

# Festkörperelektronik

## Vorlesung 5

Prof. Nils Weimann

IW / Bauelemente der Höchstfrequenzelektronik (BHE)

15.05.2025



## Zusammenfassung letzte Vorlesung

- ▶ endlicher Potentialtopf
  - ▶ gerade und ungerade Lösungen
  - ▶ grafische Methode zum Auffinden der erlaubten Energiewerte
  - ▶ gebundene Zustände
  - ▶ resonantes Tunneln – Kontinuumszustände
- ▶ Atommodell und Periodensystem
  - ▶ Wasserstoffatom, Bohr'sches Modell aus radialsymmetrischer Sgl.
  - ▶ Quantenzahlen
  - ▶ Pauli-Prinzip
  - ▶ Messung der Übergänge mit Spektroskopie

## Ziele der 5. Vorlesung

- ▶ periodische Potentiale
- ▶ Bandstruktur des Festkörpers
- ▶ effektive Masse der Elektronen

## Elektronen im Festkörper: Kronig-Penney-Modell

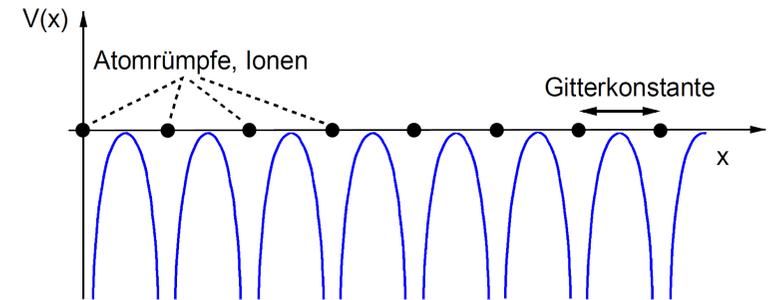
- ▶ bis jetzt: ein Elektron, ein "Ort" (Potentialtopf, Atom) → diskrete Energieniveaus
- ▶ wir möchten die **weitläufige** Bewegung von Elektronen im Festkörper beschreiben
  - ▶ Beschleunigung und Geschwindigkeit
  - ▶ und Anzahl von Elektronen, die sich frei bewegen können → Elektronik
  - ▶ Energie von Zuständen → Optik
- ▶ Erweiterung unserer bisheriger Modelle auf ausgedehnte Strukturen

## Kronig-Penney-Modell

- ▶ Entwicklung eines einfachen Modells
  - ▶ Wechselwirkung zwischen Elektronen ist schwächer als die zwischen Elektron und Kristall → für moderate Dichte "freier" Elektronen in Ordnung, auch im Halbleiter
  - ▶ Struktur des Festkörpers ist ein unendlich ausgedehnter Kristall → periodisches Potential
  - ▶ Beschränkung auf eine Dimension
- ▶ Suche nach Lösungen der Schrödingergleichung
  - ▶ Wellenfunktion  $\Psi$
  - ▶ erlaubte  $k$ -Werte (Wellenzahl → Kristallimpuls)
  - ▶ Beziehung zwischen  $W$  und  $k$  (Energie der Elektronen und Kristallimpuls)  $W_{\text{fr.El.}} = \hbar^2 k^2 / 2m \Rightarrow W_{\text{Kristall}} = ?$

## Kronig-Penney-Modell

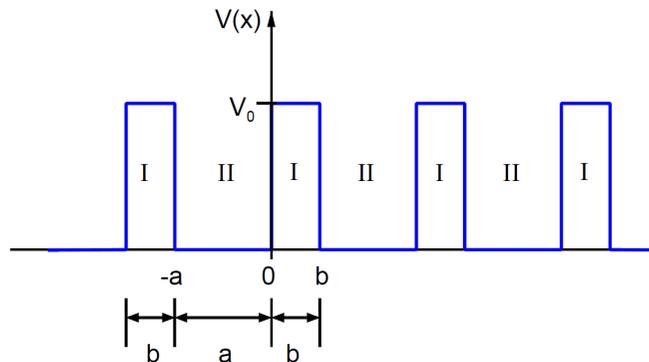
- ▶ Potentialverlauf im eindimensionalen Kristall



