Festkörperelektronik und Bauelemente

0. Allgemeine Informationen:

Prof. Dr. Uli Lemmer
Teil I: Lichttechnisches Institut (LTI), Geb. 30.34, Raum 222
Tel: 0721-608-42530
E-Mail: uli.lemmer@kit.edu, URL: www.lti.kit.edu

Prof. Dr. Ulrike Krewer
Institut für Angewandte Materialien – Elektrochemische Technologien (IAM-ET)
Adenauerring 20b, Gebäude 50.40
Teil II: Tel.: +49 721 608-47490
E-Mail: ulrike.krewer@kit.edu
URL: www.iam.kit.edu/et/index.php

Festkörperelektronik und Bauelemente

FuB 1.2

Literatur

-aktelle Folien, Folien vom letzten Semester

-Skript Festkörperelektronik (hoffentlich auch bald mit Bauelemente-Teil)

- Videos (Mitschnitte der Vorlesungen, online-Vorlesungen von SS 2021)

-Lehrbücher

-Online-Ressourcen

LTI | Lichttechnisches Institut

Karlsruher Institut für Technologie | KIT

Skript zur Vorlesung

Optik & Festkörperelektronik

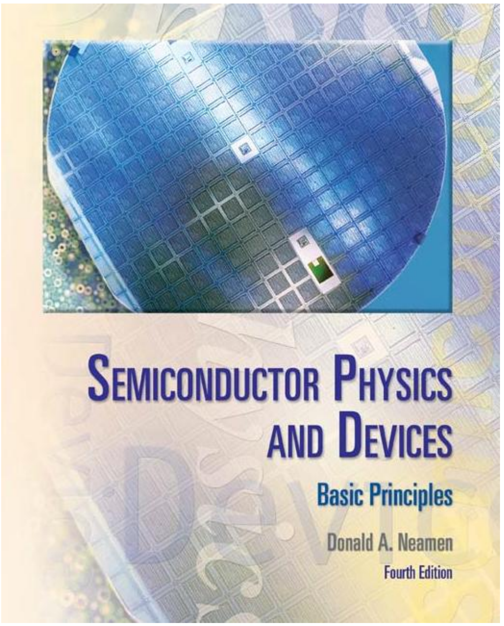
Sommersemester 2023

Professor: Prof. Dr. rer. nat. Ulrich Lemmer

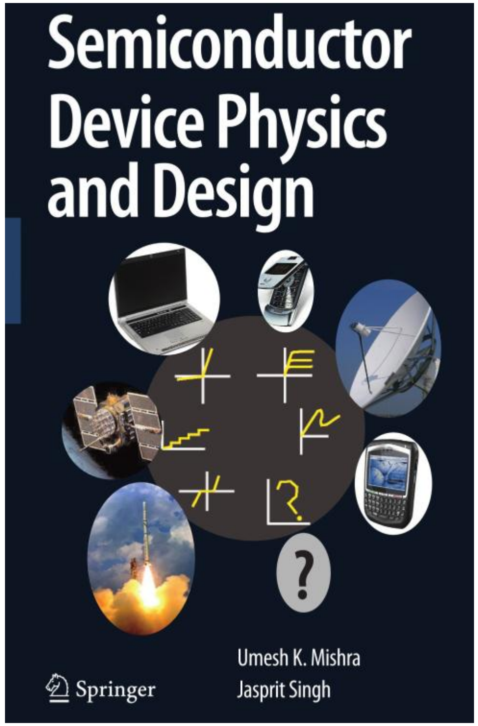
Autoren: Felix Glöckler, Benedikt Stein, Ulrich Lemmer

Übungsleiter: M.Sc. Raphael Pesch

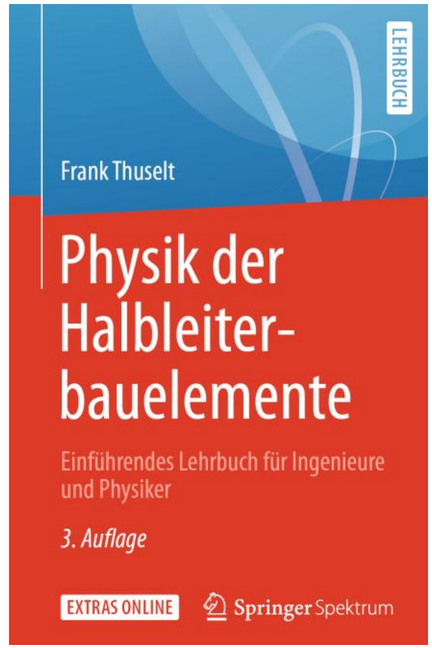
Lehrbücher



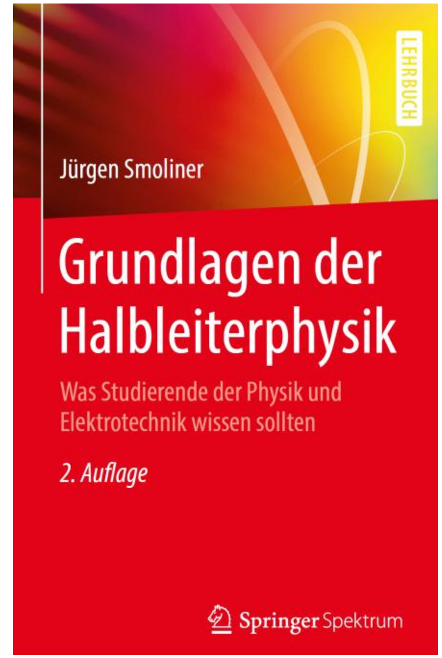
auf Ilias



auf Ilias



auf Ilias



auf Ilias

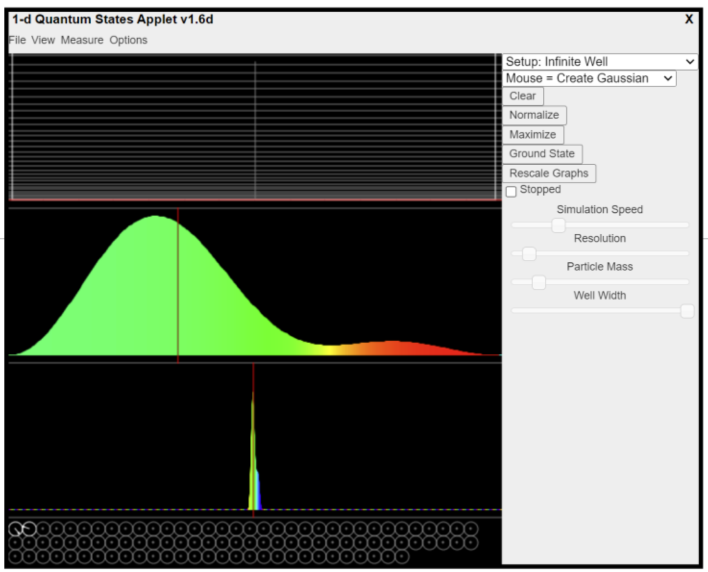
Online-Ressourcen

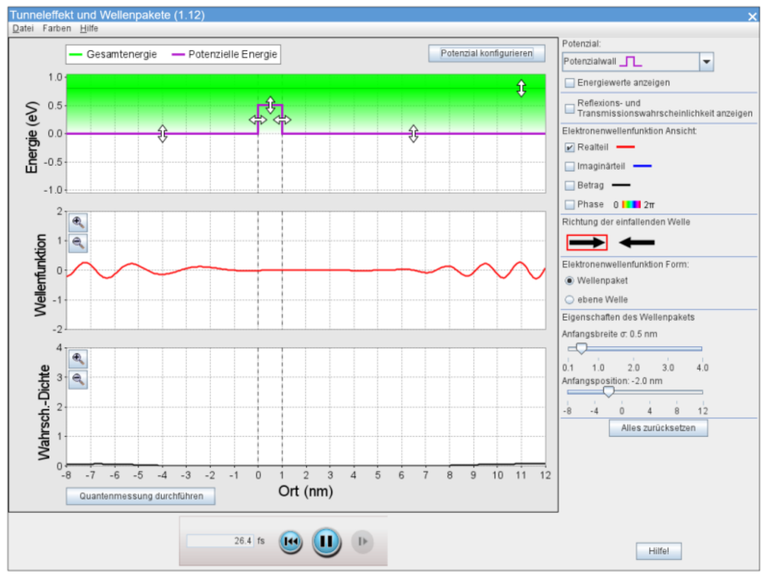
Zur Quantenmechanik gibt es jede Menge Online-Material:

z.B. https://phet.colorado.edu

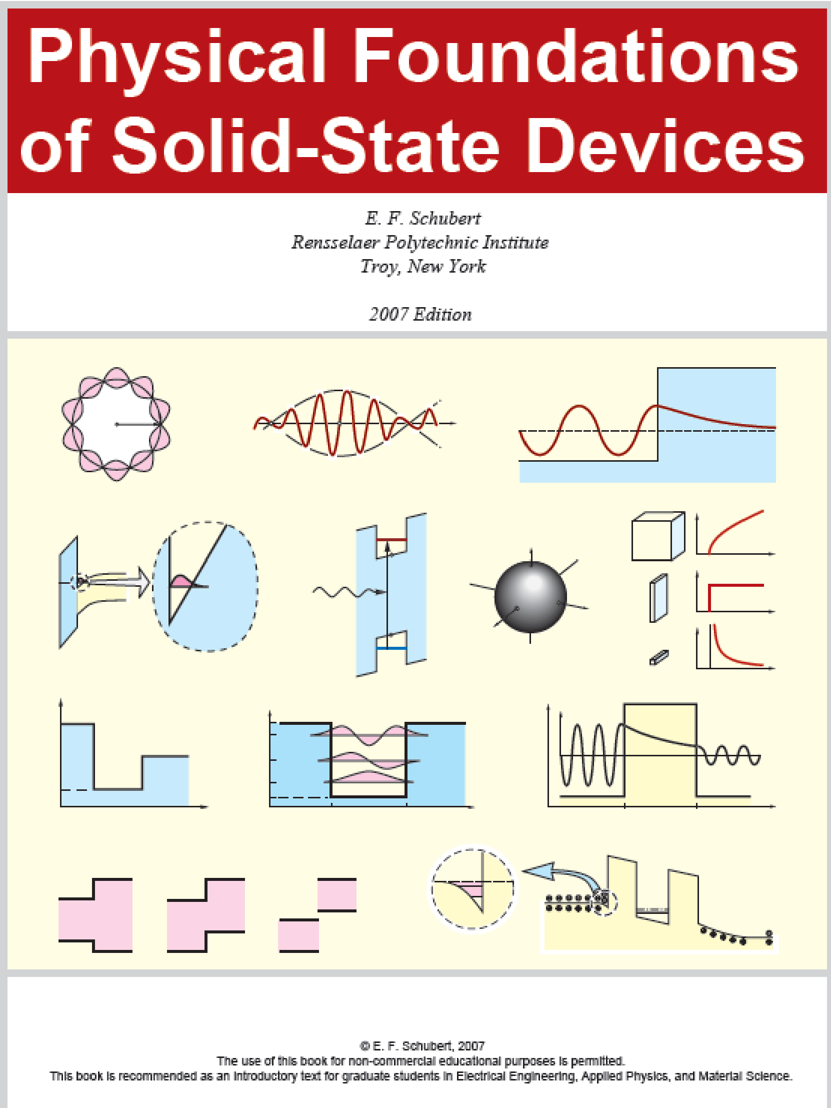
http://www.falstad.com/mathphysics.html

Weitere Links im VAB.





Online-Ressourcen


Physical Foundations of Solid-State Devices

E. F. Schubert
Rensselaer Polytechnic Institute
Troy, New York

2007 Edition

© E. F. Schubert, 2007
The use of this book for non-commercial educational purposes is permitted.
This book is recommended as an introductory text for graduate students in Electrical Engineering, Applied Physics, and Material Science.

