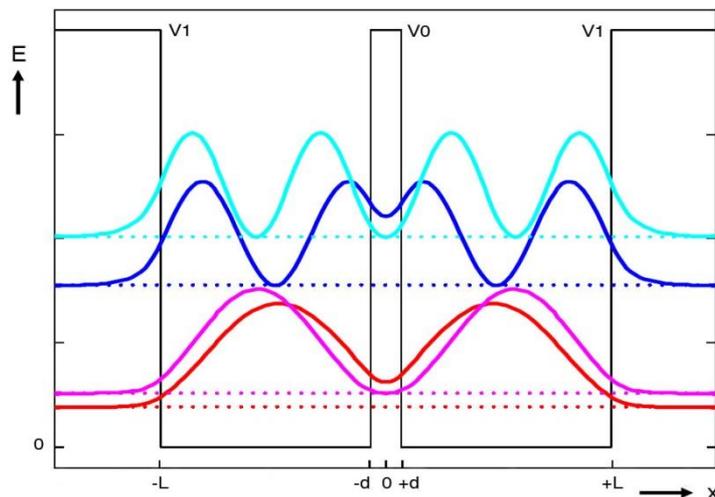
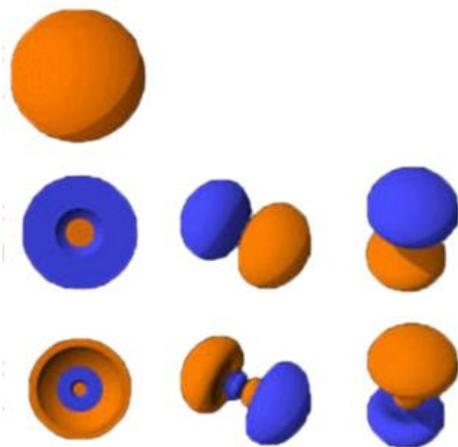


# Vom H-Atom zur Bandstruktur

## 5. Übung Optik und Festkörperelektronik

Lichttechnisches Institut (LTI)

Sommersemester 2020, Henning Mescher, Benjamin Fritz



# Terminplanung

Tag/Monat	April	Mai	Juni	Juli
1		1. Mai Feiertag	Pfingstmontag	
2			V11 FE (8)	V17 FE (14)
3				Ü8 FE (7), Ausgabe T7
4			V12 FE (9)	
5		V4 FE (1)	U5 FE (4), Ausgabe T3	
6				Tut 6
7		V5 FE (2), Ausgabe U2		V18 FE (15)
8				
9			V13 FE (10)	V19 FE (16), (Institutsführung)
10			Ausgabe Ü6/T4	Ausgabe Ü9/T8
11		Tut 1	Fronleichnam	
12		V6 FE (3), Ausgabe Ü3	Brückentag	
13				Tut 7
14		Ü2 FE (1)		V20 FE (17)
15		V7 FE (4), Ausgabe T2	Tut 3	
16			V14 FE (11)	
17				Ü9 FE (8), Ausgabe U10
18				
19		Ü3 FE (2)	Ü6 FE (5), Ausgabe Ü7/T5	
20	VL-Beginn	Ausgabe Ü4		Tut 8
21	V1 Optik (1), Ausgabe Ü1	Christi Himmelfahrt		V21 FE (18)
22		V8 FE (5)	Tut 4	
23	V2 Optik (2)		V15 FE (12)	V22 FE (19)
24				Ü10 FE (9), VL-Ende
25		Tut 2		
26		V9 FE (6)	Ü7 FE (6), Ausgabe Ü8/T6	
27				
28	V3 Optik (3)	V10 FE (7)		
29	Deadline Tut.-Anmeldung	Ü4 FE (3), Ausgabe Ü5	Tut 5	
30	U1 Optik, Ausgabe T1		V16 FE (13)	
31		Pfingsten		



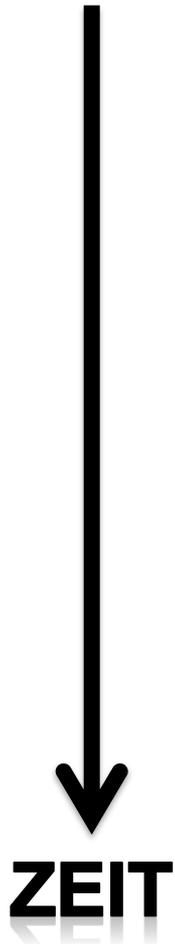
Wochenende
Feiertag
Vorlesung
Übung
Tutorium
Brückentag

