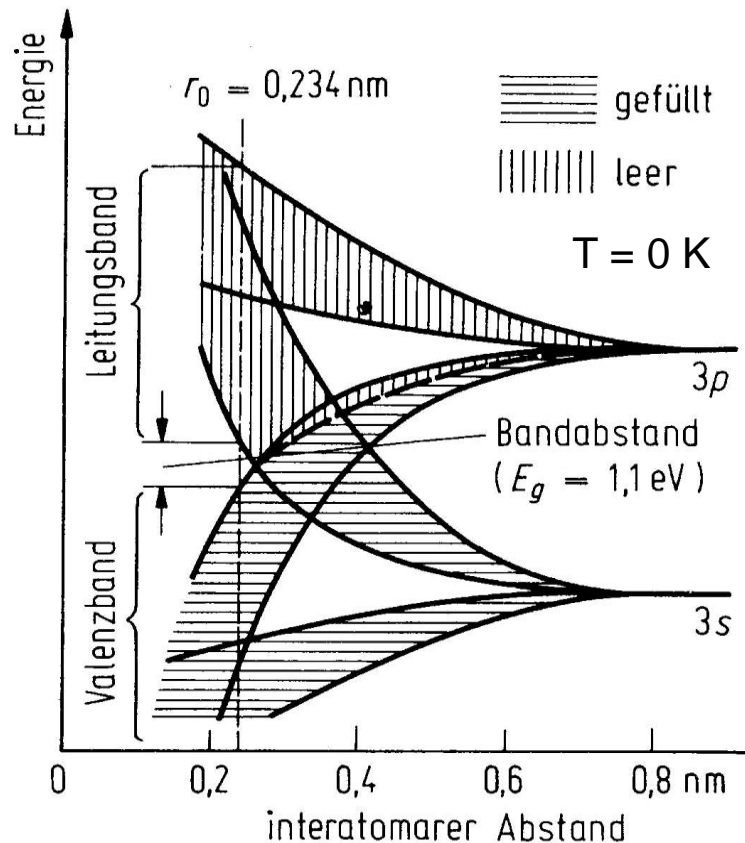
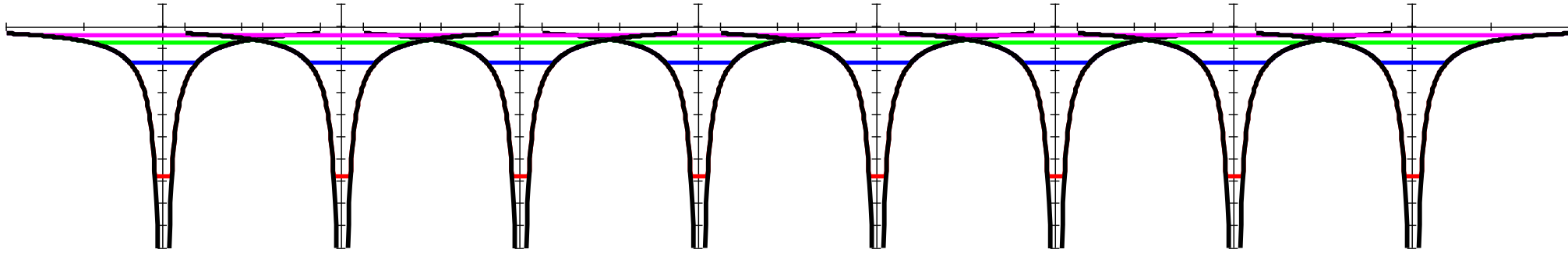


1. **Grundlagen der Quantenmechanik**
2. **Elektronische Zustände**
3. **Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente**
4. **Elektronen in Kristallen**
 - 4.1 Von 2 zu 10^{23}
 - 4.2 Atome in Festkörpern
 - 4.3 Elektronen in periodischen Potentialen
5. **Halbleiter**
6. **Quantenstatistik für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

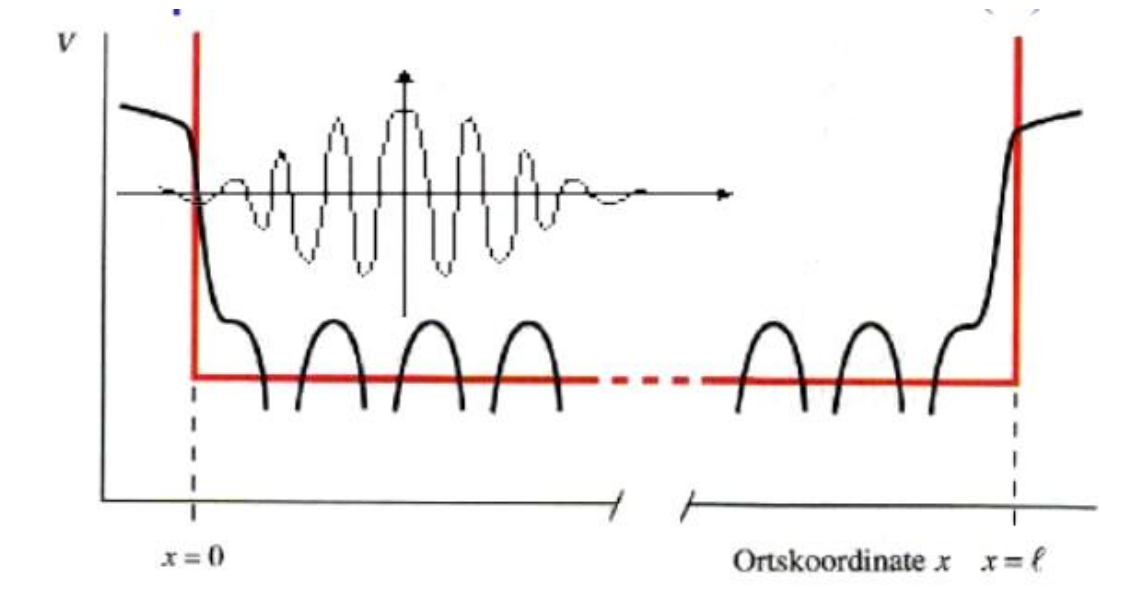
Festkörperelektronik
SS 2016
7. Foliensatz
09.06.2016