Prof. E. F. Schubert
Rensselaer Polytechnic Institute
Troy, New York

…auch im Ilias-System herunterzuladen

Übersicht über den ersten Teil der Vorlesung

1. Grundlagen der Quantenmechanik
2. Elektronische Zustände
3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente
4. Elektronen in Kristallen
5. Halbleiter
6. Quantenstatistik für Ladungsträger
7. Dotierte Halbleiter
8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht
9. Der pn-Übergang
10. Dioden und Anwendungen
11. MOSFET
12. Bipolartranistoren
13. Technologie

…danach Übergabe an Ulrike Krewer & Team

Übersicht über die Vorlesung

1. Grundlagen der Quantenmechanik
    - $\boxed{\text{1.1 Einleitung}}$
    - 1.2 Historisches
    - 1.3 Die Schrödinger-Gleichung
    - 1.4 Das freie quantenmechanische Elektron
    - 1.5 Quantenmechanische Erwartungswerte
2. Elektronische Zustände
3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente
4. Elektronen in Kristallen
5. Halbleiter
6. Quantenstatistik für Ladungsträger
7. Dotierte Halbleiter
8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht
9. Der pn-Übergang

Gliederung erster Teil

Grundlagen der Quantenmechanik

↓

Verständnis der festkörperphysikalischen Vorgänge in Halbleitern

↓

Grundlagen der Halbleiterbauelemente

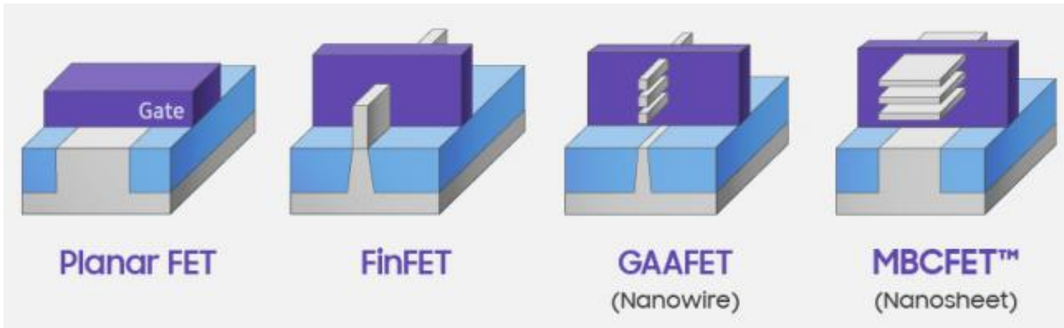
Was bringt mir die Schrödinger-Gleichung ?

Was ist ein Leitungsband ?

Wie funktioniert eine pn-Diode ?

Motivationshilfen

Vereinfacht kann man sagen, dass Quantenmechanik immer dann wichtig wird, wenn die Strukturen klein werden …und genau das passiert in der Mikroelektronik.

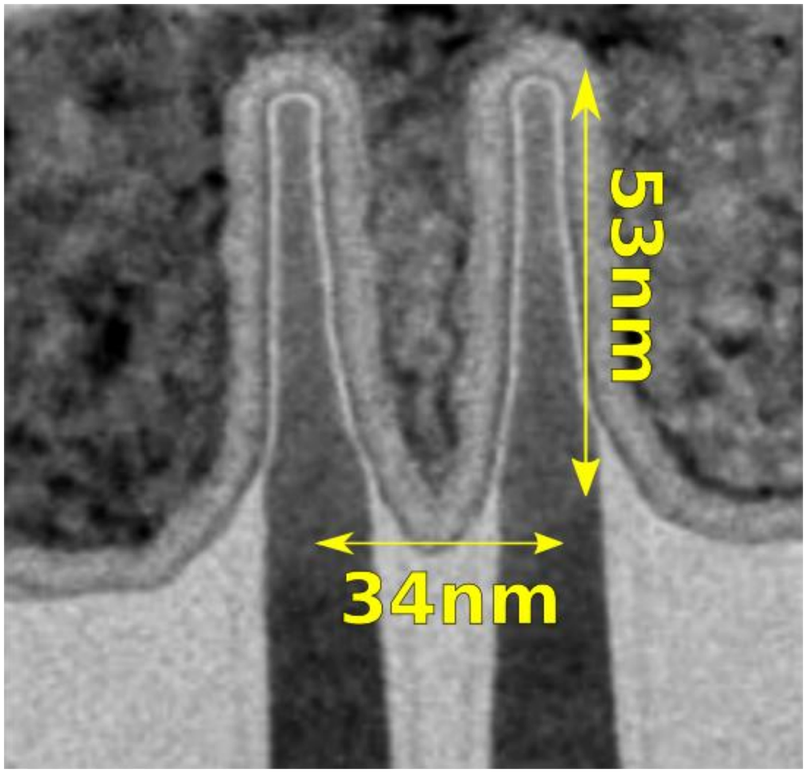


The innovation pipeline is filled to the brim

Source: IMEC, Future Summits, May 2022

Motivationshilfen

…die ETIT wird u. a. getrieben von Fortschritten in der Nanotechnologie/Materialwissenschaft. Eine Weiterentwicklung der Strukturen und ein Verständnis der Bauelemente erfordert Kenntnisse der Quantenmechanik.



Querschnitt durch einen 10 nm Intel FinFET

Quelle: Intel

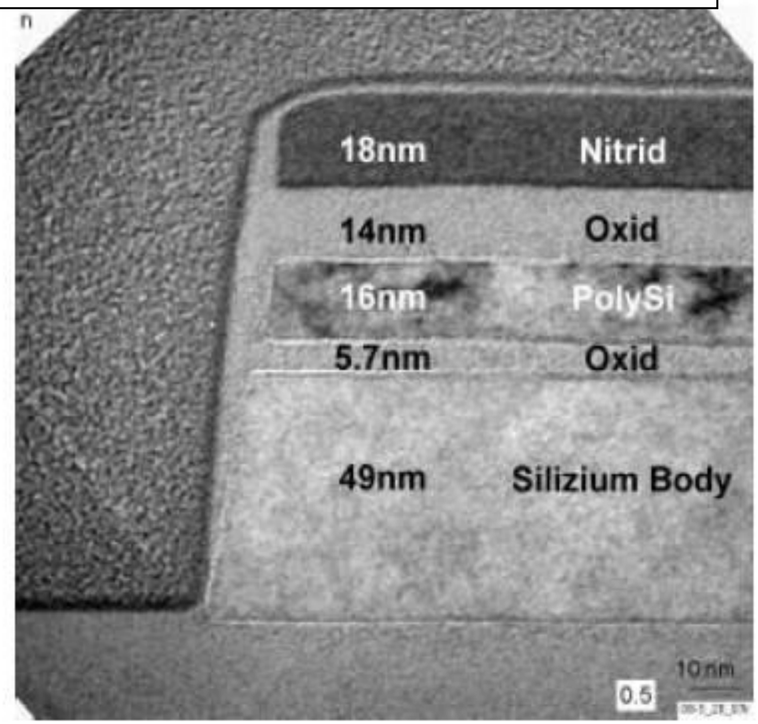
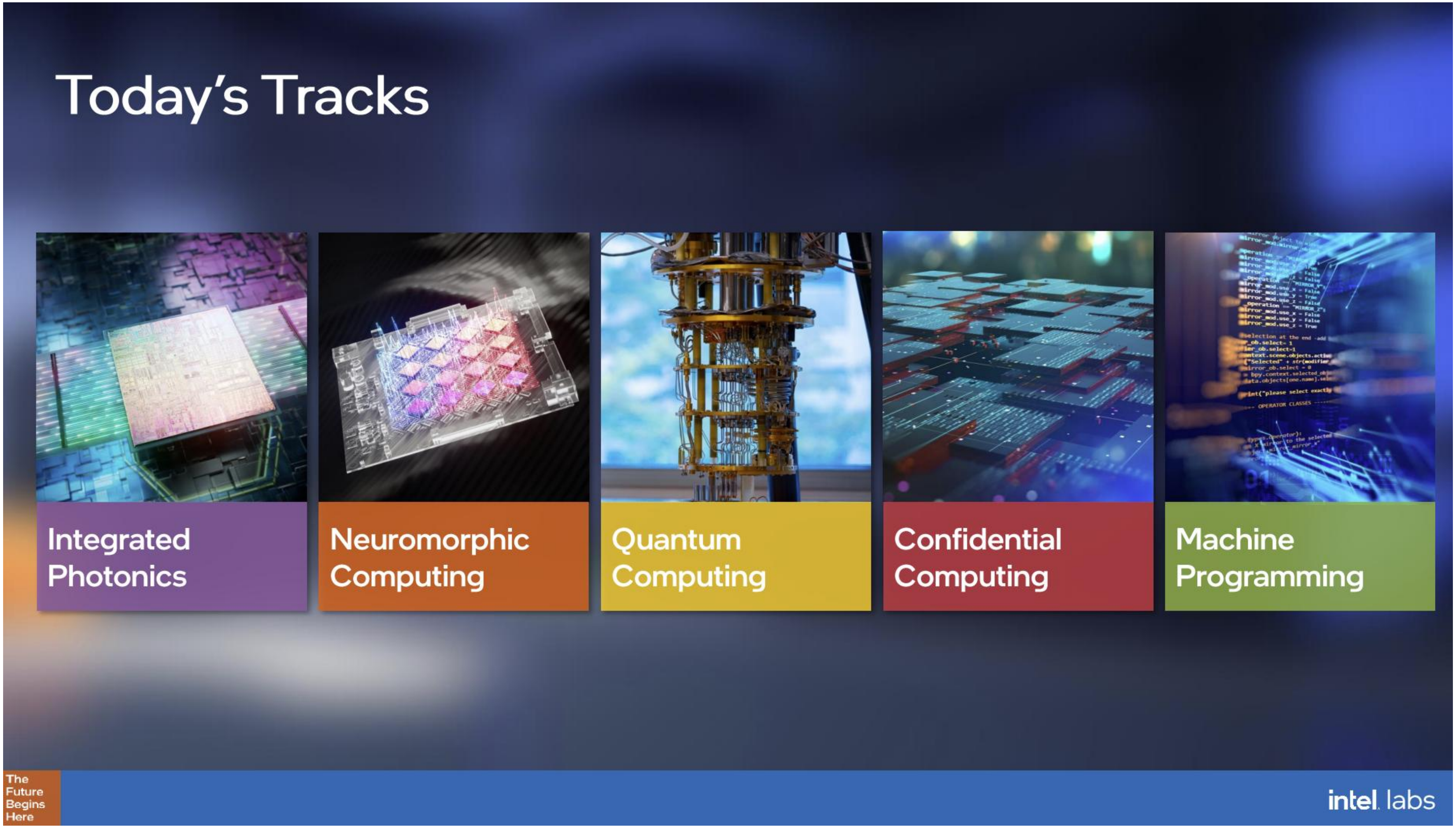
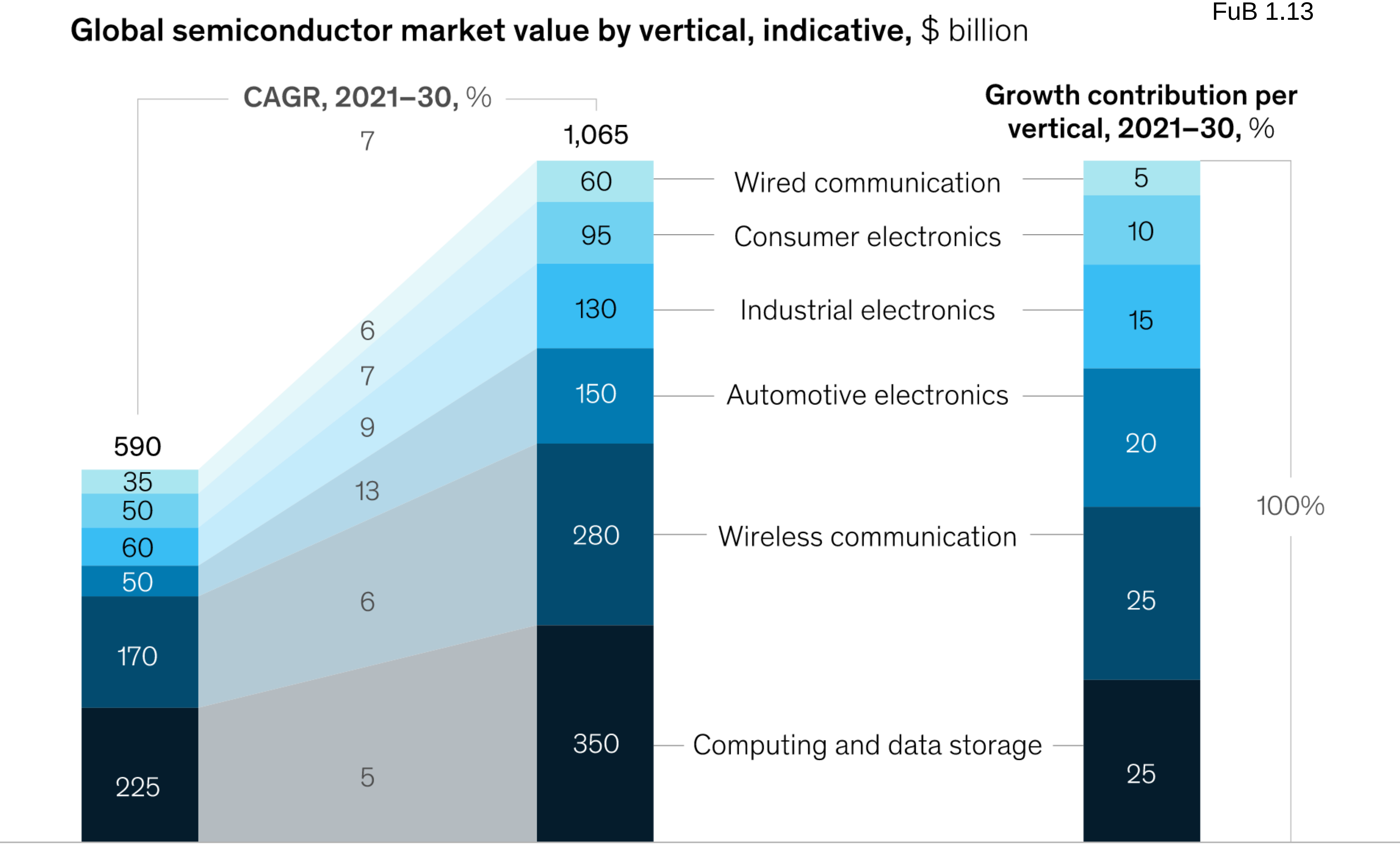