Ausgabe:  
 Ü/T wird in ILIAS veröffentlicht

Stand:04.05.2020

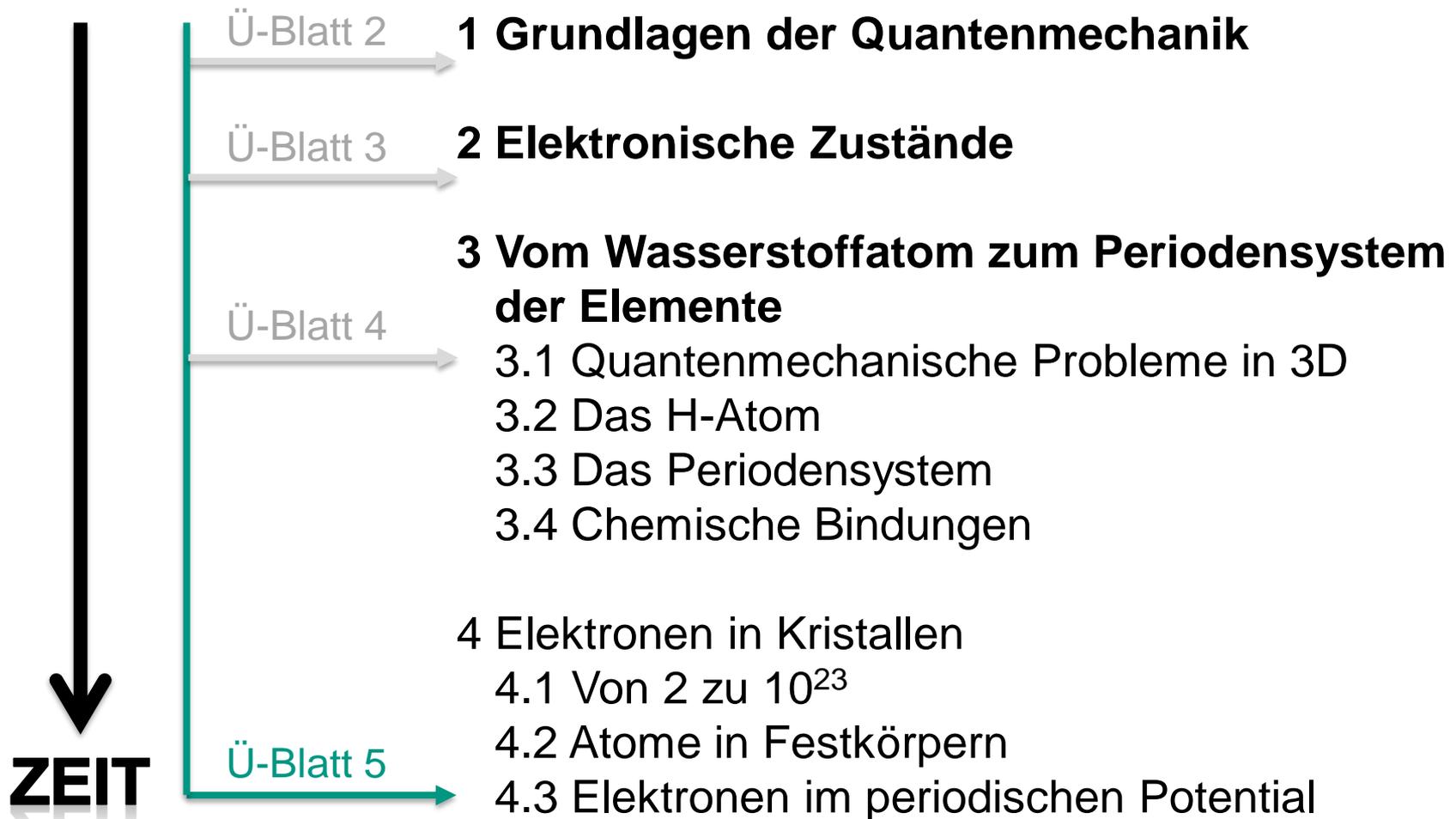
Dienstagstermine: 11:30 - 13:00, 30.46 Chemie, Neuer Hörsaal  
 Donnerstagstermine: 11:30 - 13:00, 30.46 Chemie, Neuer Hörsaal  
 Freitagstermine: 11:30 - 13:00, 11.40 Johann-Gottfried-Tulla-Hörsaal

# 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

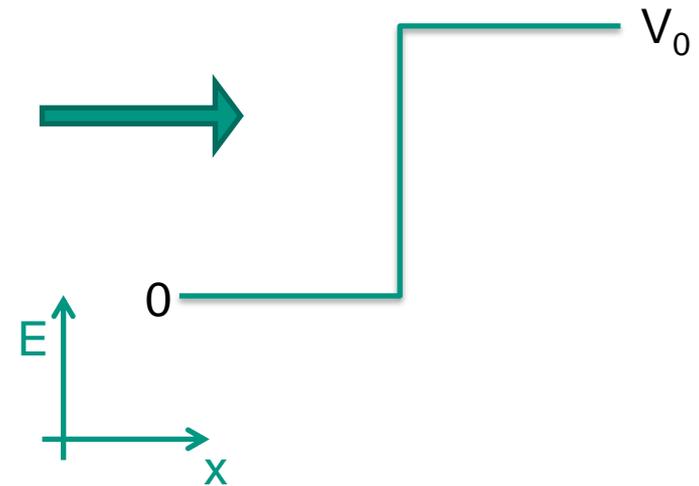
## Reflexion, Transmission & Tunneln

### ■ $W < V_0$ :

- 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.

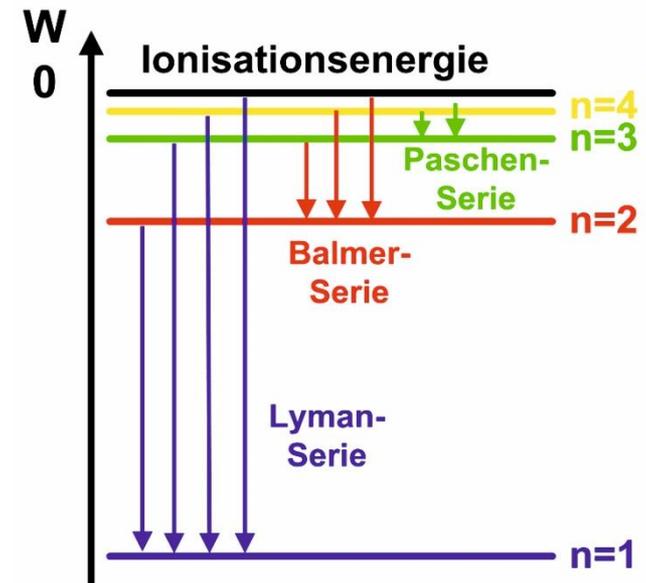
Stellen Sie eine Formel für die Wellenlängen des Lichtes auf, das emittiert wird, wenn ein Elektron ausgehend von einem höheren Zustand in den Zustand  $n = 2$  relaxiert.

