

Übersicht

2. Festkörperelektronik

2.1 Kristallgitter und reziproke Gitter

2.2 Bandstrukturen

2.3 Debye-Länge

2. Festkörperelektronik

2.1 Kristallgitter und reziproke Gitter

Bravais-Gitter

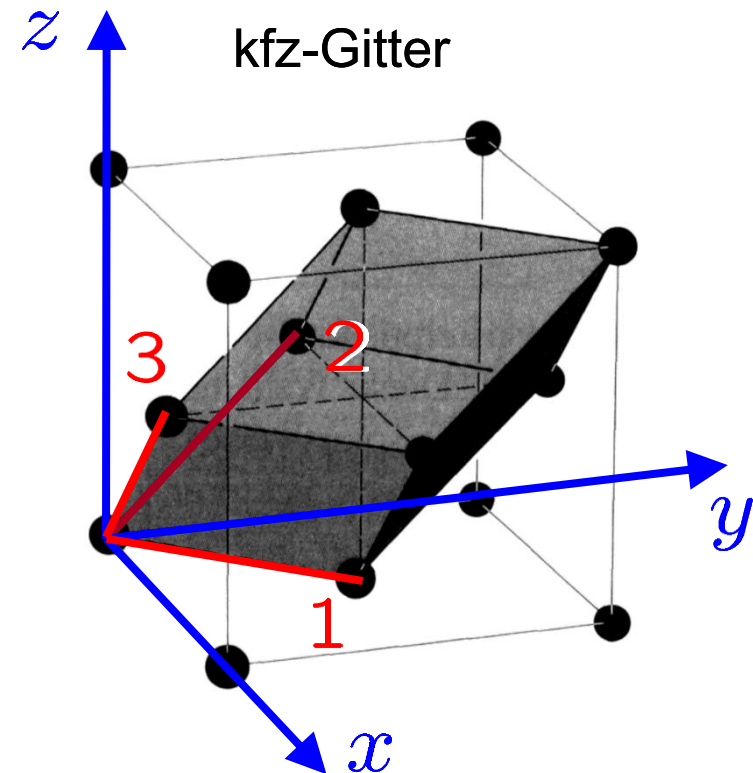
$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i$$

Basisvektoren \mathbf{a}_i im
allgemeinen nicht orthogonal!

Volumen der primitiven Einheitszelle:
Spatprodukt

$$V = \mathbf{a}_1 (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$$

$$V = \frac{1}{4} a^3$$



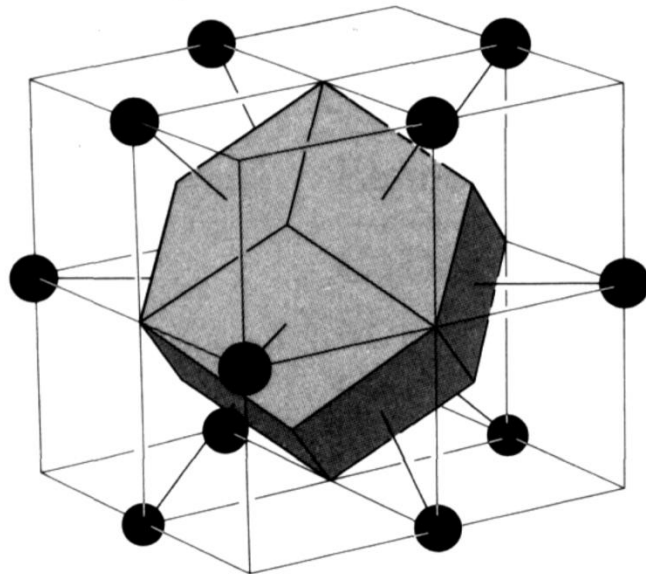
N. W. Ashcroft, N. D. Mermin: Solid State Physics, Holt, Rinehart & Winston, New York 1976

2. Festkörperelektronik

2.1 Kristallgitter und reziproke Gitter

Primitive Einheitszelle: Wigner-Seitz

kfz-Gitter



$$V = \frac{1}{4}a^3$$

Kristallstrukturen

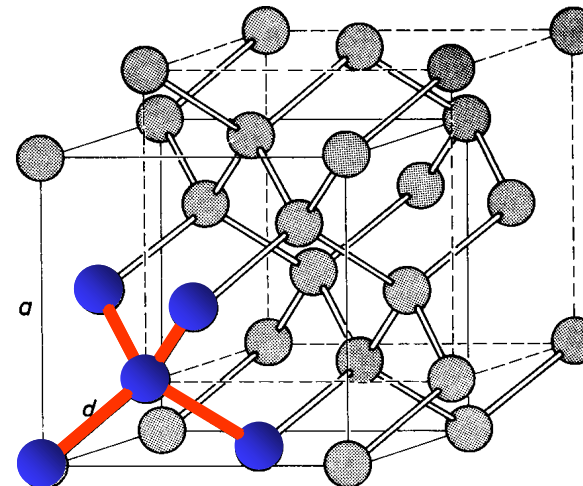
Mathematische Abstraktion

$$\text{Kristallstruktur} = \text{Gitter} + \text{Basis}$$

Material

Atom, Atomgruppe

Beispiel: Diamantgitter = kp-Gitter mit 4-atomiger Basis (Tetraeder)



2. Festkörperelektronik

2.1 Kristallgitter und reziproke Gitter

Reziprokes Gitter: Periodizität darstellen

1. Form $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = m \cdot 2\pi$

2. Form $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \cdot \delta_{ij}$

3. Form $\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{V_e}(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$

$$\mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{V_e}(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)$$

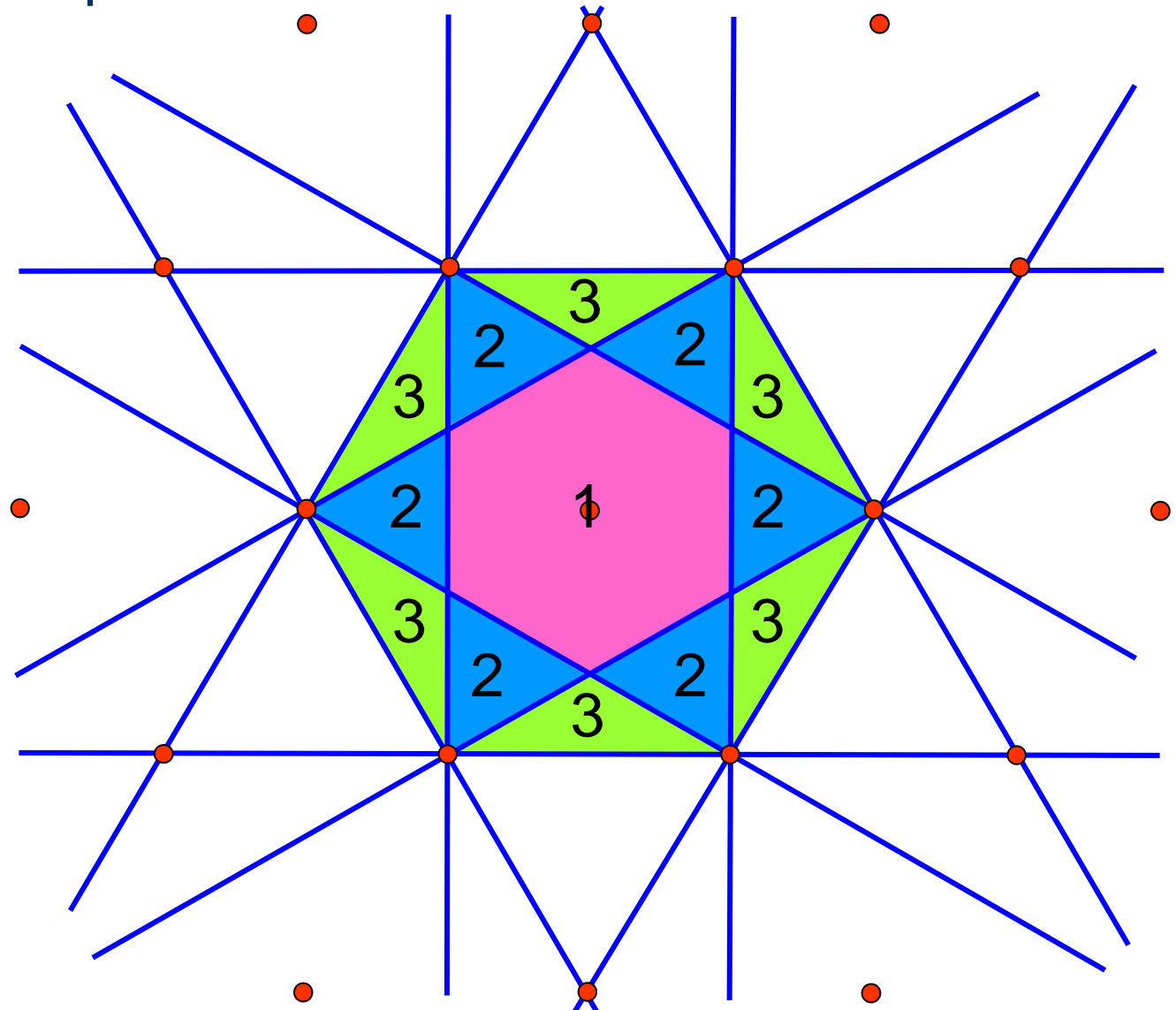
$$\mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{V_e}(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)$$