- ▶ Coulomb-Potential der Ionenrumpfe  $\sim \sum_i \frac{-1}{|x - x_i|}$

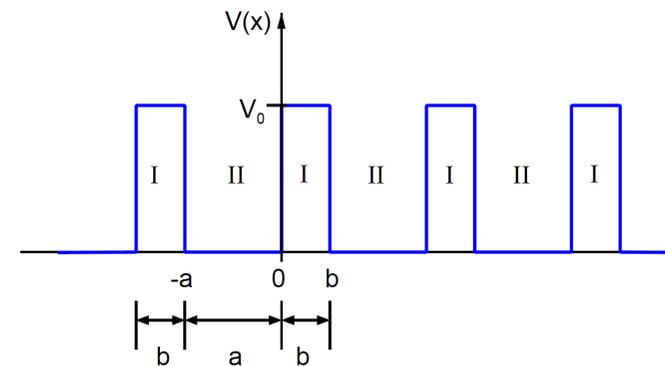
## Kronig-Penney-Modell

- ▶ vereinfachter Verlauf: Rechteckpotential



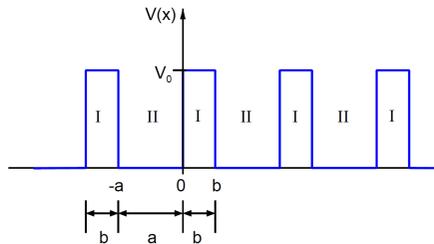
- ▶ Analogie zum rechteckigen Potentialtopf

## Kronig-Penney-Modell



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } n(a+b) \leq x < n(a+b) + b, \quad n = \{0, 1, 2, \dots\} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

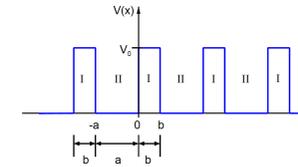
## Kronig-Penney-Modell



- ▶ Einsetzen des Potentials  $V$  in die zeitunabh. Schrödingergleichung

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (W - V(x)) \Psi = 0$$

## Kronig-Penney-Modell



- ▶ freie Elektronen im Vakuum  $\Psi(x) = A \cdot \exp(jkx)$
- ▶ suche Lösung für "quasi-freie" Elektronen im Kristall → Leitfähigkeit
- ▶ Potential  $V(x) = V(x + a + b)$  ist *periodisch*
- ▶ Wellenfunktion sollte Anteil mit der gleichen Periode haben

$$\Psi(x) = U(x) \exp(jkx)$$

$$U(x) = U(x + a + b)$$

## Kronig-Penney-Modell

- ▶  $\Psi = U(x) \exp(jkx)$  eingesetzt in die Schrödingergleichung
- ▶ Anwenden der Kettenregel
- ▶ Sortieren der Beiträge  $U''$ ,  $U'$  und  $U$  liefert

$$U''(x) + 2jkU'(x) - \left[ k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W - V(x)) \right] U(x) = 0$$

- ▶ wie beim Potentialtopf:
  - ▶ zwei Gleichungen in den Bereichen I und II
  - ▶ Stetigkeit und Differenzierbarkeit

## Kronig-Penney-Modell

$$U''(x) + 2jkU'(x) - \left[ k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (W - V(x)) \right] U(x) = 0$$

- ▶ mit  $\alpha^2 \equiv \frac{2mW}{\hbar^2}$  und  $\beta^2 \equiv \frac{2m(W - V_0)}{\hbar^2}$
- ▶ Gleichungssystem für die Bereiche I und II

$$U_I''(x) + 2jkU_I'(x) - (k^2 - \beta^2)U_I(x) = 0$$

$$U_{II}''(x) + 2jkU_{II}'(x) - (k^2 - \alpha^2)U_{II}(x) = 0$$

- ▶ wir suchen quasi-freie Elektronen mit gleicher Wellenzahl im ganzen Kristall  $k_I \sim k_{II} \equiv k$