Eine Erklärung der elektronischen Zustände in Halbleitern über die Verallgemeinerung der kovalenten Bindung erscheint intuitiv, ist aber für quantitative Vorhersagen und die Modellierung wenig geeignet bzw. mathematisch sehr aufwändig. Für amorphe und stark ungeordnete Halbleiter werden solche Ansätze verfolgt.

Bei **kristallinen** Halbleitern kann die räumliche Periodizität ausgenutzt und damit viel eleganter vorgegangen werden.

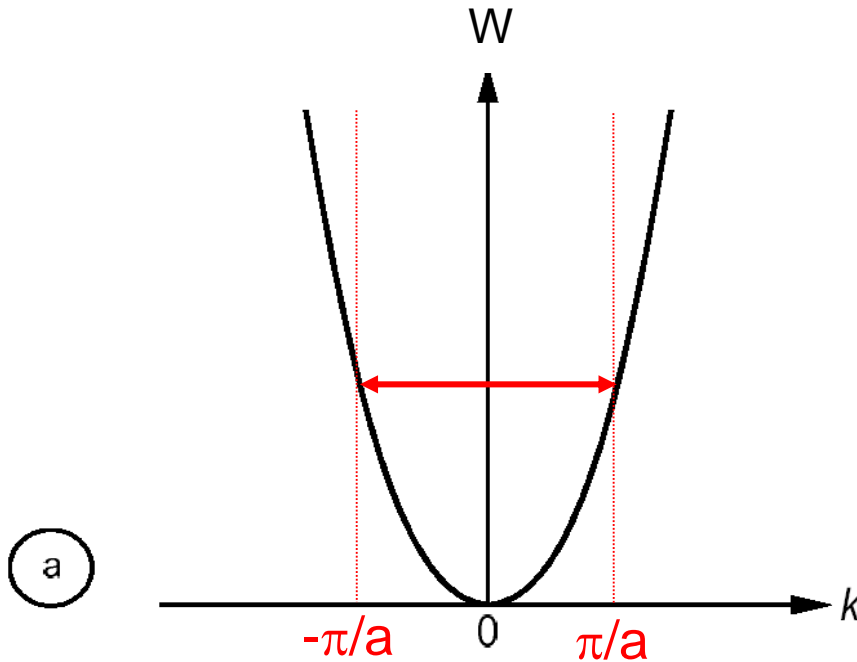
Periodische Anordnung von Atomen \rightarrow Periodisches Potential $V(x)$



Schematische Darstellung eines quantenmechanischen Elektrons in einem periodischen Potential eines kristallinen Festkörpers

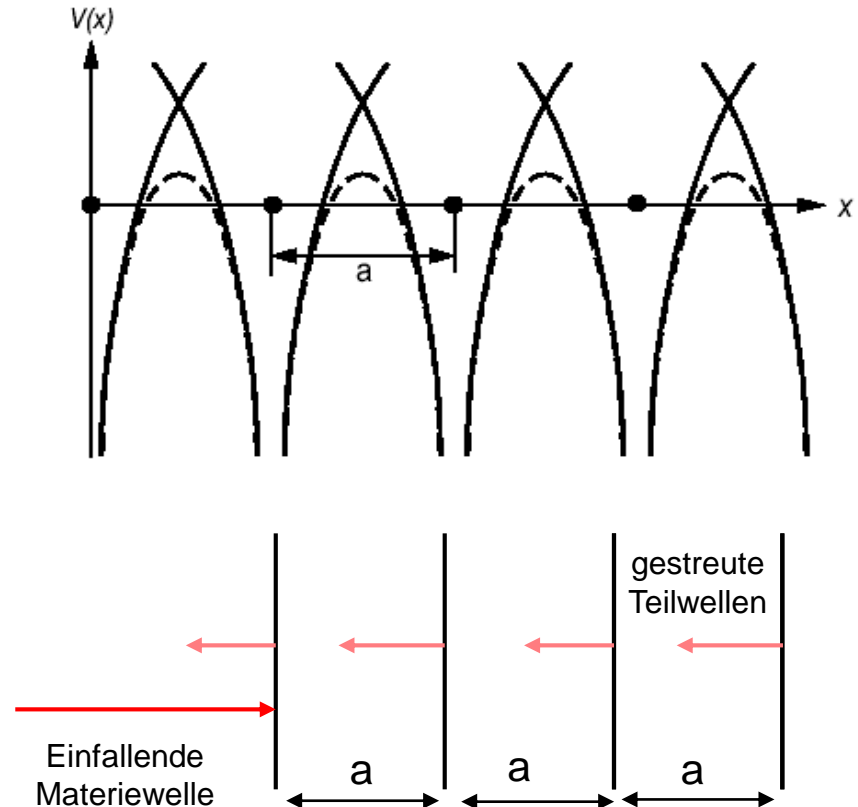
\longrightarrow Drastische Effekte, wenn die halbe Wellenlänge der Elektronen (oder ein ganzzahliges Vielfaches) gleich der Periode des Potentials ist