Fig. 9: TEM picture of a floating gate memory cell: Cross section of the Silicon channel with a 5.7nm thick SiO_2 tunnel oxide and a 16nm poly Si floating gate. On top is a Nitride dielectric serving as a hard mask for etching the floating gate and Si-body.

Quelle: Infineon

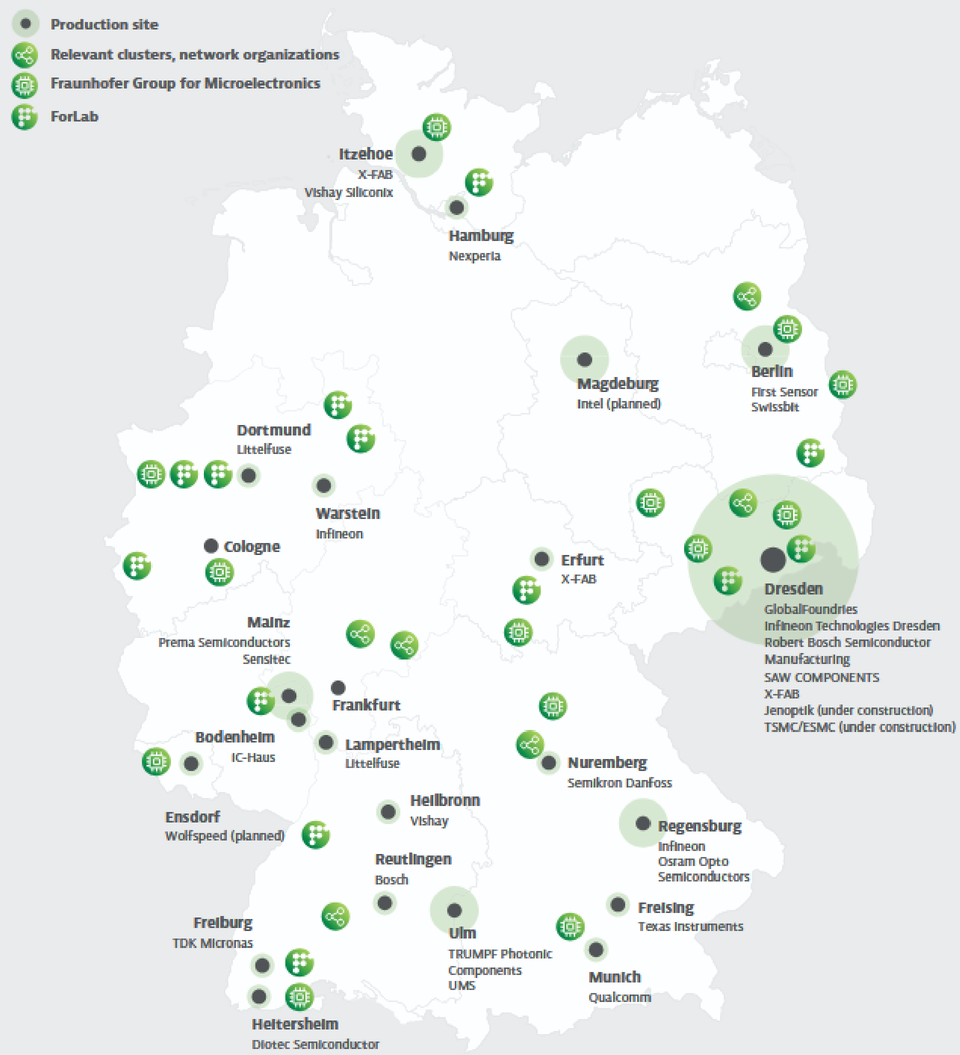

Today's Tracks
Integrated Photonics
Neuromorphic Computing
Quantum Computing
Confidential Computing
Machine Programming
The Future Begins Here
intel. labs


Global semiconductor market value by vertical, indicative, $ billion
CAGR, 2021–30, %
7
6
7
9
13
6
5
590
35
50
60
50
170
225
1,065
60
95
130
150
280
350
Wired communication
Consumer electronics
Industrial electronics
Automotive electronics
Wireless communication
Computing and data storage
Growth contribution per vertical, 2021–30, %
5
10
15
20
25
25
100%

German Semiconductor Landscape

Germany's microelectronics sector forms a complete ecosystem representing the entire industry value chain network responsible for developing the smart, integrated systems required to meet industry's changing needs.

Internationally active companies, renowned research institutions, small and medium-sized enterprises, and start-ups are all at home in different industry clusters across the country.

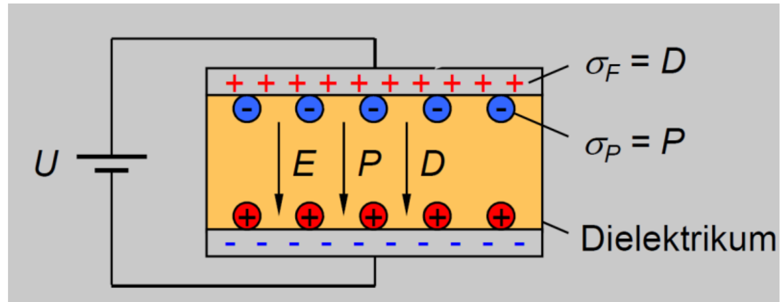


Source: Silicon Saxony, GTAI Research 2024

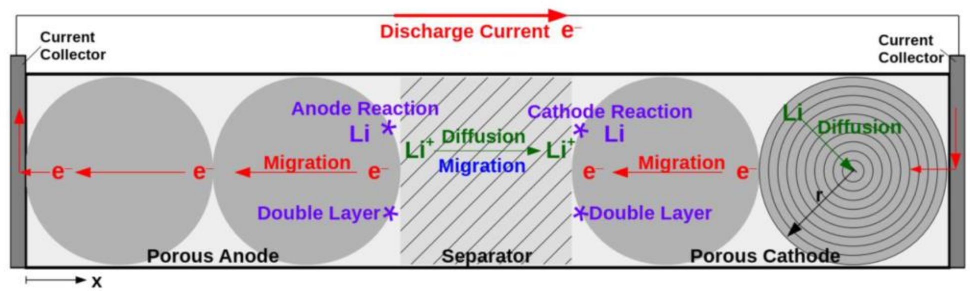
Seit Ende 2021 fertigt Bosch in Reutlingen die Generation 1 seiner Siliziumkarbid-Chips auf 150 mm Wafern in Serie.

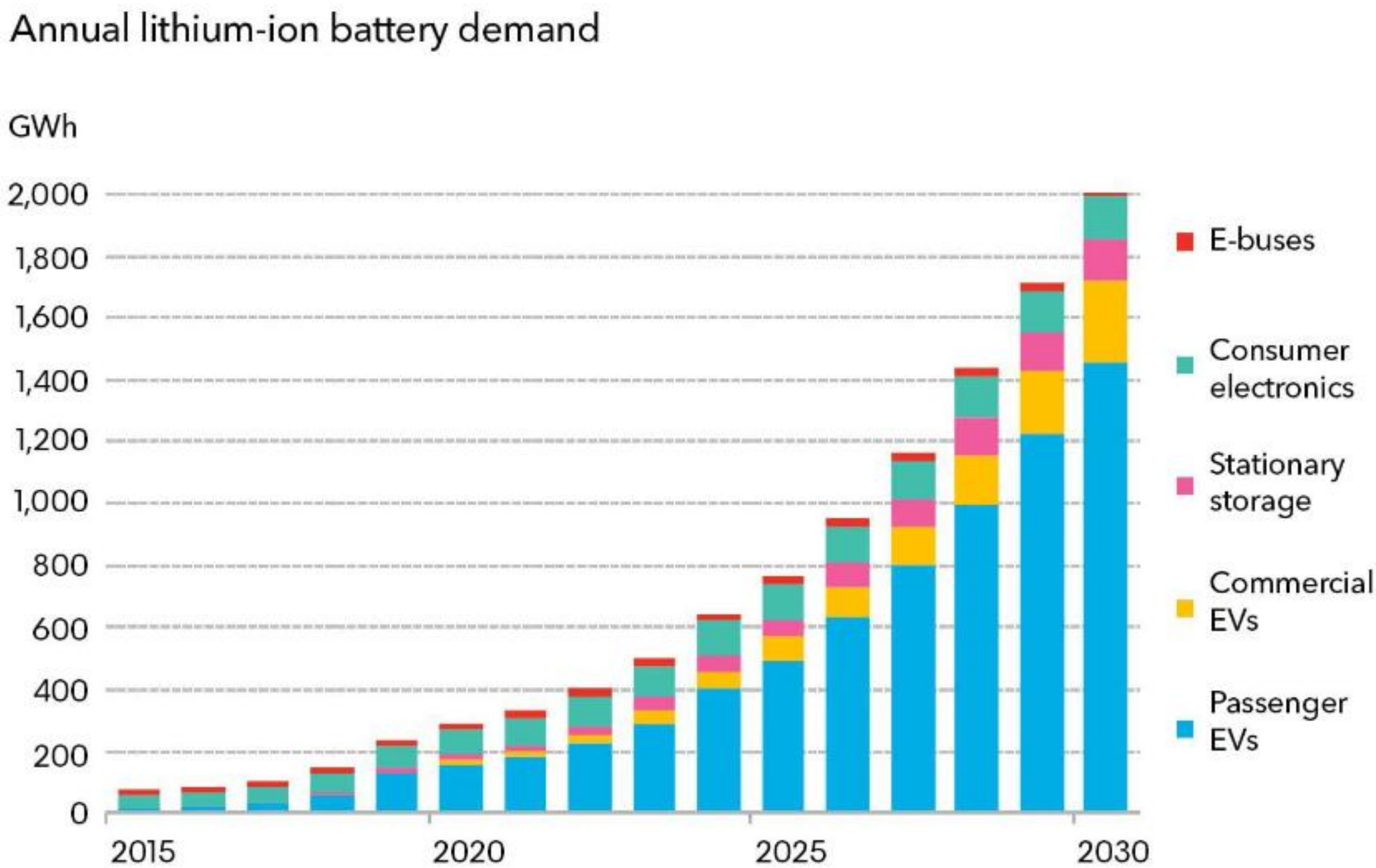
Übersicht über den zweiten Teil der Vorlesung

