

# LÖSUNGSVORSCHLAG ZUM ÜBUNGSBLATT NR.6

## Aufgabe 42

a.)

Die Energieniveaus des eindimensionalen unendlichen Potentialtopfes der Breite  $L$  haben wir früher berechnet:

$$W_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad k = \frac{n\pi}{L}, \quad (1)$$

mit  $n \in \mathbb{Z}$ . Elektronen sind Spin-1/2-Teilchen und damit Fermionen. Also gilt für sie das Pauliprinzip und dieses besagt, dass ein Energieniveau maximal von zwei Elektronen besetzt werden kann, sofern deren Spin unterschiedlich ausgerichtet ist. Ein Elektron muss also Spinausrichtung (in  $z$ -Richtung)  $S_z = \hbar/2$  und das andere  $S_z = -\hbar/2$  besitzen. Wir verteilen also die Elektronen paarweise auf die Energieniveaus. Hierbei muss noch letztendlich unterschieden werden, ob die Anzahl der Elektronen  $N$  gerade oder ungerade ist. Im Falle einer geraden Anzahl ist die Quantenzahl des höchsten besetzten Zustandes  $n = N/2$ . (Beispiel: Für  $N = 8$  Elektronen werden die Energieniveaus bis  $n = 4$  mit jeweils zwei Elektronen besetzt.) Handelt es sich jedoch um eine ungerade Anzahl, so muss das letzte Elektron das nächsthöhere Energieniveau besetzen, also gilt  $n = (N + 1)/2$ ; ansonsten wäre auch  $n$  keine natürliche Zahl mehr. (Beispiel: Für  $N = 9$  Elektronen muss das Energieniveau mit  $n = 5$  angebrochen werden.) Also gilt dann:

$$W_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n}{2L} \right)^2 = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{N}{4L} \right)^2 & \text{für } N \text{ gerade} \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{N+1}{4L} \right)^2 & \text{für } N \text{ ungerade} \end{cases}. \quad (2)$$

Man kann das Ganze auch schreiben als

$$W_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{2L} \left[ \frac{N+1}{2} \right] \right)^2, \quad (3)$$

mit der Gaußschen Klammerfunktion  $y(x) = [x]$ , welche einer Zahl  $x \in \mathbb{R}$  die ganze Zahl zuordnet, welche kleiner oder gleich der Zahl  $x$  ist.

b.)

Zur Berechnung der gesamten Energie müssen wir über alle Energien summieren. Auch hierbei unterscheiden wir zwischen einer geraden Anzahl und einer ungerade Anzahl von Elektronen:

1.)  $N$  sei gerade:

$$W_{\text{total}} = 2 \sum_{n=1}^{N/2} W_n = \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{(2L)^2} \sum_{n=1}^{N/2} n^2. \quad (4)$$

Jetzt verwenden wir die Formel auf dem Übungsblatt und erhalten:

$$W_{\text{total}} = \frac{\hbar^2}{4mL^2} \cdot \frac{1}{6} \frac{N}{2} \left( \frac{N}{2} + 1 \right) (N + 1) = \boxed{\frac{\hbar^2}{96mL^2} N(N+1)(N+2)}. \quad (5)$$

2.)  $N$  sei ungerade:

Dann ist das nächsthöhere Energieniveau mit dem letzten Elektron zu besetzen. Wir können also das Endergebnis für gerade  $N$  verwenden (wobei wir  $N-1$  für  $N$  einsetzen müssen) und noch  $W_{n+1}$  addieren:

$$\begin{aligned} W_{\text{total}} &= \frac{\hbar^2}{96mL^2} (N-1)N(N+1) + W_{\frac{N+1}{2}} = \frac{\hbar^2}{96mL^2} (N-1)N(N+1) + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{N+1}{4L} \right)^2 = \\ &= \frac{\hbar^2}{96mL^2} \{ (N-1)N(N+1) + 3(N+1)^2 \} = \frac{\hbar^2}{96mL^2} (N+1)(N^2 + 2N + 3) = \\ &= \boxed{\frac{\hbar^2}{96mL^2} (N+1)[(N+1)^2 + 2]}. \end{aligned} \quad (6)$$

Für große Teilchenzahlen, also  $N \mapsto \infty$ , macht es keinen wesentlichen Unterschied, ob die Teilchenzahl gerade oder ungerade ist. Aus beiden Formeln ergibt sich dann:

$$W_{\text{total}} = \frac{h^2}{96mL^2} N^3 + \mathcal{O}(N^2). \quad (7)$$

c.)