2. Festkörperelektronik

2.1 Kristallgitter und reziproke Gitter

Brillouin-Zonen

Beispiel:
Hexagonales
Punktgitter

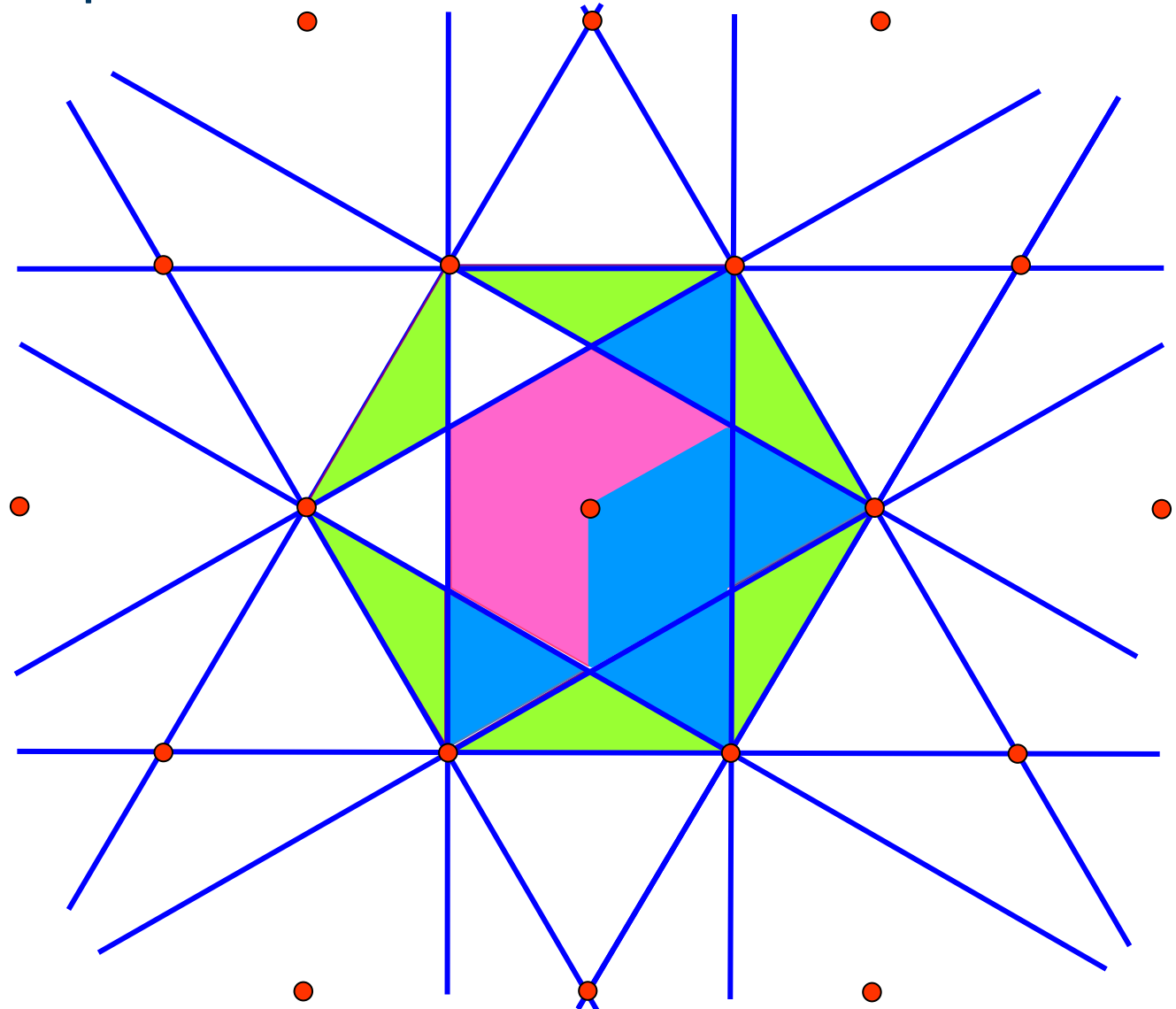


2. Festkörperelektronik

2.1 Kristallgitter und reziproke Gitter

Brillouin-Zonen

Beispiel:
Hexagonales
Punktgitter

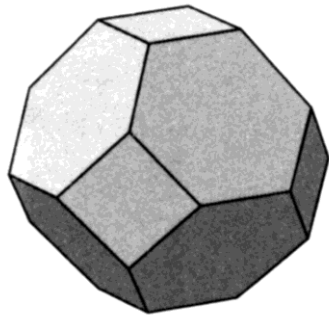


2. Festkörperelektronik

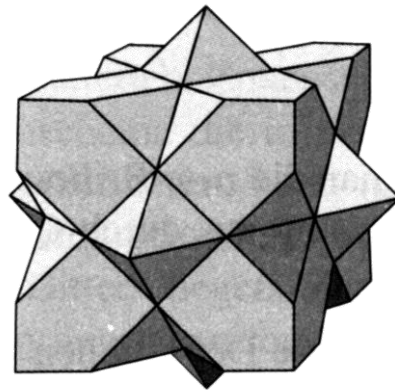
2.1 Kristallgitter und reziproke Gitter

Brillouin-Zonen

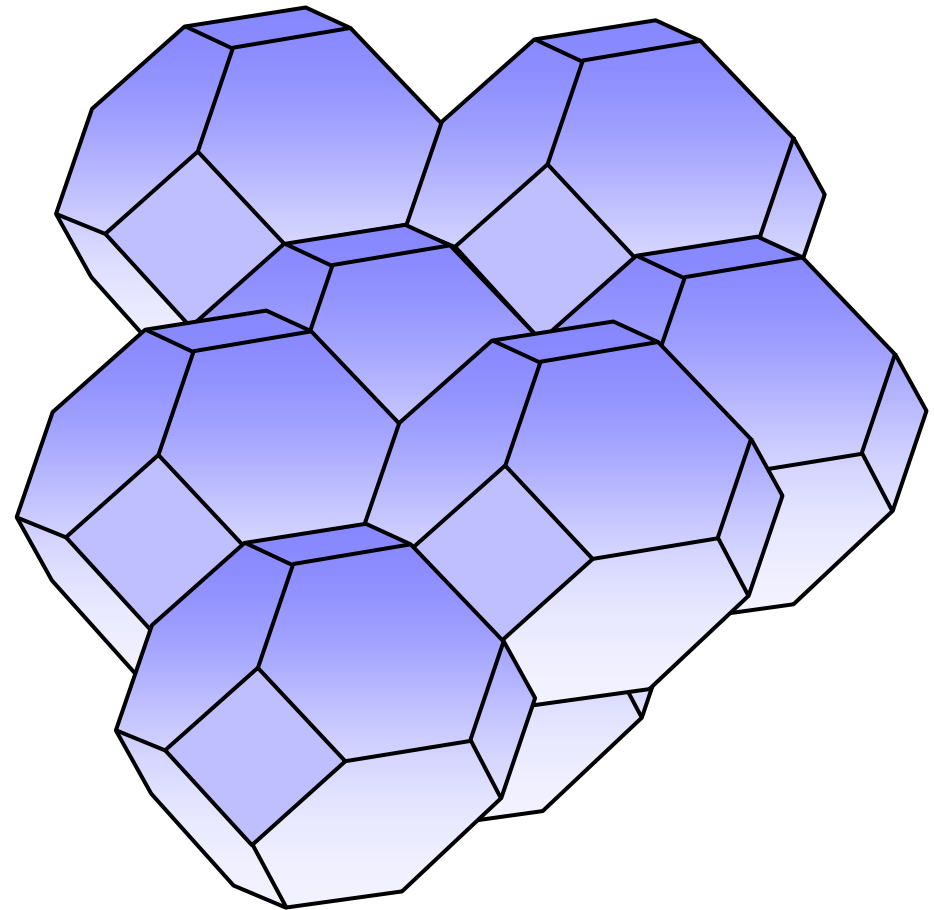
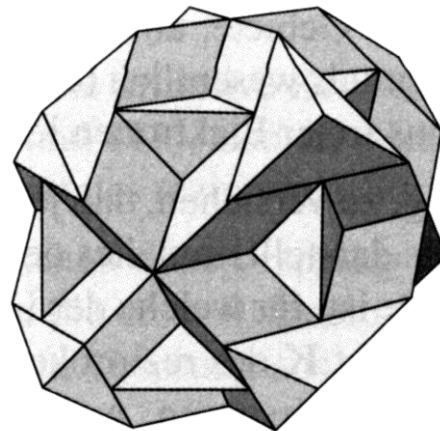
Oberfläche der
1. Brillouin-Zone
eines kfz-Gitters



2. Brillouin-Zone



3. Brillouin
-Zone



1. Brillouin-Zone eines kfz-Gitters
periodisch aneinander gefügt

2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Schrödinger-Gleichung

$$\mathcal{H}\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

Freie Elektronen $V(\mathbf{r}) = 0 \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y L_z}} \exp(j\mathbf{k}\mathbf{r}) \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad k_i L_i = n_i \cdot 2\pi$$

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = 2\pi \left[\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z} \right]$$

Die k_i ersetzen im Festkörper die 3 Bahnquantenzahlen des Atoms.

Die Spinquantenzahl bleibt erhalten.

N. W. Ashcroft, N. D. Mermin: Solid State Physics, Holt, Rinehart & Winston, New York 1976

2. Festkörperelektronik

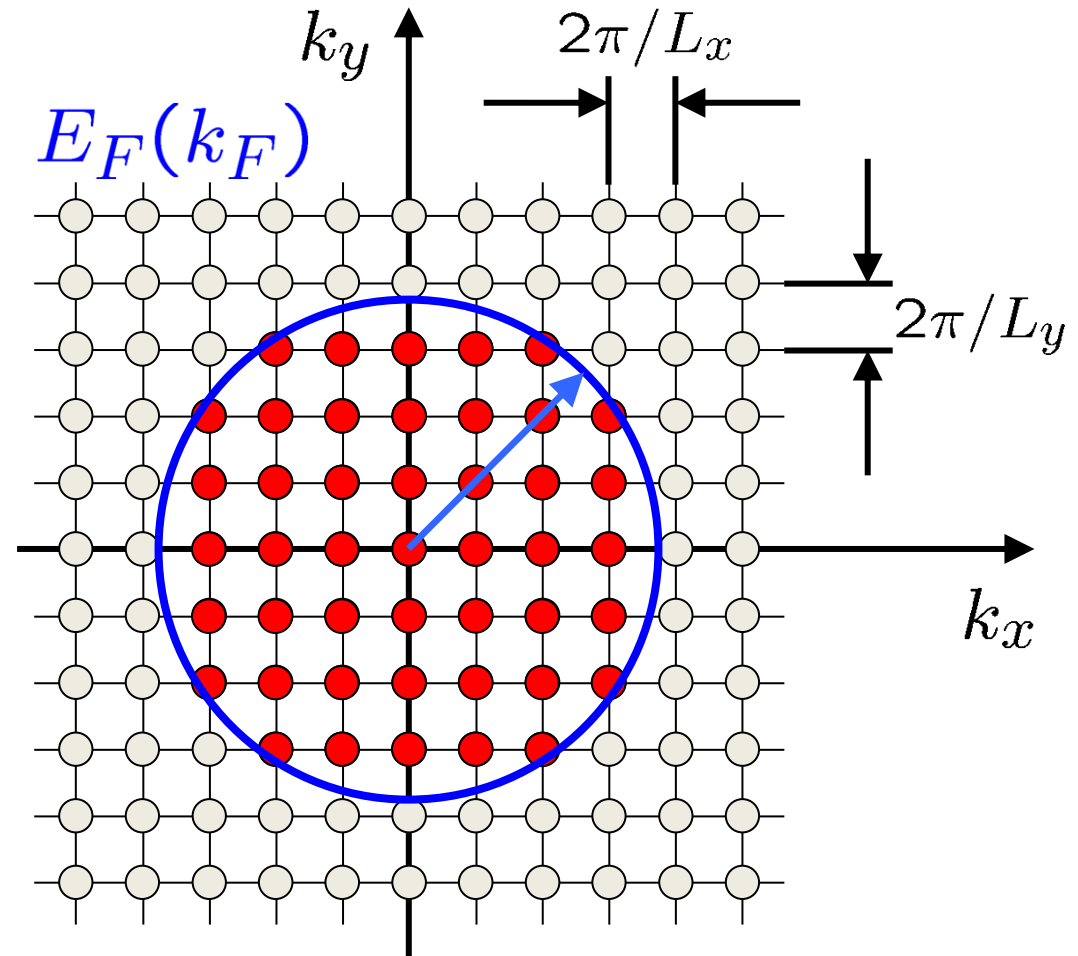
2.2 Bandstrukturen

Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned}
 E_F^0 &= \frac{p_F^2}{2m} = \frac{m}{2} v_F^2 \\
 &= \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}
 \end{aligned}$$

Volumen der Fermi-Kugel V_{k_F}
mit Radius k_F :

$$V_{k_F} = \frac{4\pi}{3} k_F^3 = \frac{4\pi}{3} \frac{(2mE_F^0)^{3/2}}{\hbar^3}$$



2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Flächen konstanter Energie

Anzahl Z der Zustände je Kugelvolumen V_k , also Volumendichte N_k innerhalb der Kugel $E = \text{const}$ im \mathbf{k} -Raum, beträgt einschließlich Spin:

$$Z = \frac{\text{eingeschlossenes Volumen im } \mathbf{k}\text{-Raum}}{\text{Volumenbedarf eines Zustands}} \cdot 2 = \frac{2V_k}{(2\pi)^3/V}$$

$$V_k = \frac{4\pi k^3}{3} = \frac{4\pi (2mE)^{3/2}}{3\hbar^3}$$

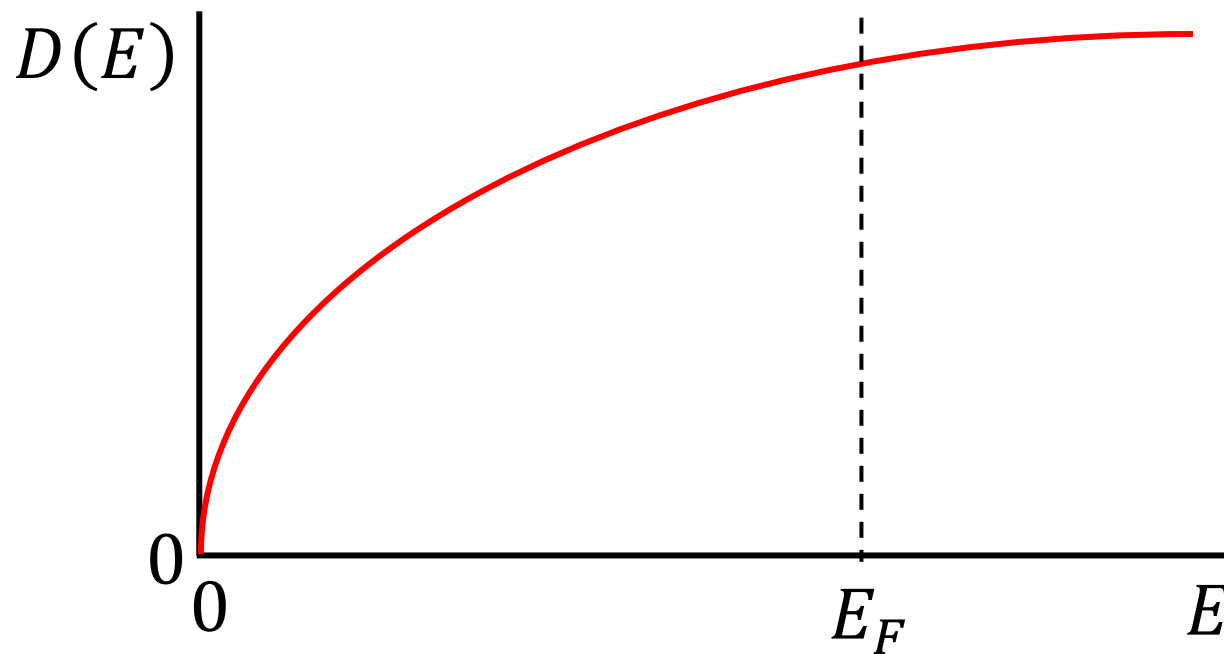
$$N_k = \frac{Z}{V} = \frac{2V_k}{(2\pi)^3} = \frac{k^3}{3\pi^2} = \frac{(2mE)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}$$

2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Zustandsdichte freier Elektronen

$$D(E) = \frac{\partial N_k}{\partial E} = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot E^{1/2}$$



2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Schrödinger-Gleichung für Kristallelektronen

$$\mathcal{H}\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

Bloch-Ansatz: Alle physikalisch messbaren Größen sind gitterperiodisch

$$\psi(\mathbf{r}) \cdot \psi^*(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 = |\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R})|^2 \quad \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi(\mathbf{r})e^{j\mathbf{k}\mathbf{R}}$$

Phasenfaktor im Bloch-Ansatz: $|e^{j\mathbf{k}\mathbf{R}}| = 1$

Born-von Karman Randbedingungen: $\psi(\mathbf{r} + N_i\mathbf{a}_i) = \psi(\mathbf{r})$

Daraus folgt: $e^{j\mathbf{k}(N_i\mathbf{a}_i)} = 1$

$$\Rightarrow N_i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) = 2\pi \cdot m_i$$

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \cdot \mathbf{g}_i = \sum_{i=1}^3 m_i \cdot \frac{\mathbf{g}_i}{N_i}$$

2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Volumenbedarf eines Zustands


Parallelepiped aus \mathbf{g}_i/N_i

$$\Delta \mathbf{k} = \frac{1}{N_1 N_2 N_3} \mathbf{g}_1 (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3) = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

Das Volumen der 1. Brillouin-Zone enthält gerade $2N$ Einelektronen-Zustände.

