



Technische  
Universität  
Braunschweig



LENA  
Laboratory  
for Energy  
Nanotechnology



Institut für  
Halbleitertechnik


**Grundlagen der Elektronik und Photonik**

**Zustandsdichte**

Prof. Dr. Andreas Waag

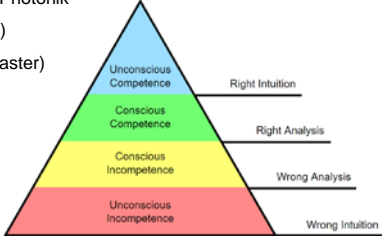
1


**Bänderschema von Halbleitern**

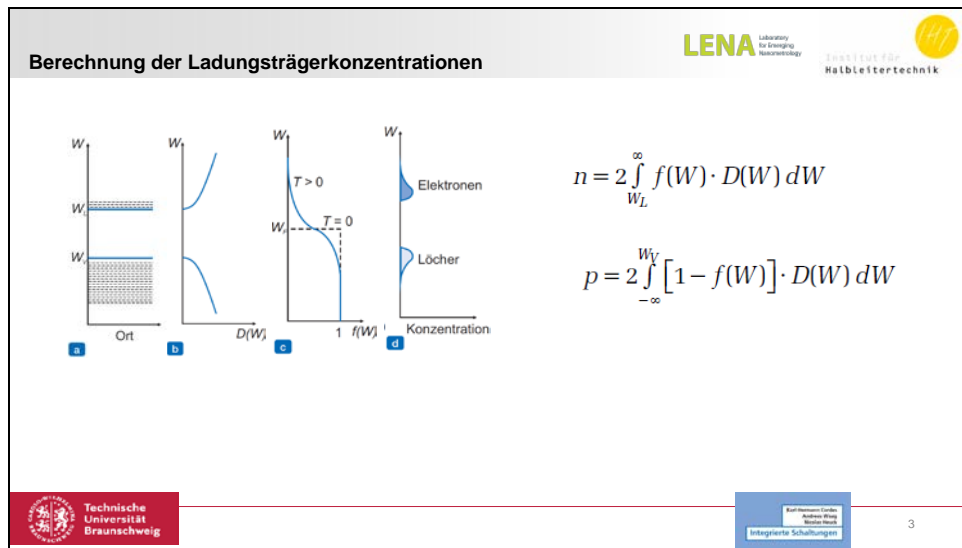
LENA Laboratory for Energy Nanotechnology  INSTITUT FÜR Halbleitertechnik

Die Inhalte dieses Clips entsprechen Level 3

- Level 1 Basiswissen Phase 1 (teilweise noch Schulwissen)
- Level 2 Basiswissen Phase 2 (Eingangskurse Bachelor)
- Level 3 Ziel-Niveau „Grundlagen der Elektronik und Photonik“
- Level 4 vertiefendes Wissen (Eingangskurse Master)
- Level 5 Expertenwissen (Fortgeschrittenen-Kurse Master)
- Level 6+ Wissensgrenze



Technische Universität Braunschweig 



Zur Berechnung der Ladungsträger-Konzentration  $n$  von Elektronen muss man die Zahl der Zustände bei einer Energie  $W$  im Energieintervall  $dW$  mit der Besetzungswahrscheinlichkeit  $f(W)$  multiplizieren (Gleichung). Wir nehmen hier die Zustandsdichte  $D(W)$  als bekannt an, an anderer Stelle können wir diese berechnen. Integriert über alle Energien ergibt sich die Elektronenkonzentration  $n$ . Dabei ist noch ein Faktor 2 zu berücksichtigen, da jeder Zustand von 2 Elektronen - eines mit Spin-Up und eines mit Spin-Down - besetzt werden kann.

Die Berechnung der Löcherkonzentration folgt den selben Schritten. Nur muss berücksichtigt werden, dass die Wahrscheinlichkeit für die Besetzung eines Zustands mit einem Loch gleich der Wahrscheinlichkeit ist, dass der Energiezustand NICHT mit einem Elektron besetzt ist. Deshalb taucht in der Gleichung für Löcher der Term  $[1 - f(W)]$  auf.