Wir benötigen erneut  $W_F$  aus Aufgabenteil (a), wobei es für große Elektronenzahlen wieder keinen Unterschied macht, ob  $N$  gerade oder ungerade ist. Dann gilt:

$$W_F = \frac{h^2}{32mL^2} N^2 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (8)$$

Die mittlere Energie pro Elektron kann man somit schreiben als:

$$W_{\text{mittel}} = \frac{W_{\text{total}}}{N} \approx \frac{h^2}{96mL^2} N^2 \approx \frac{1}{3} W_F. \quad (9)$$

d.)

Der Abstand zwischen den Energieniveaus nimmt proportional zu  $1/L^2$  ab und steigt jedoch quadratisch mit  $n^2$  an. Deshalb gehen wir von einem breiten Potentialtopf aus und betrachten außerdem nur die niedrigsten Energieniveaus. Dann können wir diese nämlich als quasikontinuierlich ansehen:

$$W(n) = \frac{h^2}{8mL^2} n^2 \Rightarrow n(W) = \frac{2\sqrt{2mL}}{h} \sqrt{W}, \quad (10)$$

und berechnen die Zustandsdichte als Ableitung von  $n(W)$  nach  $W$ :

$$D(W) = \frac{dn}{dW} = \frac{\sqrt{2mL}}{h} \frac{1}{\sqrt{W}}. \quad (11)$$

Die Proportionalität der Zustandsdichte zu  $1/\sqrt{W}$  ist typisch für eindimensionale Systeme mit einer Dispersionsrelation, welche quadratisch vom Wellenvektor abhängt. Zur Zustandsdichte selbst kommen wir später noch näher.

## Aufgabe 43

a.)

Für die Zustandsdichte der Leitungselektronen in einem Würfel der Kantenlänge  $L$  gilt

$$D(E_F) = \frac{L^3}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{W}. \quad (12)$$

Wir müssen berücksichtigen, dass jeder Zustand von zwei Elektronen mit entgegengesetzter Spineinstellung  $S_z = \hbar/2$  und  $S_z = -\hbar/2$  besetzt werden können. Da sich vier Elektronen eine Elementarzelle mit dem Volumen  $V = L^3$  teilen, steht einem einzigen Elektron ein Volumen von  $L^3/4$  zur Verfügung. Mit der Fermienergie  $W = W_F = 7 \text{ eV}$  und  $L = 0,36 \text{ nm}$  ergibt sich:

$$D(E_F) = \frac{2}{4} \cdot \frac{(36 \cdot 10^{-9} \text{ m})^3}{4\pi^2} \left(\frac{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}{(1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Js})^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{7 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}} \approx \boxed{1,31 \cdot 10^{18} \frac{1}{\text{J}}}. \quad (13)$$

Die Zustandsdichte  $D(E)$  gibt die Anzahl der besetzbaren Zustände im Energieintervall  $[E, E + dE]$  an. Die Anzahl dieser besetzten Zustände bis zur Fermienergie ergibt sich damit näherungsweise zu

$$N \approx D(E_F) \cdot E_F = 1,31 \cdot 10^{18} \frac{1}{\text{J}} \cdot 1,12 \cdot 10^{-18} \text{ J} \approx \boxed{1,47}. \quad (14)$$

Damit gibt es bis zur Fermienergie nur einen besetzbaren Zustand pro Elektron.

Aus der Größe der Elementarzelle und der Angabe, dass sich in dieser vier Leitungselektronen befinden, können wir sofort die Dichte der Leitungselektronen in Kupfer ausrechnen:

$$n = \frac{N}{V} = \frac{4}{(0,36 \text{ nm})^3} = \frac{4}{(0,36 \cdot 10^{-7} \text{ cm})^3} \approx \boxed{8,57 \cdot 10^{22} \frac{1}{\text{cm}^3}}, \quad (15)$$

wobei die gewählte Einheit  $1/\text{cm}^3$  die übliche Einheit ist, um Ladungsträgerdichten in der Festkörperphysik anzugeben. Man erkennt, dass es sich um ein Metall handelt; die Ladungsträgerdichte ist um einige Größenordnungen höher als in dotierten Halbleitern. Da liegt sie im Bereich von  $10^{18} 1/\text{cm}^3$ .

b.)