## Kronig-Penney-Modell

- ▶ Gleichungssystem

$$U_I''(x) + 2jkU_I'(x) - (k^2 - \beta^2)U_I(x) = 0$$

$$U_{II}''(x) + 2jkU_{II}'(x) - (k^2 - \alpha^2)U_{II}(x) = 0$$

- ▶ Lösungsansatz

$$U_I(x) = A_I e^{j(\beta-k)x} + B_I e^{j(\beta+k)x}$$

$$U_{II}(x) = A_{II} e^{j(\alpha-k)x} + B_{II} e^{j(\alpha+k)x}$$

- ▶ *periodische* Randbedingungen

$$U_I(0) = U_{II}(0) \quad U_I'(0) = U_{II}'(0)$$

$$U_I(b) = U_{II}(-a) \quad U_I'(b) = U_{II}'(-a)$$

## Kronig-Penney-Modell

- ▶ Lösungsansatz eingesetzt in Randbedingungen

$$A_I + B_I = A_{II} + B_{II}$$

$$A_I e^{j(\beta-k)b} + B_I e^{j(\beta+k)b}$$

$$= A_{II} e^{-j(\alpha-k)a} + B_{II} e^{-j(\alpha+k)a}$$

$$j(\beta-k)A_I + j(\beta+k)B_I$$

$$= j(\alpha-k)A_{II} + j(\alpha+k)B_{II}$$

$$j(\beta-k)A_I e^{j(\beta-k)b} + j(\beta+k)B_I e^{j(\beta+k)b}$$

$$= j(\alpha-k)A_{II} e^{-j(\alpha-k)a} + j(\alpha+k)B_{II} e^{-j(\alpha+k)a}$$

## Kronig-Penney-Modell

- ▶ Lineares System mit 4 Gleichungen für 4 Unbekannte  $\{A_I, A_{II}, B_I, B_{II}\}$
- ▶ kann als Matrixgleichung geschrieben werden, wobei die Matrixelemente  $a_{ik}$  von  $k$  und über  $\alpha$  und  $\beta$  von den Parametern  $W$  und  $V_0$  abhängen

$$(a_{ik}) \cdot \begin{pmatrix} A_I \\ A_{II} \\ B_I \\ B_{II} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- ▶ hat eine Lösung, wenn  $\det(a_{ik}) = 0$  (→siehe lineare Algebra)

## Kronig-Penney-Modell

Matrixgleichung ausgeschrieben:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ e^{jQb} & e^{jRb} & -e^{-jSa} & -e^{-jTa} \\ jQ & jR & -jS & -jT \\ jQe^{-jSa} & jRe^{jRb} & -jSe^{-jSa} & jTe^{-jTa} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_I \\ A_{II} \\ B_I \\ B_{II} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit  $Q = \beta - k, R = \beta + k, S = \alpha - k, T = \alpha + k$

## Kronig-Penney-Modell

- ▶ Einsetzen der Matrixelemente  $a_{ik}$  in die Definition der  $(4 \times 4)$ -Determinante und  $\det(a_{ik}) = 0$  setzen
- ▶ Ersetzen der Exponentialfunktionen mit Winkelfunktionen
- ▶ liefert eine Gleichung, die eine Funktion  $k(W, V_0, a, b)$  als Lösung hat

$$-\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\alpha a) \sin(\beta b) + \cos(\alpha a) \cos(\beta b) = \cos[k(a + b)]$$

- ▶ wieder zwei Fälle unterscheiden, je nachdem ob  $W \geq V_0$  ist

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$

- ▶ wir haben vorher definiert  $\beta^2 \equiv \frac{2m(W - V_0)}{\hbar^2}$
- ▶  $\beta = \sqrt{\frac{2m(W - V_0)}{\hbar^2}}$  ist hier rein imaginär
- ▶ definiere  $\beta \equiv j\gamma$  mit  $\gamma \in \mathbb{R}$
- ▶ das heißt  $\gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - W)$

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$

- ▶  $\beta \equiv j\gamma$  einsetzen in

$$-\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\alpha a) \sin(\beta b) + \cos(\alpha a) \cos(\beta b) = \cos[k(a + b)]$$

- ▶ gibt

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2j\alpha\gamma} \sin(\alpha a) \sin(j\gamma b) + \cos(\alpha a) \cos(j\gamma b) = \cos[k(a + b)]$$

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2j\alpha\gamma} \sin(\alpha a) \sin(j\gamma b) + \cos(\alpha a) \cos(j\gamma b) = \cos[k(a + b)]$$

- ▶ nutze  $\sin(jz) = j \sinh(z)$  und  $\cos(jz) = \cosh(z)$

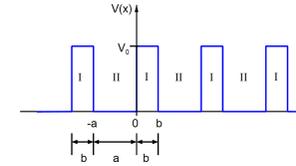
$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2\alpha\gamma} \sin(\alpha a) \sinh(\gamma b) + \cos(\alpha a) \cosh(\gamma b) = \cos[k(a + b)]$$

