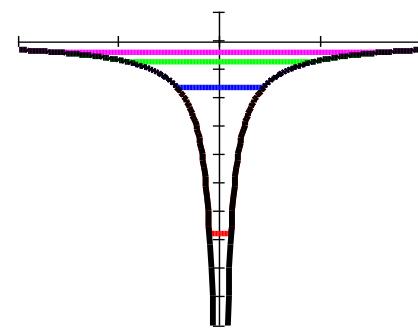
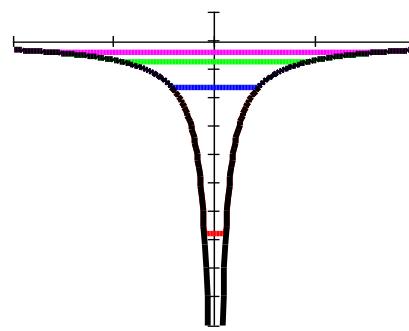
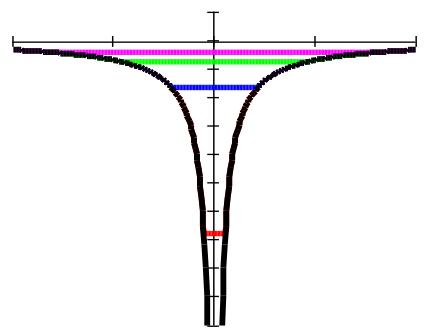


Übersicht über die Vorlesung

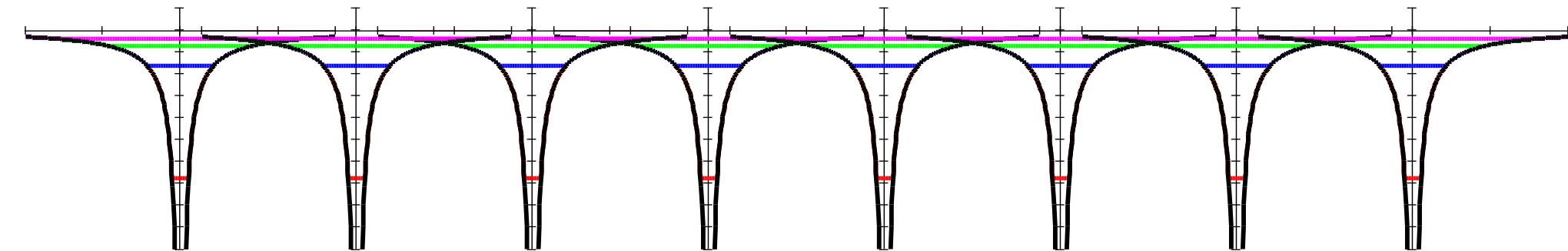
- 1. Grundlagen der Quantenmechanik**
- 2. Elektronische Zustände**
- 3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente**
- 4. Elektronen in Kristallen**
 - 4.1 Von 2 zu 10^{23}**
 - 4.2 Wellenpakete
 - 4.3 Elektronen in periodischen Potentialen
- 5. Halbleiter**
- 6. Quantenstatistik für Ladungsträger**
- 7. Dotierte Halbleiter**
- 8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht**
- 9. Der pn-Übergang**

Verallgemeinerung von zwei auf 10^{23} Atome



4.1 Vom Atom zum Molekül zum Festkörper (Von 1 zu 2 zu 10^{23})

Verallgemeinerung von zwei auf 10^{23} Atome



Aufspaltung der Energiezustände

Für N Atome Aufspaltung in N Energiezustände

Diese energetisch nahe zusammenliegenden Zustände bilden “Bänder” von erlaubten Zuständen.

Komplexes Verhalten durch Überkreuzungen

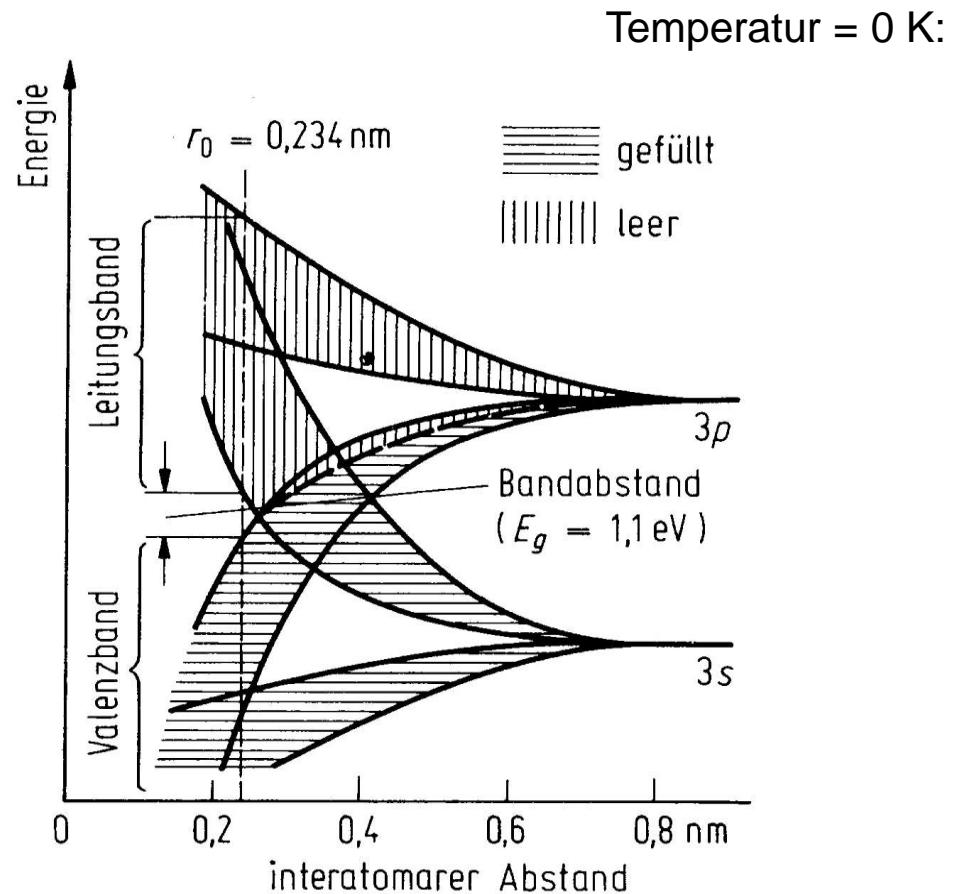
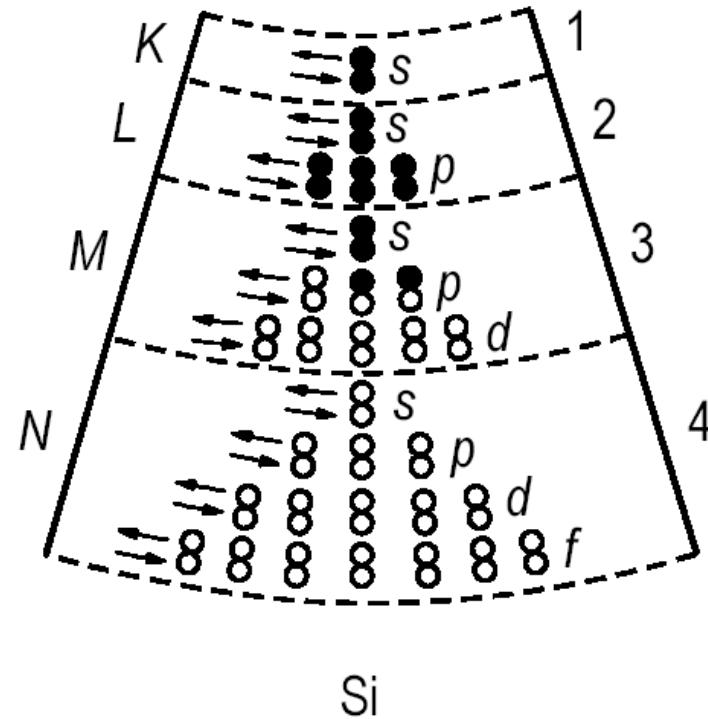
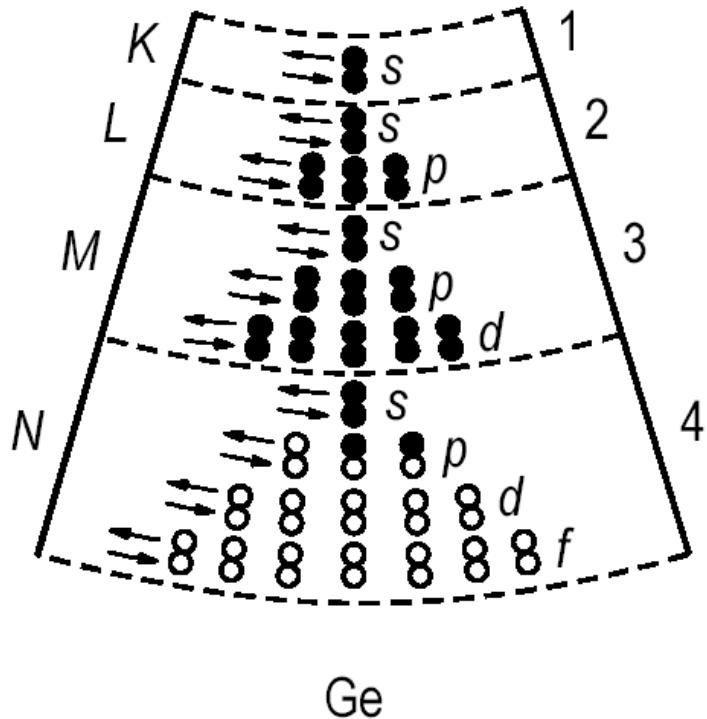


Abb.: Schema der Energieniveaus, wenn (fiktiv) aus unabhängigen Si-Atomen durch Verringerung des atomaren Abstandes ein Kristall gemacht wird.