Wir betrachten freie Elektronen mit der Dispersionsrelation

$$W = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \quad \mathbf{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix}. \quad (16)$$

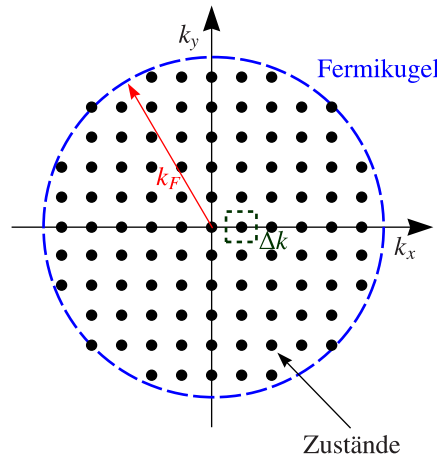
in einem dreidimensionalen unendlichen würfelförmigen Potentialtopf der Kantenlänge  $L$ . Aufgrund der Randbedingungen, dass die Wellenfunktion auf der Oberfläche des Würfels verschwinden muss, ergibt sich eine Quantelung von  $\mathbf{k}$  derart

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{L}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{L}, \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}, \quad (17)$$

analog zum eindimensionalen unendlichen Potentialtopf, nur jetzt für alle drei Raumrichtungen. Wir führen die Argumentation nun im Impulsraum, also im  $k$ -Raum durch, wo jeder Zustand durch einen Wellenvektor  $\mathbf{k}$  gekennzeichnet ist. Benachbarte Zustände in  $k_x$ ,  $k_y$  und  $k_z$ -Richtung sind jeweils durch  $\Delta k = n\pi/L$  voneinander getrennt. Die Länge des Würfels, welchen wir in der Aufgabe betrachten ist makroskopisch und liegt bei einem Millimeter. Damit ist der Abstand zwischen den Zuständen im  $k$ -Raum wieder sehr klein und diese sind quasi kontinuierlich verteilt. Alle Zustände liegen innerhalb der Kugel

$$W_F = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_F^2}{2m}, \quad (18)$$

mit dem Radius dem sogenannten Fermi-Wellenzahlvektor  $\mathbf{k}_F$ .  $\mathbf{k}_F$  ist der Wellenvektor, welcher bei Temperatur  $T = 0$  zu den energetisch höchstens Zuständen gehört;  $W_F$  ist also die Fermienergie. (Man bezeichnet  $W_F$  außerdem auch als Fermikugel.)



Was wir nun noch tun müssen, ist,  $\mathbf{k}_F$  zu berechnen. Dazu betrachten wir den Platz im  $k$ -Raum, dem ein Zustand zur Verfügung steht. Dabei handelt es sich im Prinzip um einen kleinen Würfel der Kantenlänge  $\Delta k$  und mit dem Volumen  $V_k = \Delta k^3 = (2\pi/L)^3$ . Die Gesamtheit aller Zustände hat in dem Volumen, welches durch die Fermikugel gegeben ist, Platz. Damit folgt die Anzahl der Zustände, indem wir das Volumen der Fermikugel durch das Volumen dividieren, welches ein einziger Zustand beansprucht. Die erhaltene Anzahl der Zustände muss außerdem mit einem Faktor 2 multipliziert werden. Das trägt erneut dem Pauliprinzip Rechnung, welches besagt, dass ein Zustand im  $k$ -Raum von maximal zwei Elektronen besetzt werden kann, sofern diese entgegengesetzte Spineinstellung  $S_z = \hbar/2$  bzw.  $S_z = -\hbar/2$  haben. Also gilt für die Anzahl  $N$  der Elektronen, welche in dem Würfel der Kantenlänge 1 mm untergebracht werden können:

$$N = 2 \frac{V}{V_k} = 2 \frac{\frac{4}{3} \pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{\frac{8}{3} \pi k_F^3}{\frac{8\pi^3}{V}} = \frac{1}{3\pi^2 V} k_F^3. \quad (19)$$

Damit ist dann umgekehrt

$$k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 \frac{N}{V}}. \quad (20)$$

Damit folgt die Energie des höchsten besetzten Zustands, also die Fermienergie (bei  $T = 0$ ):