Das Ergebnis des Integrals ist in der Graphik links dargestellt und zeigt das Bänderschema, die Zustandsdichte  $D(W)$ , die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion  $f(W)$  und den Wert des Integrals für  $n$  und  $p$ , d.h. von Elektronen und Löchern

### Zustandsdichte: Definition

$D(W) = \text{Zustandsdichte}$

$$\int_{W_L}^{\infty} D(W) dW \quad D(W) \propto \sqrt{W - W_L}$$

Zahl der Zustände pro  $\text{cm}^{-3}$  im Leitungsband

Für ein 3-dimensionales System ist die Zustandsdichte proportional zur Wurzel aus der Energie.

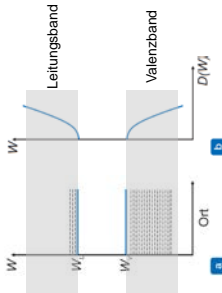
**LENA**  
Laboratory for Energy Nanotechnology

INSTITUT FÜR  
Halbleitertechnik

Technische Universität Braunschweig

Die Zustandsdichte gibt die Dichte der Energiezustände im Leitungs- oder Valenzband an. Das Integral über die Energie ergibt die Gesamtzahl der Zustände in dem Energieintervall. Die Dichte ist dabei nicht nur bezogen auf ein Energieintervall, sondern auch bezogen auf ein Einheitsvolumen des Kristalls, meist  $1 \text{ cm}^3$ . Im folgenden wird die Zustandsdichte für ein freies Elektronengas berechnet. Dabei sollen sich die Elektronen in allen 3 Dimensionen des Raums frei bewegen können. Das Ergebnis wird lauten: die Zustandsdichte in 3D ist proportional zur Wurzel aus der Energie. (Gleichung). In der Nanoelektronik kommen heute auch sehr oft 2-dimensionale und 1-dimensionale Systeme vor. Dann ergeben sich andere Zusammenhänge zwischen Zustandsdichte und Energie. Der Grund hierfür wird im folgenden klar werden.

### Zustandsdichte: Gang der Berechnung





Betrachte freie Elektronen im Kristall

Schrödinger-Gleichung liefert diskrete Energieniveaus

Zustände mit Energie W im Energieintervall dW müssen aufsummiert werden.

Ergebnis: Zustandsdichte D(W)

$$D(W) \propto \sqrt{W - W_L}$$

Der Berechnung der Zustandsdichte liegt folgender Plan zu Grunde: der quantenmechanischen Beschreibung folgend wird das Elektron als Materiewelle betrachtet. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung mit Randbedingungen für ein freies Elektron in einem Kristall ergeben quantisierte Energieniveaus. Dies quantisierten Energieniveaus werden als „Energie-Zustände“ oder einfach als „Zustände“ bezeichnet. Es ergeben sich quantisierte Wellenlängen  $\lambda$  und damit auch quantisierte Wellenzahlen  $k$ . Zustände zu einer bestimmten Energie  $W$  und Energieintervall  $dW$  müssen dann noch aufsummiert werden. Das Ergebnis ist die Zustandsdichte für Elektronen im Leitungsband.

**Zusammenhang zwischen Teilchen- und Welleneigenschaften  
Impuls und Wellenlänge freier Elektronen**

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad W(p) = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m} \frac{1}{\lambda^2}$$

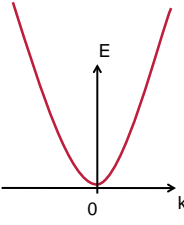
de Broglie Beziehung



$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad W(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$k$  = Wellenzahl  
 $\lambda$  = Wellenlänge

**LENA** Laboratory for Energy Nanotechnology

INSTITUT FÜR  
**Halbleitertechnik**




Wir betrachten man zunächst den Zusammenhang zwischen dem Impuls  $p$  und der Wellenzahl  $k$ . Die zugehörige Gleichung hat der Physiker de Broglie aufgestellt. Erstmals wurden mit dieser Gleichung eine Teilcheneigenschaft (der Impuls) mit einer Welleneigenschaft (der Wellenlänge) kombiniert. Die damals noch theoretische Forderung von de Broglie war zunächst auch unter den Gründervätern der Quantenmechanik höchst umstritten. Kurze Zeit später konnten Interferenzexperimente allerdings die Wellennatur von Elektronen nachweisen und die de Broglie-Beziehung experimentell bestätigen. Seitdem ist klar: jedem Teilchen mit einem Impuls  $p$  kann auch eine Wellenlänge zugeordnet werden. Heute sind Interferenzexperimente sogar mit Atomen und Molekülen realisierbar.