Atome in Festkörpern

FuB 6.5

- chemische und physikalische Eigenschaften der Elemente sind durch ihre Elektronenkonfiguration im Grundzustand sowie durch naheliegende angeregte Zustände bestimmt
- z.B. Germanium Ge (32 Elektronen) und Silizium Si (14 Elektronen):
- jeweils vier Elektronen in der äußersten Schale

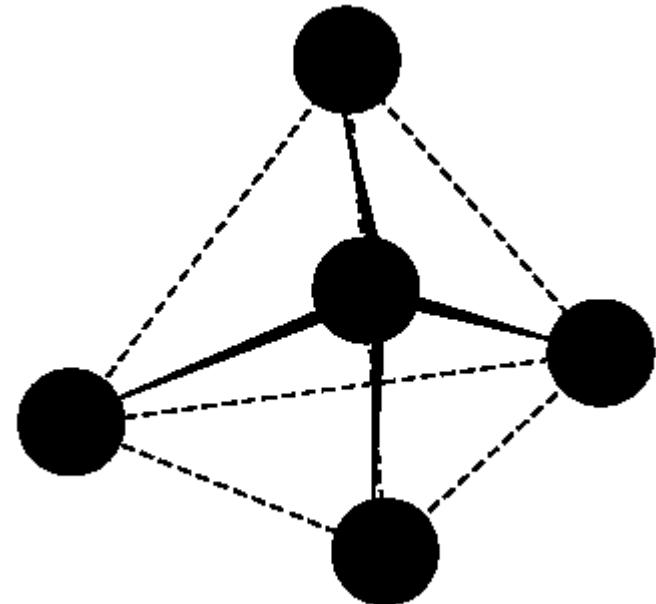


Atome in Festkörpern

- Elektronen in der äußersten Schale gehen Verbindungen mit anderen Atomen ein (kovalente Bindung, teilweise ionisch bei unterschiedlichen Atomen, z.B. GaAs)
- Anordnung der Atome erfolgt so, dass die Gesamtenergie minimal wird

Dies ist oft gegeben, wenn eine Unterschale gefüllt wird.

Jedes Si- oder Ge-Atom geht Verbindungen mit vier weiteren Atomen ein.

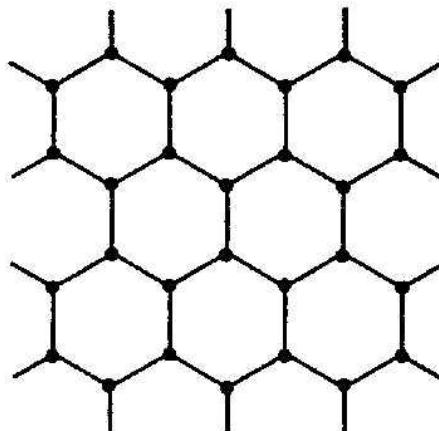


Ordnung in Festkörpern

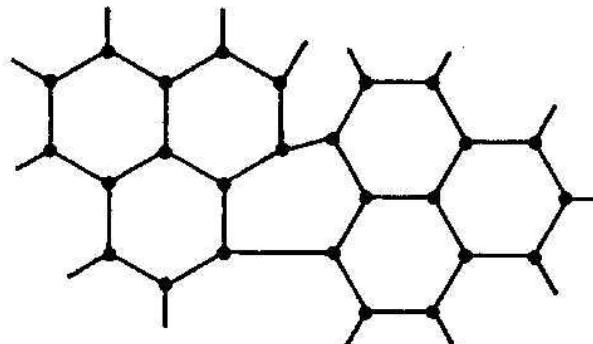
Je nach Art der Herstellung können sich die Atome verschieden geordnet zu Festkörpern zusammenschliessen.

- ⇒ Kristalle: Die Atome sind periodisch angeordnet.
- ⇒ Polykristalline Festkörper: Kristalline Bereiche, aber keine Fernordnung
- ⇒ Amorphe Festkörper: nur Nahordnung, keine Periodizität, keine Fernordnung.

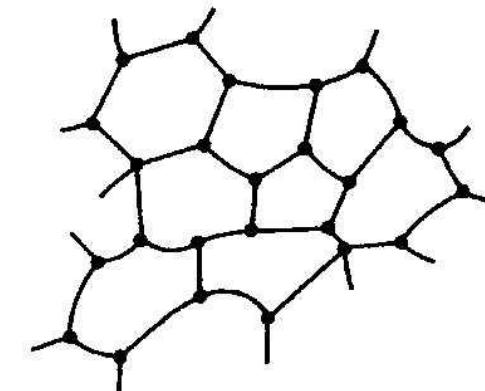
- Halbleitermikroelektronik wird dominiert durch kristalline Siliziumchips
- Halbleiteroptoelektronik wird dominiert durch Verbindungshalbleiter (mehr als ein Element)
- polykristalline und amorphe Halbleiter bei großflächiger und kostengünstiger Elektronik



kristallin

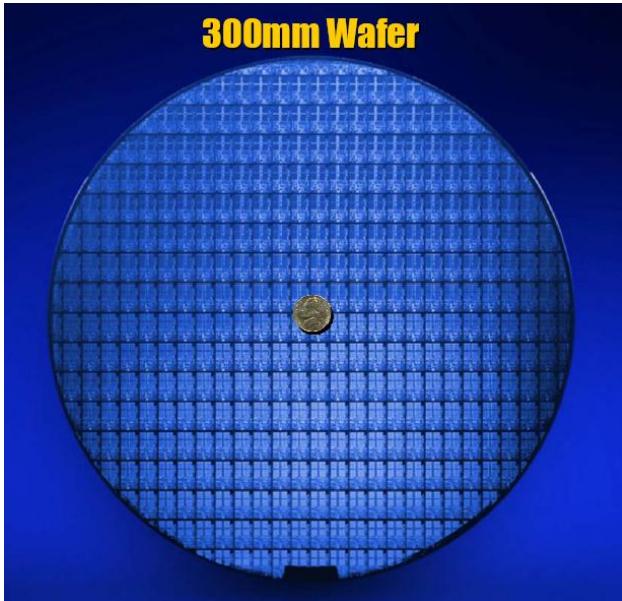


polykristallin

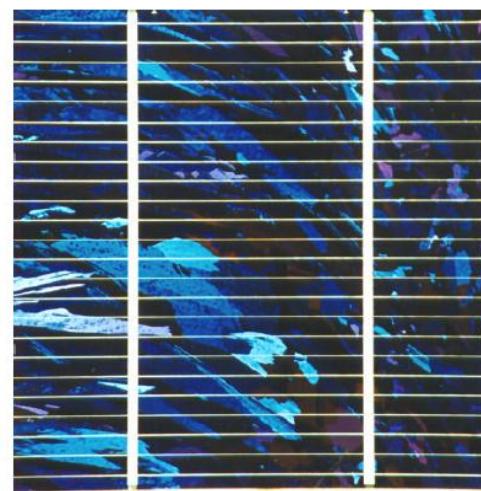


amorph

Ordnung in Festkörpern



Kristalliner Wafer
→ Si-Mikroelektronik



Polykristalline
Si-Solarzelle



Amorphe
Dünnfilmtransistoren

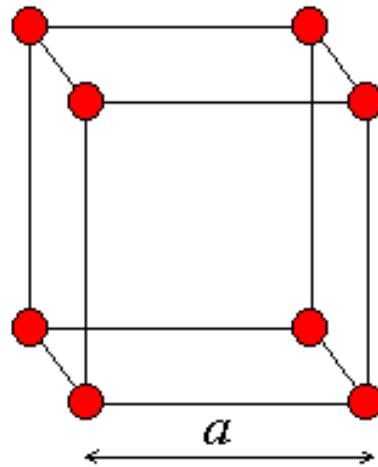
3D-Kristallgitter

In 3D wird die Anordnung durch drei Gittervektoren a_1 , a_2 und a_3 eindeutig beschrieben.

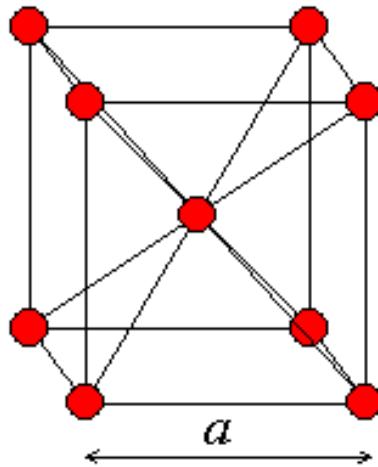
In 3D gibt es 14 verschiedene Kristallgitter.

Die Grundeinheit  muss nicht ein einzelnes Atom sein.