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2\alpha\gamma} \sin(\alpha a) \sinh(\gamma b) + \cos(\alpha a) \cosh(\gamma b) = \cos[k(a + b)]$$

- ▶ rechte Seite: nur Werte zwischen  $-1$  und  $+1$
- ▶ eingeschränkte Lösungsmenge für  $\alpha, \gamma, a, b$  und damit für den Satz von Parametern  $W, V_0, a, b$
- ▶  $V_0, a, b$  sind durch Potential und Geometrie vorgegeben →  $W$  kann nur gewissen Wertebereich annehmen!
- ▶ "Bänder" mit erlaubten Energien  $W$  des Elektrons → **elektronische Bandstruktur** des Festkörpers

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$



- ▶ weitere Vereinfachung:  $b \rightarrow 0$  und gleichzeitig  $V_0 \rightarrow \infty$ , wobei  $V_0 \cdot b = \text{konst.}$
- ▶ dabei bleibt die Tunnelwahrscheinlichkeit gleich, vgl. endliche Potentialstufe

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2\alpha\gamma} \sin(\alpha a) \sinh(\gamma b) + \cos(\alpha a) \cosh(\gamma b) = \cos[k(a + b)]$$

- ▶ mit  $V_0 \cdot b = \text{konst.}$  und  $b \rightarrow 0$
- ▶ für  $\gamma b \sim \sqrt{V_0} \cdot b \rightarrow 0$
- ▶ daher  $\sinh(\gamma b) \approx \gamma b$  und  $\cosh(\gamma b) \approx 1$

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2\alpha\gamma} \sin(\alpha a) \gamma b + \cos(\alpha a) \cdot 1 = \cos[k(a + 0)]$$

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2\alpha\gamma} \sin(\alpha a) \gamma b + \cos(\alpha a) = \cos(ka)$$

- ▶ kürze mit  $\gamma$
- ▶ erweitere mit  $a$
- ▶ umsortieren von  $b$

$$ab \frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2} \cdot \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ka)$$

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$

$$ab \frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2} \cdot \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ka)$$

►  $\gamma^2 - \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - 2W) \xrightarrow{V_0 \rightarrow \infty} \frac{2mV_0}{\hbar^2}$

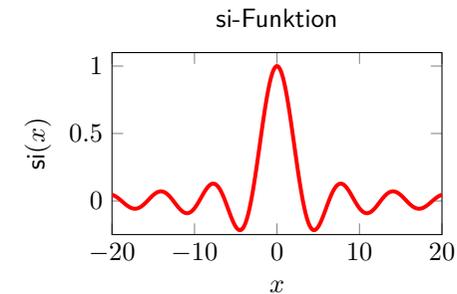
$$\frac{amV_0b}{\hbar^2} \cdot \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ka)$$

►  $P \equiv \frac{am}{\hbar^2} \cdot (V_0 \cdot b)$  divergiert nicht wegen  $V_0 \cdot b = \text{konst.}$

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$

$$P \cdot \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ka)$$

► auch  $\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} \equiv \text{si}(\alpha a)$  divergiert nicht

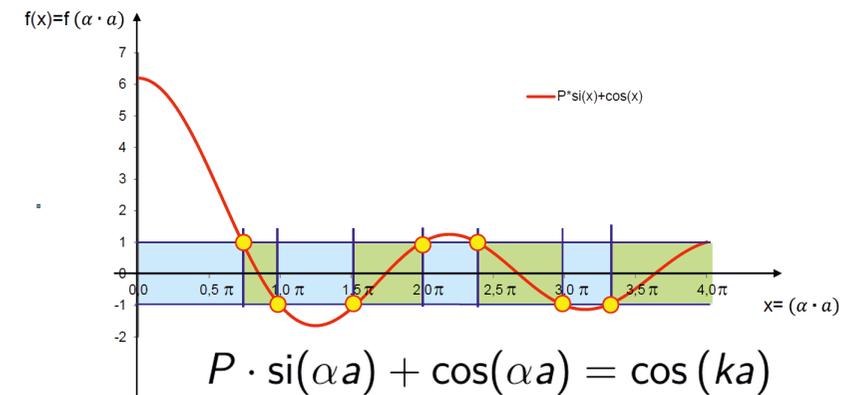


## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$

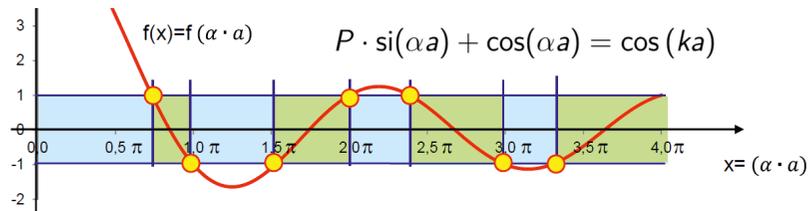
$$P \cdot \text{si}(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos(ka)$$