Der Zusammenhang zwischen Energie und Impuls ist aus der klassischen Mechanik bekannt: (Gleichung siehe Folie). Setzt man für den Impuls nun die de Broglie Beziehung (Gleichung) ein, und berücksichtigt man gleichzeitig, dass (Gleichung 3), so erhält man einen Zusammenhang zwischen Energie  $W$  und Wellenzahl  $k$  (Gleichung 4). Dieser „ $W$  von  $k$ “ Zusammenhang könnte man als die Bandstruktur eines freien Teilchens bezeichnen.

**Beschreibung freier Elektronen durch eine Materiewelle**

LENA Laboratory for Energy Nanotechnology  INSTITUT FÜR Halbleitertechnik

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

$\Psi(x)$


Das freie Elektron wird durch seine Materiewelle mit der Wellenlänge und Wellenzahl  $k$  beschrieben.

Die Materiewelle befindet sich in einem Halbleiter-Kristall, der als Würfel mit der Kantenlänge  $L$  angenommen wird.

Potential im Würfel =  $V(x) = 0$


Die Materiewelle eines freien Elektrons:  
Wellenfunktion  $\Psi(x)$  in einem Potential  $V(x)=0$

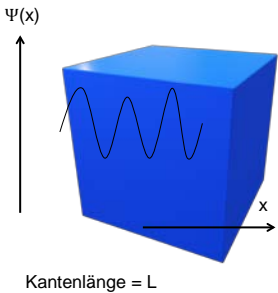
$$\Psi(x) = \Psi_0 \exp^{ikx}$$

Technische Universität Braunschweig 

Die Materiewelle des Elektrons wird durch eine Wellenfunktion  $\Psi(x)$  beschrieben.  $\Psi(x)$  ergibt sich aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung, die die Grundgleichung der Quantenmechanik darstellt. Der Einfachheit halber betrachten wir im folgenden nur eine Dimension: die  $x$ -Richtung. Die Ergebnisse können später in 3D verallgemeinert werden. Aus der Schrödinger-Gleichung ergibt sich als Lösung für ein Elektron in einem Potential  $V(x)=0$  eine ebene Welle (Gleichung).  $i$  ist die imaginäre Zahl.

**Beschreibung freier Elektronen durch eine Materiewelle**

LENA Laboratory for Energy Nanotechnology  INSTITUT FÜR Halbleitertechnik



Periodische Randbedingungen:

$$\Psi(x + L) = \Psi(x)$$


$$\Psi_0 \exp^{ikx} = \Psi_0 \exp^{ik(x+L)}$$

$$\exp^{ikx} = \exp^{ikx} \exp^{ikL}$$

$$\exp^{ikL} = 1$$

$$kL = n \times 2\pi$$

$$k_x = n_x \frac{2\pi}{L}$$

Technische Universität Braunschweig 

Die Wellenfunktion  $\Psi(x)$  löst zwar die Schrödinger-Gleichung, aber noch ohne Randbedingung. Im nächsten Schritt müssen sinnvolle Randbedingungen definiert werden. Wir wählen periodische Randbedingungen: die Wellenfunktion setzt sich über den Würfel hinaus periodisch fort. Der ganze Kristall kann so aus diesen Würfeln aufgebaut werden. Später wird man sehen, dass das Ergebnis unabhängig von der Wahl des Original-Würfels ist.

Periodische Randbedingungen bedeutet mathematisch, dass die Wellenfunktion identisch sein muss, wenn sie um die Kantenlänge eines Würfels  $L$  verschoben wird. (Gleichung 1). Daraus ergibt sich (Gleichungen). und am Ende bedeutet dies eine Randbedingung für die erlaubten Wellenzahlen  $k$ : nur dann erfüllt die Wellenfunktion die Randbedingungen, wenn  $k =$  ganzzahliges Vielfaches von  $2\pi$  durch  $\lambda$ . Der Index  $x$  soll uns daran erinnern, dass wir bisher nur eine Dimension betrachtet haben.