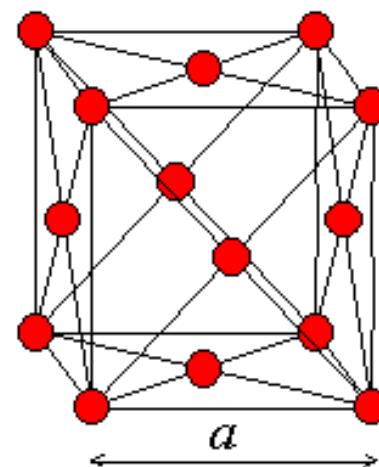
Sie kann auch eine kompliziertere Einheit  aus mehreren Atomen sein.



simple cubic
einfach kubisch
(sc)



body-centered cubic
kubisch raumzentriert
(bcc)



face-centered cubic
kubisch flächenzentriert
(fcc)

Verbindungshalbleiter

Verbindungshalbleiter bilden sich ebenfalls nach der Regel, möglichst die Unterschalen zu füllen.

Dadurch entstehen IV-IV, III-V und II-VI Halbleiter.

Halbleiter aus zwei Elementen nennt man **binäre** Halbleiter.

Element-HL	Verbindungs-HL		
C, Si, Ge	IV-IV-Verbindungen SiC SiGe	III-V-Verbindungen AlP, AlAs, GaN, GaP AlSb, GaAs, InP, GaSb, InAs, InSb	II-VI-Verbindungen ZnS, ZnO, ZnSe, ZnTe CdS, CdSe, HgS, CdTe, HgSe, HgTe

Halbleiter aus drei Elementen nennt man **ternäre** Halbleiter.

⇒ z.B. $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$

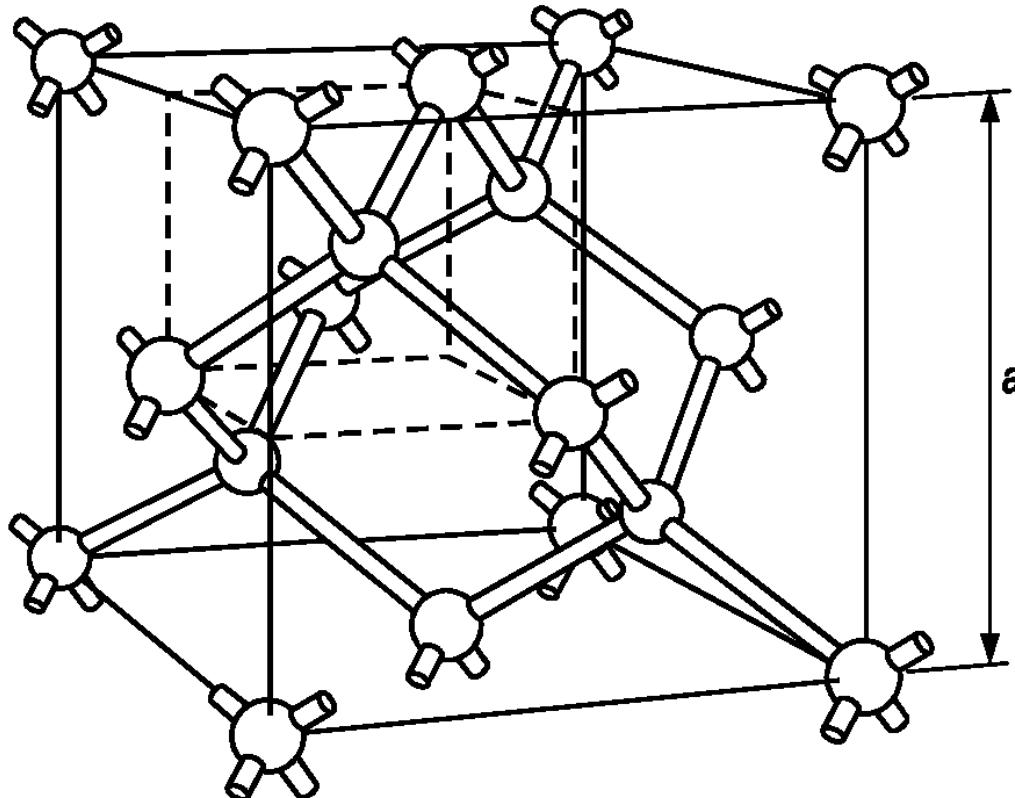
Halbleiter aus vier Elementen nennt man **quaternäre** Halbleiter.

⇒ z.B. $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_{1-y}\text{P}_y$

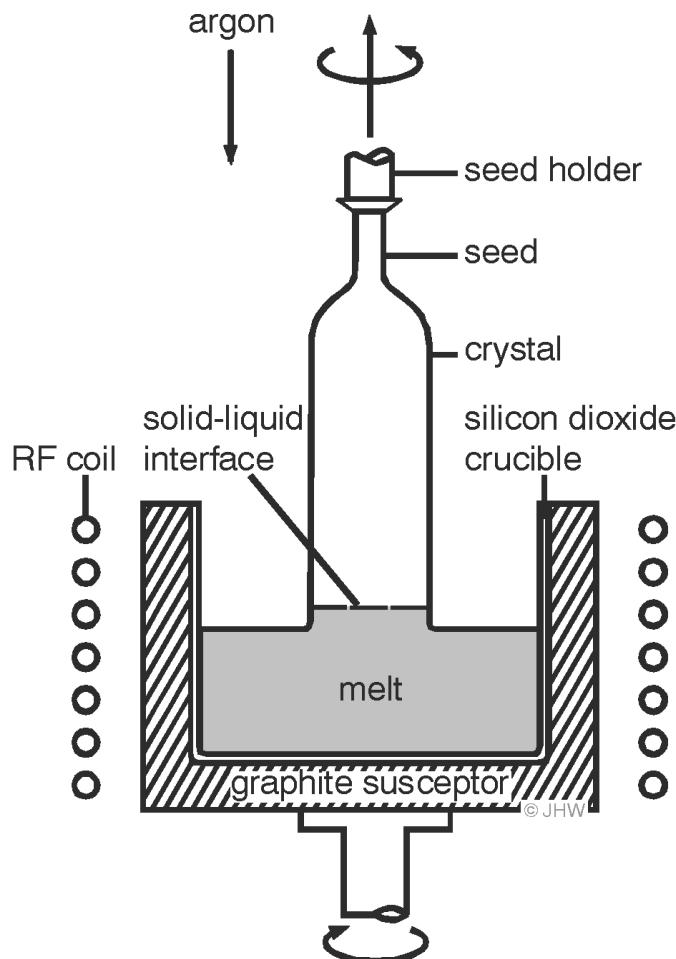
Kristallstruktur von Si und Ge

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.



Einkristallwachstum: Czochralski-Verfahren



-für gute Transporteigenschaften ist einkristallines Material erforderlich

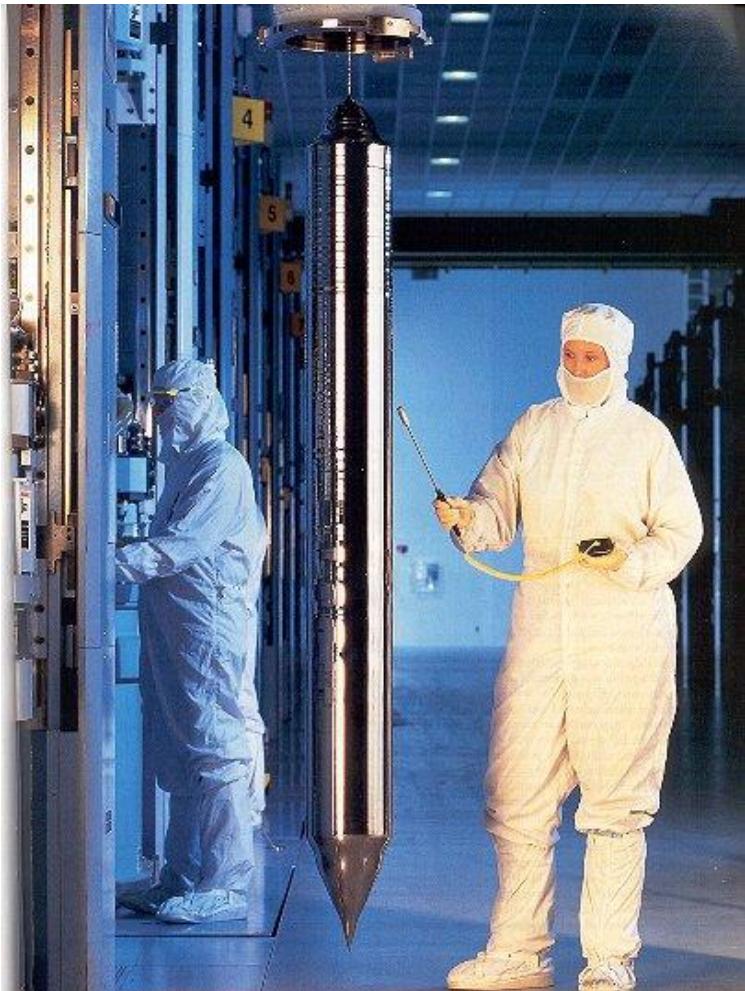
Bruchstücke von poly-Si werden unter Schutzgas aufgeschmolzen
($T_s = 1415 \text{ }^\circ\text{C}$)