Lösung durch Fourier-Entwicklung aller Funktionen nach ebenen Wellen führt auf eine modifizierte Schrödinger-Gleichung. Im reziproken Gitter \mathbf{G} gilt damit die Eigenwertgleichung für die Energien $E_{\mathbf{k}}$. Für jeden \mathbf{G} ergibt sich eine Gleichung:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2 - E_{n\mathbf{k}} \right] c_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} + \sum_{(\mathbf{G}')} V_{\mathbf{G}'-\mathbf{G}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{G}'} = 0$$



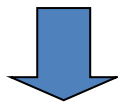
 (\mathbf{G})

2. Festkörperelektronik

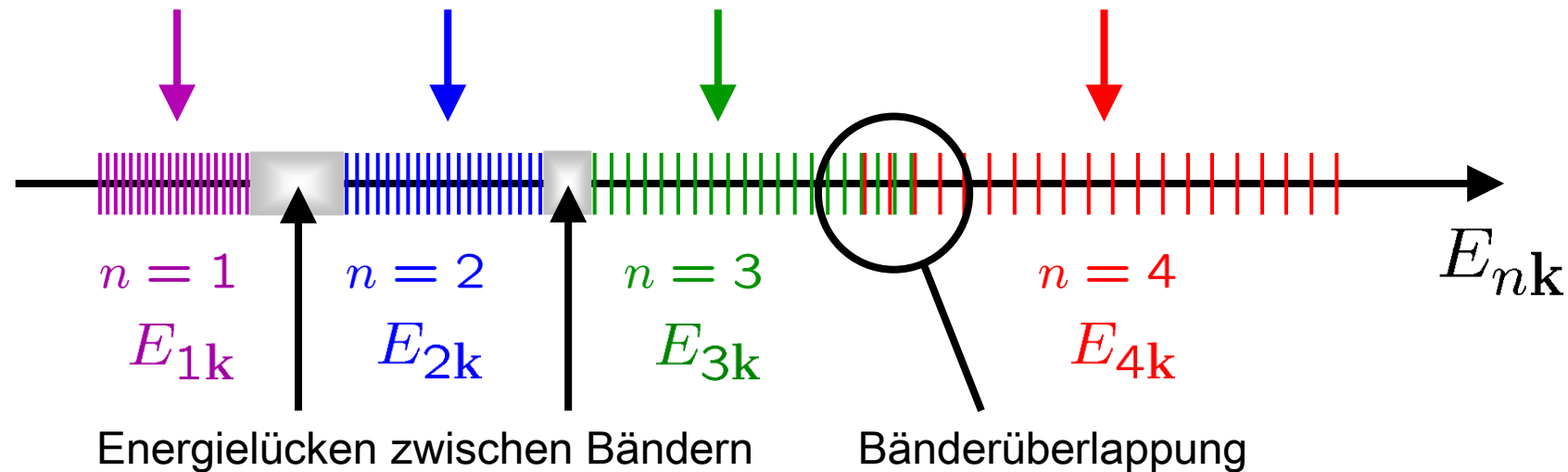
2.2 Bandstrukturen

Schrödinger-Gleichung

\mathbf{k} -Raum: N quasi-kontinuierlich verteilte \mathbf{k} mit je 2 Zuständen (Spin)




N quasi-kontinuierlich verteilte $E_{n\mathbf{k}}$ mit je 2 Zuständen: **Bänder**



2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Folgerungen aus dem Bloch-Ansatz

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{(\mathbf{G})} c_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} \cdot e^{j(\mathbf{k}-\mathbf{G})\mathbf{r}}$$


Wellen mit sehr verschiedenen Wellenzahlvektoren

$\hbar\mathbf{k}$ kann nicht mehr als Impuls interpretiert werden. Neue Bezeichnung:

Kristallimpuls oder Quasiimpuls

$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ repräsentiert die drei Bahnquantenzahlen.

2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Eigenwertgleichung für ein leeres Gitter (empty lattice), also freie Elektronen

Leeres Gitter: $V(\mathbf{r}) = 0$ also $V_{\mathbf{G}} = 0$

Eigenwertgleichung:
$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2 - E_{n\mathbf{k}} \right] c_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0$$

Nichttriviale Lösung:
$$E_{n\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2$$

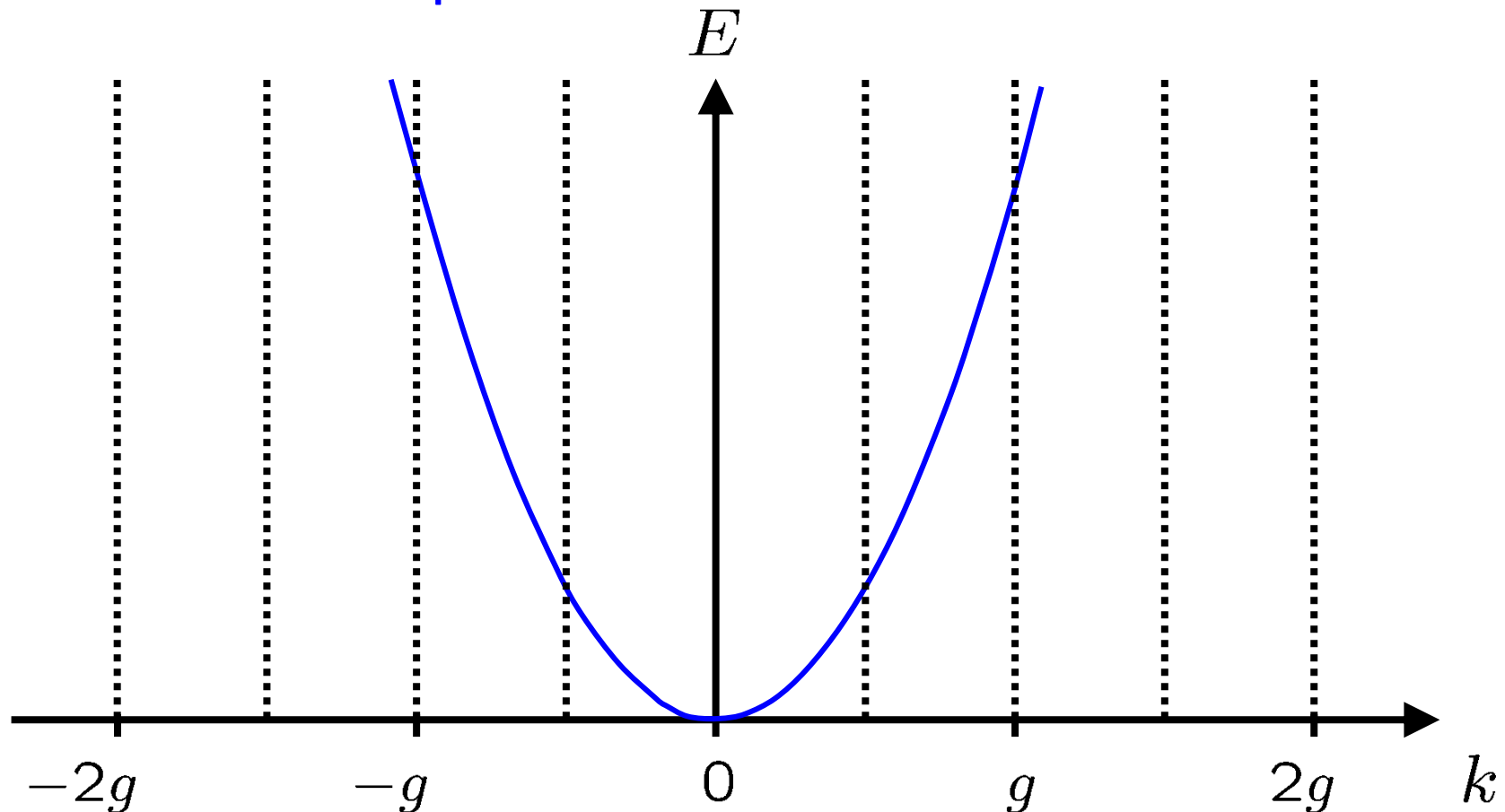
"Sommerfeld-Parabeln" mit Scheitelpunkten an allen \mathbf{G} .

$|\mathbf{k} - \mathbf{G}|$ ist der geometrische Abstand im \mathbf{k} -Raum.