- rechte Seite beschränkt zwischen  $-1 \dots +1$ , von (festem) Atomabstand  $a$  und Wellenzahl  $k$  abhängig
- linke Seite abhängig von Atomabstand  $a$  und Potentialverlauf  $P$  sowie Elektronen-Energie  $\alpha = \alpha(W)$
- versuche graphische Lösung, um  $W(k)$  zu finden

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$

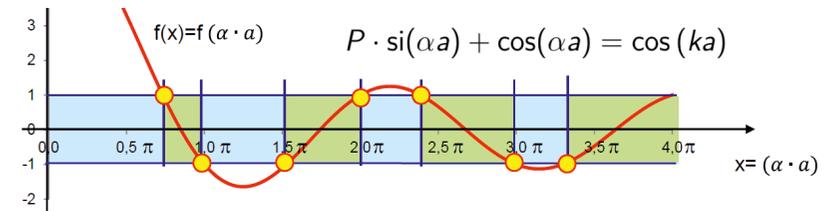


## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$



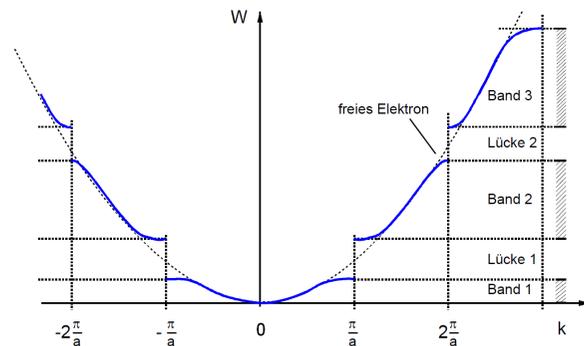
- ▶ rechte Seite kann nur grünes & blaues Gebiet erreichen
- ▶ nur die (Energie-)Werte  $\alpha a$  sind zulässig, wo die linke Seite (rote Funktion) die grünen Gebiete überstreicht
- ▶ eine Wellenzahl  $k$  in der rechten Seite ist mit *mehreren* Energiewerten  $\alpha(W)$  auf der linken Seite verknüpft

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$



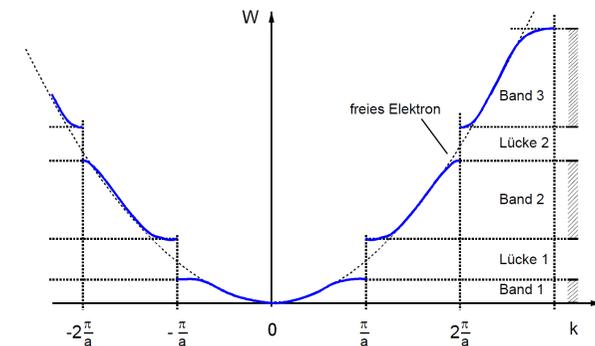
- ▶ wie bekommen wir die Energie- und Wellenzahl-Werte?
- ▶  $\alpha a$  als Parameter, berechne  $W = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$  und  $k = \arccos[f(\alpha a)]/a$  in den erlaubten (grünen) Bereichen
- ▶ dann trägt man auf  $W(k)$
- ▶ Sprung entlang der horizontalen Begrenzung der verbotenen (blauen) Gebiete  
→ Sprung in der Energie  $\alpha(W)$  bei gleichem  $k$