## ■ Balmer-Serie:

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

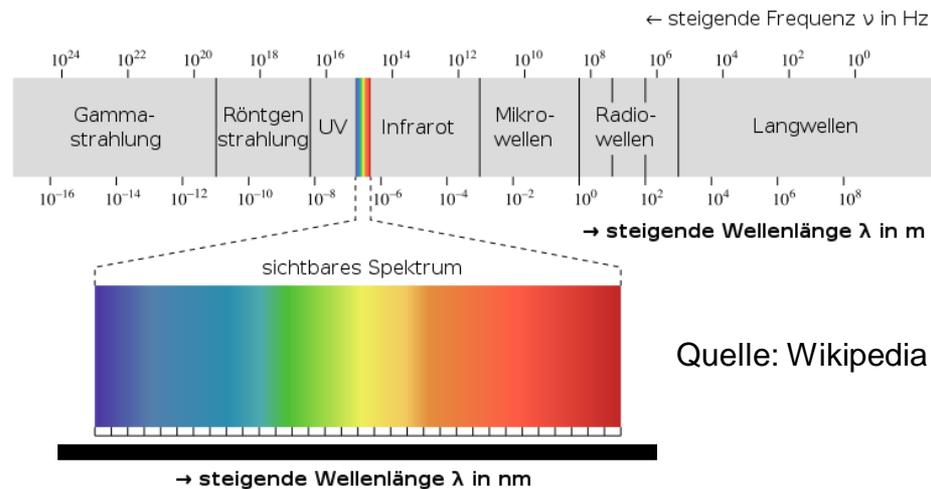
## ■ Mit Rydbergkonstante:

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



# A1 a) – Das Wasserstoffatom

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



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

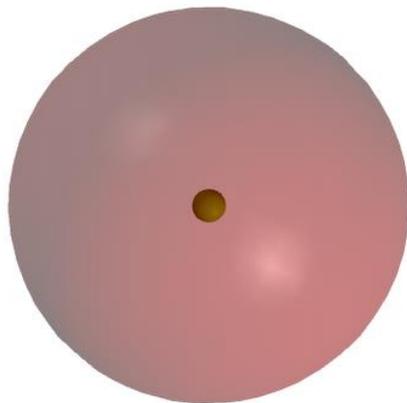
■ Mit:  $\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{W}$

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

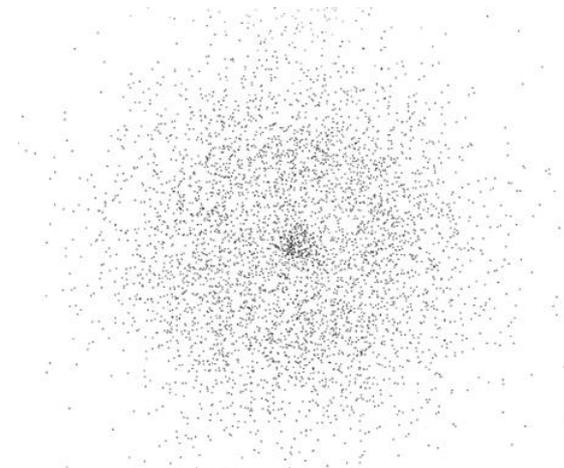
## A1 b) – Das Wasserstoffatom

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

# A1 c) – Das Wasserstoffatom

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

■ Hauptquantenzahl  $n$  → Energie des Zustands, Abstand zum Kern

■ Drehimpulsquantenzahl  $l$  → Form der Wellenfunktion/Orbitals

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

■ Magnetquantenzahl  $m$  → Ausrichtung des Orbitals

$$L_z = \hbar m$$

■ Spinquantenzahl  $s$  → 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:

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{Hauptquantenzahl})$$

$$l = 0, 1, 2, \dots (n - 1) \quad (\text{Nebenquantenzahl, Drehimpulsquantenzahl})$$

$$m = -l, (-l + 1), \dots 0, \dots l \quad (\text{Magnetquantenzahl})$$

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

■  $n = 5$ :

■  $l = 0, 1, 2, 3, 4$

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

■ 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

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

# A1 f) – Das Wasserstoffatom

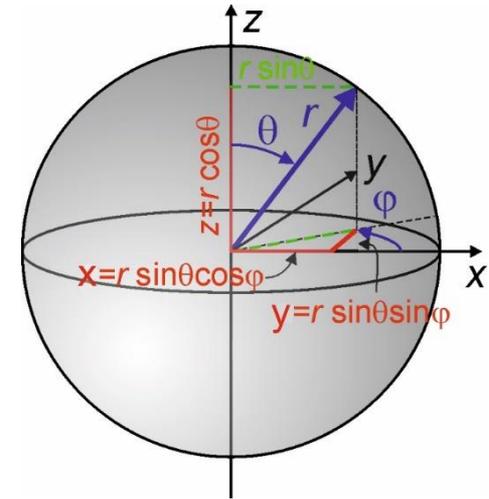
Recherchieren Sie, wie die Wellenfunktion für das Wasserstoffatom  $\psi$  lautet.