Die Quantisierung der Wellenzahl  $k$

LENA Laboratory for Energy Nanotechnology INSTITUT FÜR Halbleitertechnik

$\Psi(x)$

Kantenlänge =  $L$


$$k_x = n_x \frac{2\pi}{L} \quad k_y = n_y \frac{2\pi}{L} \quad k_z = n_z \frac{2\pi}{L}$$

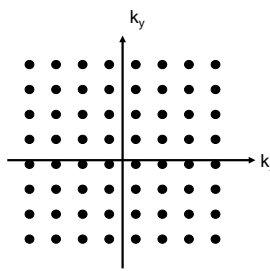
$$\Delta k_{x,y,z} = \frac{2\pi}{L}$$

Technische Universität Braunschweig

Tatsächlich müssen wir 3 Dimensionen  $x, y, z$  berücksichtigen. Die Ergebnisse für die Quantisierung von  $k$  sind identisch. Es ergibt sich (3 Gleichungen). Der Abstand zwischen zwei benachbarten  $k$ -Werten beträgt:  $\Delta k = 2\pi / \lambda$ . Trägt man alle erlaubten  $k$ -Werte in einem  $k_x / k_y / k_z$  Raum auf, so ergibt sich ein Punktmuster mit dem jeweiligen Abstand von  $2\pi / L$ .

Die Zustandsdichte im k-Raum  $D(k)$

LENA Laboratory for Energy Nanotechnology  INSTITUT FÜR Halbleitertechnik




$$\Delta k_{x,y,z} = \frac{2\pi}{L}$$

$$V_k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$$

$$\widetilde{D}_k = \frac{1}{V_k} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$$

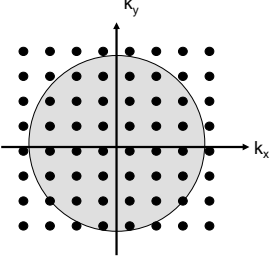
$$D(k) = \frac{\widetilde{D}_k}{L^3} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3$$

 Technische Universität Braunschweig

Kantenlänge = L

Hieraus ergibt sich die Zustandsdichte in  $k$ , d.h. die Zustandsdichte im  $k$ -Raum: ein Zustand benötigt ein Volumen im  $k$ -Raum von (Gleichung für  $V_k$ ). Die Zustandsdichte im  $k$ -Raum ist die Zahl der Zustände pro Volumen im  $k$ -Raum, also 1 durch  $V_k$ . (Gleichung) Teilt man nun noch durch das Volumen des ursprünglichen Würfels, also  $L$  hoch 3, so erhält man die Zustandsdichte  $D_k$  im  $k$ -Raum pro Volumen. Das Ergebnis ist denkbar einfach: die Zustandsdichte im  $k$ -Raum pro Volumen ist konstant, unabhängig von  $k$ , überall gleich groß. Dies hat man auch schon an der Punktdichte im  $k_x/k_y$  Diagramm gesehen: dort ist die Punktdichte überall gleich. Insofern konnte man ein solches Ergebnis erwarten.

**Zustandsdichte**

$$D(k) = \frac{\widetilde{D}_k}{L^3} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3$$


**LENA** Laboratory for Energy Nanotechnology


INSTITUT FÜR Halbleitertechnik

$$W(k) = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$N_{E=const} = \int_{E=const} D(k) dk_x dk_y dk_z$$

$$N_{E=const} = \int_{E=const} D(k) 4\pi k^2 dk$$

$$N_{E=const} = \int_{E=const} \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$$

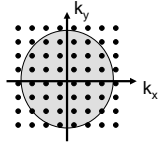


Allerdings sind wir nicht an der Zustandsdichte als Funktion von  $k$ , sondern an der Zustandsdichte als Funktion von  $E$  interessiert.  $k$  und  $E$  hängen zusammen (Gleichung), deshalb kann man beides ineinander umrechnen. Man könnte nun leichtsinnigerweise annehmen, dass die Zustandsdichte  $D(W)$  ebenfalls unabhängig von  $W$  ist. Schließlich hängt  $D(k)$  ja auch nicht von  $k$  ab. Dies ist allerdings ein Trugschluss.  $D(k)$  bezieht sich nämlich auf ein Intervall im  $k$ -Raum  $dk$ ,  $D(W)$  hingegen bezieht sich auf ein Energie-Intervall  $dW$ . Deshalb muss auch noch  $dk$  in  $dW$  umgerechnet werden. Wir müssen also vorsichtiger vorgehen.

Hierzu folgende Überlegung:  $D(W) dW$  ist die Zahl der Zustände mit einer Energie  $W$  in einem Energieintervall  $dW$ . Zustände konstanter Energie liegen auf einer Kugeloberfläche, da  $W$  proportional zu  $k$ -Quadrat ist. Die zugehörige Gleichung (Gleichung) ist gerade die Definition einer Kugeloberfläche im  $k_x/k_y/k_z$  Raum. Die Kugeloberfläche einer Kugel mit Radius  $k$  beträgt gerade  $4\pi k^2$ .