\longrightarrow Ausbildung von **stehenden Wellen**



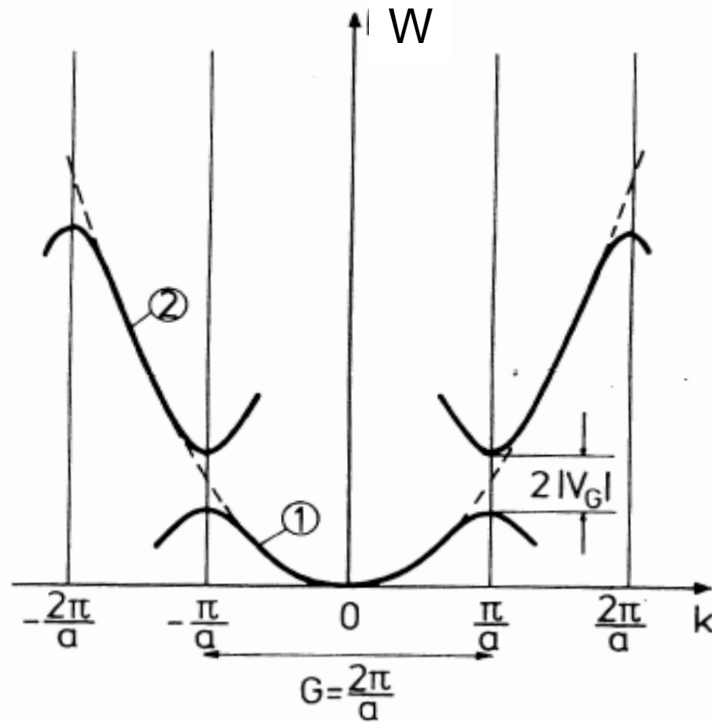
Dispersionsrelation
des freien Elektrons

$$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



Konstruktive Überlagerung
der Teilwellen falls $\lambda/2=a$
oder $k=\pi/a$

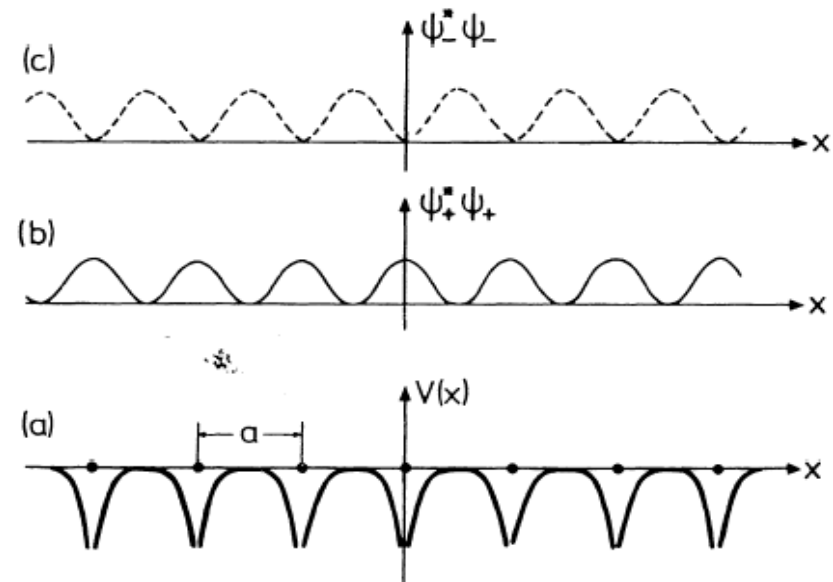
Vom freien Elektron zum Kristallelektron



Dispersionsrelation
des Kristallelektrons

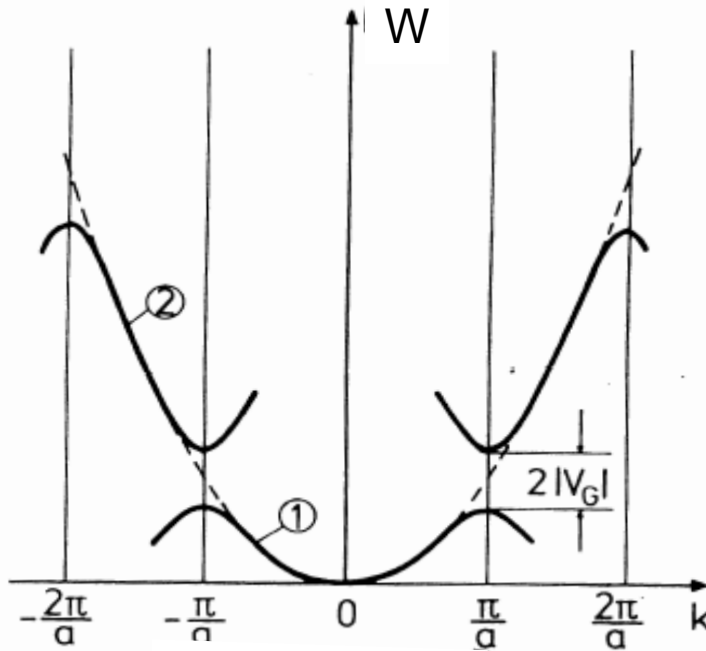
→ **Aufspaltung der
Parabeläste bei $|k| = \pi/a$, Ausbildung von
stehenden Wellen**

- c) Aufenthaltswahrscheinlichkeit obere „Bandkante“
(Wellenbäuche zwischen Atomrümpfen)
- b) Aufenthaltswahrscheinlichkeit untere „Bandkante“
(Wellenbäuche bei Atomrümpfen)



-bei einer Wellenlänge **zwei** qualitativ unterschiedliche Möglichkeiten die **stehende** Welle im Verhältnis zu den Atomrümpfen zu platzieren.