- 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:

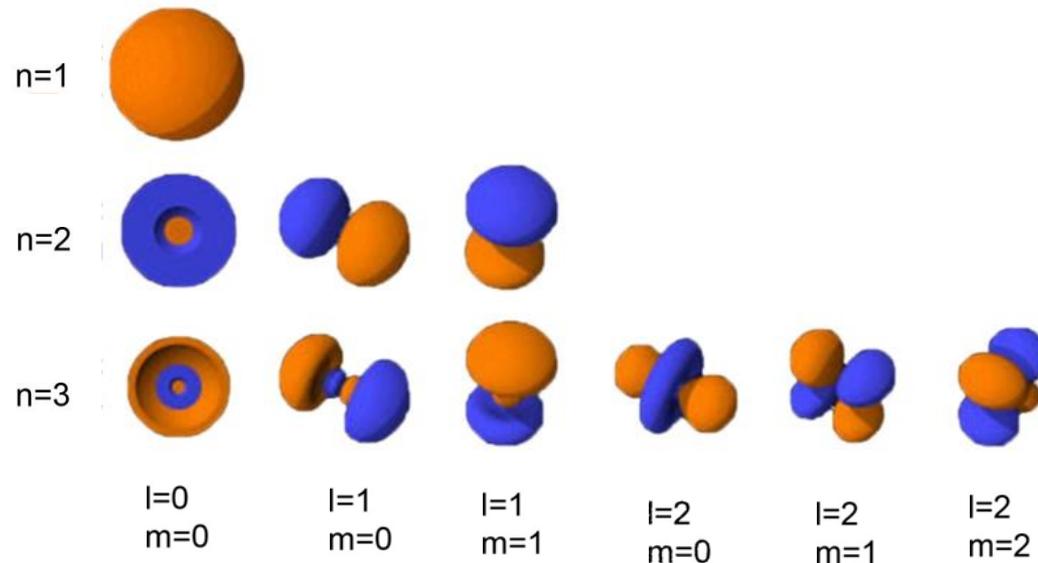
$$\psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}$$

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

# 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



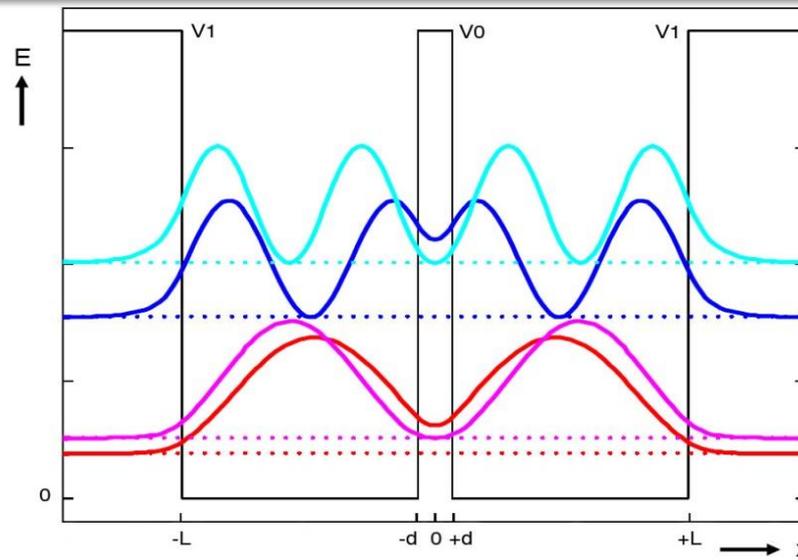
<http://csi.chemie.tu-darmstadt.de/ak/immel/misc/oc-scripts/orbitals.html>

## 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

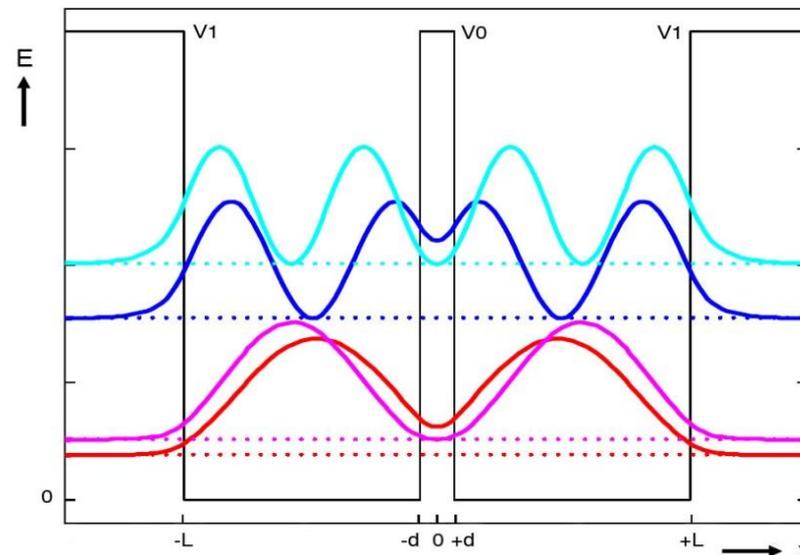
Ein Elektron der Energie  $W_{q1} > V_1$  laufe von links ein. Wie verhält es sich im angegebenen Potentialgebiet?

- 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  $W_{k2} > V_1$ ?