Damit ergibt sich: (Gleichungen)

**Zustandsdichte**



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

$$N_{E=const} = \int_{E=const} \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$$

$$N_{E=const} = \int_{Kugel} \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{2m}{\hbar^2} W\right) dk$$

$$dW = 2k \cdot dk \frac{\hbar^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{m} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} W} \cdot dk$$

$$dk = \left( \frac{\hbar^2}{m} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} W} \right)^{-1} dW$$

LENA Laboratory for Energy Nanotechnology

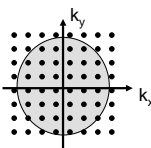
INSTITUT FÜR Halbleitertechnik

Technische Universität Braunschweig

$k^2$  kann einfach in Energie  $W$  umgeschrieben werden.  $dk$  muss allerdings aus der Gleichung für  $W(k)$  abgeleitet werden: (Gleichungen). Damit ergibt sich  $dk$  als Funktion von der Energie  $W$  (Gleichung)

Zustandsdichte

LENA Laboratory for Energy Nanotechnology INSTITUT FÜR Halbleitertechnik



$$N_{W=const} = \int_{W=const} \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$$

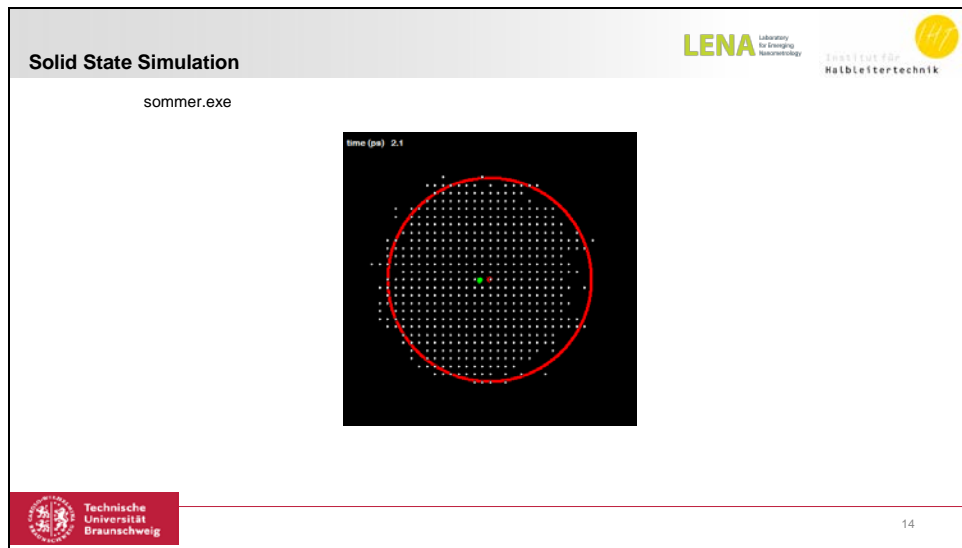
$$dk = \left( \frac{\hbar^2}{m} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \right)^{-1} dE$$

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

$$D(W) = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{W}$$

Technische Universität Braunschweig

Ziehen wir die Ergebnisse zusammen, so ergibt sich für die Gesamtzahl der Zustände bei der Energie  $W$  und einem Energie-Intervall  $dW$  die obige Gleichung. Im Integranden steht die Zustandsdicht als Funktion der Energie  $W$ . Für diese Zustandsdichte  $D(W)$  ergibt sich eine Proportionalität zu Wurzel aus der Energie. Im Vorfaktor steht neben Konstanten wie z.B. dem planckchen Wirkungsquantum  $h$ -quer noch die Masse. Hierfür ist in Halbleitern die effektive Masse  $m^*$  von quasi-freien Elektronen oder Löchern einzusetzen. Dies ist auch der Grund, warum Zustandsdichten für Elektronen und Löcher nicht völlig identisch sind, da sich die jeweiligen effektiven Massen – und damit die Vorfaktoren in der Zustandsdichte – unterscheiden.



Die Verteilung der Elektronen auf die möglichen Zustände im k-Raum folgt der Fermi-Dirac-Funktion: die Zustände werden von niedriger Energie beginnend aufgefüllt. Die Energie des höchsten besetzten Zustands nennt man Fermi-Energie.