Dielektrische Werkstoffe
(z.B. im Kondensator)



Ionenleiter und Grenzfächen
(z.B. in einer Li-Ionen-Batterie)



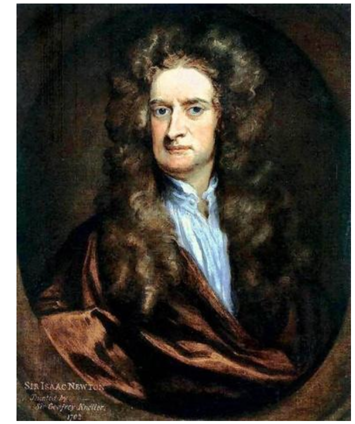


Source: Bloomberg NEF 2019 Electric Vehicle Outlook

Übersicht über die Vorlesung

Stand der Wissenschaft um 1900: Mechanik

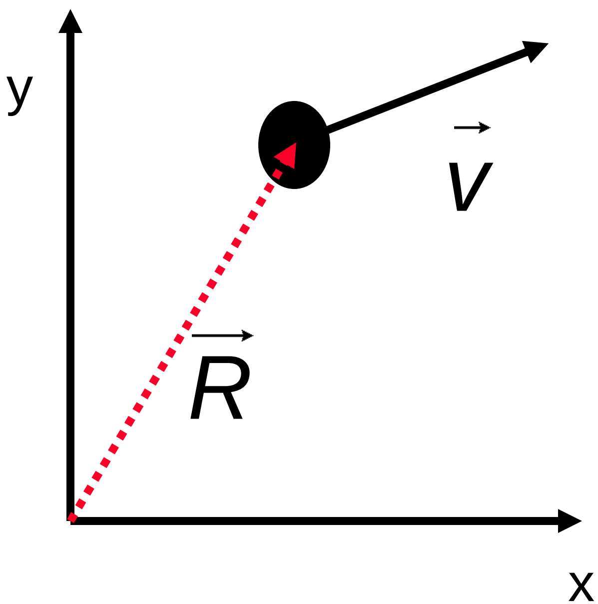
1.2.1: Physikalische Theorien



Sir Isaac Newton
(1643-1727)

- Beschreibung der Mechanik durch idealisierte Teilchen
- idealerweise als punktförmige Teilchen

Was heißt eigentlich Teilchen ?



Zum Zeitpunkt t befindet sich das Teilchen der Masse m am Ort $\vec{R}$ und bewegt sich mit der Geschwindigkeit $\vec{v}$. Sein Impuls beträgt $\vec{p} = m\vec{v}$.

Die Bewegung der Massenpunkte wird durch die Newton'schen Gesetze beschrieben.

Stand der Wissenschaft vor 1900: Elektrodynamik: Maxwell-Gleichungen

$$\mathrm{div}\ \vec{D} = \rho$$

$$\mathrm{div}\ \vec{B} = 0$$

$$\mathrm{rot}\ \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\mathrm{rot}\ \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

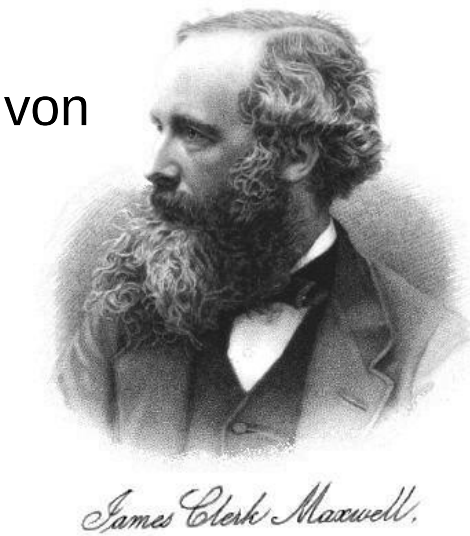
Erlauben eine Vorhersage der zeitlichen und räumlichen Entwicklung von

elektrischer Flussdichte $\vec{D}$

magnetischer Flussdichte $\vec{B}$

elektrischer Feldstärke $\vec{E}$

magnetischer Feldstärke $\vec{H}$



(1831-1879)

„Felder“: Dinge, die ganze Raumbereiche erfüllen, im Gegensatz zum Teilchen NICHT lokalisiert.

Die „Bewegung“ (zeitliche Entwicklung) der Felder wird durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben.

Der Theoriebegriff

Postulate (z. B. Newton‘sche Gesetze, Maxwell-Gleichungen, ...)

$\downarrow$

Überprüfbare Vorhersagen

: Gültigkeitsbereich (z. B. v<<c für die Newton‘sche Mechanik, falls das nicht erfüllt ist, müssen wir relativistische Effekte berücksichtigen)

-Quantenmechanik können wir uns sparen, wenn Energie * Zeit >> h = 6.626 10^{-34} Js

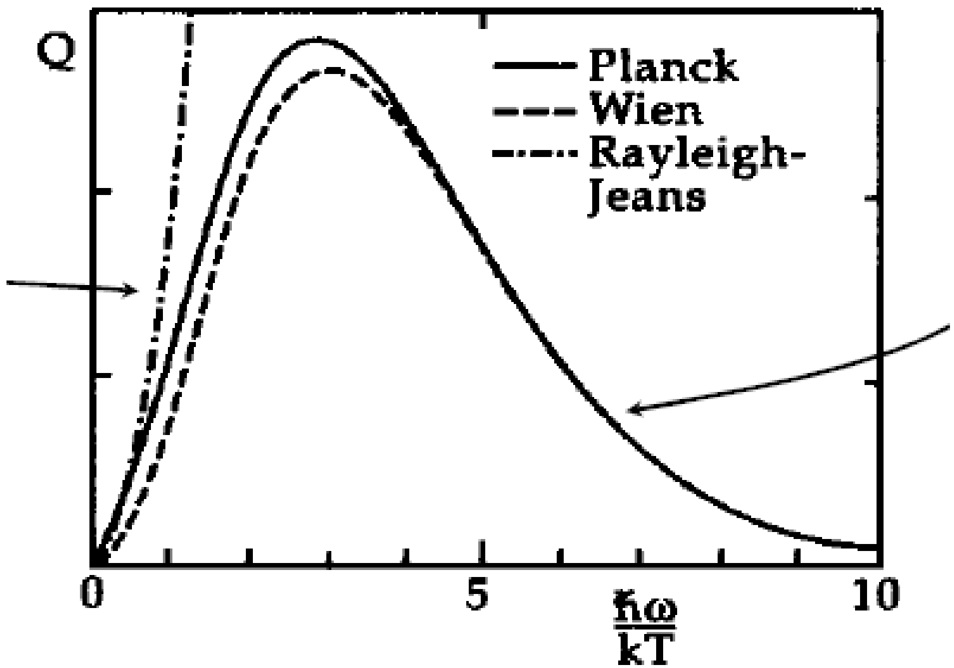
h ist das *Planck*‘sche Wirkungsquantum

Historisches zur Quantenmechanik: Schwarzkörperstrahlung

1.2.2: Der Beginn der Quantenmechanik

Zusammenbruch der klassischen Physik

1. Erklärung des Schwarzkörperstrahlungsspektrums durch Planck (1900)



Planck'sche Quantenhypothese (1900):

„Energien im System sind gemäß $E=h\nu$ „gequantelt"

h ist das Planck'sche Wirkungsquantum

Historisches zur Quantenmechanik: Photoeffekt

2. Photoeffekt (Einstein 1905, 1917)

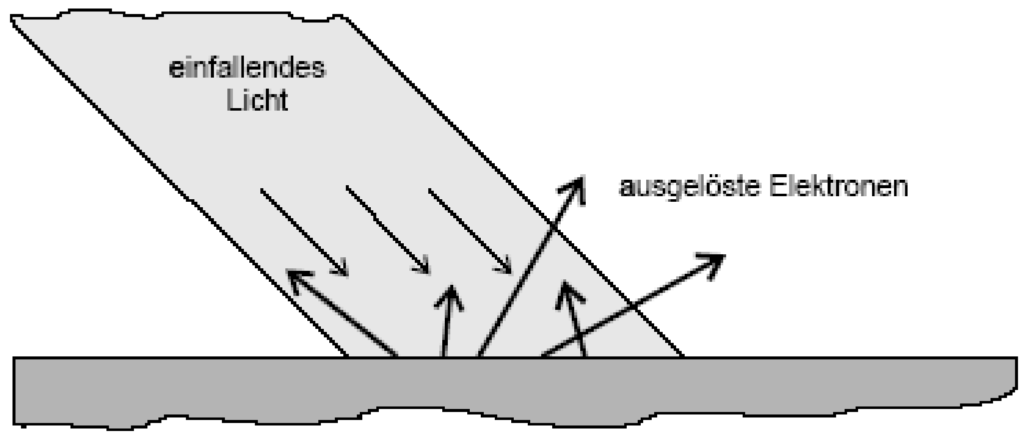


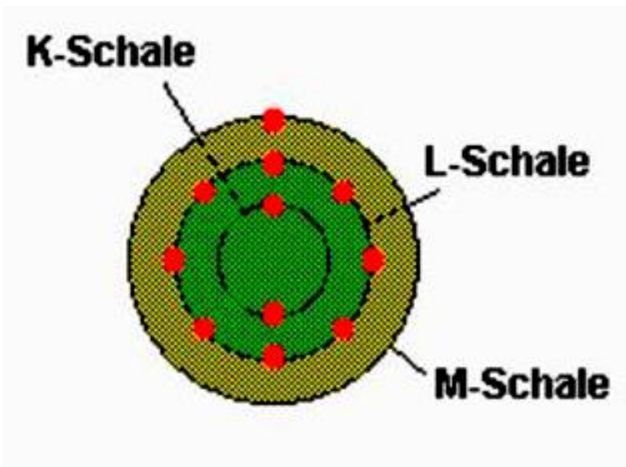
Abbildung 1.2: Licht löst Elektronen aus Metalloberflächen

-Elektronenenergie hängt nicht von der Intensität des Lichtes sondern von der Frequenz ν ab. Licht als Schauer von Lichtteilchen (Photonen) mit einer Energie $E=h\nu$