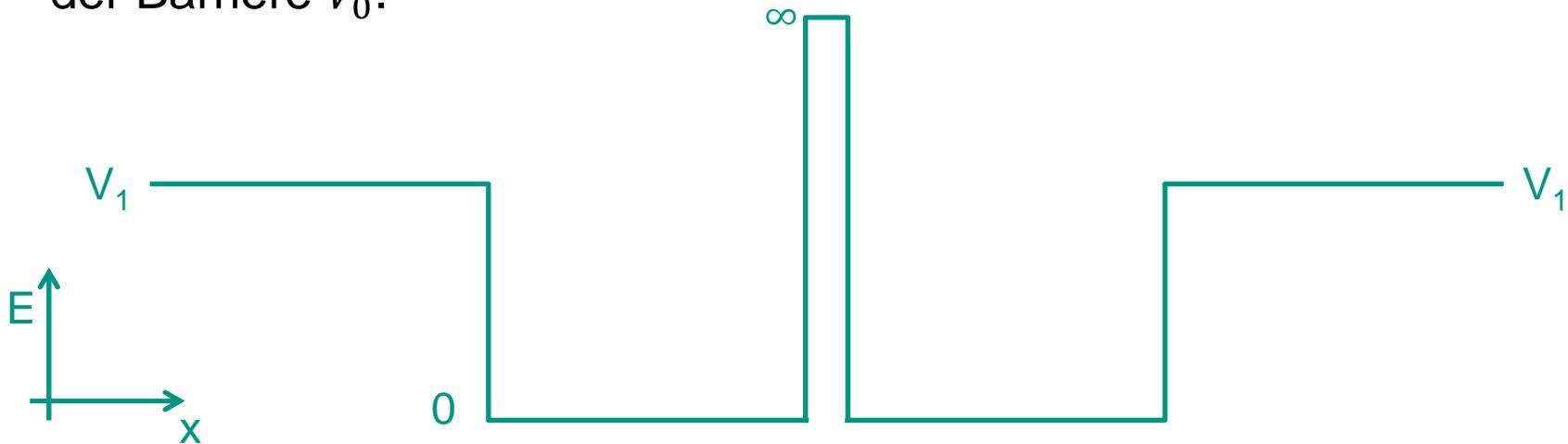
- $W_{k1} < V_1$ : Das Elektron bewegt sich wie ein Ball **entweder** im linken **oder** im rechten Topf hin und her.
- $W_{k2} > V_1$ : Das Elektron erhält an den Stellen  $\pm d$  und  $\pm L$  einen Kraftstoß, der das Elektron beschleunigt oder abbremst



## 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.)

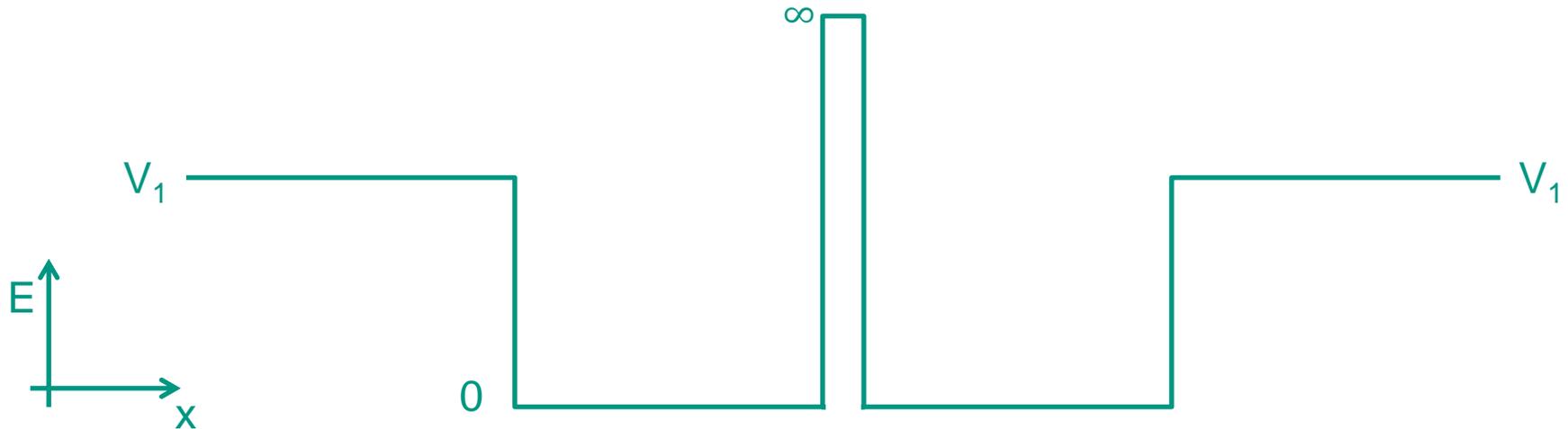
- $W_{q1} > V_1$ : Das Elektron wird am Gebiet  $V_0 = \infty$  reflektiert, kein Tunneln
- $W_{q1} < V_1$ : Das Elektron kann in das Gebiet  $V_1$  eindringen. Reflexion an der Barriere  $V_0$ .



## 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.)

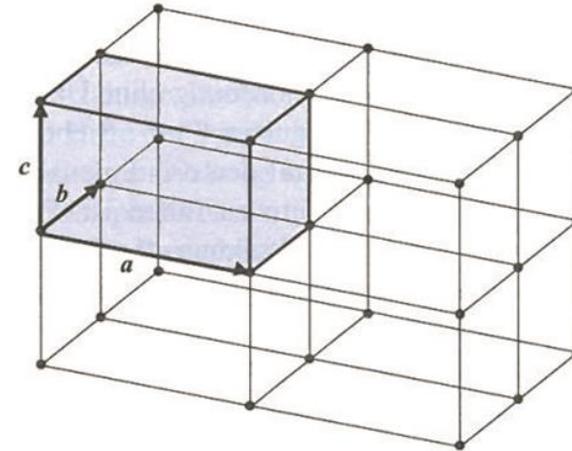
- Das Elektron bewegt sich im Topf mit der gleichen Wahrscheinlichkeit nach links bzw. rechts.  $\rightarrow \langle \hat{p} \rangle = 0$