2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Eindimensionales Beispiel

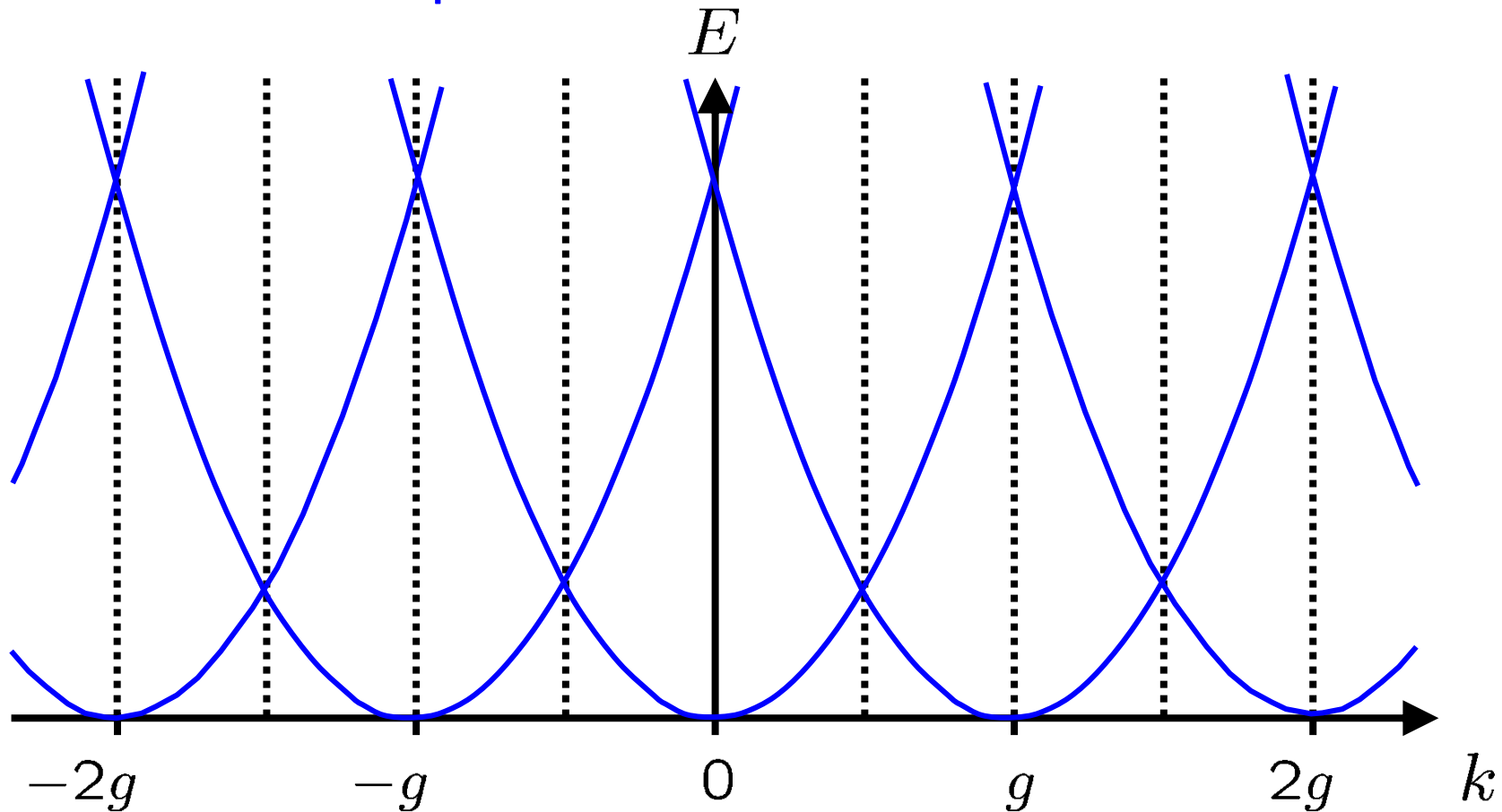


erweitertes Zonenschema

2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Eindimensionales Beispiel

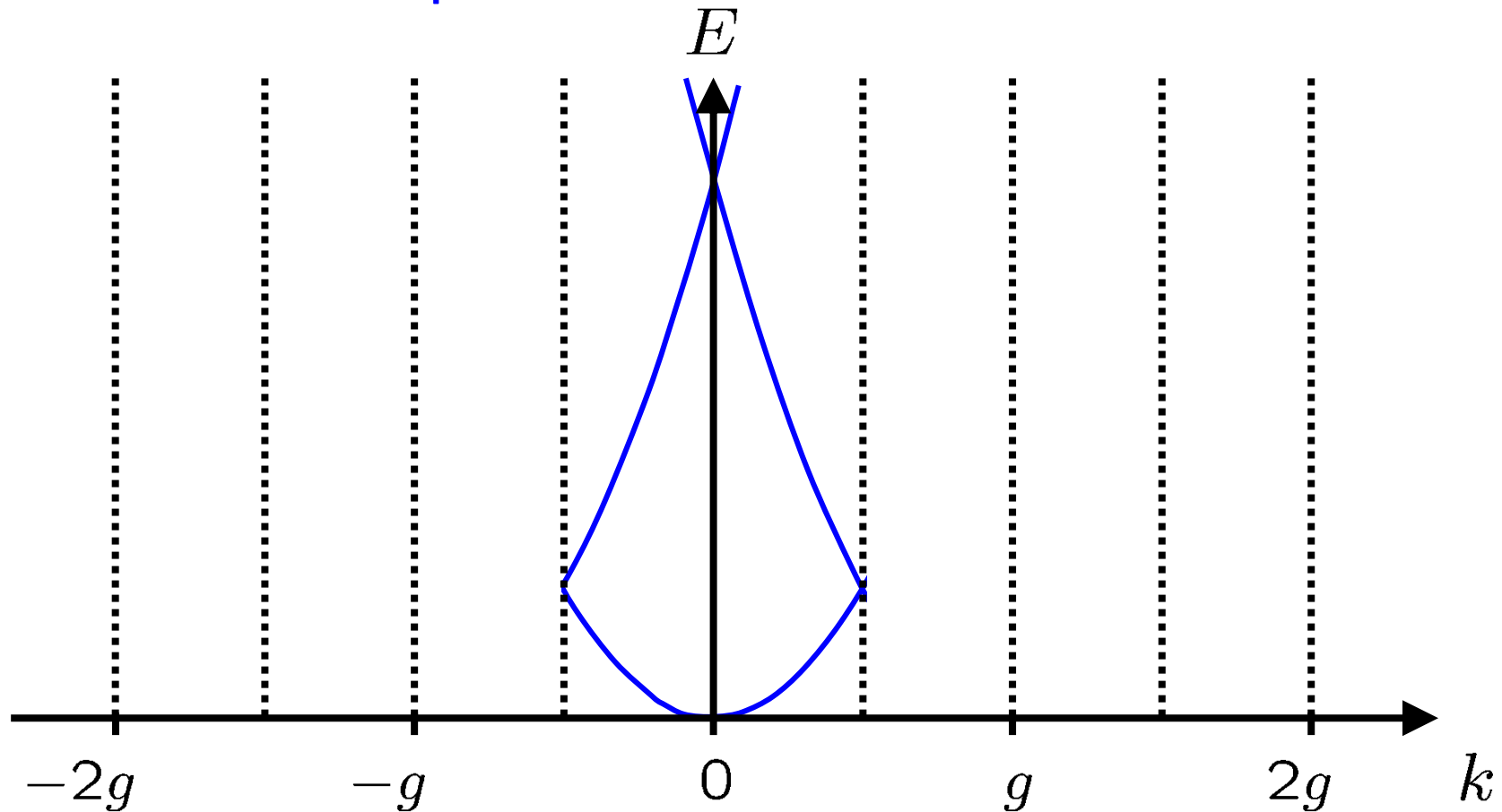


periodisches Zonenschema

2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Eindimensionales Beispiel

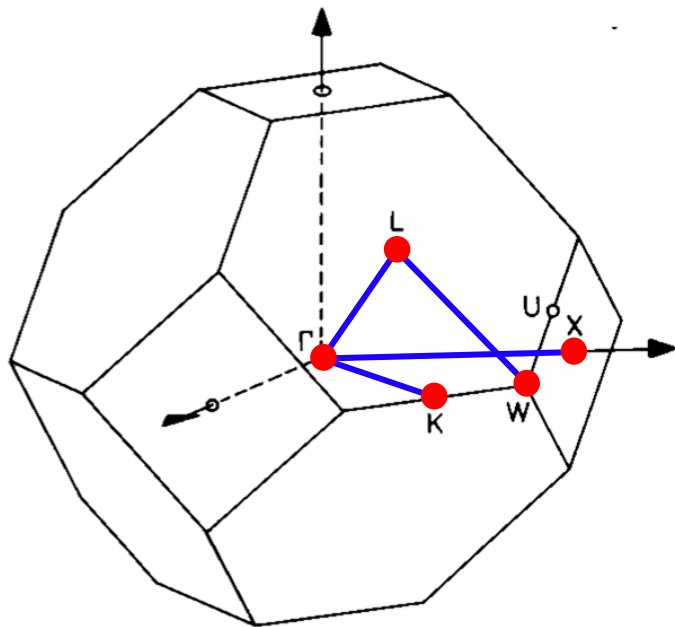


reduziertes Zonenschema

2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Symmetrien im reziproken Gitter des kfz-Gitters



Würfelkante: $\frac{4\pi}{a} = 2k_0$

Linien:

$$\Gamma - X = \Delta$$

$$\Gamma - L = \Lambda$$

$$L - W = Q$$

$$\Gamma - K = \Sigma$$

Punkte:

$$\Gamma = (0, 0, 0)$$

$$X = (1, 0, 0)k_0$$

$$L = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)k_0$$

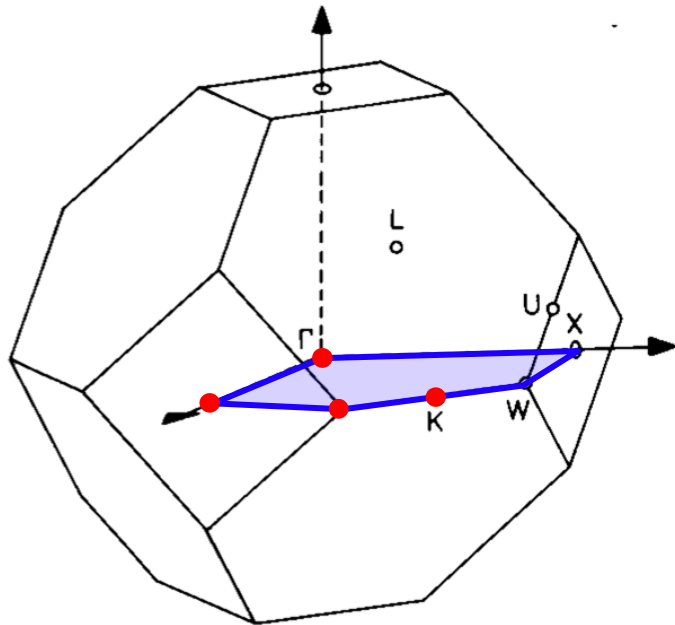
$$W = \left(1, \frac{1}{2}, 0\right)k_0$$

$$K = \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0\right)k_0$$

2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

Symmetrien im reziproken Gitter des kfz-Gitters



$$\Gamma = (0, 0, 0)$$

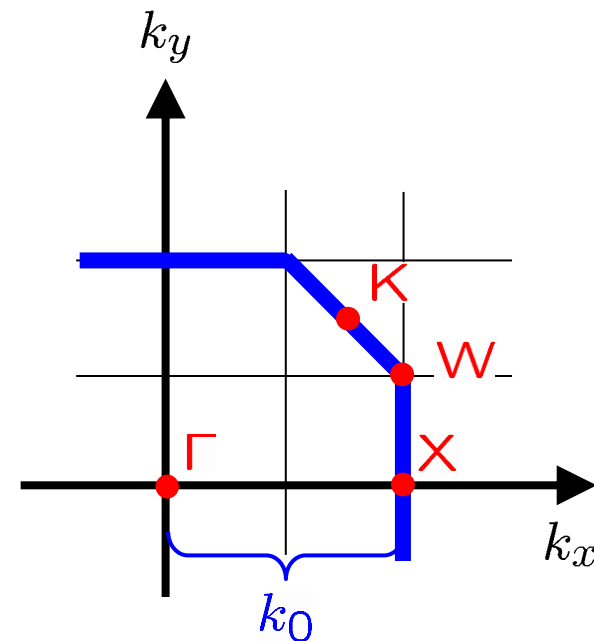
$$X = (1, 0, 0)k_0$$

$$L = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)k_0$$

$$W = \left(1, \frac{1}{2}, 0\right)k_0$$

$$K = \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0\right)k_0$$

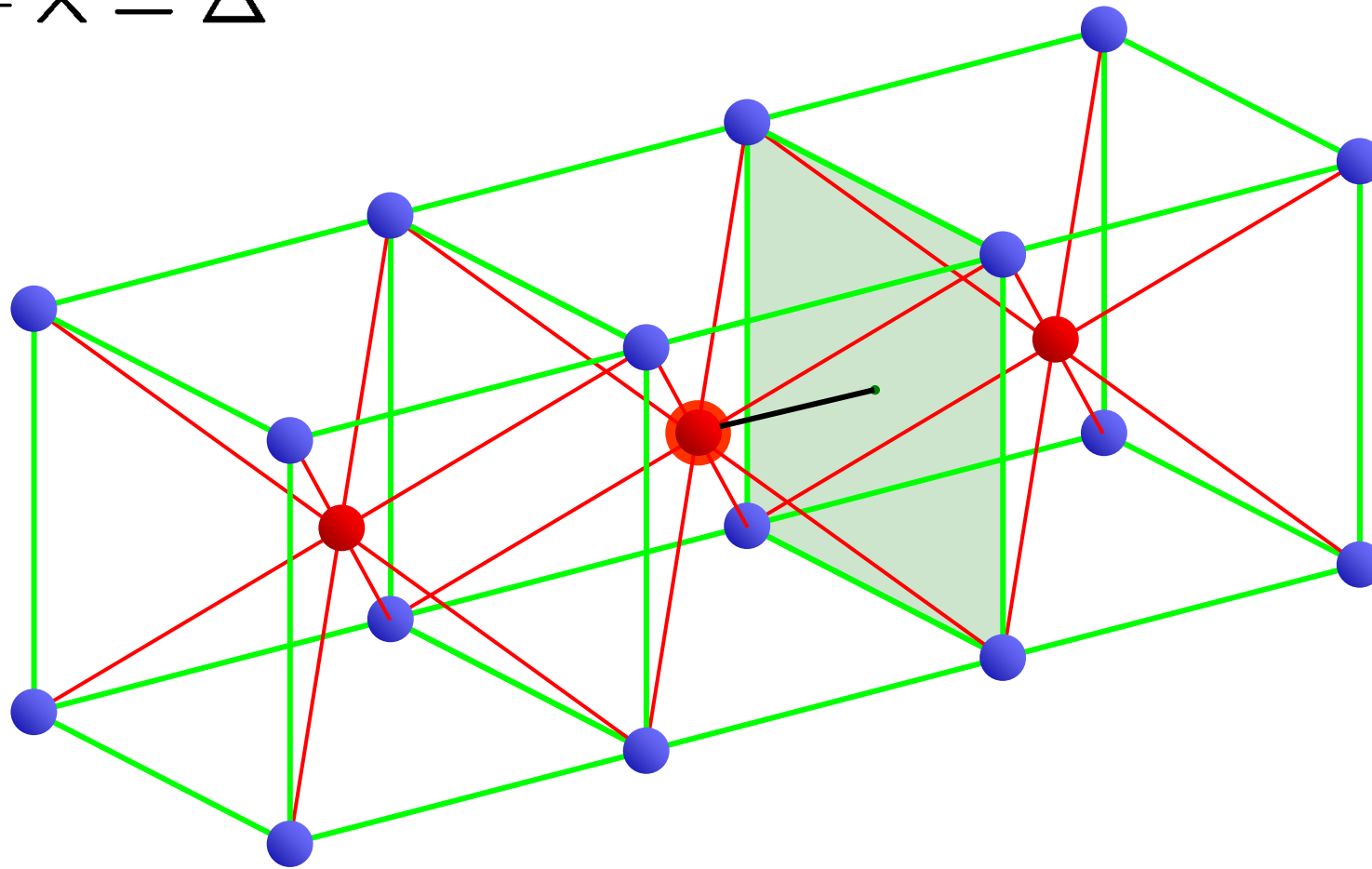
Ebene $k_z = 0$:



2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

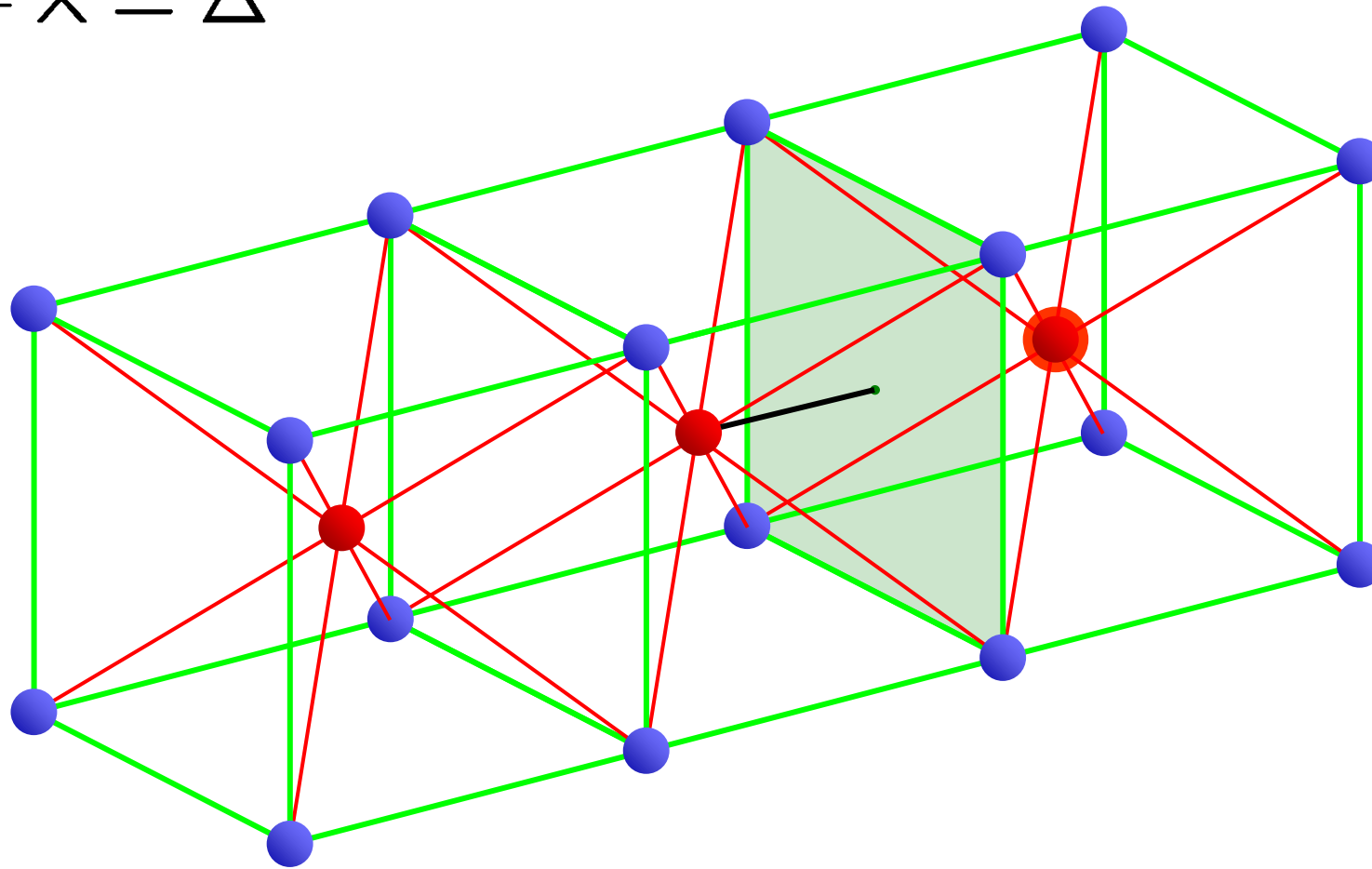
$$\Gamma - X = \Delta$$



2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

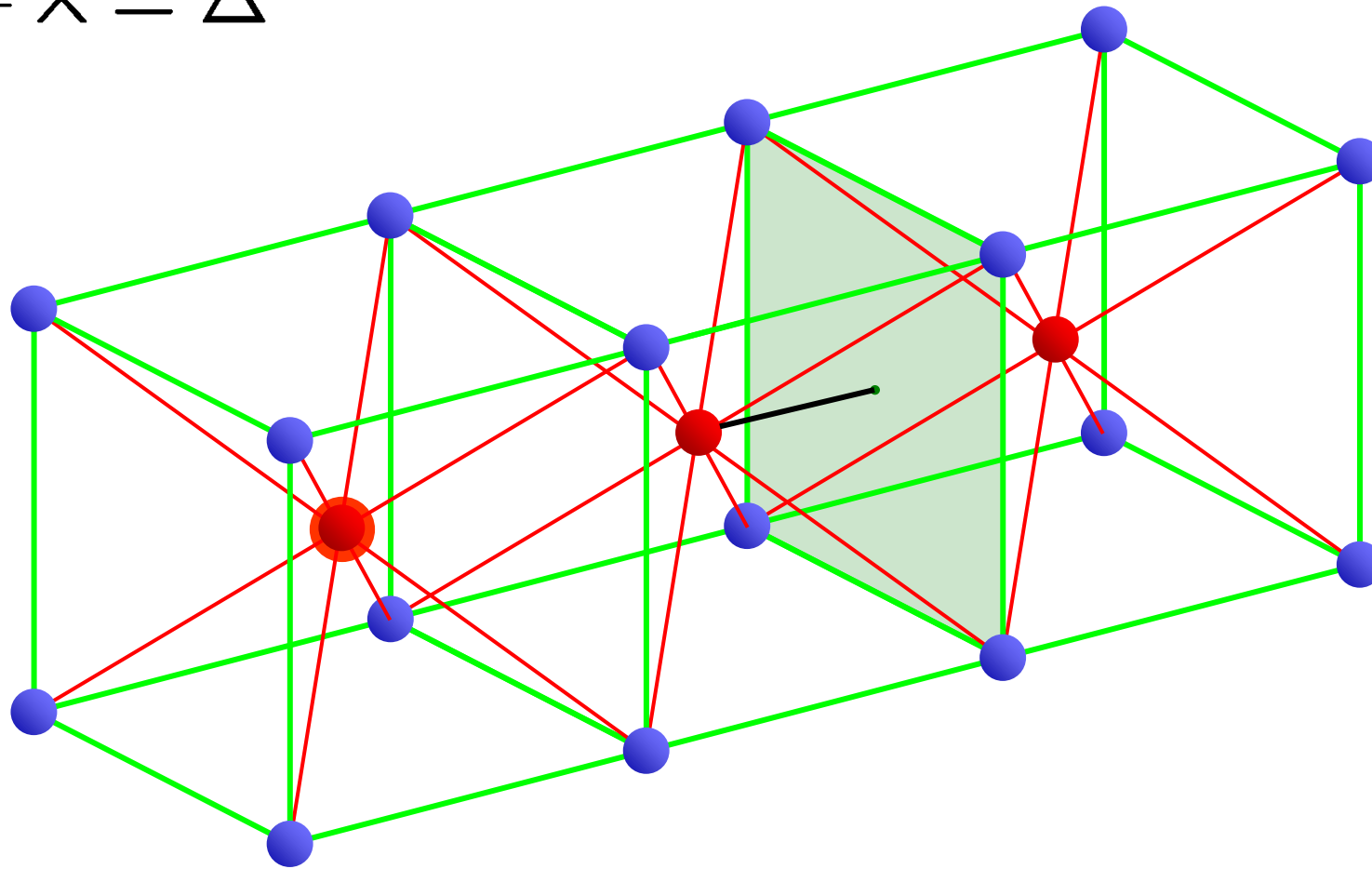
$$\Gamma - X = \Delta$$



2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

$$\Gamma - X = \Delta$$



2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

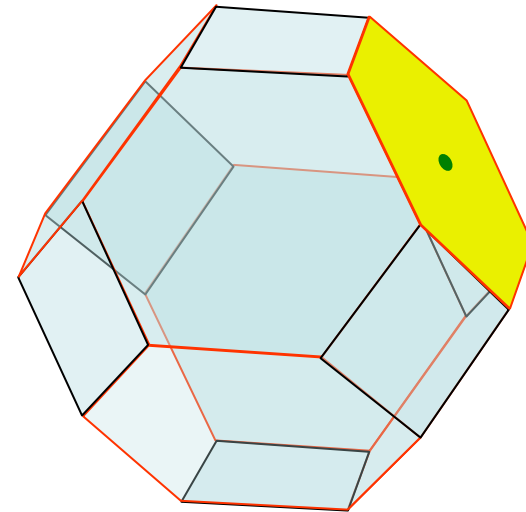
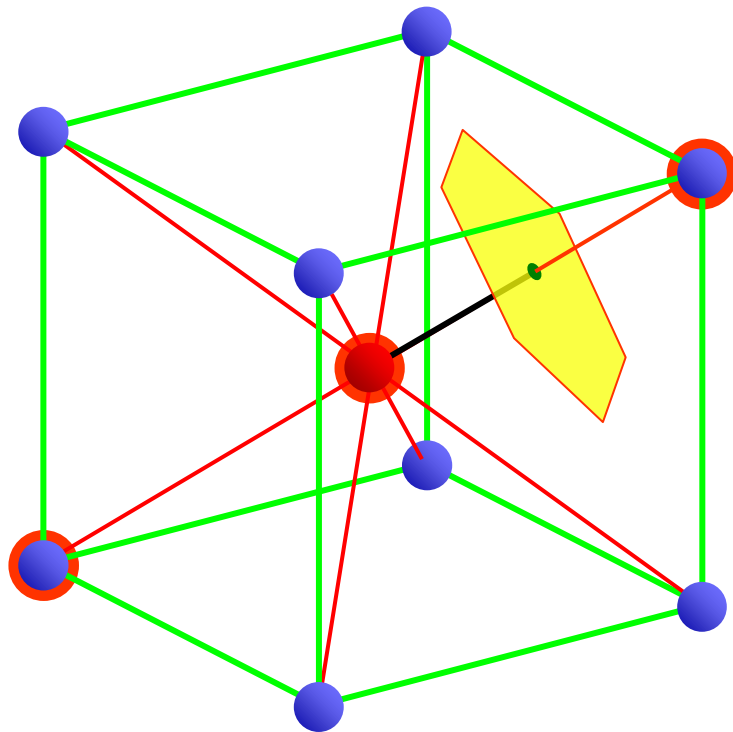