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$



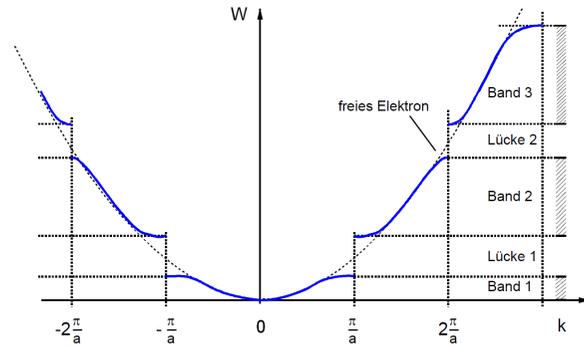
- ▶ parabelförmiger Verlauf von  $W(k)$ , ähnelt der Energie des freien Elektrons  $W_{\text{fr. El.}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
- ▶ tief im Band und um  $k \approx 0$  überlappen die Kurven mit dem freien Elektron
- ▶ Elektron kann hier kinetische Energie aufnehmen

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$



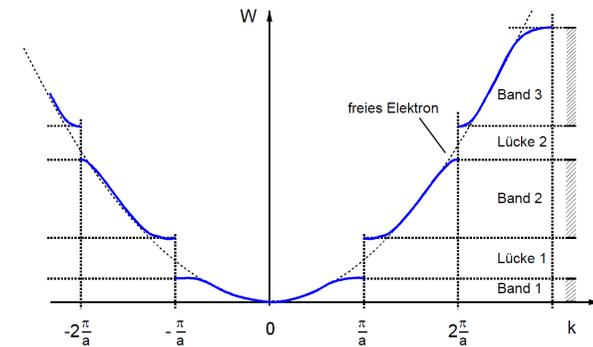
- ▶ Lücken bei  $k = \pm\pi/a, \pm 2\pi/a, \dots$
- ▶ erlaubte **Energiebänder** und verbotene **Energielücken**
- ▶ es gibt im Kristall *keine* Elektronen, deren Energie in einer der Lücken liegt

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$



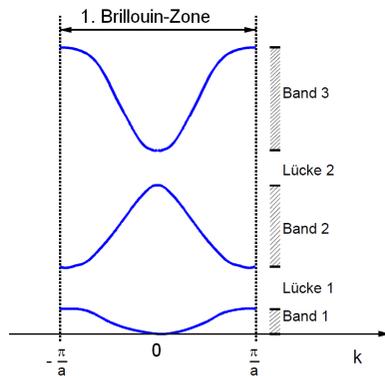
- ▶ starke Abweichung vom freien Elektron an der Grenze der erlaubten Energiebänder
- ▶ hier waagerechte Tangente an die  $W(k)$ -Kurve
- ▶ keine weitere Zunahme der kinetischen Energie möglich

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$



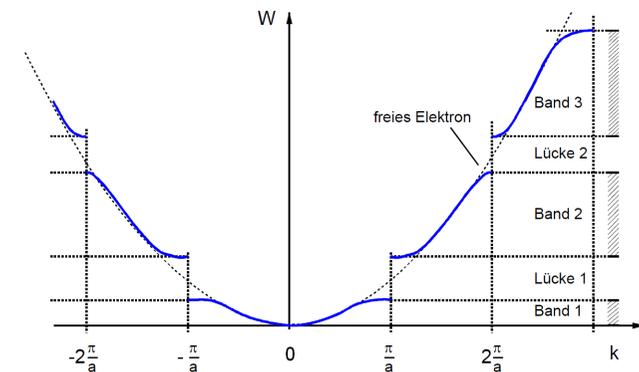
- ▶ in  $P \cdot \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos(ka)$  ist das Argument von  $\cos(ka)$  auf  $\pm 2n\pi$  unbestimmt, mit  $n = 1, 2, \dots$
- ▶ zu  $k$  man kann daher in jedem Ast  $\pm 2n\pi/a$  addieren
- ▶ das führt auf das reduzierte Schema ...

## Kronig-Penney-Modell mit $W < V_0$



- ▶ Reduzierung auf  $k = -\pi/a \dots \pi/a \rightarrow$  1. Brillouin-Zone
- ▶ am Rand der Brillouin-Zone  $k \approx \pm\pi/a$  ähnlich dem gebundenen Elektron im Potentialtopf, mit diskreten Energiewerten

## Kronig-Penney-Modell mit $W > V_0$



- ▶ für höhere Energie werden Bänder breiter und Bandlücken schmaler (in  $W$ -Richtung)
- ▶ bei sehr hohen Elektronenenergien geht die Struktur in eine freie  $E(k)$ -Parabel über, die Energielücken verschwinden

## effektive Elektronenmasse

- ▶ wie können wir die Bewegung der Elektronen aus der Bandstruktur ableiten? → träge Masse