„Felder treten auch als Teilchen auf“

Historisches zur Quantenmechanik:
Bohr'sches Atommodell

3. Nichtbeobachteter Atomzerfall und Spektrallinien
Versuch der Erklärung durch das Bohr'sche Atommodell (1913)



I. Das Elektron bewegt sich auf Kreisbahnen um den Kern. Diese sind stationär und das Elektron strahlt keine Energie ab.

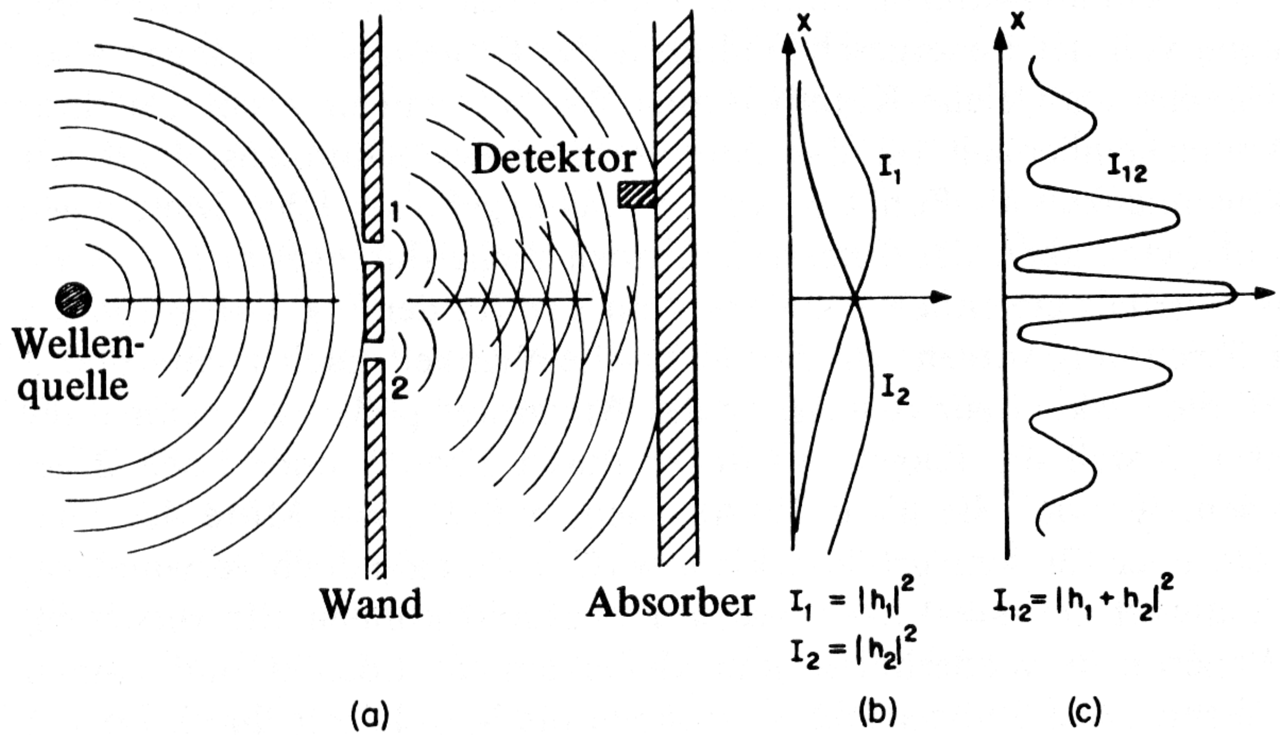
II. Unter allen Kreisbahnen sind nur diejenigen erlaubt, auf denen der Drehimpuls des Elektrons ein ganzzahliges Vielfaches von $h/2\pi$ ist.

III. Strahlung wird nur beim Übergang zwischen 2 stationären Zuständen emittiert oder absorbiert.

... an sich O.K., nur warum ist das so ? Wir haben doch gelernt,
dass beschleunigte Ladungen als Quelle einer elektromagnetischen Wellen fungieren ?

Historisches zur Quantenmechanik: Interferenz

Interferenz ist ein typisches Wellenphänomen. Experimente hierzu können z.B. in der Badewanne erfolgen.



Quelle: Feynman Lectures

Fig. 1–2. Interferenzexperiment mit Wasserwellen.

Viele Interferenzphänomen sind auch im Bereich der Optik bekannt. Hier kommt es zu einer Überlagerung von elektromagnetischen Wellen.

Historisches zur Quantenmechanik: Interferenz

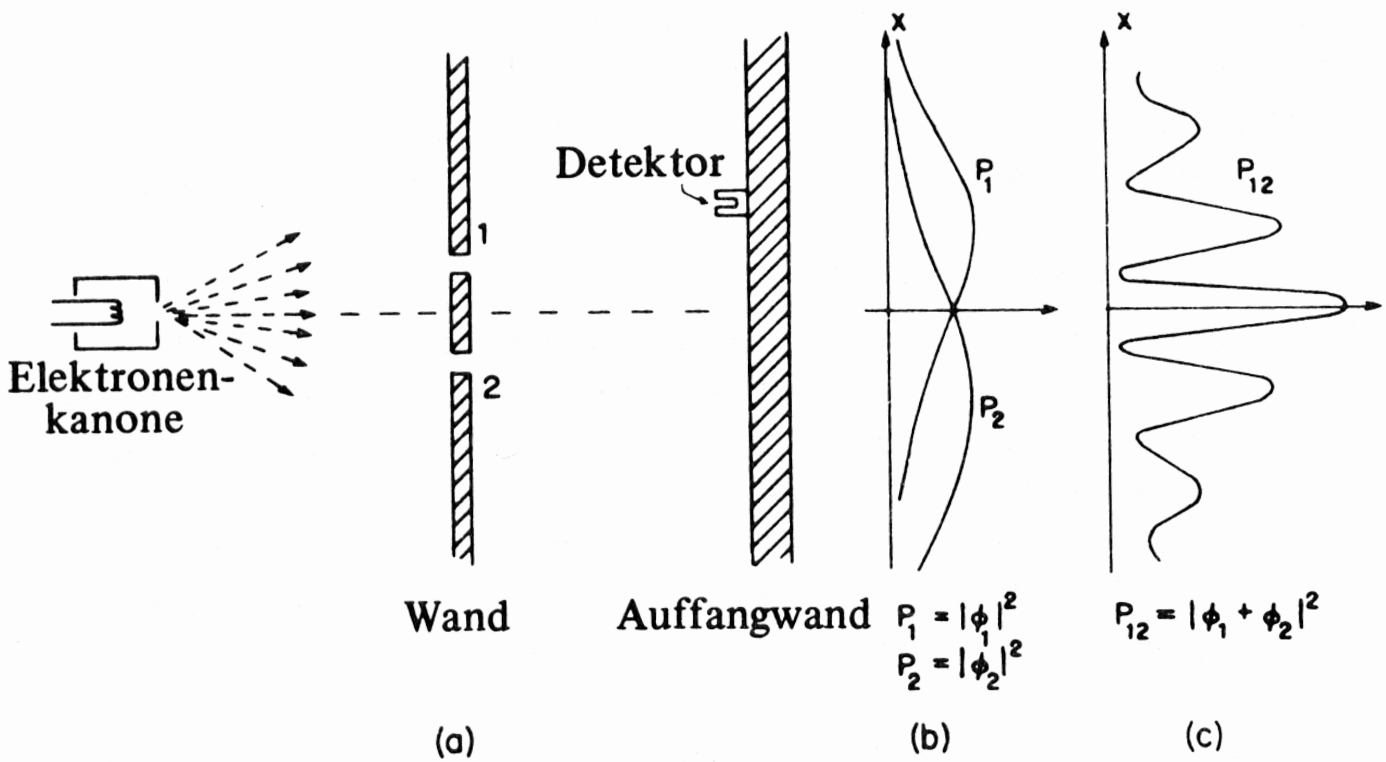


Fig. 1–3. Interferenzexperiment mit Elektronen.

Quelle: Feynman Lectures

Mit einem ähnlichen Experiment konnten Davisson und Germer 1927 erstmals die Interferenz von Elektronen nachweisen.

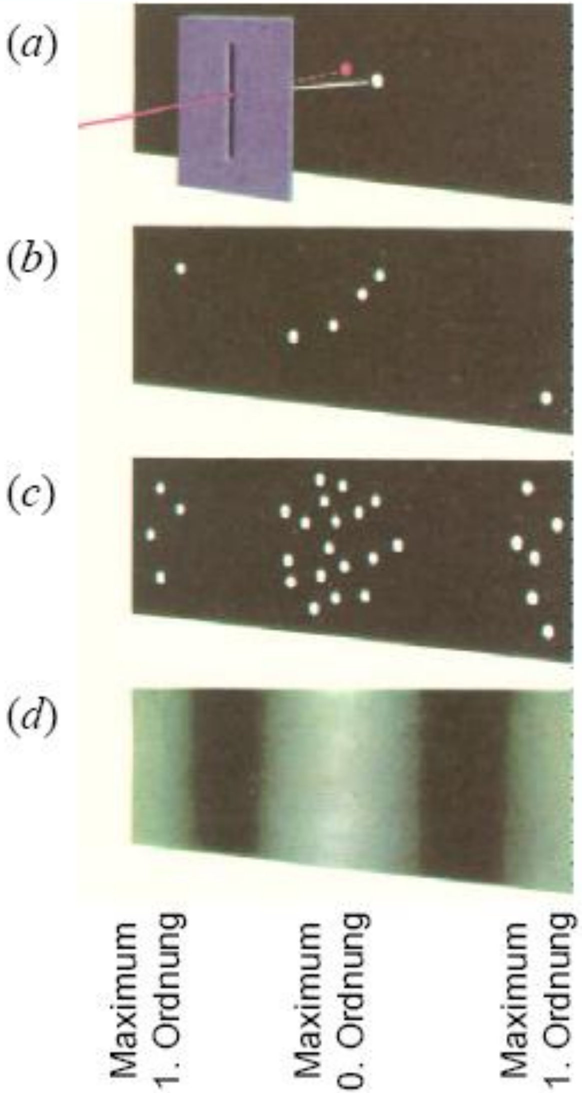
Teilchen treten auch als Felder (Wellen) auf.

Die legendären Bell-Labs

Meilensteine

- 1926 Nachweis der Beugung von Elektronen an Kristallen durch Clinton Davisson und Lester Germer. Davisson erhielt dafür 1937 den Nobelpreis für Physik.
- 1932 entdeckte Karl Guthe Jansky, dass aus der Mitte unserer Galaxie Radiowellen emittiert wurden, während er nach den Ursachen des Rauschens bei Langstrecken-Funkverbindungen forschte – dies war der Beginn der Radioastronomie.
- ab 1936 arbeitete Hendrik Wade Bode (Bode-Diagramm) bei den Bell Labs. Im April 1945 veröffentlichte er das Buch "Network Analysis and Feedback Amplifier Design".
- 1940 führte George Stibitz den von ihm bei den Bell Labs entwickelten *Complex Number Calculator*, eine elektrische Relais-basierte Rechenmaschine für komplexe Zahlen ferngesteuert über eine Telefonleitung von einer Tagung der American Mathematical Society vor.
- 1943 bis 1945 folgten weitere Relais-Rechner für die Flak-Zielführung und ballistische Berechnungen.
- Der erste funktionierende Bipolartransistor wurde 1947 in der von John R. Pierce geführten Forschungsgruppe in den Bell Laboratories gebaut und von ihm so getauft. Die Wissenschaftler John Bardeen, William Bradford Shockley, und Walter Houser Brattain erhielten dafür den Physik-Nobelpreis von 1956.
- Claude Shannon, Mathematiker an den Bell Labs, veröffentlichte 1948 *Die mathematische Theorie der Kommunikation* im Bell System Technical Journal, wobei er sich auf frühere Erkenntnisse von Harry Nyquist und Ralph Hartley auf dem Gebiet der Informationstheorie stützte.
- Daryl Chapin, Calvin Souther Fuller und Gerald Pearson entwickelten 1953 und produzierten an den Bell Labs die ersten technisch interessanten Silizium-Solarzellen mit über 4 % Wirkungsgrad (eine hatte sogar 6 % Wirkungsgrad). Sie bauten dabei auf vielen neuen Entwicklungen der vergangenen Jahre auf.
- 1957 entwickelte Max Mathews die erste Version seines MUSIC-N-Programms zur Komposition von Computermusik.
- 1960, nur knapp ein halbes Jahr nach dem ersten Laser von Theodore Maiman stellt die Arbeitsgruppe von Ali Javan den Helium-Neon-Laser vor, es ist der erste Gaslaser.
- 1962 erfanden Gerhard M. Sessler und James Edward Maceo West das Elektret-Mikrofon.
- 1964 entdeckten Arno Penzias und Robert Woodrow Wilson den kosmischen Mikrowellenhintergrund, der von George Gamow als ein Überbleibsel der heißen Frühphase des Universums vorhergesagt worden war. Penzias und Wilson erhielten dafür 1978 den Nobelpreis in Physik.
- 1964 Chandra Kumar N. Patel entwickelt mit dem Kohlendioxidlaser eine Laserstrahlquelle mit hoher cw-Leistung und hohem Wirkungsgrad.
- 1969 entwickelten Willard Boyle und George E. Smith den CCD-Sensor, der heute vor allem in Digitalkameras Verwendung findet. Sie erhielten dafür 2009 ebenfalls den Nobelpreis in Physik.
- Ende 1960er entwickelten John R. Arthur and Alfred Y. Cho die Molekularstrahlepitaxie (englisch *molecular beam epitaxy*, *MBE*) zum Abscheiden einkristalliner Schichtsysteme, welche die Grundlage für die heutige Optoelektronik bilden.
- Ab Ende der 1960er waren die Bell Labs der Ursprung des Unix-Betriebssystems und der Programmiersprache C, entwickelt von Dennis Ritchie und Ken Thompson in den frühen 1970ern, sowie dessen objektorientierter Erweiterung C++ von Bjarne Stroustrup in den 1980ern. Auch die statistische Programmiersprache S hat ihren Ursprung an den Bell Labs.