Elektronen pro Einheitszelle

2. Festkörperelektronik

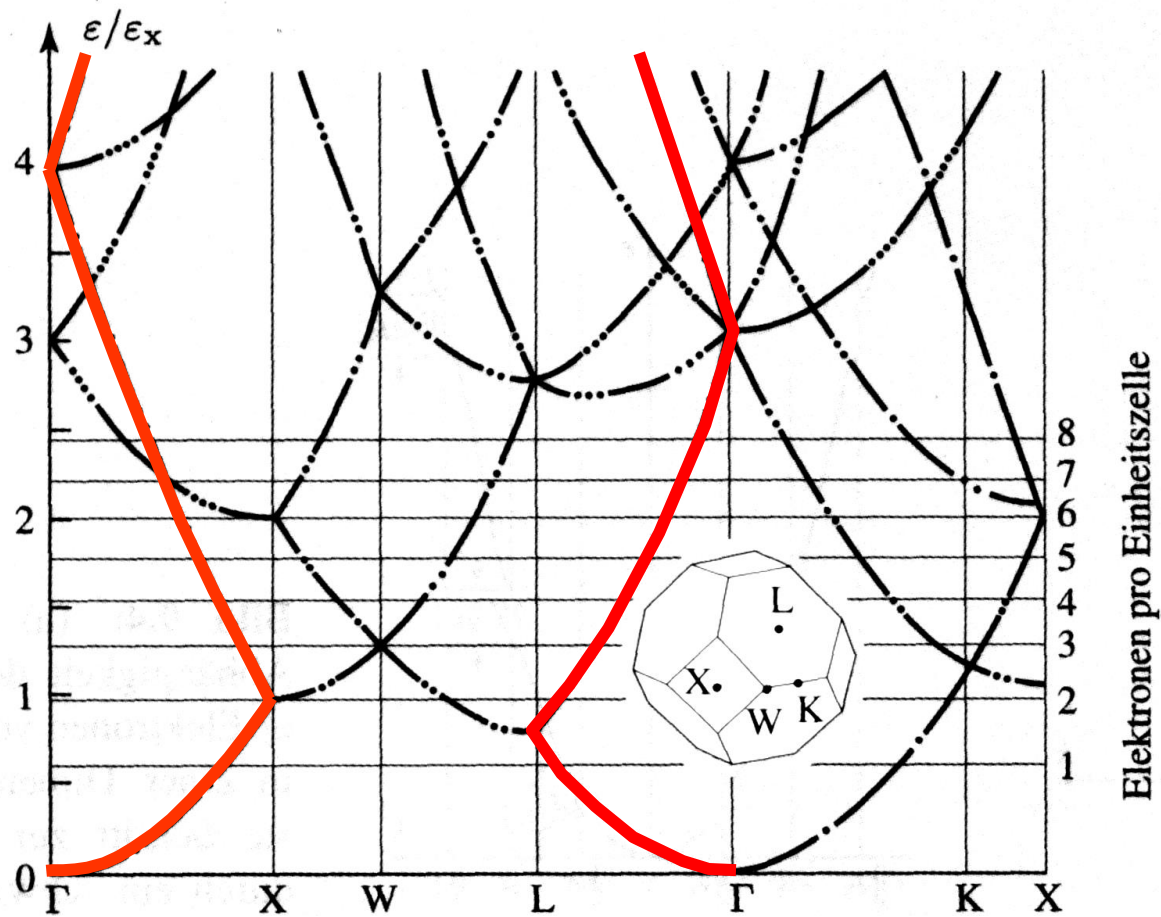
2.2 Bandstrukturen

$$\Gamma - L = \Lambda$$



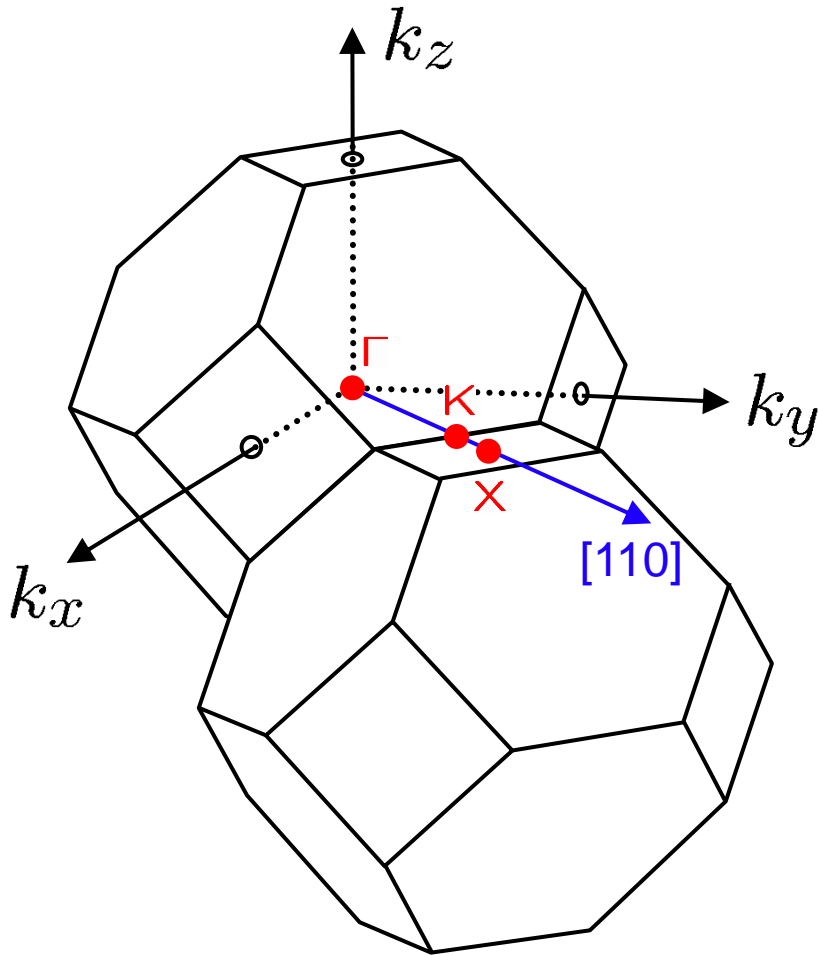
2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

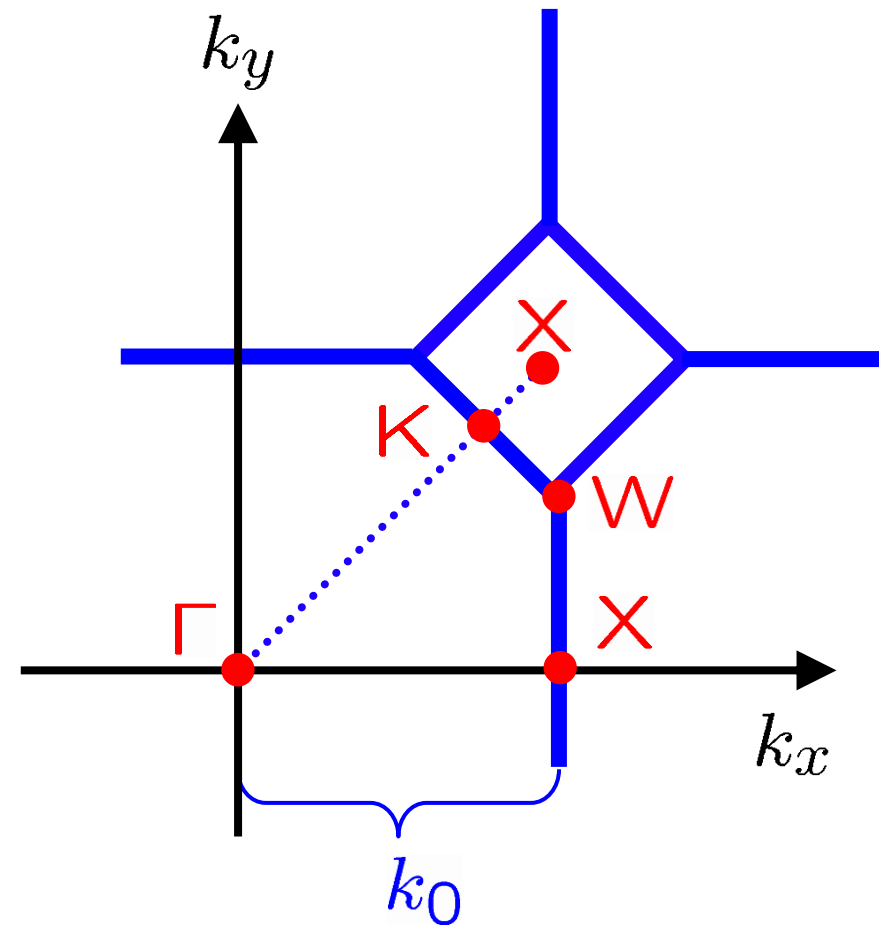


2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen



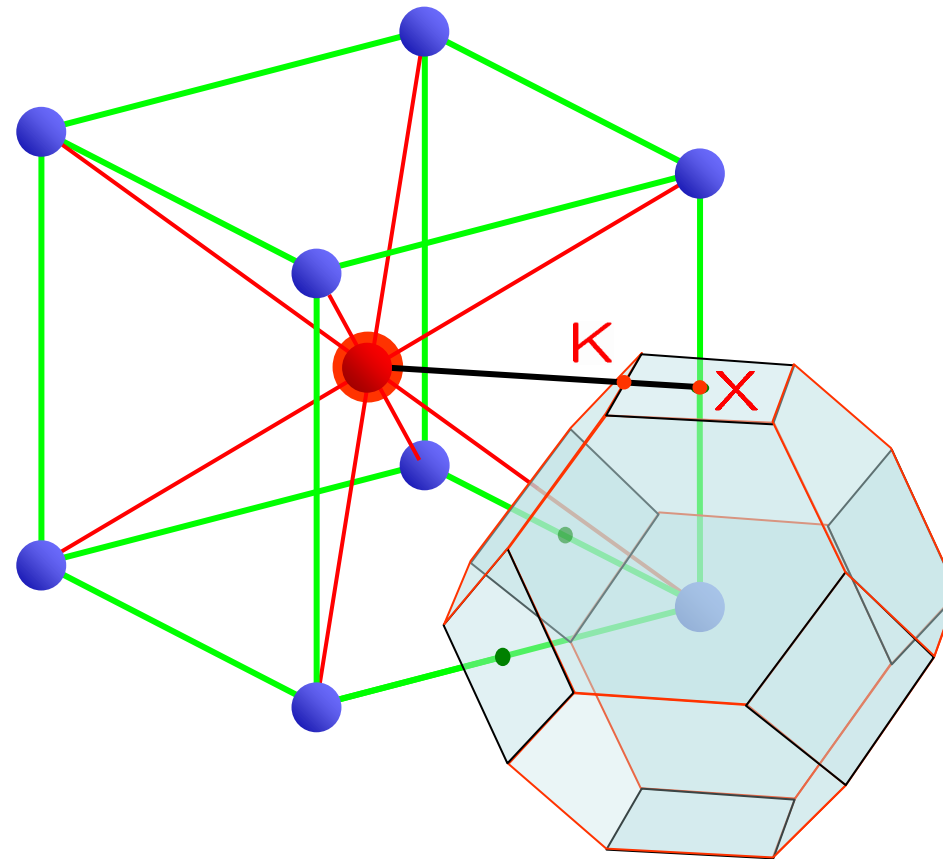
Ebene $k_z = 0$:



2. Festkörperelektronik

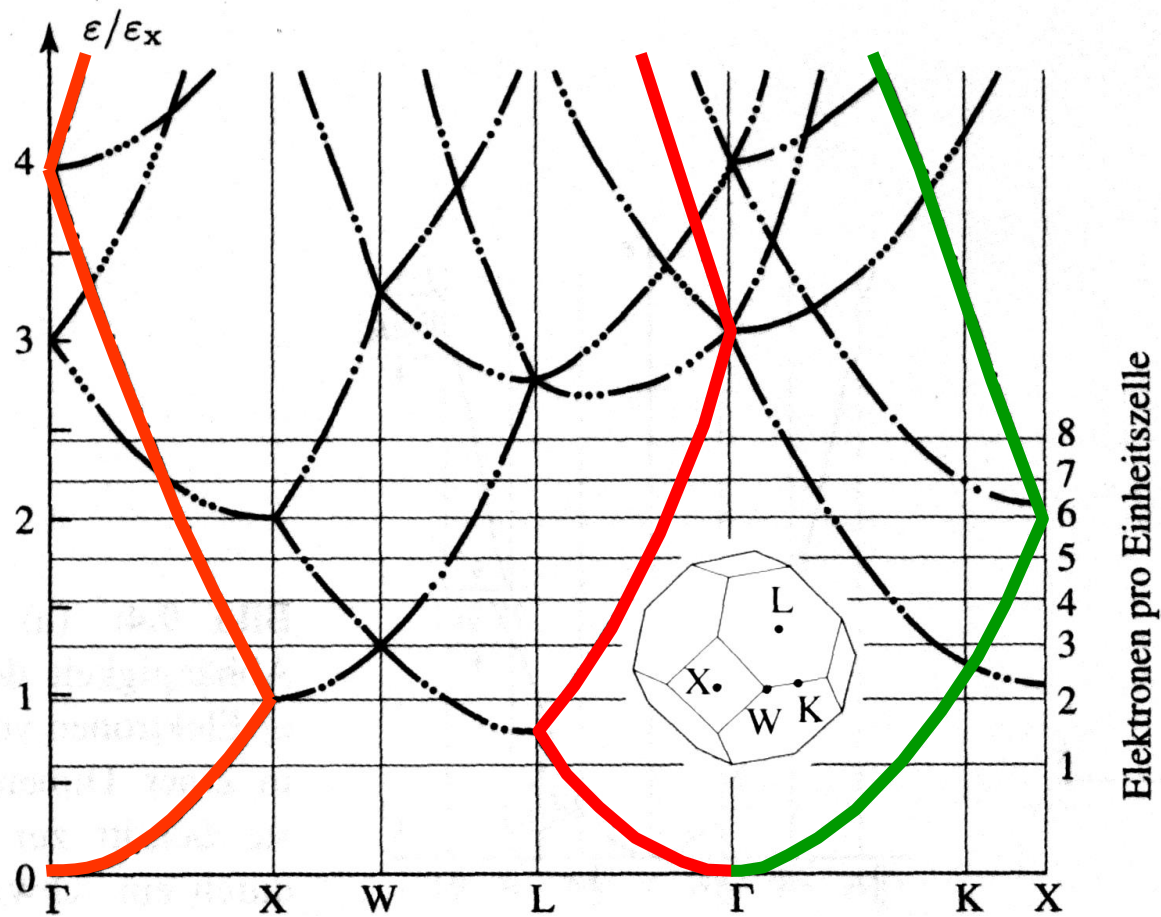
2.2 Bandstrukturen

$$\Gamma - K = \Sigma$$



2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

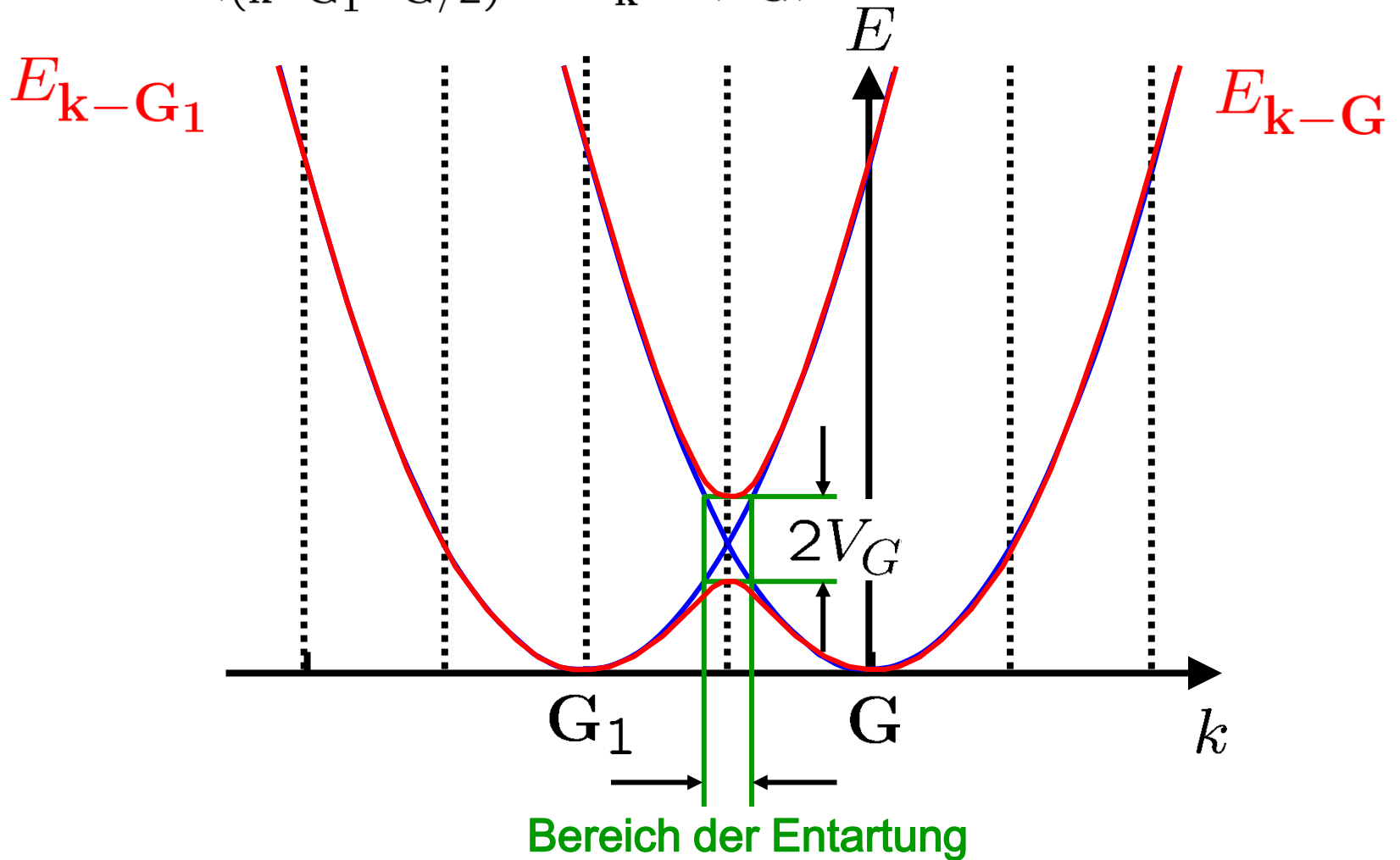


Elektronen pro Einheitszelle

2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

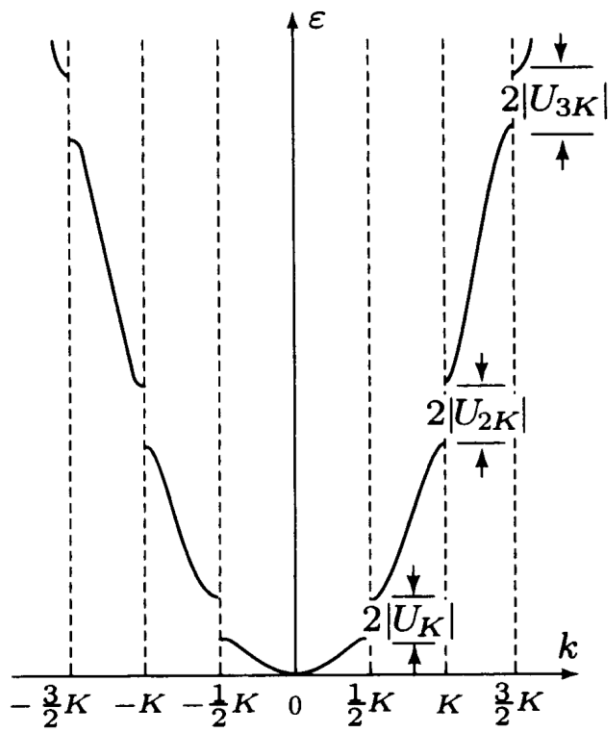
Energielücke $E|_{(k-G_1=G/2)} = E_{k'}^0 \pm |V_G|$