- ▶ für ein *freies Elektron* ist  $W_{\text{fr.El.}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

- ▶ wir können  $m_e$  aus der 2. Ableitung von  $W$  nach  $k$  erhalten

$$\frac{1}{m_e} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W_{\text{fr.El.}}}{\partial k^2}$$

- ▶ das versuchen wir, um aus der Bandstruktur eine *effektive Masse*  $m^*$  des Elektronis *im Festkörper* abzuleiten

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W(k)}{\partial k^2}$$

## effektive Elektronenmasse

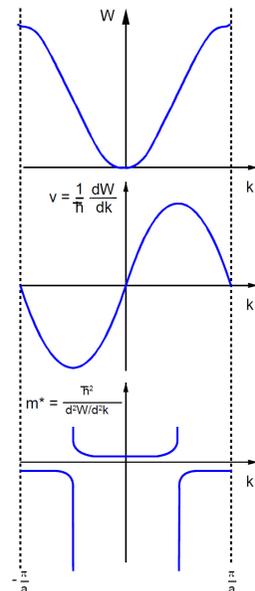
- ▶ außerdem steckt die Geschwindigkeit in der 1. Ableitung

$$\frac{\partial W_{\text{fr.El.}}}{\partial k} = \frac{\hbar^2 k}{m_e}$$

- ▶ mit dem quantenmech. Impuls  $\hbar k = p = m_e v$  also

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial W_{\text{fr.El.}}}{\partial k}$$

## effektive Elektronenmasse



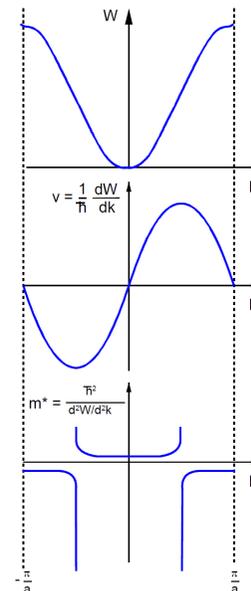
## effektive Elektronenmasse

- ▶ für Wellenzahlen  $k \approx 0$  wie ein freies Elektron
  - ▶ mit steigendem Impuls  $k$  wachsen Geschwindigkeit  $v$  und Energie  $W$  kontinuierlich
  - ▶ Trägheit wird durch ungefähr konstante Masse  $m^*(k) \approx m^*(0)$  beschrieben

## effektive Elektronenmasse

- ▶ in der Mitte des Bands für  $k = \pm \frac{\pi}{2a}$  erreicht  $v$  ein Maximum und fällt darüber hinaus, obwohl der Impuls  $k$  zunimmt
  - ▶ Masse  $m^*(k) \rightarrow \infty$  für  $k \rightarrow \frac{\pi}{2a}$
  - ▶ für  $k > \frac{\pi}{2a}$  wechselt  $m^*(k)$  das Vorzeichen
- ▶ die Masse  $m$  beschreibt die Antwort auf Kraft  $\vec{F} = m\vec{a} = q\vec{E}$
- ▶ Vorzeichenwechsel von  $m$  kann als Vorzeichenwechsel der Ladung  $q$  interpretiert werden
- ▶ es bewegt sich also für  $k > \frac{\pi}{2a}$  eine *positive* Ladung in die gleiche Richtung → **Defektelektron** oder **Loch**, d.h. ein fehlendes Elektron

## effektive Elektronenmasse



## effektive Elektronenmasse

- ▶ an der Grenze zwischen erlaubten und verbotenen Energiebereichen bilden sich auf Grund von Gitter-Reflexion (Bragg → Optik) stehende Wellen aus
- ▶ stehenden Wellen mit Bäuchen in der Nähe von Atomkernen sind energetisch günstiger als jene mit Bäuchen zwischen den Atomkernen
- ▶ die Bragg-Reflexionen können als Ursache der verbotenen Energiebereiche gedeutet werden

## Zusammenfassung 5. Vorlesung

- ▶ periodische Potentiale
- ▶ Einführung der Bandstruktur des Festkörpers – kontinuierliche Energiebänder im Kristall vgl. mit diskreten Energien im Atom
- ▶ effektive Masse der Elektronen beschreibt Bewegung
- ▶ Elektronen für  $|k| < \frac{\pi}{2a}$  und Löcher für  $|k| > \frac{\pi}{2a}$

Danke für Ihre Teilnahme!