Teilchen als Wellen



Beugung im Teilchenbild.

(*a*) Die Flugbahn des einzelnen Teilchens weicht von der geraden Richtung ab.

(*b*) Die Auftreffpunkte mehrerer Teilchen sind scheinbar regellos verteilt.

(*c*) Häufung an bestimmten Stellen.

(*d*) Gesamtes Erscheinungsbild.

- Flugbahn des einzelnen Teilchens nicht bekannt
- Wahrscheinlichkeitsaussagen

Quelle: H. Leipner, U Halle

Historisches zur Quantenmechanik: Interferenz

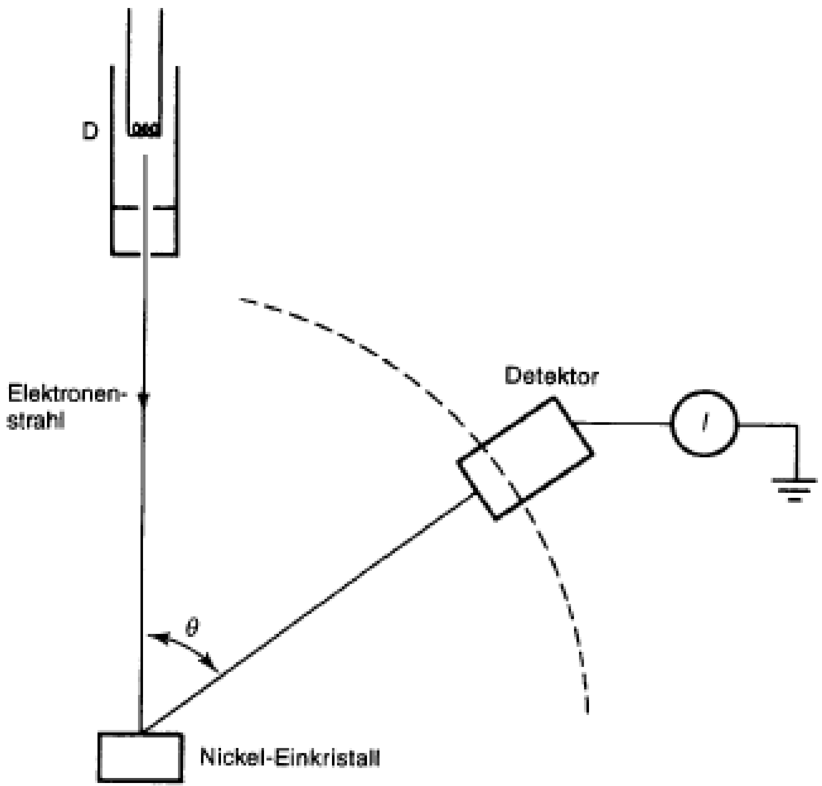
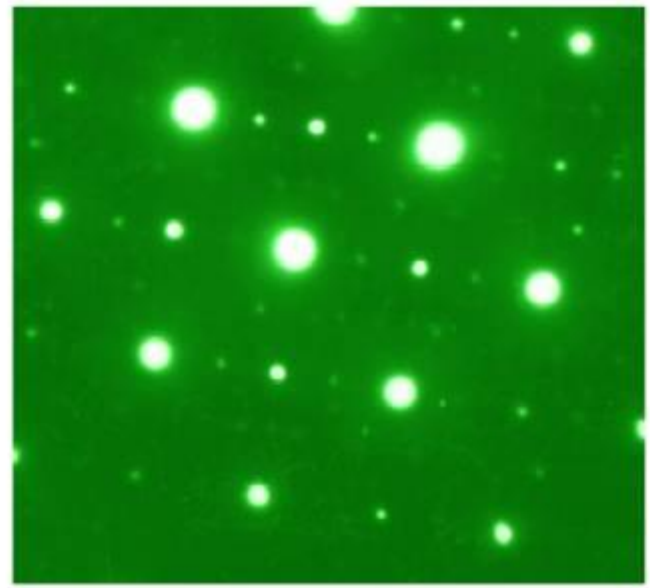


Abb: Interferenz von Elektronen an GaAs



Quelle: H. Leipner, U Halle

Das ist alles im Einklang mit den schon von Louis de Broglie im Jahre 1923 postulierten Materiewellen mit der Wellenlänge

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p}.}$$

„Teilchen treten auch als Felder (Wellen) auf (z.B. Elektronenbeugung/-interferenz)"
„Felder treten auch als Teilchen auf (z.B. Photoeffekt)"

Übersicht über die Vorlesung

1. Grundlagen der Quantenmechanik
    - 1.1 Einleitung
    - 1.2 Historisches
    - 1.3 Die Schrödinger-Gleichung
    - 1.4 Das freie quantenmechanische Elektron
    - 1.5 Quantenmechanische Erwartungswerte
2. Elektronische Zustände
3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente
4. Elektronen in Kristallen
5. Halbleiter
6. Quantenstatistik für Ladungsträger
7. Dotierte Halbleiter
8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht
9. Der pn-Übergang

Der Zustandsbegriff

Zustand eines Systems: Minimaler Satz von physikalischen Größen, aus dem sich maximale Information ableiten lässt.

- eindeutige Vorhersage über den Zustand zum Zeitpunkt t aus der Kenntnis des Zustandes zum Zeitpunkt t_0

Beispiel: Impuls und Ort eines klassischen Massepunktes

Mathematisch: $$\boxed{\frac{dZ(t)}{dt} = F\left[Z(t)\right]}$$

- Zeitliche Änderung des Zustandes wird beschrieben durch Differentialgleichung 1. Ordnung (Evolutionsgleichung)

Vorhersage eines Zustandes aus Anfangszustand

Lösung der DGL

© DAPD

Akrobat schön: Neuer hält den Elfmeter von Ronaldo

Der quantenmechanische Zustand

<u>1. Postulat der Quantenmechanik:</u>

Der quantenmechanische Zustand eines Teilchens der Masse *m*, das sich in einem Kraftfeld mit dem Potential $V(x,t)$ befindet, lässt sich als komplexwertige Funktion $\psi(x,t)$ des Ortes und der Zeit beschreiben. Seine Zeitentwicklung gehorcht der zeitabhängigen ***Schrödinger***gleichung:

Erwin Schrödinger
(1887-1961)

$$j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,t)\right\}\psi(x,t)$$

mit $h=h/2\pi=1.055*10^{-34}$Js; $j^2=-1$

$\psi(x,t)$ heißt **Wellenfunktion** des Teilchen

Der quantenmechanische Zustand

<u>1. Postulat der Quantenmechanik:</u>

Der quantenmechanische Zustand eines Teilchens der Masse *m*, das sich in einem Kraftfeld mit dem Potential *V(x,t)* befindet, lässt sich als komplexwertige Funktion $\psi(x,t)$ des Ortes und der Zeit beschreiben. Seine Zeitentwicklung gehorcht der zeitabhängigen ***Schrödinger***gleichung:

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi(x,t)$$

mit $h = h/2\pi = 1.055 \cdot 10^{-34}$ Js; $j^2 = -1$

$\psi(x,t)$ heißt **Wellenfunktion** des Teilchen

Erwin Schrödinger
(1887-1961)

Erwin Schrödinger und die Frauen Wie ein sexistischer Biograf einen Skandal auslöste

Das zweifelhafte Vorgehen eines Schrödinger-Biografen ließ das Gerücht entstehen, der Physiker habe Teenager sexuell genötigt. Ein Berliner Forscherpaar zeichnet jetzt ein ganz anderes Bild.

Von Eva Murašov
03.07.2024, 08:00 Uhr

Der Quantenphysiker Erwin Schrödinger (1887-1961) sei nicht nur ein einzigartiger Forscher gewesen, sondern auch ein frauenverachtender Macho, der Teenager schwängert und dann im Stich lässt, sogar ein „serieller Missbrauchstäter" und „Pädophiler": So lauten die schweren Vorwürfe, die 2022 in der ↗ „Irish Times" erhoben und von der internationale Presse weiterverbreitet wurden, und bis heute das Bild des Quantenphysikers als Privatmensch prägen.

Die Schrödingergleichung

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi(x,t)$$

Direkte Folgerungen:

Ist $\psi(x,t_0)$ bekannt, so folgt eindeutig $\psi(x,t)$ für alle $t > t_0$
(Lösung des Anfangswertproblems)

- keine Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten

$\longrightarrow$ mathematisch eher hässlich und eine allgemeine analytische Lösung ist unmöglich

Die Schrödingergleichung

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi(x,t)$$

Direkte Folgerungen:

Ist $\psi(x,t_0)$ bekannt, so folgt eindeutig $\psi(x,t)$ für alle $t > t_0$

(Lösung des Anfangswertproblems)

- keine Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten

$\longrightarrow$ mathematisch eher hässlich und eine allgemeine analytische Lösung ist unmöglich

-sieht ähnlich aus wie eine Diffusionsgleichung, z.B. Wärme: $\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2}$

$\longrightarrow$ aber komplett andere (wellenartige) Lösungen durch das imaginäre j

Linearität der Schrödingergleichung

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi(x,t)$$

Linearität der Schrödingergleichung

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi(x,t)$$

Wenn $\psi_1(x,t)$ und $\psi_2(x,t)$ Lösung der S-Glg.,

dann auch $\psi\ (x,t) = \alpha\psi_1(x,t) + \beta\psi_2(x,t)$

Linearität der Schrödingergleichung

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi(x,t)$$

Wenn $\psi_1(x,t)$ und $\psi_2(x,t)$ Lösung der S-Glg.,

dann auch $\psi\ (x,t) = \alpha \psi_1(x,t) + \beta \psi_2(x,t)$

$$\alpha j\hbar \frac{\partial \psi_1(x,t)}{\partial t} + \beta j\hbar \frac{\partial \psi_2(x,t)}{\partial t} \quad = \quad \alpha \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi_1(x,t) + \beta \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi_2(x,t)$$

Linearität der Schrödingergleichung

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi(x,t)$$

Wenn $\psi_1(x,t)$ und $\psi_2(x,t)$ Lösung der S-Glg.,

dann auch $\psi(x,t) = \alpha\psi_1(x,t) + \beta\psi_2(x,t)$

$$\alpha j\hbar \frac{\partial \psi_1(x,t)}{\partial t} + \beta j\hbar \frac{\partial \psi_2(x,t)}{\partial t} = \alpha \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi_1(x,t) + \beta \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi_2(x,t)$$

Linearität der Schrödingergleichung

$$j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,t)\right\}\psi(x,t)$$

Wenn $\psi_1(x,t)$ und $\psi_2(x,t)$ Lösung der S-Glg.,
dann auch $\psi\ (x,t)=\alpha\psi_1(x,t)+\beta\psi_2(x,t)$

$$\alpha j\hbar\frac{\partial\psi_1(x,t)}{\partial t}+\beta j\hbar\frac{\partial\psi_2(x,t)}{\partial t}=\alpha\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,t)\right\}\psi_1(x,t)+\beta\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,t)\right\}\psi_2(x,t)$$

$\longrightarrow$ wir können Lösungen überlagern (Superpositionsprinzip)
gleiches Spiel wie bei elektromagnetischen Feldern und Wellen

Die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$

...und was bringt uns jetzt die Wellenfunktion ????