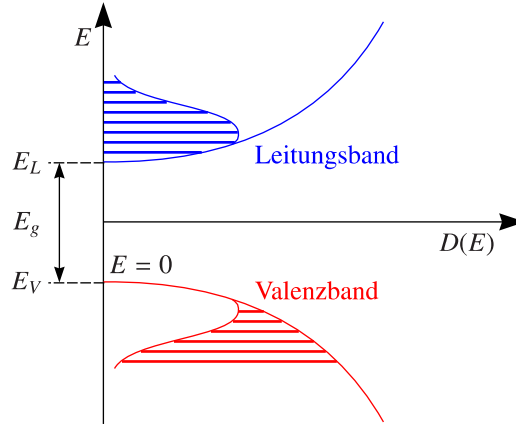
$$\boxed{W_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}}. \quad (21)$$

Mit dem bei Aufgabenteil (a) berechneten Wert für die Elektronendichte können wir  $W_F$  berechnen:

$$W_F = \frac{(1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Js})^2}{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}} \left(3\pi^2 \cdot \frac{8,573 \cdot 10^{22} \frac{1}{\text{cm}^3} \cdot \frac{1}{1000} \text{ cm}^3}{\left(\frac{1}{1000} \text{ m}\right)^3}\right)^{\frac{2}{3}} \approx \boxed{1,28 \cdot 10^{-18} \text{ J} \approx 7,09 \text{ eV}}. \quad (22)$$

## Aufgabe 44

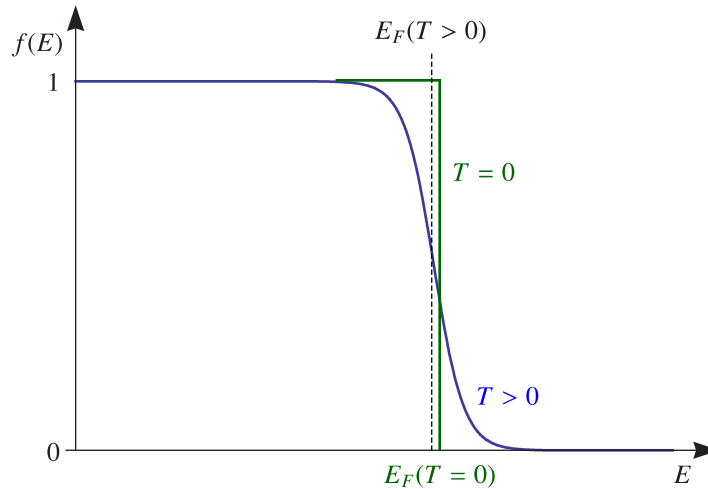
Ist von Eigenleitung die Rede, so bedeutet dies, dass wir einen intrinsischen Halbleiter ohne Dotierung betrachten. In diesem entspricht die Dichte der angeregten Leitungselektronen  $n$  im Leitungsband der Dichte der Löcher im Valenzband:  $n = p$ . Alle angeregten Elektronen im Leitungsband stammen nämlich aus dem Valenzband. Wir legen den Energienullpunkt in das Maximum des obersten Valenzbandes. Sei  $E_g$  die Energie der Bandlücke, also die Energiedifferenz zwischen dem Maximum des Valenzbandes und dem Minimum des untersten Leitungsbandes. Wir berechnen nun die Dichten  $n$  und  $p$  mittels der Zustandsdichte und der Fermi-Verteilungsfunktion.



Die Zustandsdichte  $D(E)$  gibt die Anzahl der besetzbaren Zustände in einem infinitesimal kleinen Energieintervall  $[E, E + dE]$  an. Die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right) + 1}, \quad (23)$$

macht wiederum eine Aussage darüber, mit wie vielen Elektronen (Fermionen) im Mittel ein Zustand besetzt ist (mittlere Besetzungszahl):