Eintauchen eines einkristallinen Keims

einkristallines Wachstum unter Zieh- und Drehbewegungen

Wachstum von einkristallinen Stäben

Einkristallwachstum: Czochralski-Verfahren



-für gute Transporteigenschaften ist einkristallines Material erforderlich

Bruchstücke von poly-Si werden unter Schutzgas aufgeschmolzen
 $(T_s=1415\text{ }^{\circ}\text{C})$

↓

Eintauchen eines einkristallinen Keims

↓

einkristallines Wachstum unter Zieh- und Drehbewegungen (ca. 5mm/h)

↓

Wachstum von einkristallinen Stäben

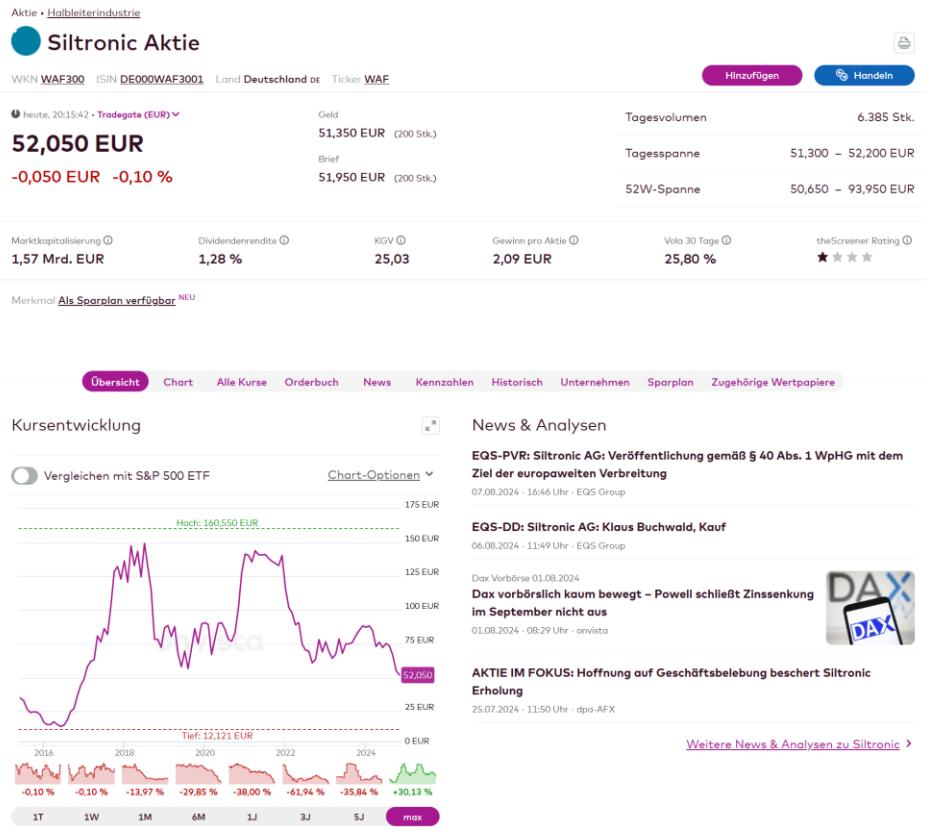
(Foto: Siltronic Burghausen)

Der Anfang der Wertschöpfungskette der Mikroelektronik: Beispiel Siltronic



**PRÄZISION, INNOVATION,
WACHSTUM**

Die Siltronic AG ist einer der weltweit führenden Produzenten von Wafern aus Reinstsilizium und seit Jahrzehnten Partner vieler großer Halbleiterhersteller.



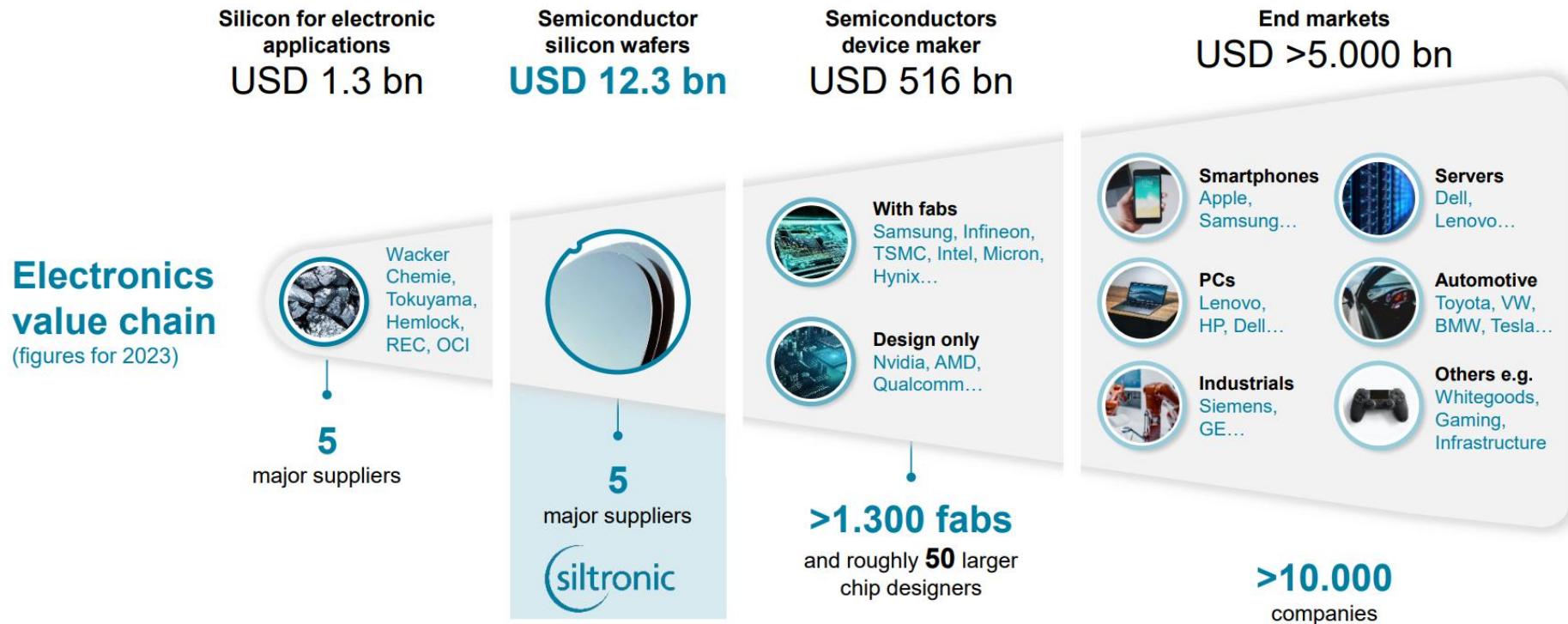
Unternehmensdaten

Firmenprofil zu Siltronic

Die Siltronic AG gehört eigenen Angaben zufolge zu den weltweit führenden Herstellern für Wafer aus Reinstsilizium und ist Partner vieler führender Chip-Hersteller. Das Unternehmen unterhält Produktionsstätten in Europa, Asien und den USA. Siltronic entwickelt und fertigt Wafer mit einem Durchmesser von bis zu 300 mm. Siliciumwafer sind die Grundlage der modernen Mikro- und Nanoelektronik. Sie werden z.B. in Computern, Smartphones, Flachdisplays, Navigationssystemen, Steuer- und Kontrollsystmen für die Automobilbranche sowie in vielen anderen Anwendungen eingesetzt. Anfang Dezember 2020 hatte das Unternehmen eine Vereinbarung über den Zusammenschluss mit dem taiwanischen Chip-Zulieferer GlobalWafers unterzeichnet. Quelle: AFU Research GmbH