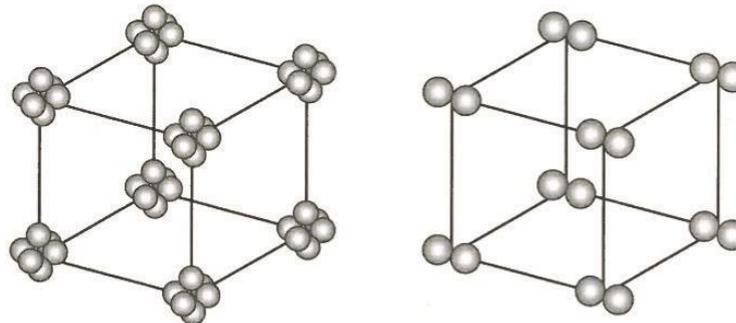
# A3 a) – Kristalle

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

- Translationssymmetrie → Kristallgitter:

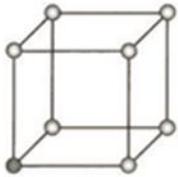


- Die Basis – Bausteine der Materie (Atome, Moleküle) an den Punkten des Kristallgitters:

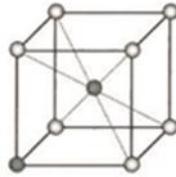


# A3 a) – Kristalle

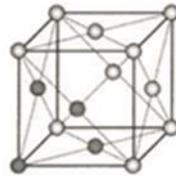
## ■ 14 Möglichkeiten – die Bravais-Gitter:



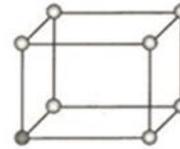
kubisch  
primitiv



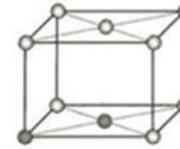
kubisch  
raumzentriert



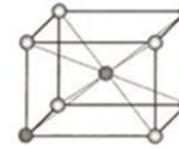
kubisch  
flächenzentriert



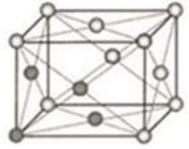
orthorhombisch  
primitiv



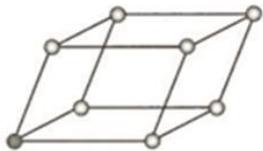
orthorhombisch  
basiszentriert



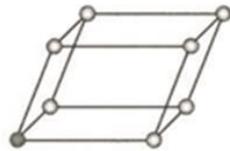
orthorhombisch  
raumzentriert



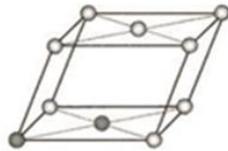
orthorhombisch  
flächenzentriert



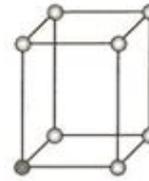
triklin



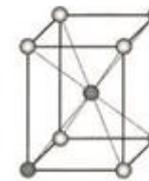
monoklin  
primitiv



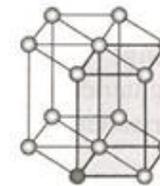
monoklin  
basiszentriert



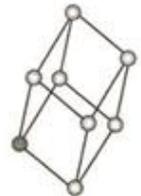
tetragonal  
primitiv



tetragonal  
raumzentriert



hexagonal

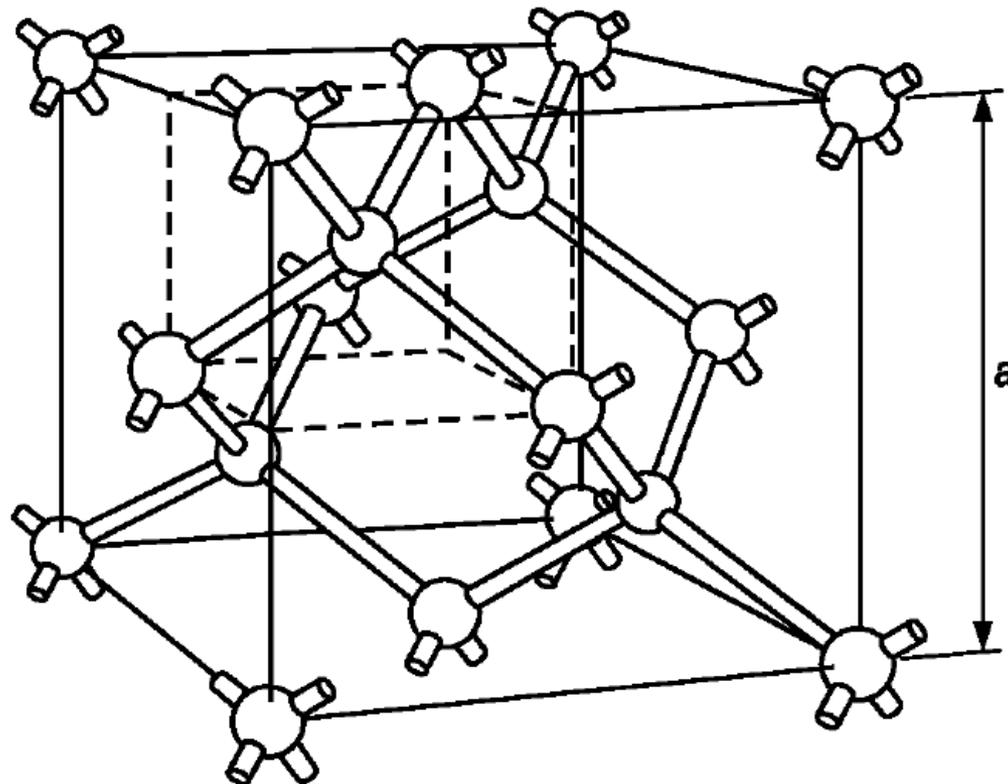


trigonal  
(rhomboedrisch)

## A3 b) – Kristalle

Si und Ge bilden Diamantgitter

Die Diamantstruktur hat ein fcc-Gitter mit einer Einheitszelle, die aus zwei Atomen bei  $(0,0,0)$  und  $(1/4,1/4,1/4)a$  besteht.  $a$  ist die Länge der Einheitszelle.