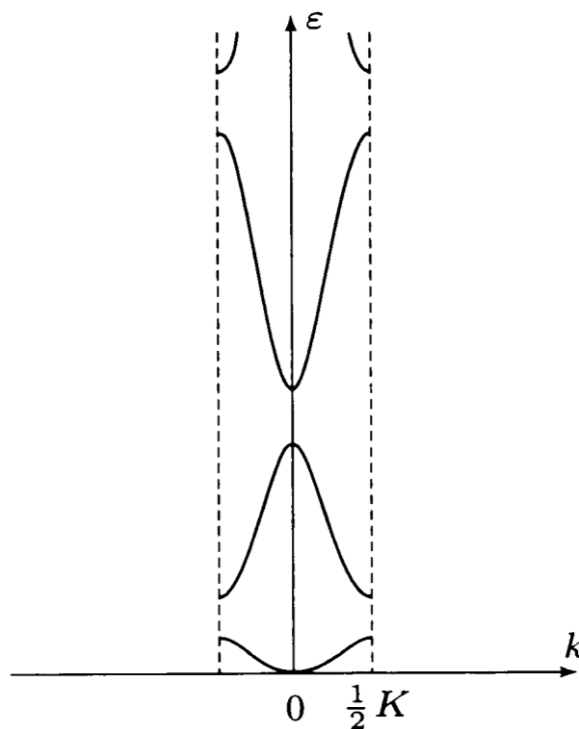
2. Festkörperelektronik

2.2 Bandstrukturen

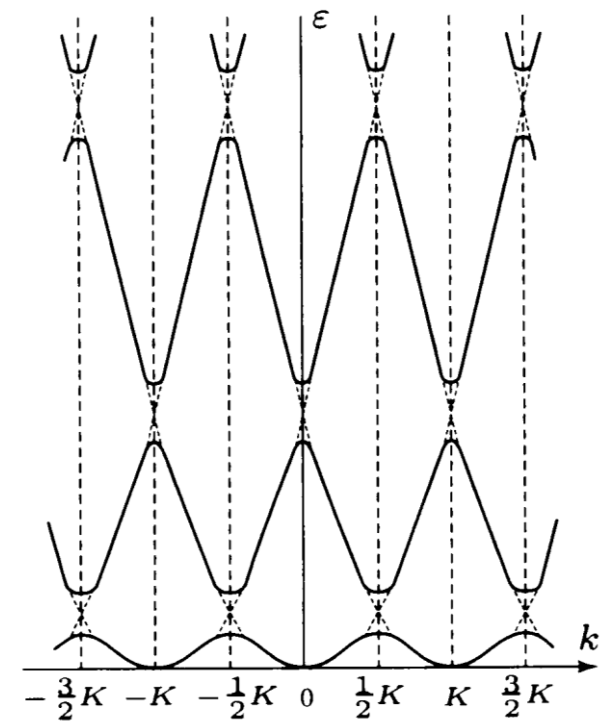
Zonenschema



erweitert



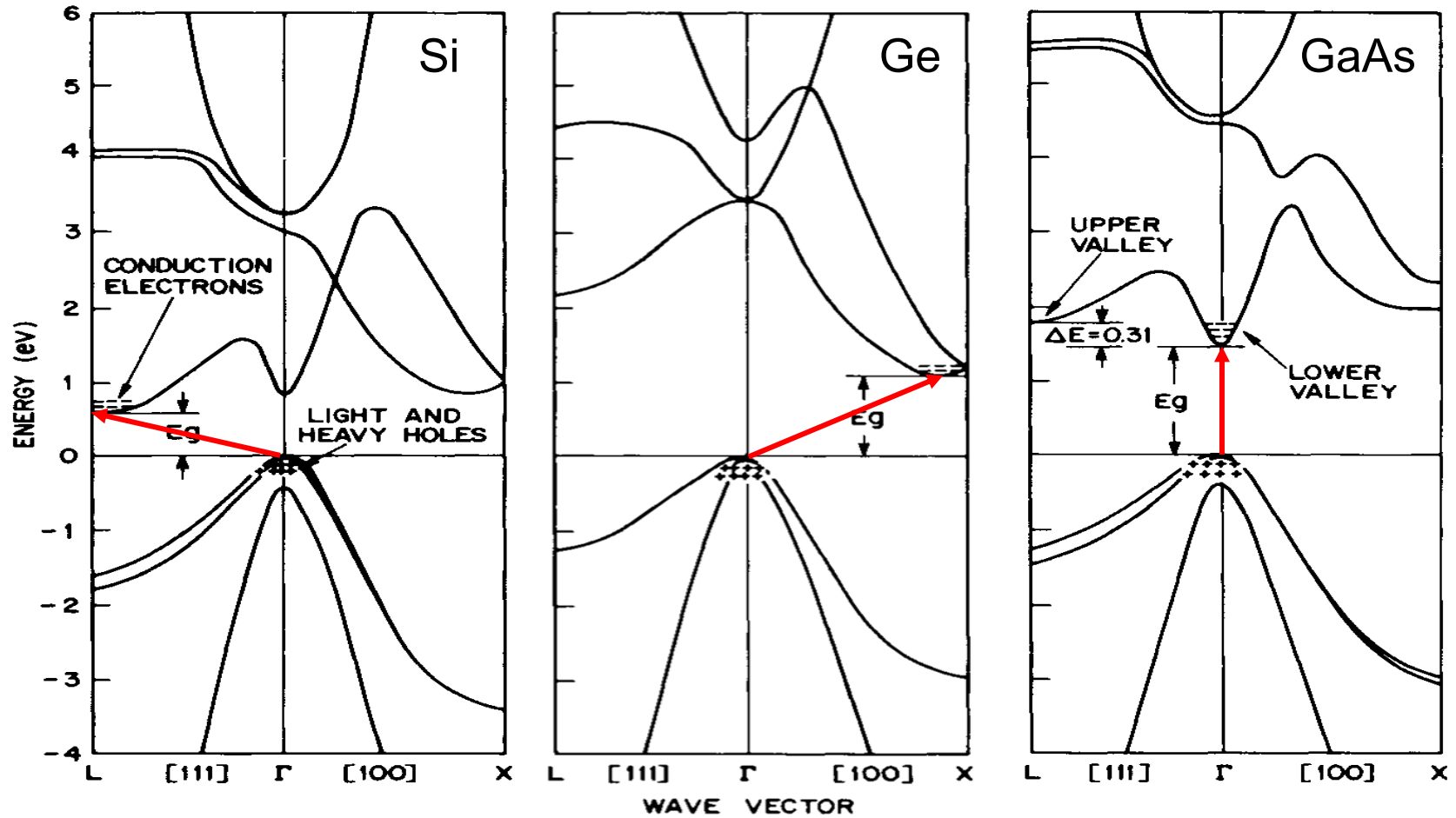
reduziert



periodisch

2. Festkörperelektronik

2.3 Halbleiter: Bandstruktur

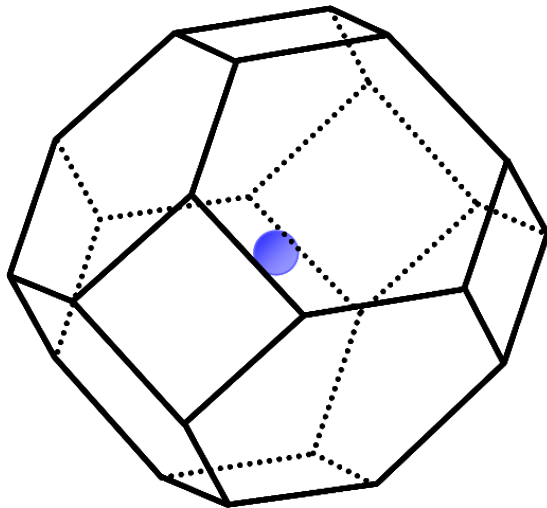


S. M. Sze, Kwok K. Ng: Physics of Semiconductor Devices, 3rd ed., Wiley, New York 2006

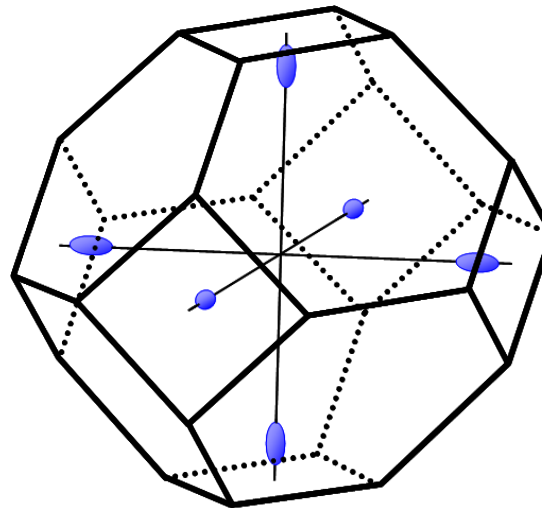
2. Festkörperelektronik

2.3 Halbleiter: Bandstruktur

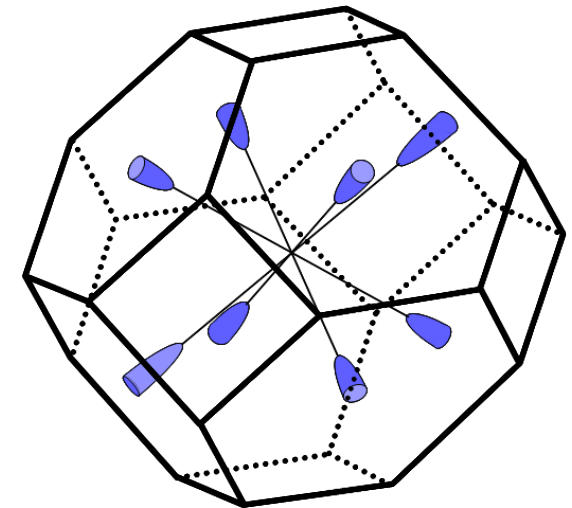
1. BZ und Flächen konstanter Energie: Leitungsband



GaAs



Si

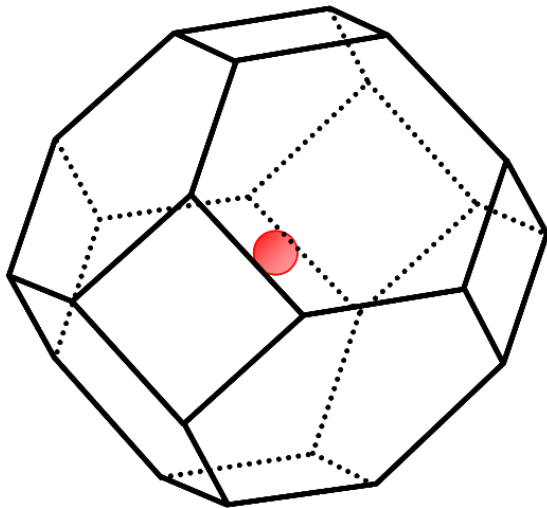


Ge

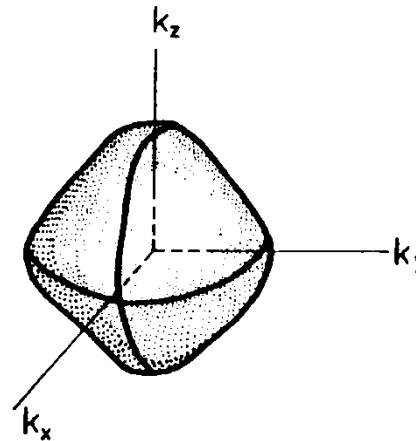
2. Festkörperelektronik

2.3 Halbleiter: Bandstruktur

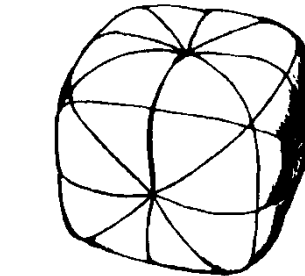
1. BZ und Flächen konstanter Energie: Valenzband



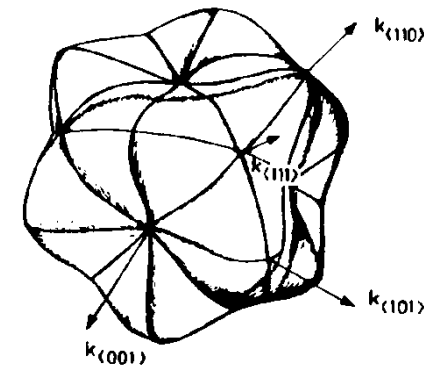
alle Element-HL,
III-V-, II-VI-HL



leichte Löcher



schwere Löcher
oben niedrige Energie
unten hohe Energie



2. Festkörperelektronik

2.3 Halbleiter: Debye-Länge

Majoritätsträger-Dichtestörung (Elektronen im *n*-HL)

Annahme kleiner Störung vom Gleichgewichtswert n_0 ,
dadurch entsteht Raumladung ρ :

$$\rho = -e(n - n_0)$$

3. Maxwell-Gleichung: $\rho = \text{div}\mathbf{D} = \epsilon_s \text{div}\mathbf{E}$

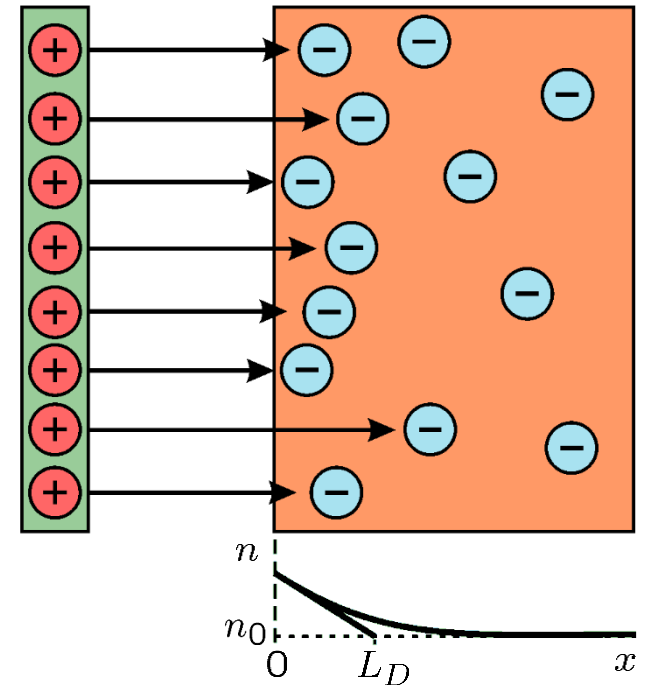
kleine Störung: $e\mu_n n \approx e\mu_n n_0 = \sigma$

Beschränkung auf eindimensionalen Fall:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\sigma}{\epsilon_s}(n - n_0) + D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$

Abschirmung:

Feldverteilung und
Majoritätsträgerdichte bei
kleiner Störung am Rand:



2. Festkörperelektronik

2.3 Halbleiter: Debye-Länge

Majoritätsträger-Dichtestörung (Elektronen im n -HL)

homogene Störung: $\frac{\partial n}{\partial x} = 0 \quad \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = 0$

$$n - n_0 = (n - n_0)|_{(t=0)} \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_d}\right)$$

$$\tau_d = \frac{\epsilon_s}{\sigma} \ll \tau_{n,p}$$

dielektrische Relaxationszeit

stationäre Störung: $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$

$$n - n_0 = (n - n_0)|_{(t=0)} \cdot \exp\left(-\frac{x}{L_D}\right)$$

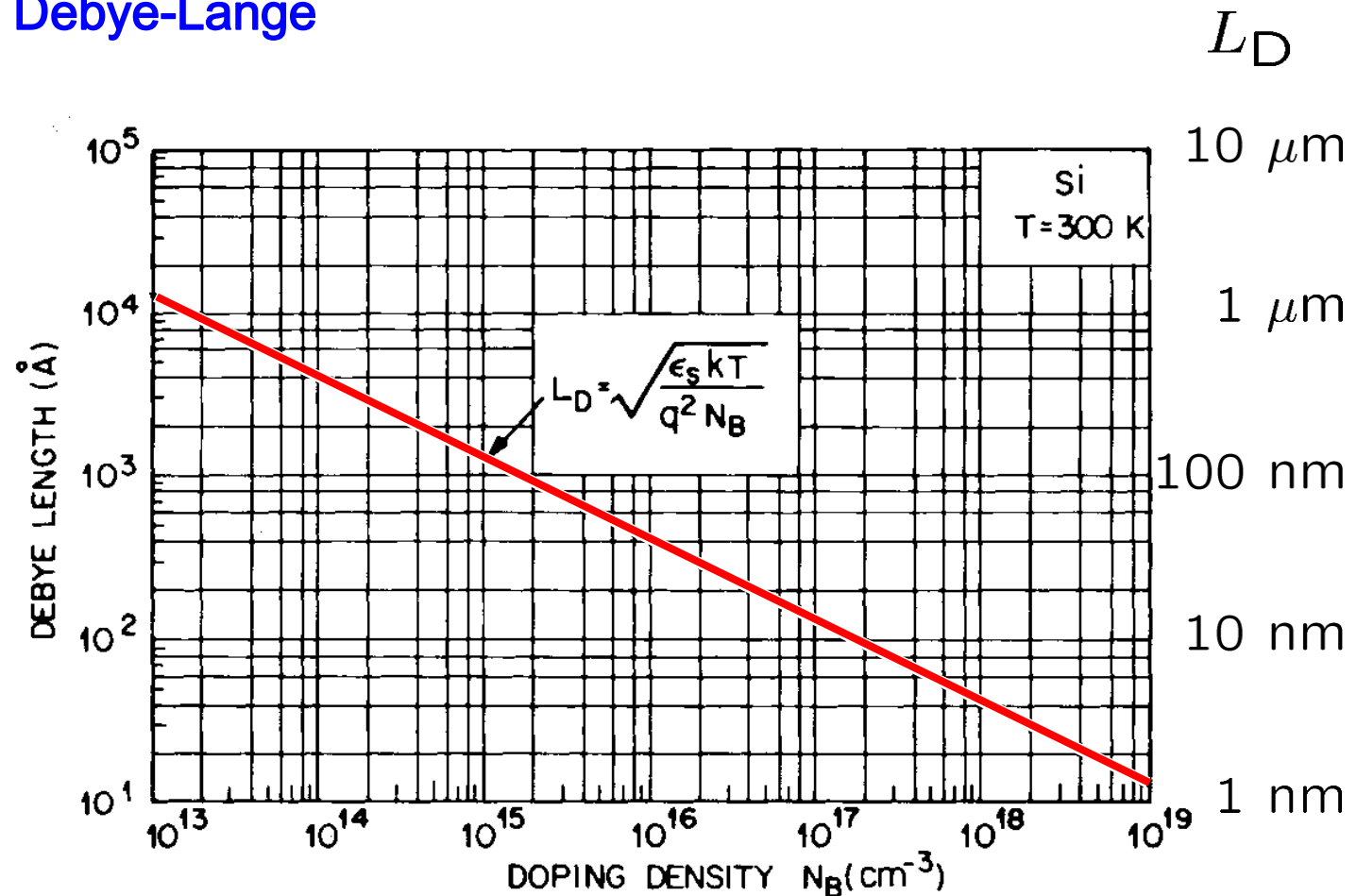
$$L_D = \sqrt{D_n \tau_d}$$

Debye-Länge

2. Festkörperelektronik

2.3 Halbleiter: Debye-Länge

$$L_D^2 = \frac{\epsilon_s k_B T}{e^2 n_0}$$



Die Sperrschichtdicke in Feldeffekttransistoren ist von der Größenordnung L_D .

S. M. Sze, Kwok K. Ng: Physics of Semiconductor Devices, 3rd ed., Wiley, New York 2006