<u>2. Postulat der Quantenmechanik:</u>

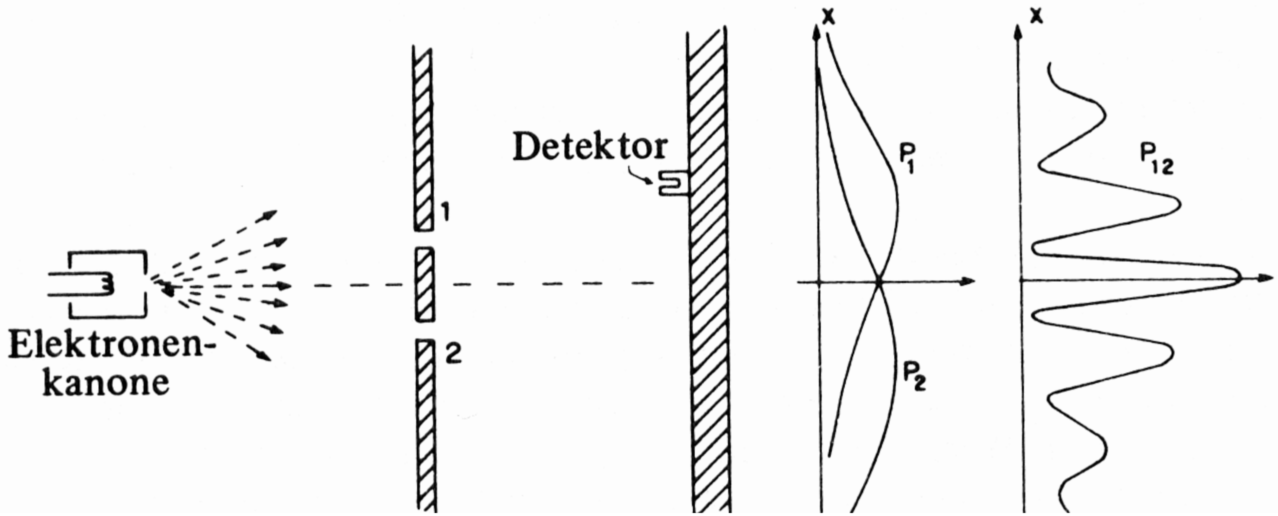
Die Wellenfunktion ist nicht observabel (=keine Meßgröße); ihr Absolutquadrat

$$\rho(x,t) = \left|\psi(x,t)\right|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$$

ist proportional zur Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Raum.

... nehmen wir als Meßgröße den Ort:

Die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$



... aha, $\Psi(x,t)$ regelt also z. B. das Entstehen von Elektronen-Interferenzmustern

$\rho(x,t)$ ist messbar, $\Psi(x,t)$ selbst aber NICHT !

Übersicht über die Vorlesung

1. Grundlagen der Quantenmechanik

   1.1 Einleitung

   1.2 Historisches

   1.3 Die Schrödinger-Gleichung

   1.4 Das freie quantenmechanische Elektron

   1.5 Quantenmechanische Erwartungswerte

2. Elektronische Zustände
3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente
4. Elektronen in Kristallen
5. Halbleiter
6. Quantenstatistik für Ladungsträger
7. Dotierte Halbleiter
8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht
9. Der pn-Übergang

1.4 Das freie quantenmechanische Elektron

Zeitabhängige S-Glg.

$$\boxed{j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi(x,t)}$$

1.4 Das freie quantenmechanische Elektron

Zeitabhängige S-Glg.

$$\boxed{j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \cancel{V(x,t)} \right\} \psi(x,t)}$$

1.4 Das freie quantenmechanische Elektron

Zeitabhängige S-Glg.

$$\boxed{j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\cancel{V(x,t)}\right\}\psi(x,t)}$$

Analogie zu den elektromagnetischen Wellen, „Materiewellen“, intuitives Raten etc.

$\longrightarrow$ Wellenansatz: $\psi(x,t)=A\exp(j(kx-\omega t))$

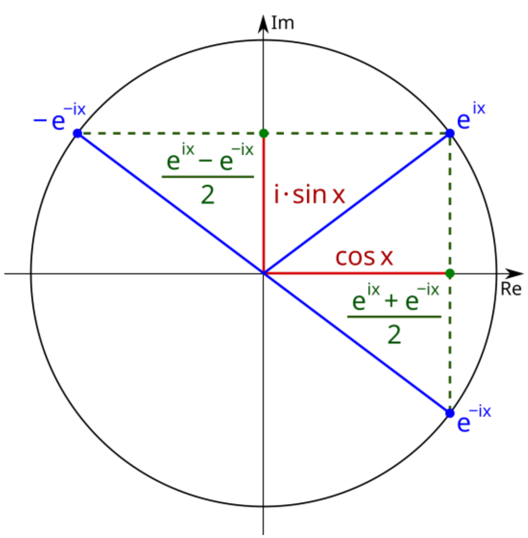
1.4 Das freie quantenmechanische Elektron

Zeitabhängige S-Glg.

$$\boxed{j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \cancel{V(x,t)} \right\} \psi(x,t)}$$

Analogie zu den elektromagnetischen Wellen, „Materiewellen“, intuitives Raten etc.

→ Wellenansatz: $\psi(x,t) = A \exp(j(kx - \omega t))$



Eulersche Formel

Im Komplexen sind die trigonometrischen Funktionen mit der Exponentialfunktion mittels der **Eulerschen Formel** (andere Bezeichnung **Eulersche Identität**) verknüpft:

$$e^{i\varphi} = \cos\varphi + i \sin\varphi. \quad (1)$$

1.4 Das freie quantenmechanische Elektron

Zeitabhängige S-Glg.

$$\boxed{j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\cancel{V(x,t)}\right\}\psi(x,t)}$$

Analogie zu den elektromagnetischen Wellen, „Materiewellen“, intuitives Raten etc.

$\longrightarrow$ Wellenansatz: $\psi(x,t)=A\exp(j(kx-\omega t))$

<u>linke Seite</u>: $j\hbar\frac{\partial}{\partial t}A\exp(j(kx-\omega t))=j\hbar(-j\omega)A\exp(j(kx-\omega t))=A\hbar\omega\exp(j(kx-\omega t))$

1.4 Das freie quantenmechanische Elektron

Zeitabhängige S-Glg.

$$\boxed{j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \cancel{V(x,t)} \right\} \psi(x,t)}$$

Analogie zu den elektromagnetischen Wellen, „Materiewellen“, intuitives Raten etc.

$\longrightarrow$ Wellenansatz: $\psi(x,t) = A\exp(j(kx-\omega t))$

<u>linke Seite</u>: $j\hbar \frac{\partial}{\partial t} A\exp(j(kx-\omega t)) = j\hbar(-j\omega)A\exp(j(kx-\omega t)) = A\hbar\omega\exp(j(kx-\omega t))$

<u>rechte Seite</u>:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\} A\exp(j(kx-\omega t)) = -\frac{\hbar^2 jk}{2m}\frac{\partial}{\partial x} A\exp(j(kx-\omega t))$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} A\exp(j(kx-\omega t))$$

Die Lösungen der Schrödinger-Glg. für das freie Teilchen

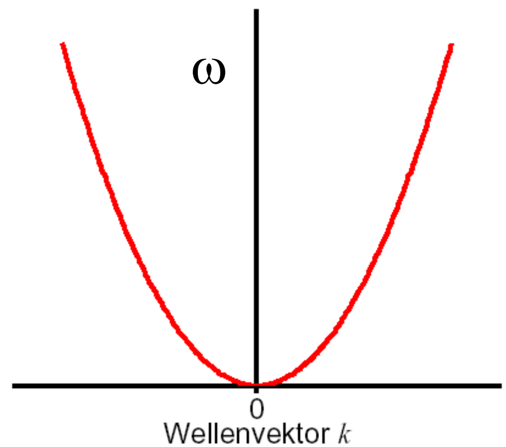
$$\Rightarrow \left\{ \hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right\} A \exp(j(kx - \omega t)) = 0$$

-muss erfüllt sein für alle Zeiten t, d. h. wir erhalten mögliche Lösungen für die ω und k, für die die Beziehung $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ gilt.

$\longrightarrow$ unendlich viele Lösungen

Für alle $-\infty < k < \infty$ gibt es jeweils ein passendes ω, so dass die Gleichung erfüllt wird.

Dieser Zusammenhang wird als Dispersionsrelation bezeichnet.

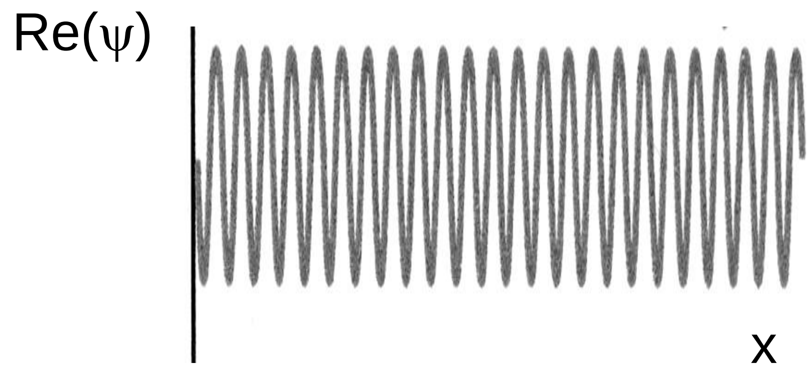


„Dispersionsrelation“

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

Ebene Welle:

$$\psi(x,t) = A\exp(j(kx - \omega_k t))$$



..schön und gut, aber wie komme ich wieder an reale Größen ??

<u>1. Der Ort des Teilchens:</u>

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist proportional zum Absolutquadrat der Wellenfunktion:

$$\rho(x,t) = \left|\psi(x,t)\right|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t) =$$

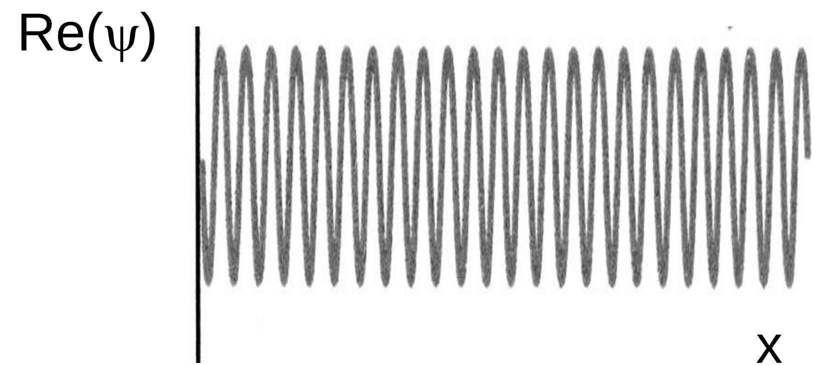
$$\left|A\right|^2 \exp(jkx - jkx - j\omega t + j\omega t) = \left|A\right|^2$$

...aha, räumlich konstant !?