Die Wertschöpfungskette der Mikroelektronik

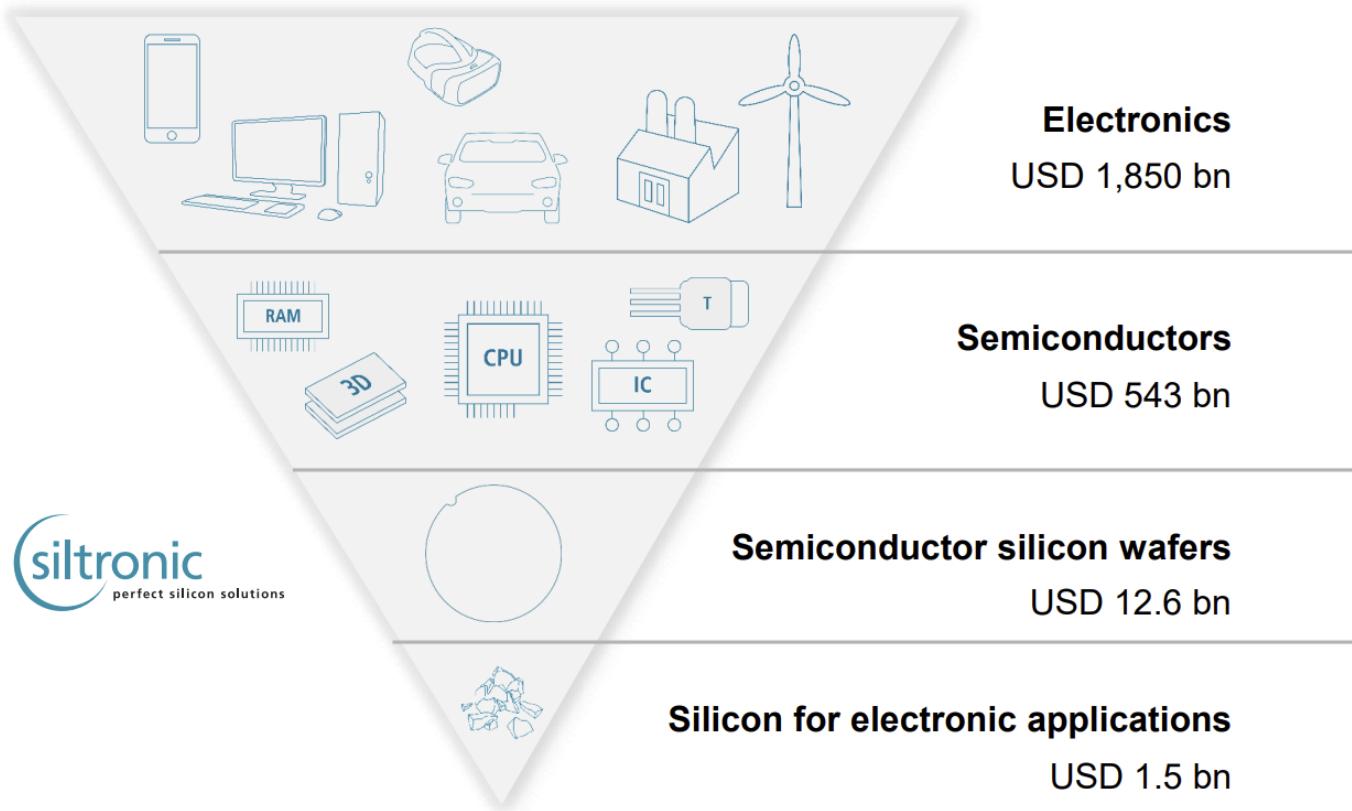
THE WAFER SUPPLIERS ARE FUELING THE WHOLE ELECTRONICS VALUE CHAIN



Source: TechInsights, WSTS (Silicon based), SEMI SMG, Siltronic Marketing

Electronics value chain continued to grow in 2021

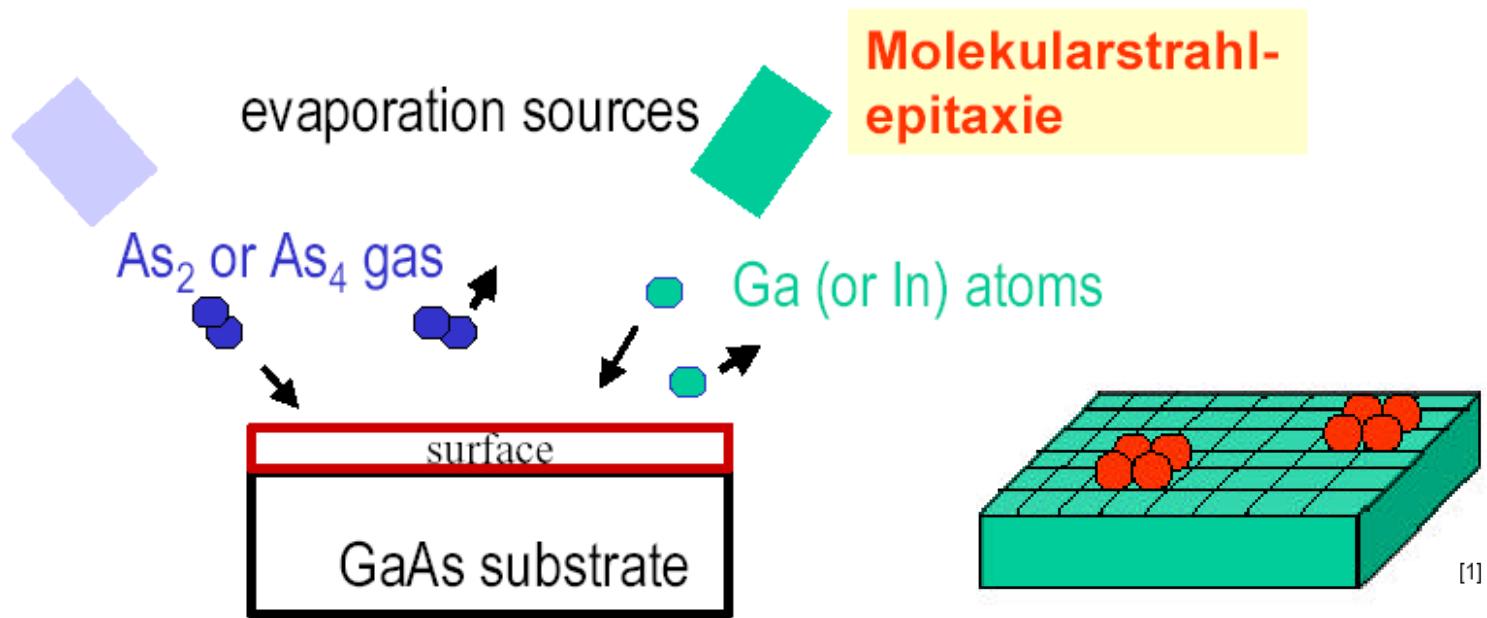
Increasing demand for electronic devices and new applications drive semiconductor growth, which in turn fuels silicon demand