Vom freien Elektron zum Kristallelektron



Gittervektoren:

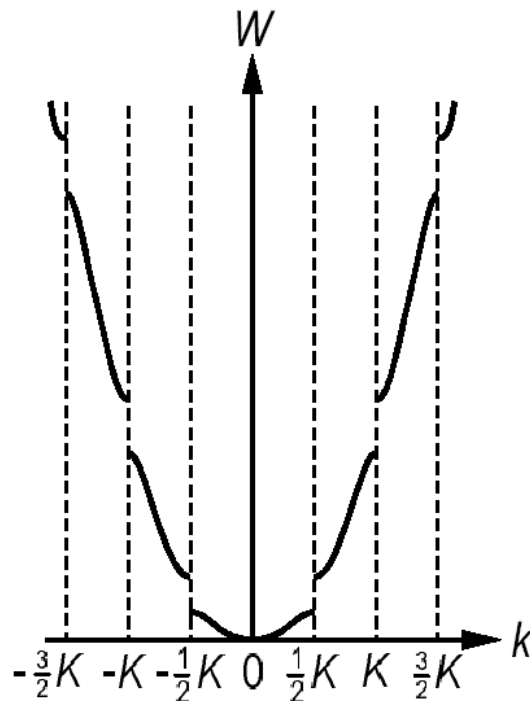
$$\vec{R}_n = n\vec{a} = na\vec{e}_x$$

„Reziproker“ Gittervektor:

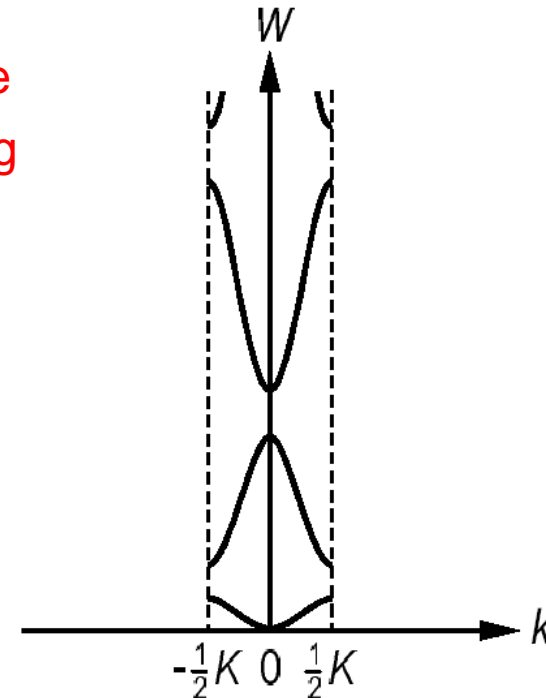
$$\vec{K} = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_x \quad \vec{K}_n = n \frac{2\pi}{a} \vec{e}_x$$

Das periodische Potential führt zu einer teilweisen Aufhebung der Impulserhaltung. Es kann zu jedem k -Wert in der Bandstruktur ein reziproker Gittervektor hinzuaddiert werden.

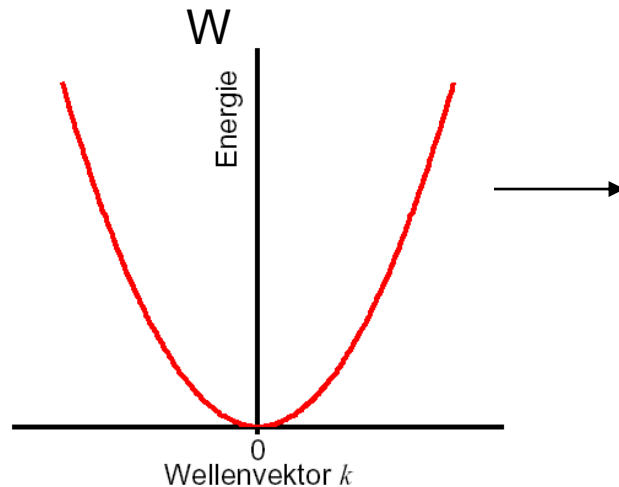
Es genügt, den Bereich von $-\pi/a$ bis π/a oder allgemeiner von $-0.5K$ bis $0.5K$ darzustellen. Diesen Bereich nennt man die erste Brillouin-Zone.



Einfachere
Darstellung



Freie Elektronen



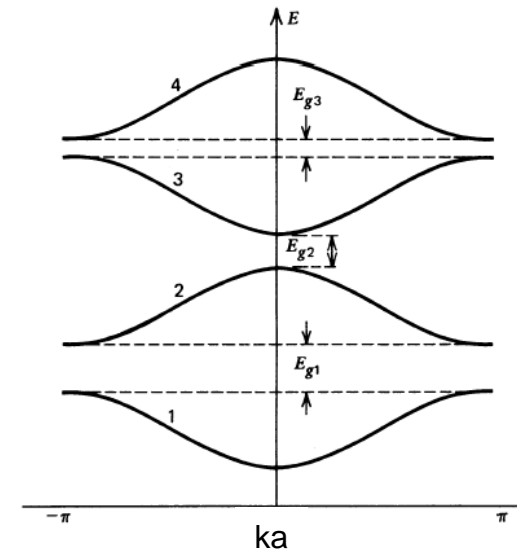
Klassifizierung nach dem Wellenvektor:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{j\vec{k}\vec{r}} \quad \text{mit}$$