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

Ebene Welle:

$$\psi(x,t) = A\exp(j(kx - \omega_k t))$$



..schön und gut, aber wie komme ich wieder an reale Größen ??

2. Phasengeschwindigkeit:

Wie schnell bewegt sich ein Punkt konstanter Phase ? Das heisst, wir suchen die x-Werte, für die das Argument in der Wellenfunktion gleich bleibt:

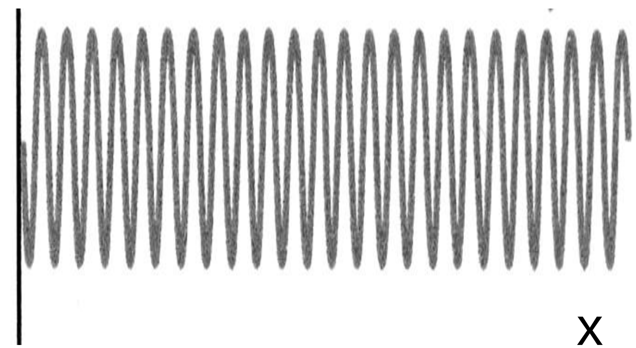
$$(kx - \omega_k t) = const. \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}(kx - \omega_k t) = 0$$

$$\Rightarrow kv_p - \omega_k = 0 \Rightarrow v_p = \frac{\omega_k}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

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

Ebene Welle:

$$\psi(x,t) = A\exp(j(kx - \omega_k t))$$



..schön und gut, aber wie komme ich wieder an reale Größen ??

<u>3. Der Impuls</u> (klassisch *p=mv*):

Zusammenhang wurde schon von Louis de Broglie 1923 erkannt:

Louis de Broglie
(1892-1987)

$$\boxed{\text{Wellenlänge } \lambda = \frac{h}{p}}$$

Mit $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ folgt $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hk}{2\pi} = \hbar k$.

Jeder Welle mit Wellenzahl(vektor) *k* „entspricht“ ein Elektron mit Impuls *p=hk.*
(Eine „sauberere “ Einführung erfolgt später.)

Es handelt sich um ein „merkwürdiges“ Elektron, da total delokalisiert.

Übersicht über die Vorlesung

1. Grundlagen der Quantenmechanik
   - 1.1 Einleitung
   - 1.2 Historisches
   - 1.3 Die Schrödinger-Gleichung
   - 1.4 Das freie quantenmechanische Elektron
   - 1.5 Quantenmechanische Erwartungswerte
2. Elektronische Zustände
3. Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente
4. Elektronen in Kristallen
5. Halbleiter
6. Quantenstatistik für Ladungsträger
7. Dotierte Halbleiter
8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht
9. Der pn-Übergang

1.5 Quantenmechanische Erwartungswerte

Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion ist (im Prinzip) bekannt.

Wie werden nun messbare Größen vorhergesagt/berechnet ??

Wir kennen schon die Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$$

Allgemeiner:

Der Erwartungswert bei einer Ortsmessung ist: $\boxed{< x > (t) = \int dx \psi^*(x,t) x \psi(x,t)}$

Er ist der Mittelwert, der sich für die Messgröße Ort ergibt, wenn eine große Anzahl von Messungen an gleichartigen quantenmechanischen Systemen gemessen wird.

Aber: Bei einer einzelnen Messung wird immer nur ein bestimmter Wert gemessen.

Damit haben wir den Ort des Teilchens quantenmechanisch im Griff !

... aber was ist mit allen anderen physikalischen Größen (Energie, Impuls etc.) ??

Quantenmechanische Erwartungswerte

3. Postulat der Quantenmechanik:

Physikalische Meßgrößen werden durch Operatoren beschrieben. Dem Teilchenort wird der Operator

x zugeordnet, der ψ(x) mit x multipliziert.

Dem Impuls wird der Operator $p = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ zugeordnet.

Bei oftmaliger Messung einer Größe F(x,p) an einem quantenmechanischen System ergibt sich als Mittelwert:

$$\langle F \rangle = \frac{\int dx \psi^*(x,t) \hat{F}(\hat{x},\hat{p}) \psi(x,t)}{\int dx \psi^*(x,t) \psi(x,t)}$$

Quantenmech. Erwartungswerte: Beispiel Ebene Welle

$$\psi(x,t) = A\exp(j(kx - \omega_k t))$$

Ort: ...hatten wir im Prinzip schon.

$$\langle x \rangle = \frac{\int dx A\exp(-j(kx - \omega_k t)) x A\exp(j(kx - \omega_k t))}{\int dx A\exp(-j(kx - \omega_k t)) A\exp(j(kx - \omega_k t))} = \frac{\int dx x}{\int dx} = 0$$

Quantenmech. Erwartungswerte: Beispiel Ebene Welle

$$\psi(x,t) = A\exp(j(kx - \omega_k t))$$

Ort: ...hatten wir im Prinzip schon.

$$<x> = \frac{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))xA\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))} = \frac{\int dxx}{\int dx} = 0$$

Erwartungswert für den Impuls:

$$<p> = \frac{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))(-j\hbar\frac{\partial}{\partial x})A\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))} =$$

Quantenmech. Erwartungswerte: Beispiel Ebene Welle

$$\psi(x,t) = A\exp(j(kx - \omega_k t))$$

Ort: ...hatten wir im Prinzip schon.

$$<x>=\frac{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))xA\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))} = \frac{\int dxx}{\int dx} = 0$$

Erwartungswert für den Impuls:

$$<p>=\frac{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))(-j\hbar\frac{\partial}{\partial x})A\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))} =$$

$$\frac{-j\hbar jk\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))} = \hbar k$$

Quantenmech. Erwartungswerte: Beispiel Ebene Welle

Kinetische Energie ?

Klassisch: $W_{\mathrm{Kin}} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$

Wir benutzen die „Quantisierungsvorschrift“

$$p = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

und schreiben den klassischen Ausdruck als Operator:

$$\text{Klassisch: } W_{Kin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$$

$$\rightarrow \text{quantenmechanisch: } \hat{W}_{kin} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Quantenmechanische Erwartungswerte: z.B. Ebene Welle FuB 1.62

$$<\hat{W}_{kin}>=\frac{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2})A\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))}=$$

Quantenmechanische Erwartungswerte: z.B. Ebene Welle FuB 1.63

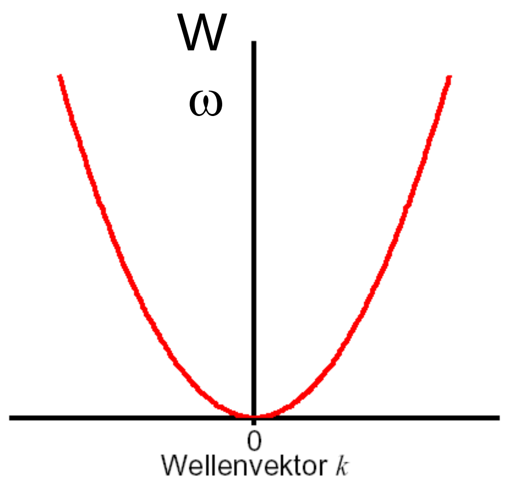
$$<\hat{W}_{kin}>=\frac{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2})A\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))}=$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}jk\frac{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))(\frac{\partial}{\partial x})A\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

Quantenmechanische Erwartungswerte: z.B. Ebene Welle

$$<\hat{W}_{kin}> = \frac{\int dx A \exp(-j(kx-\omega_k t))(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}) A \exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dx A \exp(-j(kx-\omega_k t)) A \exp(j(kx-\omega_k t))} =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} jk \frac{\int dx A \exp(-j(kx-\omega_k t))(\frac{\partial}{\partial x}) A \exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dx A \exp(-j(kx-\omega_k t)) A \exp(j(kx-\omega_k t))} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



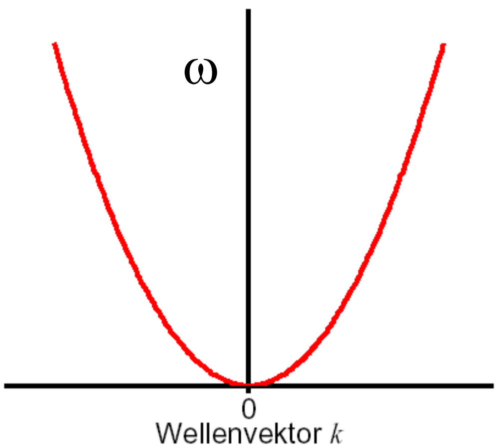
„Dispersionsrelation“

Vergleich mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ zeigt, dass

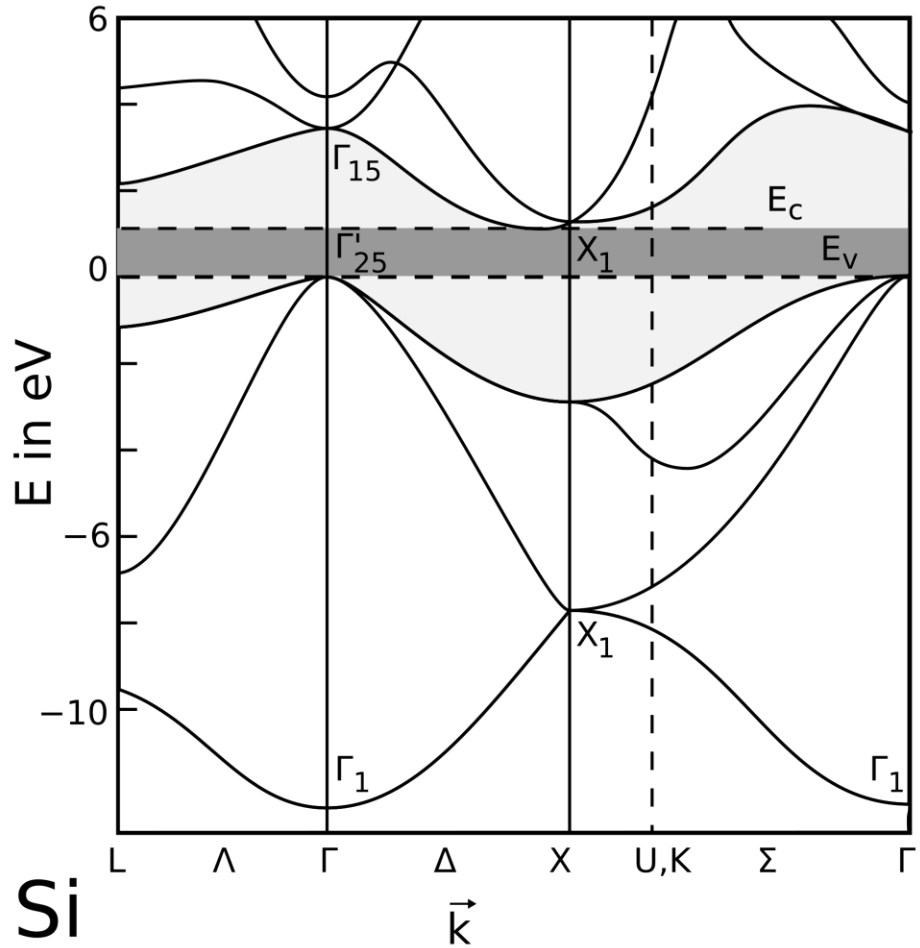
$$\left\langle \hat{W}_{kin} \right\rangle \equiv W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega$$

Dispersionsrelation ist auch der Zusammenhang zwischen Energie und Wellenzahl (Impuls). Dies wird uns in leicht modifzierter Form als Bandstruktur eines Halbleiters wieder begegnen.

Von der Dispersionsrelation zur Bandstruktur



Dispersionsrelation



Bandstruktur