Sources: IC Insights, WSTS, SEMI SMG, Siltronic Marketing

Herstellung von dünnen Kristallschichten: MBE

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

Herstellung von dünnen Kristallschichten: MBE

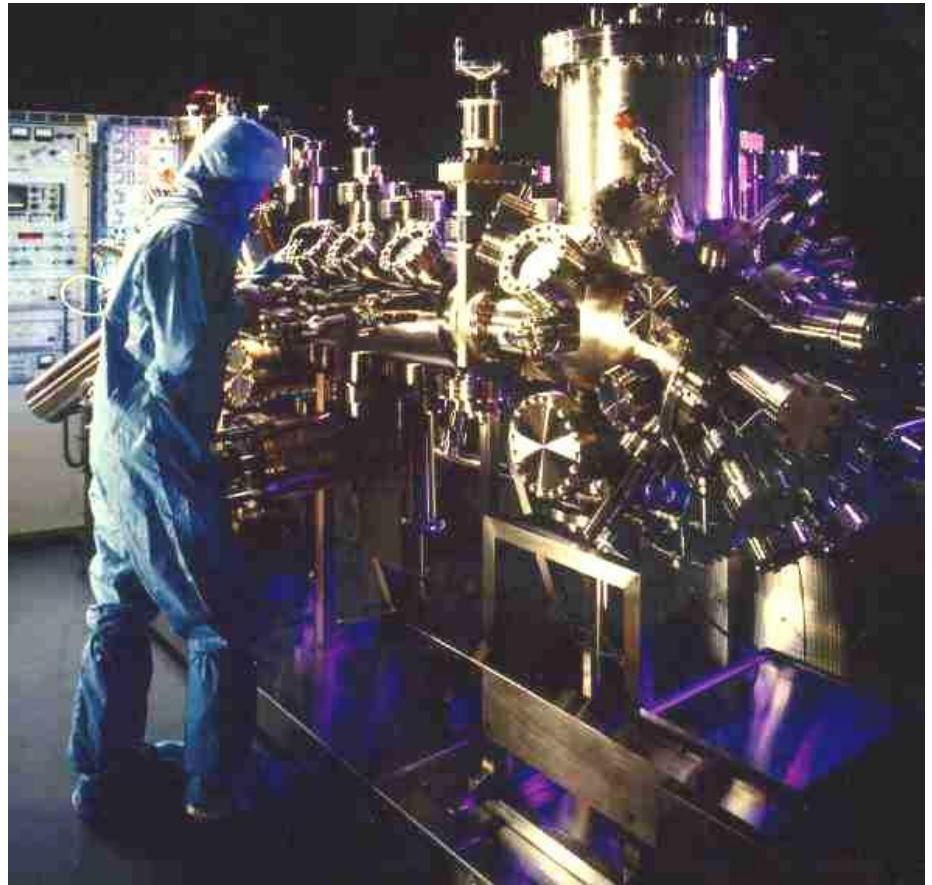
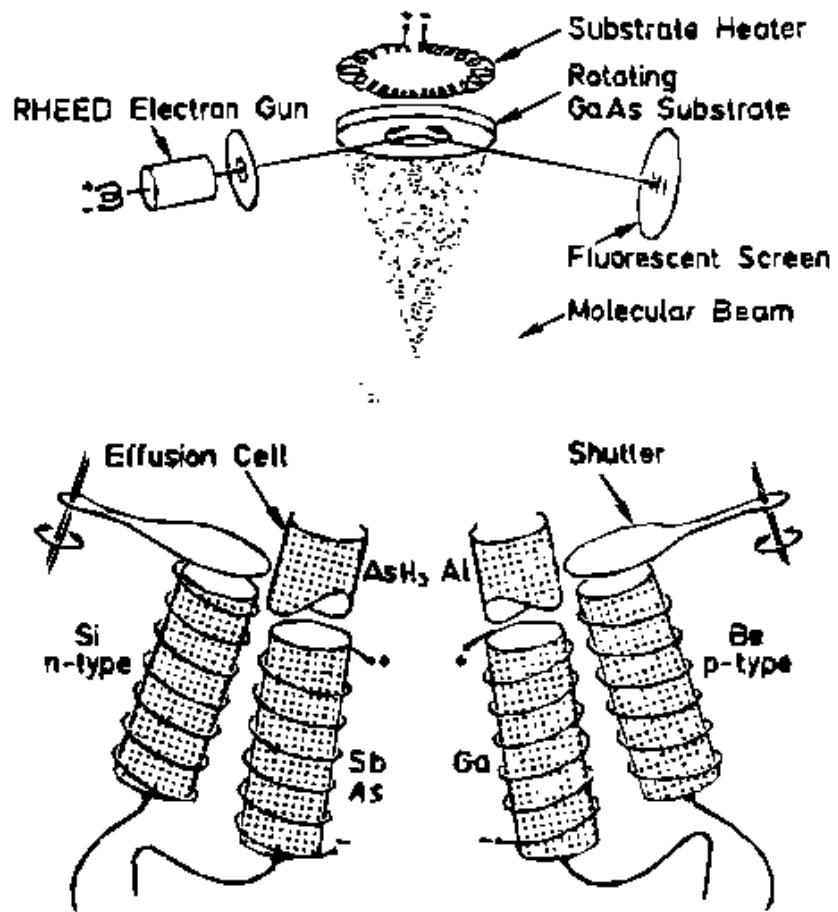
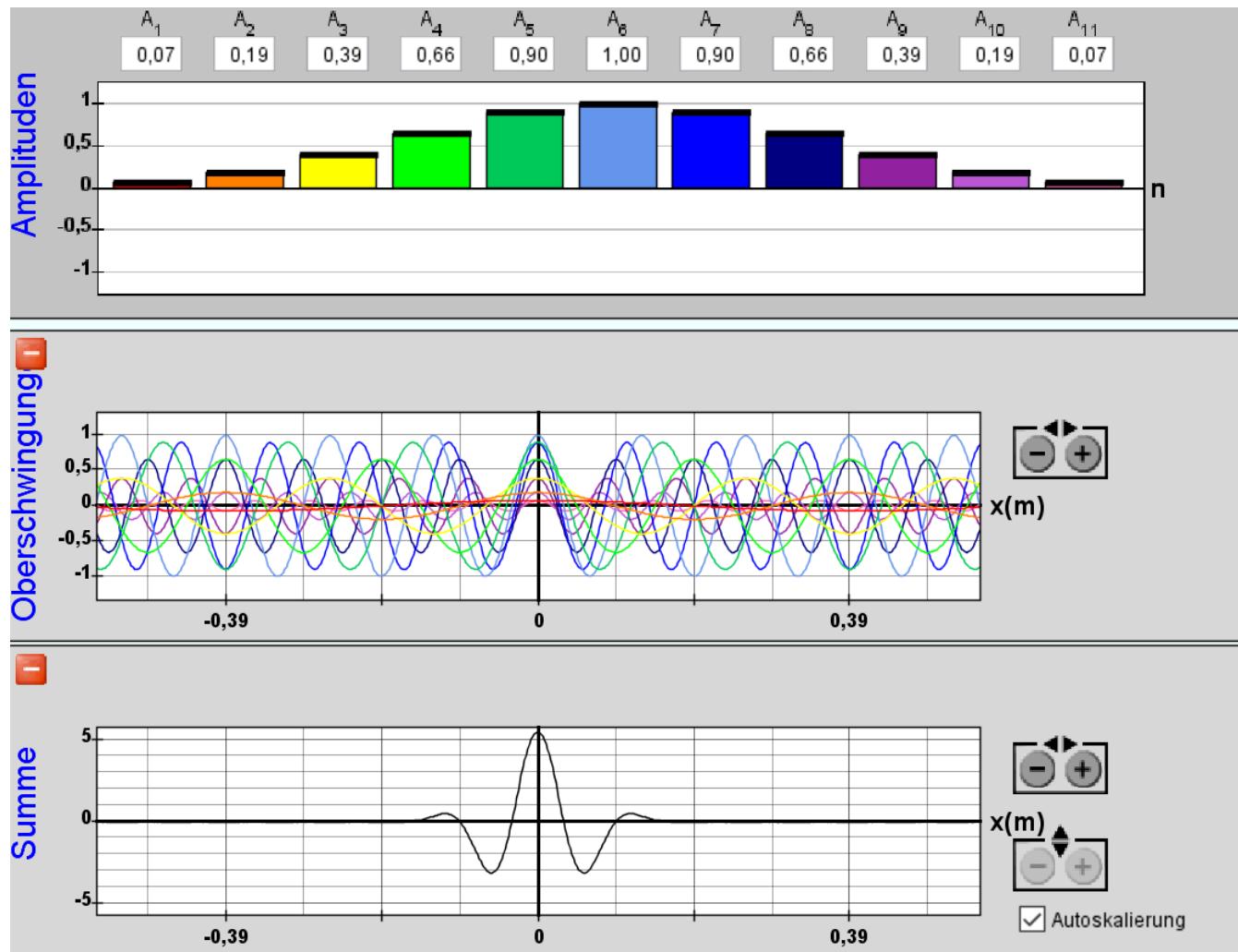


Abb. : Schema und Bild einer MBE-Anlage

Übersicht über die Vorlesung

- 1. Grundlagen der Quantenmechanik**
- 2. Elektronische Zustände**
- 3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente**
- 4. Elektronen in Kristallen**
 - 4.1 Von 2 zu 10^{23}
 - 4.2 Wellenpakete**
 - 4.3 Elektronen in Kristallen
- 5. Halbleiter**
- 6. Quantenstatistik für Ladungsträger**
- 7. Dotierte Halbleiter**
- 8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht**
- 9. Der pn-Übergang**