$$W(k) = \frac{(\hbar k)^2}{2m_0}$$

Reduktion auf die erste Brillouin-Zone

Bloch-Elektronen



Klassifizierung nach reduziertem Wellenvektor k und Bandindex n :

$$\Psi_{nk}(\vec{r}) = e^{j\vec{k}\vec{r}} u_{nk}(\vec{r})$$

$$u_{nk}(\vec{r}) = u_{nk}(\vec{r} + \vec{R}) \quad \text{Energie: } W_n(k)$$

(gitterperiodisch)

$$\Psi_{nk}(\vec{r}) = e^{j\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

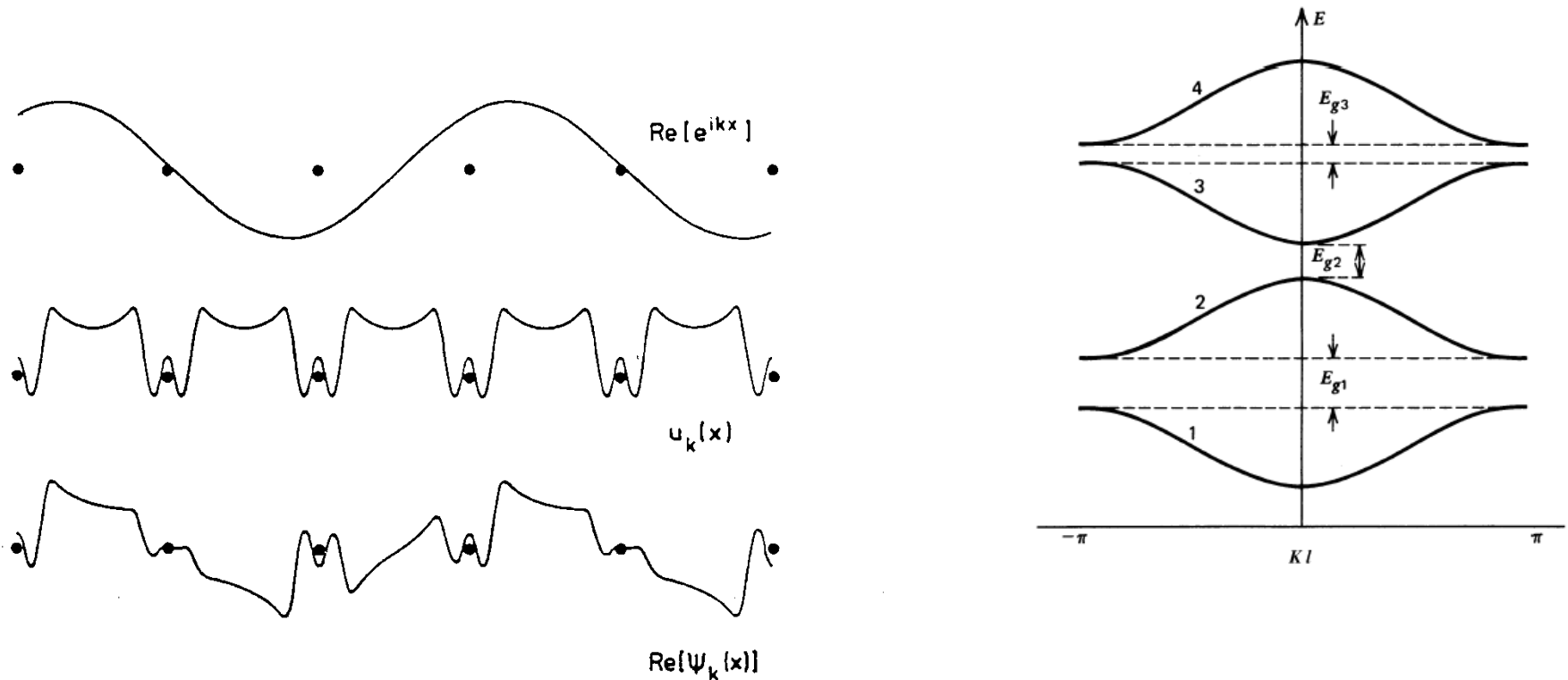
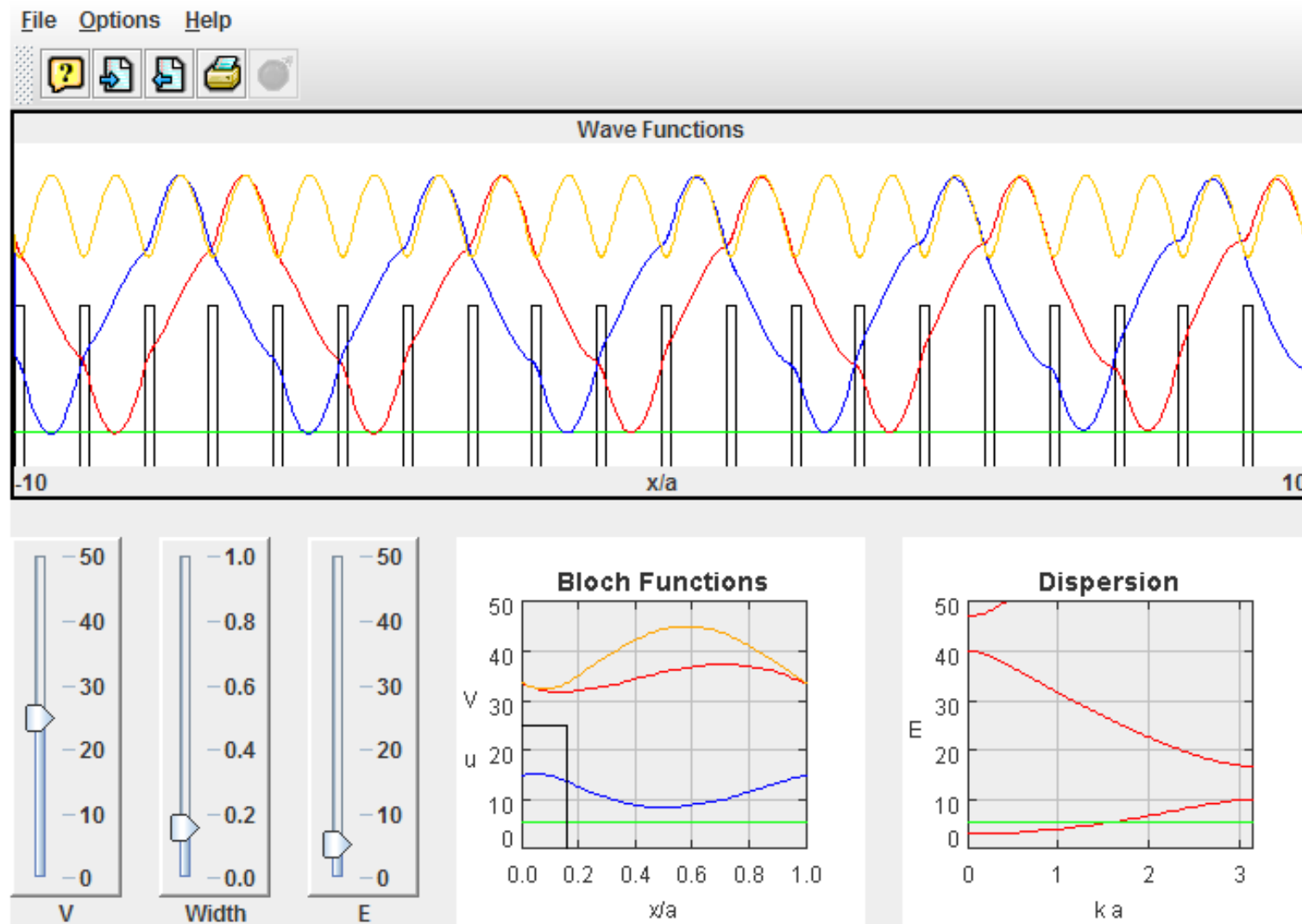