# A3 b) – Kristalle

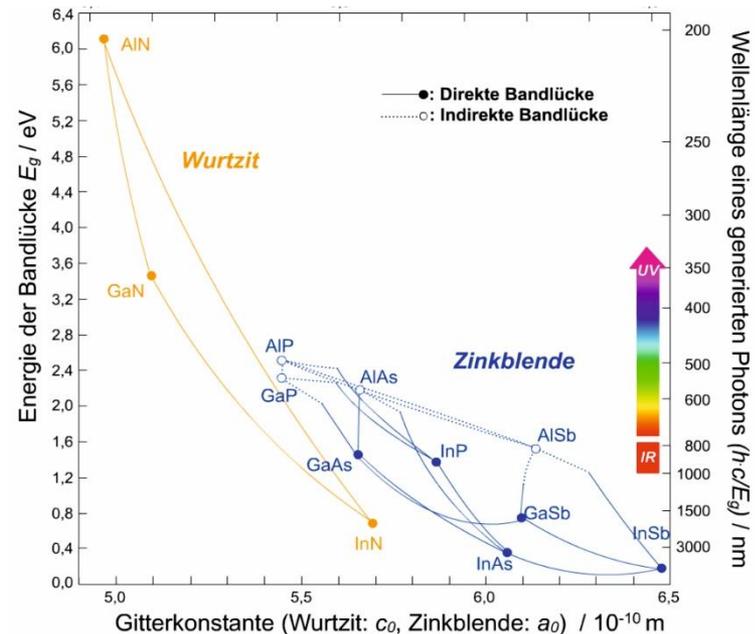
Welche Herstellungsmethoden von hochreinen kristallinen Festkörpern kennen Sie?

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



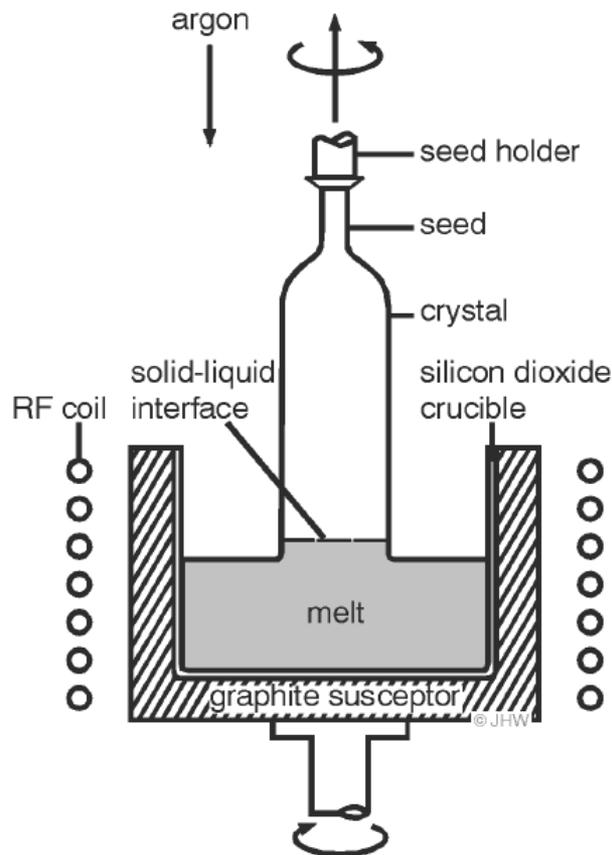
Silizium-Einkristall  
Czochralski-Verfahren

Quelle: Wikipedia



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

# A3 b) – Kristalle



-für gute Transporteigenschaften ist einkristallines Material erforderlich

Bruchstücke von poly-Si werden unter Schutzgas aufgeschmolzen ( $T_S=1415\text{ °C}$ )