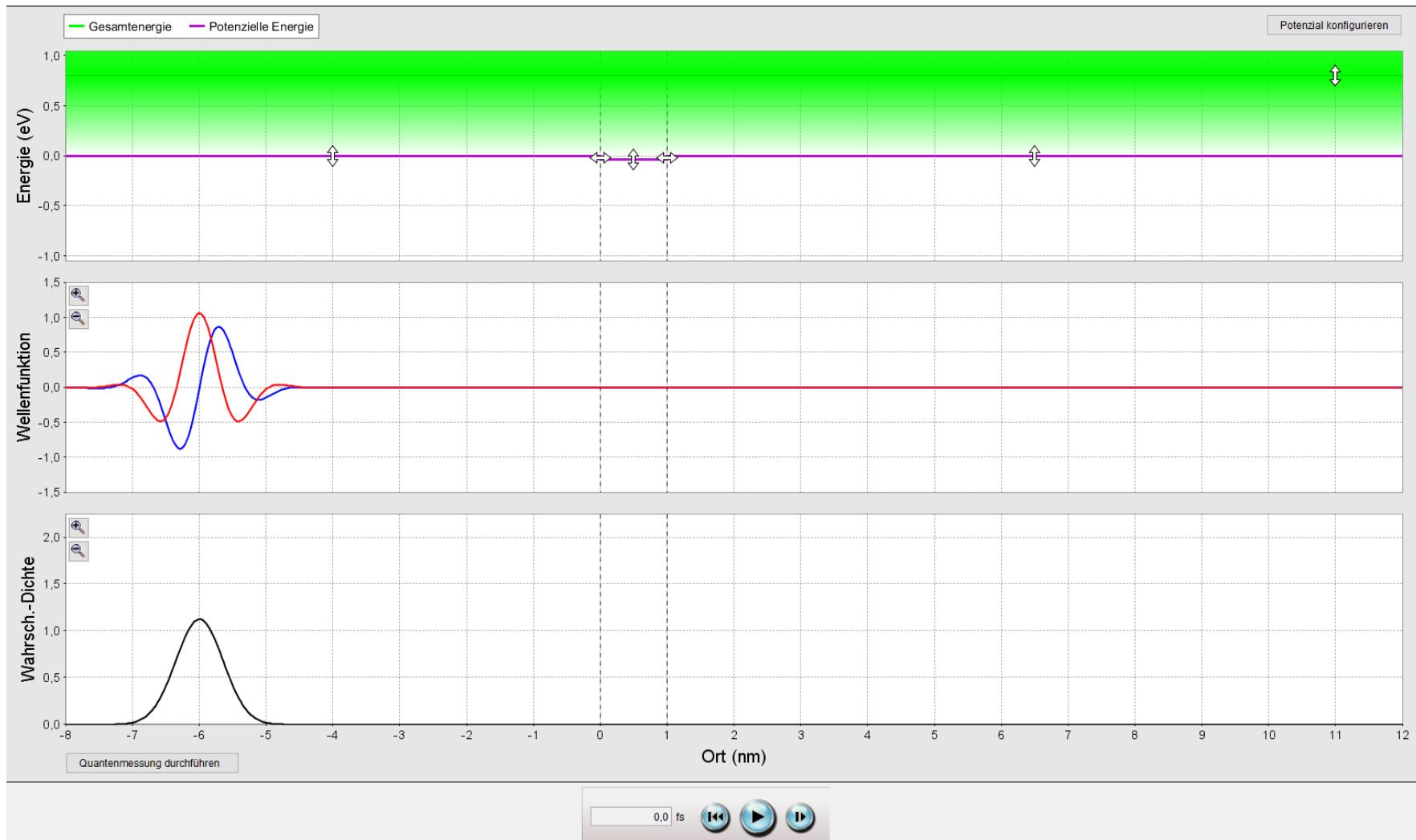
Wellenpakete



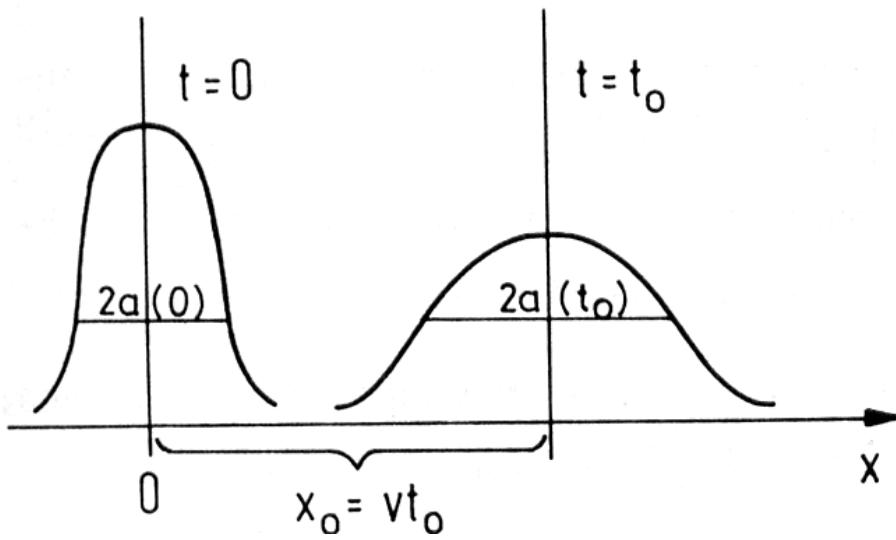
Wellenpakete durch Überlagerung von ebenen Wellen

Quelle: <https://phet.colorado.edu/de/simulation/fourier>

Wellenpakete



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete



- Wellenpaket zerfliesst im Laufe der Zeit !
- Schwerpunkt bewegt sich mit einer Geschwindigkeit

$$v = \frac{\hbar k_0}{m} \quad \text{oder} \quad mv = p = \hbar k_0$$

Gruppengeschwindigkeit:

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m} = 2v_p$$

Zum Vergleich: Phasengeschwindigkeit:

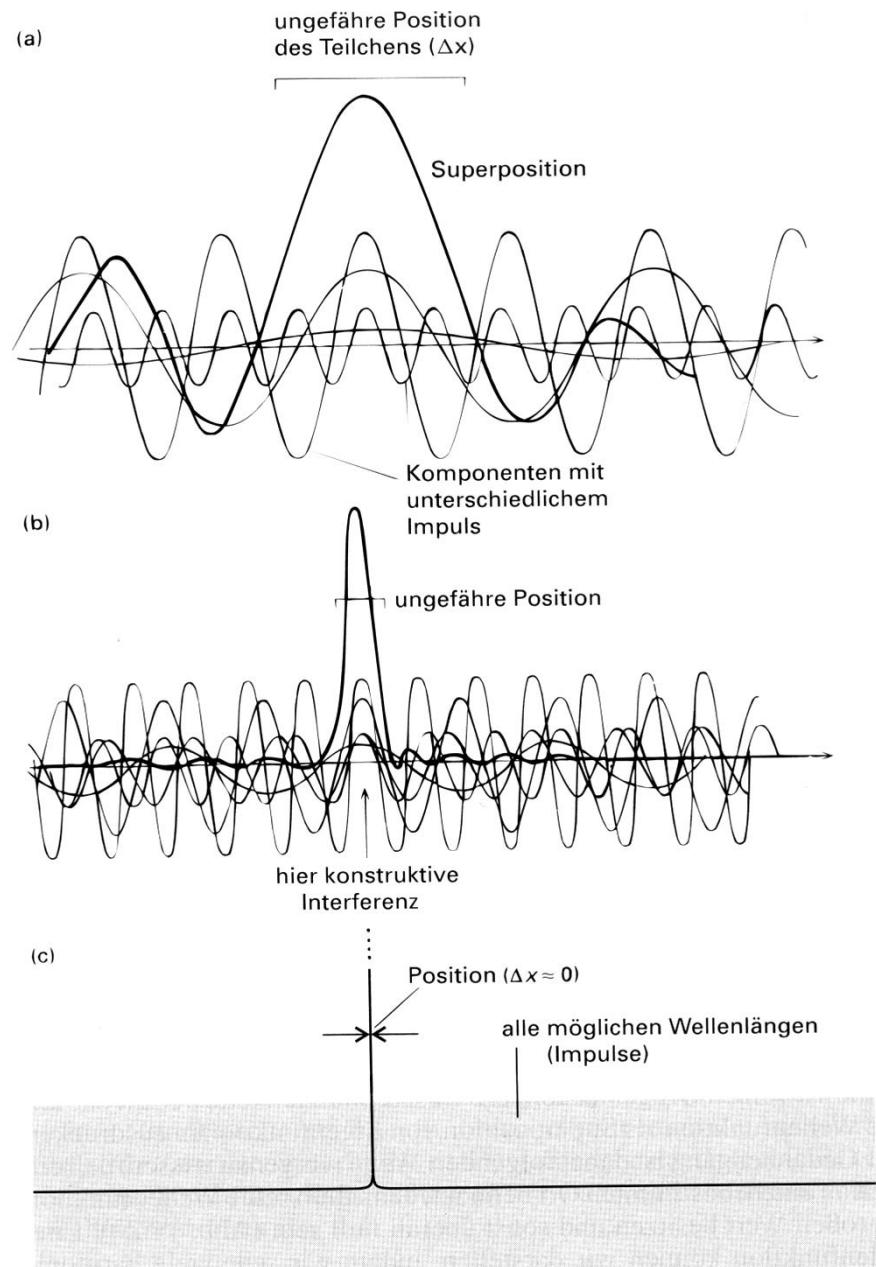
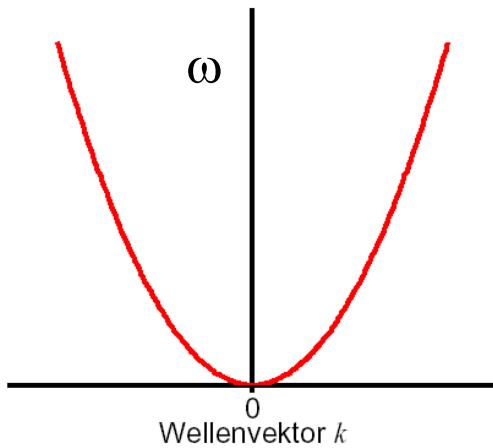
$$v_p = \frac{\hbar k}{2m}$$

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Superposition

Aufgrund des Superpositionsprinzips kann man beliebig Lösungen mit verschiedenen Impulsen überlagern:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp(j(kx - \omega_k t)) dk \equiv$$

$$\int dk A(k) \exp(j(kx - \omega_k t))$$



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

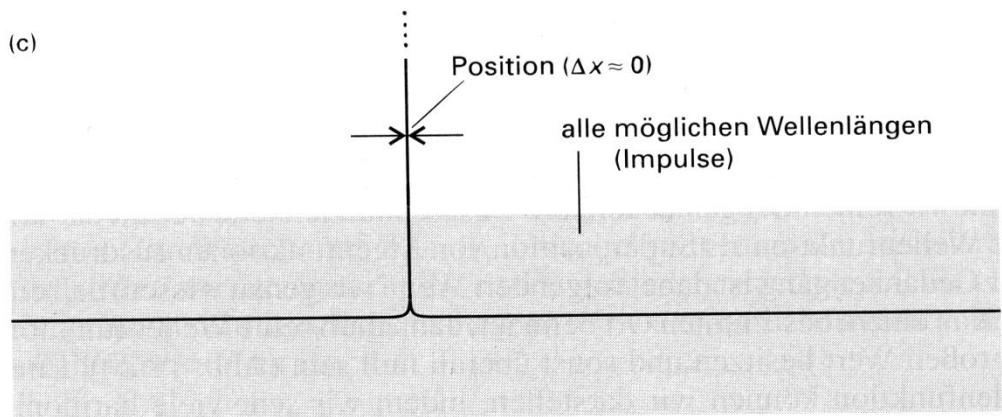
Übergang von einer Darstellung im „**Ortsraum**“ $\psi(x, t)$
 zu einer Darstellung im „**k-Raum**“ $\tilde{\psi}(k, t)$ (Spezialfall einer Fouriertrafo.).

Übergang von der einen zur anderen
 Darstellung:

$$\tilde{\psi}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x, t) \exp(-jkx)$$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{\psi}(k, t) \exp(jkx)$$

Bsp.: Elektron für $t=0$ vollkommen
 lokalisiert im Raum bei $x=0$



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

Darstellung eines lokalisierten Elektrons kann durch die *Dirac'sche Delta-Funktion* erfolgen.