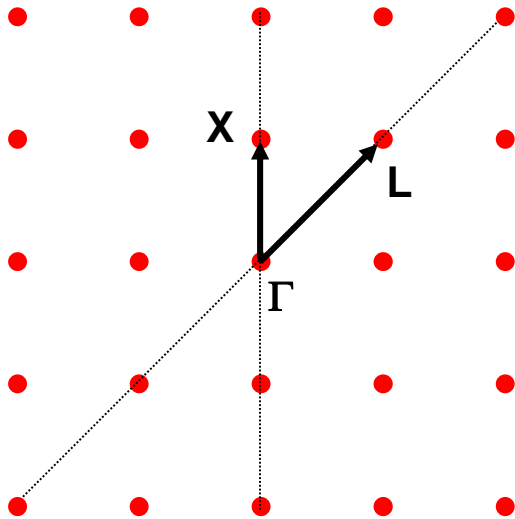
Fig. 3.4 Konstruktion einer Blochfunktion $\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$ für ein eindimensionales Gitter aus einer Wellenfunktion e^{ikx} , die mit einer gitterperiodischen Funktion $u_k(x)$ moduliert ist



Bisher haben wir nicht bedacht, dass das Potential für die verschiedenen Raumrichtungen verschieden ist.

Nehmen wir z.B. an wir haben ein 2D-Gitter. Die Atome sind entlang der X-Richtung näher zusammen als entlang der L-Richtung.

Daher erwarten wir, dass durch den unterschiedlichen Potentialverlauf auch die Energiezustände unterschiedlich sind.



z.B. beim quadratischen
Gitter in 2D:

Γ : $K=(0,0)$

X : $K=(0,1)$

L : $K=(1,1)$

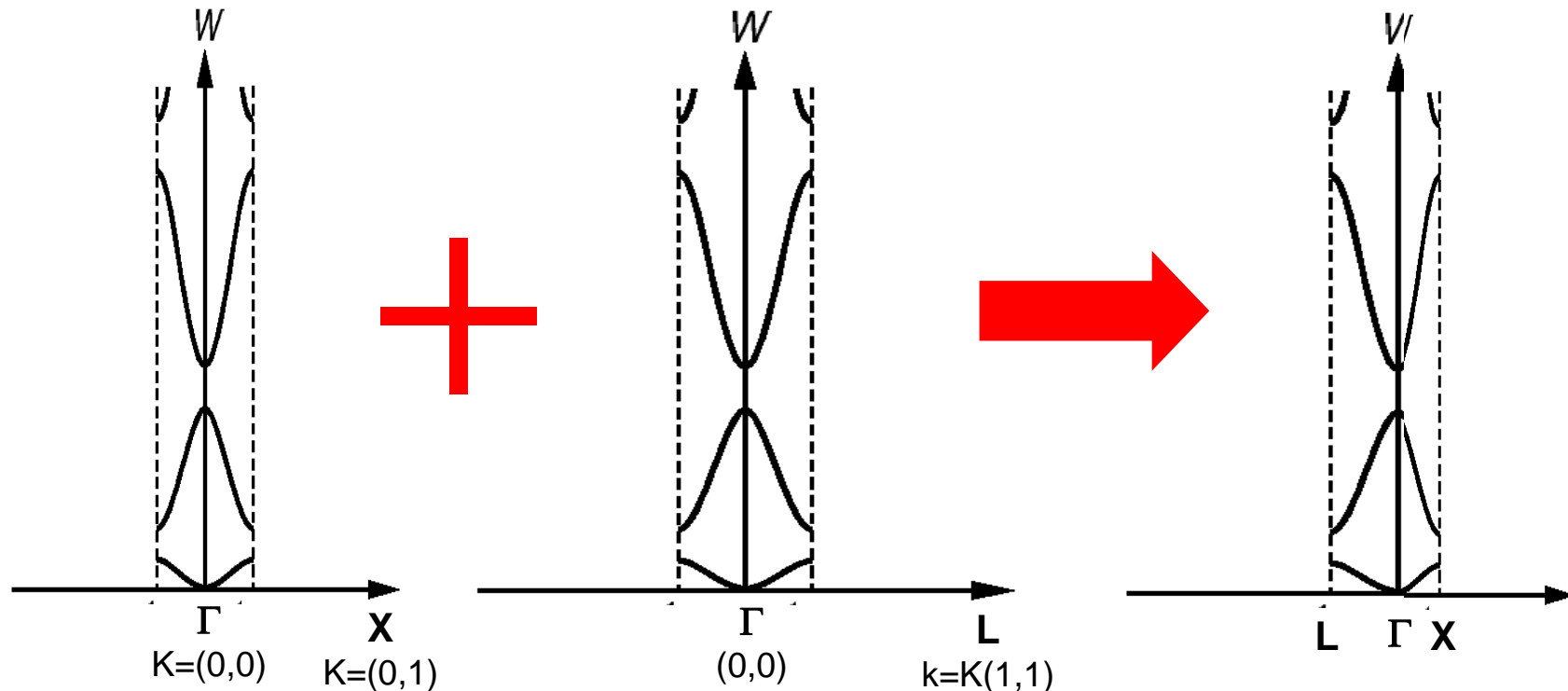
Die Energie hängt damit vom
Wellenvektor \vec{k} ab:

Energie: $W_n(\vec{k})$

Richtungsabhängigkeit des Potentials

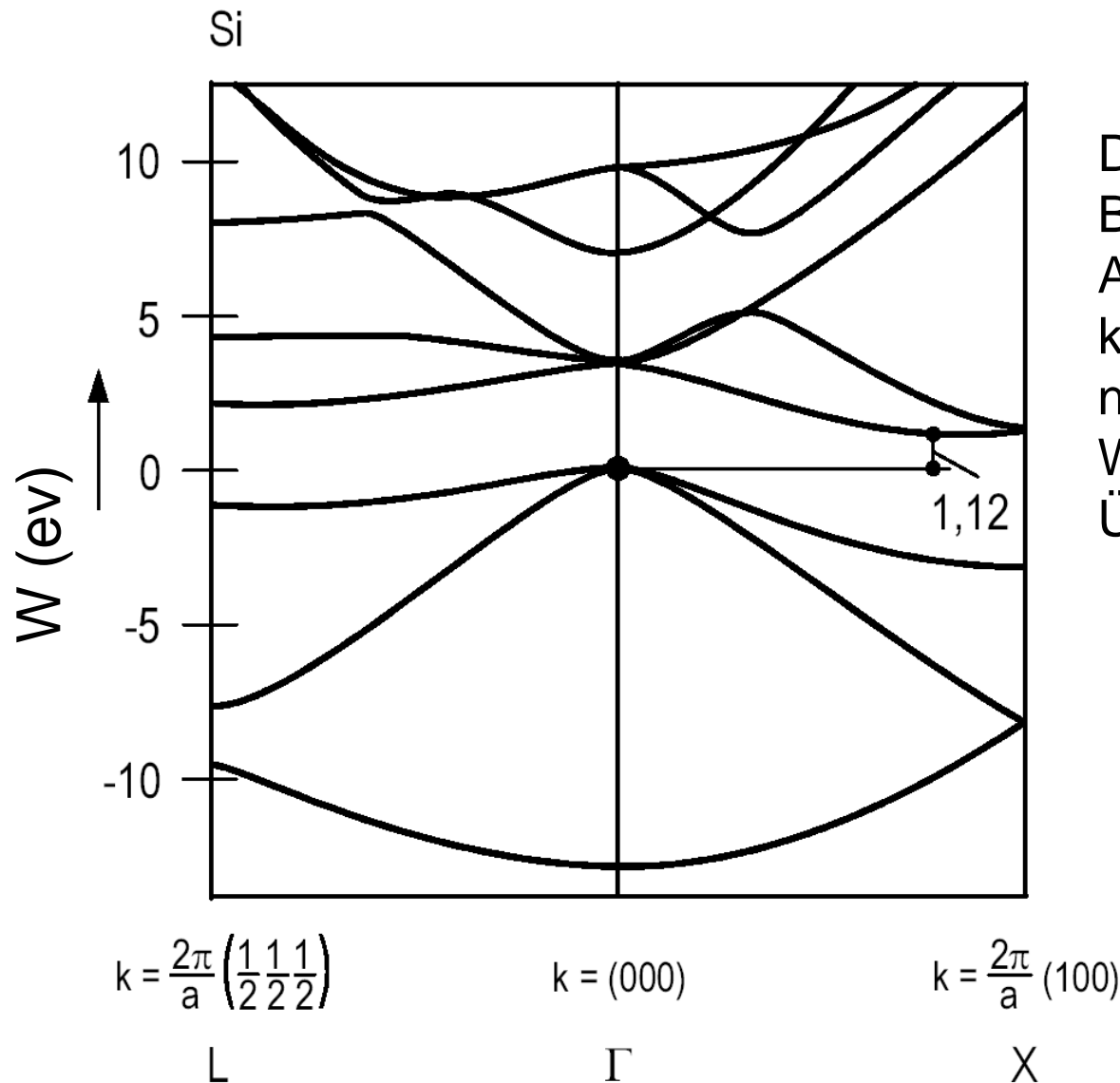
In der Tat zeigen Berechnungen, dass die Energiezustände richtungsabhängig sind.