Die Werte der Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion liegen zwischen 0 und 1, da nach dem Pauliprinzip ein Zustand höchstens mit einem Fermion besetzt werden kann. Bei  $T = 0$  ist die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion eine Heavisidesche  $\theta$ -Funktion  $\theta(E - E_F)$ . Bei  $T > 0$  schmiert sie bei der Fermienergie  $E_F$  etwas aus, wobei  $E_F$  selbst auch noch von der Temperatur abhängt. Nun zur Rechnung:

$$\begin{aligned} n &= \frac{N}{V} = \int_{E_g}^{\infty} D_e(E) f_e(E) dE = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{E_g}^{\infty} \frac{\sqrt{E - E_g}}{\exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right) + 1} dE \stackrel{(E-E_g)/(k_B T)=x}{=} \\ &= N_e F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_g}{k_B T}\right), \end{aligned} \quad (24)$$

und analog für die Löcher

$$\begin{aligned} p &= \int_{-\infty}^0 D_h(E) (1 - f_e(E)) dE = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_h^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^0 \frac{\sqrt{-E}}{\exp\left(\frac{E_F - E}{k_B T}\right) + 1} dE \stackrel{-E/(k_B T)=x}{=} \\ &= N_h F_{1/2} \left(-\frac{E_F}{k_B T}\right), \end{aligned} \quad (25)$$

mit den effektiven Zustandsdichten für Elektronen und Löcher

$$N_e = 2 \left( \frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad N_h = 2 \left( \frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (26)$$

und dem Fermiintegral

$$F_{1/2}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{\exp(x-\eta)+1} dx. \quad (27)$$

$m_e^*$  und  $m_h^*$  sind die effektiven Massen von Elektronen bzw. Löchern. Am Temperaturnullpunkt liegt die Fermienergie genau zwischen Leitungsband und Valenzband, also in der Mitte der Bandlücke  $E_g$ . Bei typischen Halbleitern liegt  $E_g$  im Bereich von einem bis mehreren eV. Bei Zimmertemperatur gilt

$$k_B T = 1,381 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}} \cdot 293 \text{ K} \approx 4,04 \cdot 10^{-21} \text{ J} \approx 0,025 \text{ eV} = \boxed{25 \text{ meV}}. \quad (28)$$

Also ist bei Zimmertemperatur  $k_B T \ll E_F$ . Damit können wir das Argument des Fermiintegrals vereinfachen, da die eins im Nenner gegenüber der Exponentialfunktion vernachlässigt werden kann:

$$F_{1/2}(\eta) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{\exp(x-\eta)} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(\eta) \int_0^\infty \sqrt{x} \exp(-x) dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(\eta) \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \exp(\eta). \quad (29)$$

Dann lässt sich das Fermiintegral also durch eine Boltzmannfunktion annähern:

$$n = N_e \exp\left(\frac{E_F - E_g}{k_B T}\right), \quad p = N_h \exp\left(-\frac{E_F}{k_B T}\right). \quad (30)$$

Aus  $n = p$  für einen intrinsischen Halbleiter ergibt sich:

$$\exp\left(\frac{2E_F - E_g}{k_B T}\right) = \frac{N_h}{N_e} = \left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (31)$$

Logarithmieren führt auf

$$\frac{2E_F - E_g}{k_B T} = \frac{3}{2} \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \Rightarrow E_F = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right). \quad (32)$$

Liegt die effektive Masse der Elektronen im Leitungsband bei einem Drittel der effektiven Masse der Löcher im Valenzband, so ergibt sich (die Zimmertemperatur sei 293 K):

$$\begin{aligned} E_F &= \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} \cdot 1,381 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}} \cdot 293 \text{ K} \ln\left(\frac{m_h^*}{\frac{1}{3}m_e^*}\right) \approx \frac{E_g}{2} + 3,33 \cdot 10^{-21} \text{ J} \approx \frac{E_g}{2} + 0,021 \text{ eV} = \\ &= \boxed{\frac{E_g}{2} + 21 \text{ meV}}. \end{aligned} \quad (33)$$

Bei  $T = 0 \text{ K}$  liegt die Fermienergie exakt in der Mitte zwischen Leitungs- und Valenzband (was wir oben schon angemerkt haben). Bei Raumtemperatur  $T = 293 \text{ K}$  verschiebt sich dieses um einige meV nach oben, was jedoch viel kleiner als die Bandlücke selbst ist. Außerdem schmiedet die Fermifunktion selbst im Bereich der Fermienergie um einige  $k_B T$  auf. Damit kann ein kleiner Bruchteil von Elektronen vom Valenz- ins Leitungsband angeregt werden. Bei Zimmertemperatur sind dies jedoch aufgrund der kleinen Verschiebung der Fermienergie nicht viele, weshalb die Leitfähigkeit eines intrinsischen Halbleiters bei Zimmertemperatur nicht so gut ist. Abhilfe schafft hier die Dotierung des Halbleiters, also das Einbringen von Fremdatomen.