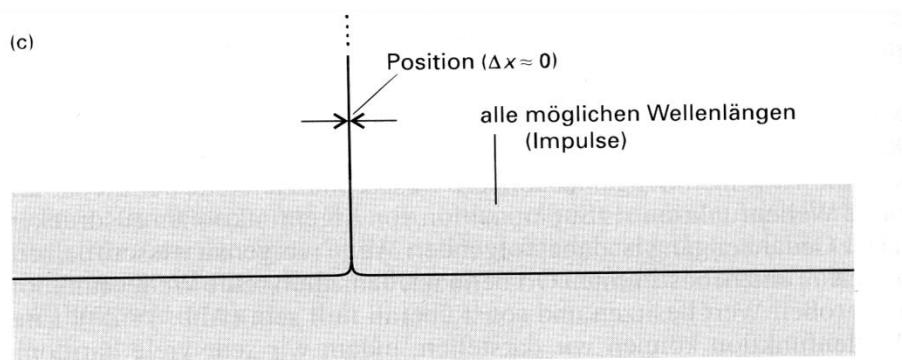
$$\psi(x,0) = \delta(x)$$

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x = 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 ; \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0)$$

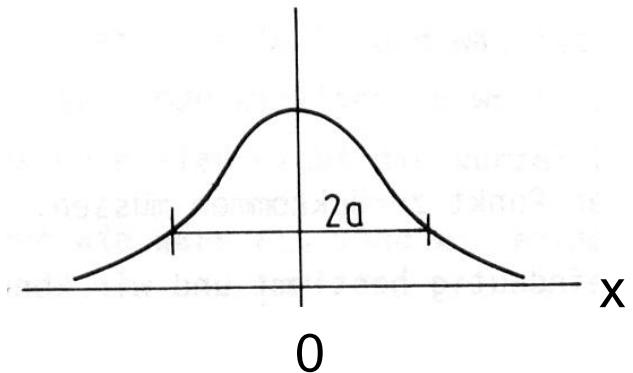
Für die Darstellung im Impulsraum, also die Fouriertransformierte ergibt sich dann zum Zeitpunkt t=0:

$$\tilde{\psi}(k,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) \exp(-jkx) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete

Analytisch zu beschreiben: Das Gauß'sche Wellenpaket



$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) \exp(jk_0 x)$$

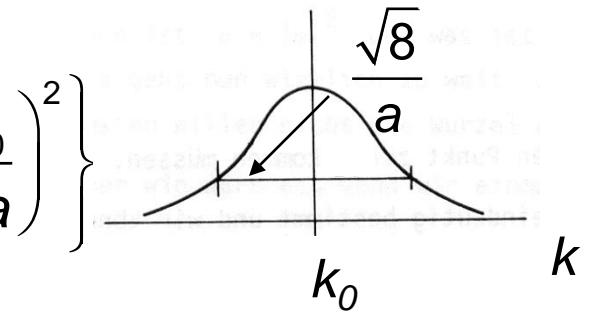
Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$\rho(x,0) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)$$

... einigermassen auf $\Delta x=2a$ lokalisiertes Teilchen

Wir basteln uns das Ganze aus ebenen Wellen zusammen: (Fouriertrafo)

$$\psi(k,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x,0) \exp(-jkx) = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}} \exp\left\{-\left(\frac{k-k_0}{\sqrt{2}/a}\right)^2\right\}$$



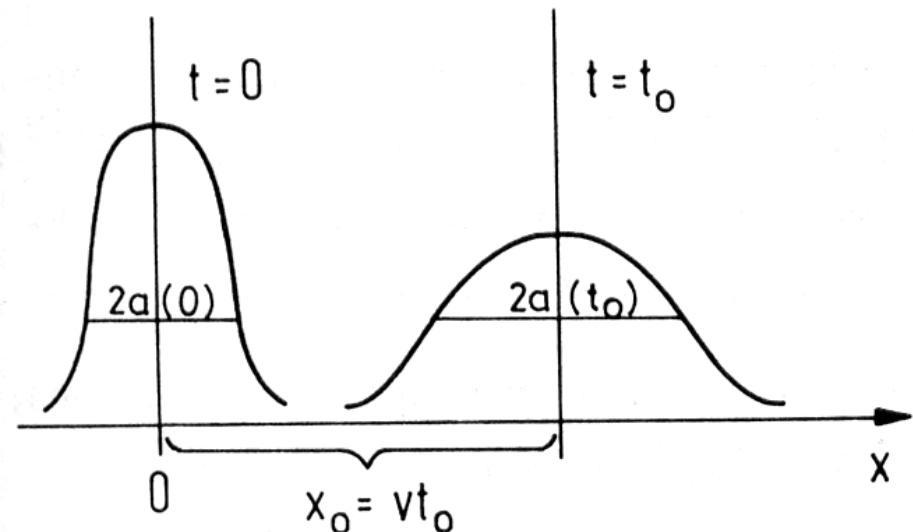
Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete

- damit ergibt sich eine qualitative Aussage über das Verhältnis von Δx und Δk
- Lösung für alle Zeiten, denn wir müssen jetzt die ebenen Wellen nur noch „loslaufen“ lassen

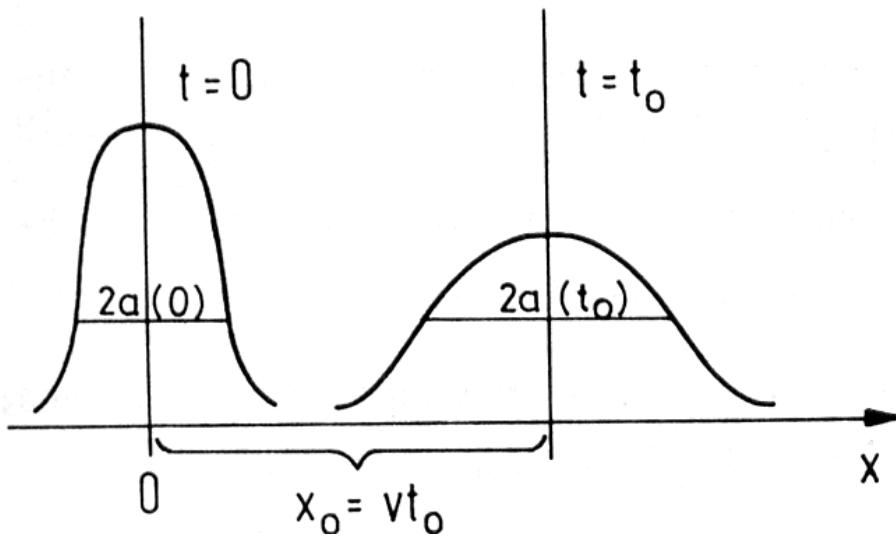
$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{a^2 + \frac{j\hbar t}{m}}} \exp\left(-\frac{a^2 k_0^2}{2}\right) \exp\left\{\frac{1}{2} \frac{(a^2 k_0 + jx)^2}{\left(a^2 + \frac{j\hbar t}{m}\right)}\right\}$$

bzw. für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a(t)} \exp\left\{-\left[\frac{x - \frac{\hbar k_0 t}{m}}{a(t)}\right]^2\right\}$$



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete



- Wellenpaket zerfliesst im Laufe der Zeit !
- Schwerpunkt bewegt sich mit einer Geschwindigkeit

$$v = \frac{\hbar k_0}{m} \quad \text{oder} \quad mv = p = \hbar k_0$$

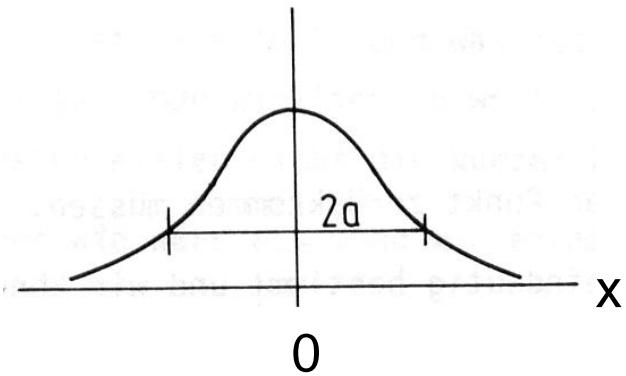
Gruppengeschwindigkeit:

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m} = 2v_p$$

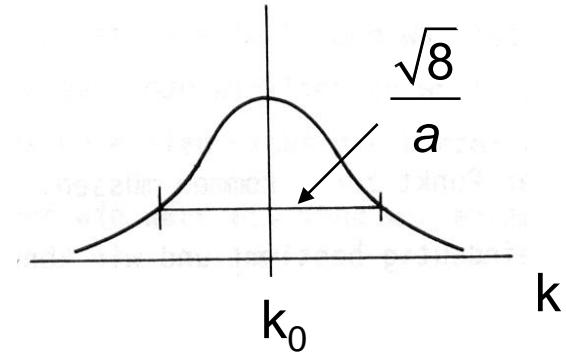
Zum Vergleich: Phasengeschwindigkeit:

$$v_p = \frac{\hbar k}{2m}$$

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete



„Ortsraum“



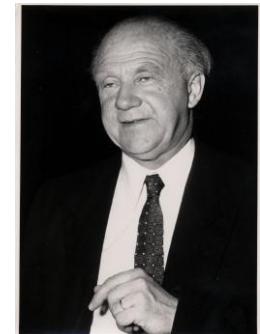
„Impulsraum“

Breite der Funktionen im Orts- bzw. Impulsraum verhalten sich reziprok zueinander

Ganz allgemein gilt:

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$



Heisenberg'sche Unschärferelation für Impuls und Ort !

Werner Heisenberg
*1901, †1976