Oft werden deshalb in einem Bandstruktur-Diagramm die Energiezustände für verschiedene relevante Richtungen gezeigt:



Beispiel: Bandstruktur von Silizium

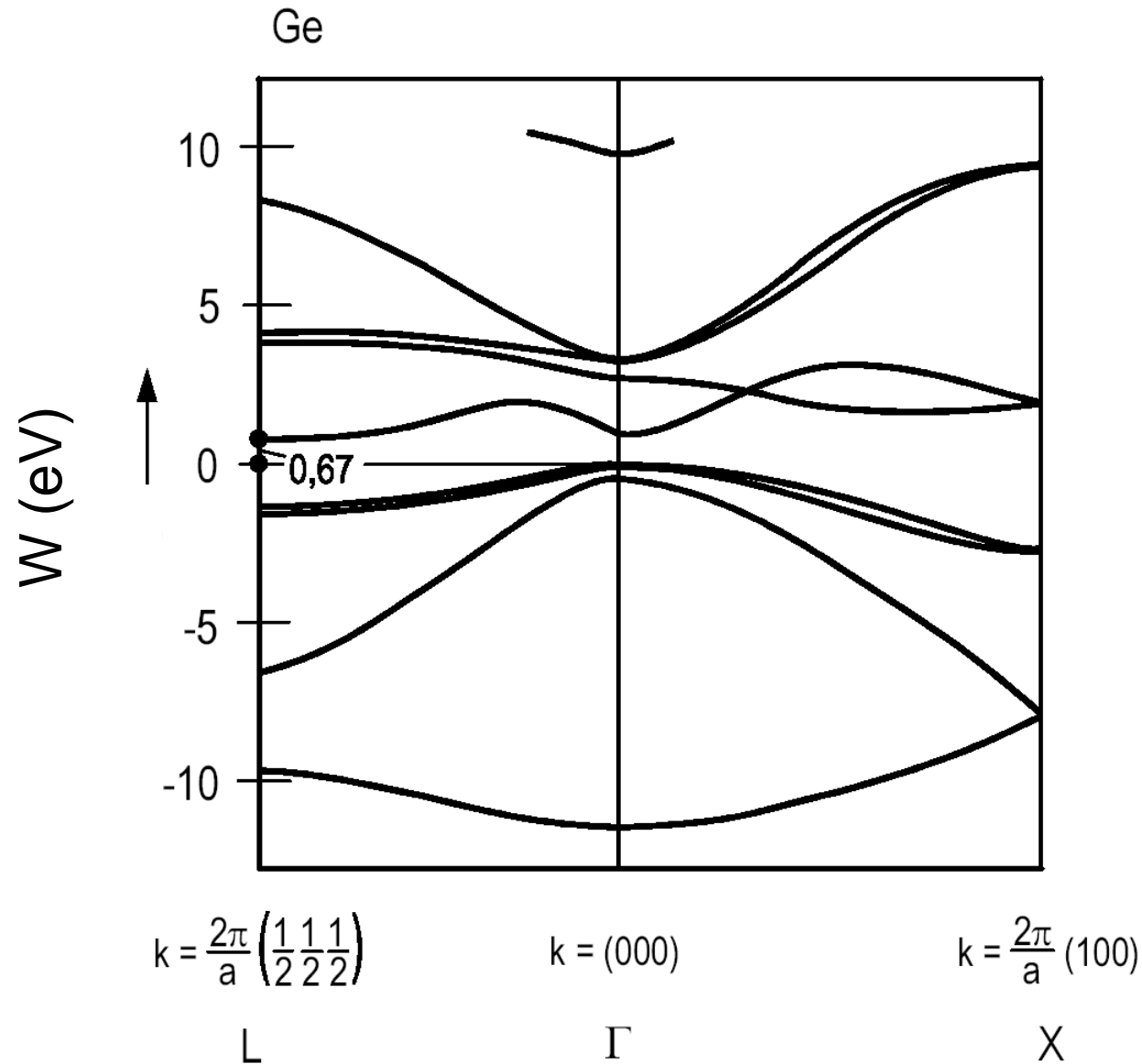
FE 7.13
SS 2016



Darstellung der Eigenzustände in Bandstrukturen. Gibt wieder die Abhängigkeit von ω (bzw. E) von k an. Allerdings handelt es sich nicht mehr um einzelne ebene Wellen sondern um komplexe Überlagerungen.

Beispiel: Bandstruktur von Germanium

FE 7.14
SS 2016



Beispiel: Bandstruktur von GaAs

FE 7.15
SS 2016