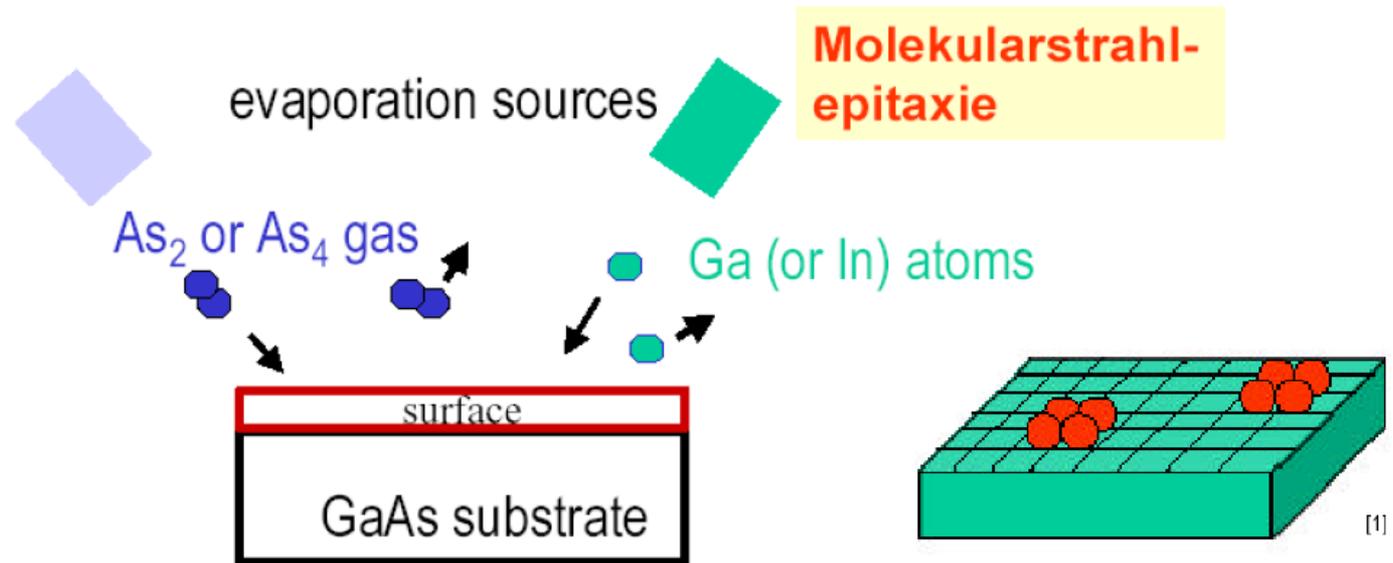
Eintauchen eines einkristallinen Keims

einkristallines Wachstum unter Zieh- und Drehbewegungen

Wachstum von einkristallinen Stäben

## A3 b) – Kristalle

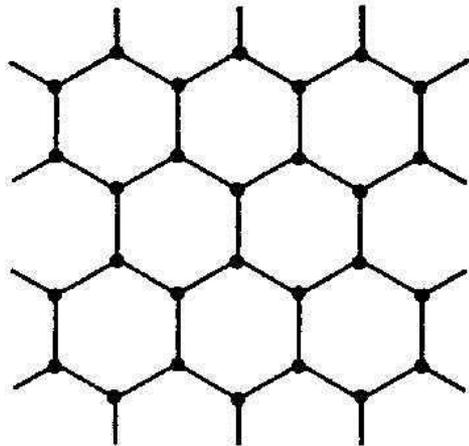
Molekularstrahlepitaxie (molecular beam epitaxy, MBE)



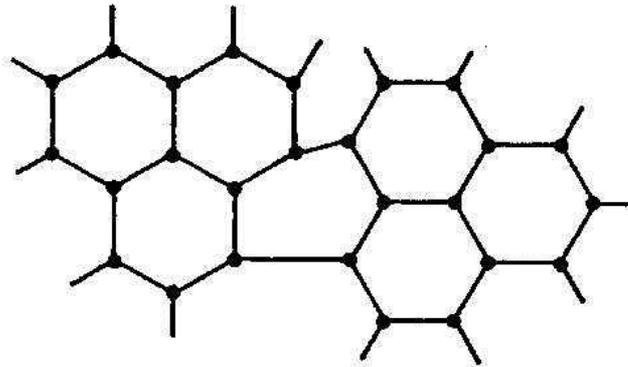
- Verdampfung der Elemente aus fester Quelle im Ultrahochvakuum ( $10^{-10}$  mbar)
- ist für Verbindungshalbleiter interessant
  - Methode für die Erforschung neuer Materialien

## A3 c) – Kristalle

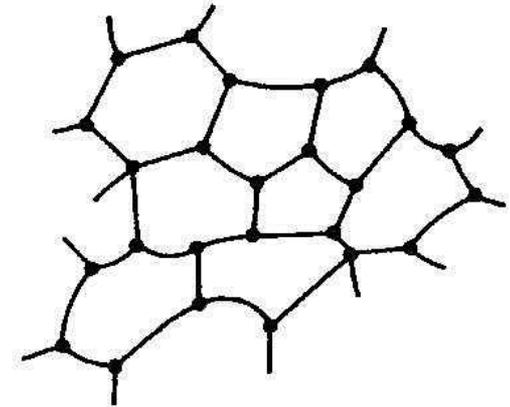
Wann spricht man von polykristallinen, wann von amorphen Festkörpern?



kristallin



polykristallin



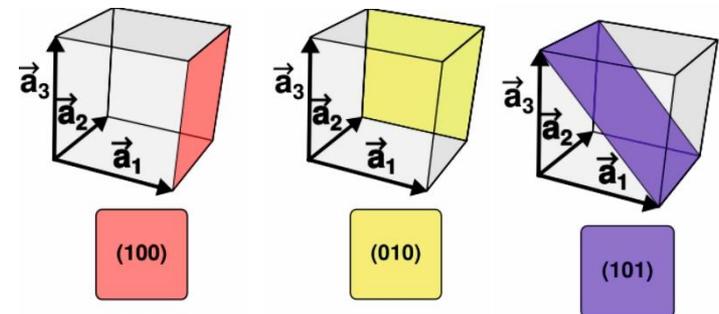
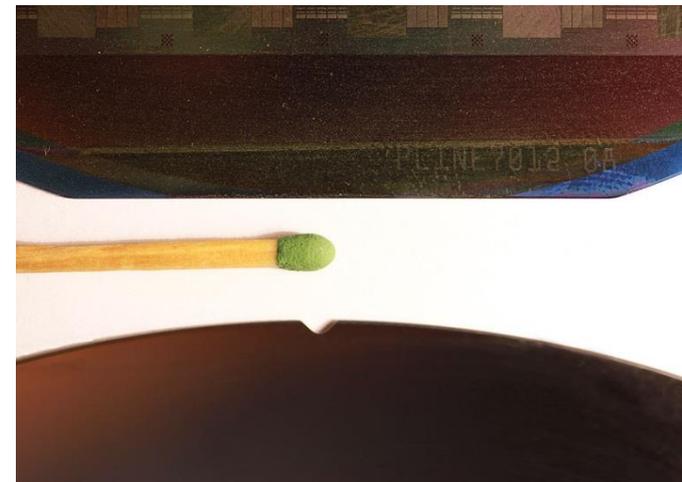
amorph

- 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

- 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?

# Ankündigungen

■ Nächste Tutorien: 15. – 19. Juni 2020

---

■ Nächste Übung (Ü6): 19. Juni 2020