

FESTKÖRPERPHYSIK

**KRISTALLSTRUKTUR
ELEKTRONENZUSTÄNDE
WECHSELWIRKUNGEN**

VON EINEM AUTORENKOLLEKTIV

**UNTER LEITUNG VON
PROF. DR. KONRAD UNGER
(FEDERFÜHRENDER AUTOR)**

**SEKTION PHYSIK
DER KARL-MARX-UNIVERSITÄT LEIPZIG**

**PROF. DR. HELMUT GÜNTHER SCHNEIDER
SEKTION PHYSIK/ELEKTRONISCHE BAUELEMENTE
DER TECHNISCHEN HOCHSCHULE KARL-MARX-STADT**

MIT 266 ABBILDUNGEN UND 21 TABELLEN



**LEIPZIG 1979
AKADEMISCHE VERLAGSGESELLSCHAFT
GEEST & PORTIG K.-G.**

Inhalt

H. G. Schneider und K. Unger

Technische Hochschule Karl-Marx-Stadt, Sektion Physik/Elektronische Bauelemente, und Karl-Marx-Universität Leipzig, Sektion Physik

1.	Einleitende Bemerkungen	16
----	-----------------------------------	----

Kristallstruktur des Festkörpers

E. Höhne

Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Molekularbiologie, Berlin-Buch

2.	Methodik zur Bestimmung und kristalchemische Interpretation der Idealstruktur von Kristallen	19
2.1.	Vorkommen der Kristalle	19
2.2.	Der Kristallbegriff	19
2.2.1.	Der Idealkristall	19
2.2.2.	Der Mosaikerkristall	20
2.2.3.	Kristallpulver	20
2.3.	Die Kristallstruktur	20
2.4.	Experimentelle Grundlagen	21
2.4.1.	Grundlagen der Röntgenbeugung	21
2.4.2.	Bestimmung des Kristallgitters und der Symmetrie	22
2.4.3.	Experimentelle Methoden der Röntgenbeugung	22
2.5.	Berechnung der Kristallstruktur	23
2.6.	Beispiele	24
2.6.1.	Epimino-cholestan-hydrobromid	24
2.6.2.	Veralkamin-hydrojodid	26
2.6.3.	N-Methyl-piperidinium-acet-ortho-chlor-anilid-jodid	27
2.7.	Ultragenaue Kristallstrukturanalyse	28
2.7.1.	Problemstellung	28
2.7.2.	Beispiele	28
2.8.	Einsatzmöglichkeiten der Methode	31
2.8.1.	Organische Verbindungen	32
2.8.2.	Anorganische Verbindungen	32
2.8.3.	Biologische Strukturen	32
2.8.4.	Entwicklungstendenzen	32
	Literatur zu Kapitel 2	33

P. Süptitz

Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Elektronenphysik, Berlin

3.	Atomare Fehlstellen in Kristallen	34
3.1.	Einleitung	34
3.2.	Punktdefektarten	35

3.3.	Statistisch-thermodynamische Behandlung der Eigendefekte	38
3.4.	Die Aktivierungsenergie für die Bildung von Eigenfehlstellen	41
3.5.	Platzwechsel	43
3.6.	Diffusion	45
3.7.	Punktdefekte und weitere Kristalleigenschaften	47
	Literatur zu Kapitel 3	49

M. Schulz

Kombinat VEB Halbleiterwerk Frankfurt/O., Hauptbereich Forschung, Stahnsdorf

4.	Realstruktur von Kristallen	50
4.1.	Einleitung	50
4.2.	Kristallbaufehler	51
4.2.1.	Baufehlersystematik	51
4.2.2.	Baufehlerbeschreibung	51
4.2.3.	Baufehlerwechselwirkungen	53
4.2.4.	Kristallbaufehlerentstehung	53
4.2.5.	Kristallbaufehlernachweis	54
4.3.	Untersuchungsmethoden	55
4.3.1.	Lichtmikroskopie	55
4.3.2.	Elektronenmikroskopie	55
4.3.3.	Infrarotmikroskopie	56
4.3.4.	Röntgentopographie	57
4.4.	Experimentelle Ergebnisse aus Realstrukturuntersuchungen	57
	Literatur zu Kapitel 4	67

P. Süptitz

Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Elektronenphysik, Berlin

5.	Herstellung und Struktur amorpher Festkörper	69
5.1.	Einleitung	69
5.2.	Die Herstellung amorpher Festkörper	70
5.2.1.	Thermische Verdampfung	71
5.2.2.	Zerstäuben	71
5.2.3.	Glasherstellung durch Abkühlen einer Schmelze	72
5.2.4.	Weitere Herstellungsmethoden amorpher Festkörper aus der flüssigen Phase	73
5.2.5.	Amorphisierung fester Körper	73
5.3.	Die Realstruktur amorpher Festkörper	74
5.4.	Methoden zur Untersuchung der Grundstruktur amorpher Festkörper	75
5.5.	Die Nahordnung in amorphen Festkörpern	78
5.6.	Strukturmodelle	80
5.6.1.	Das Mikrokristallit-Modell	80
5.6.2.	Cluster-Modelle	81
5.6.3.	Das Netzwerkmodell	82
	Literatur zu Kapitel 5	83

Elektronenzustände im Festkörper

K. Kreher

Karl-Marx-Universität Leipzig, Sektion Physik

6.	Die Bandstruktur von Halbleitern und Isolatoren sowie ihre Beziehung zu Bauelementeparametern	85
6.1.	Einleitung	85
6.2.	Bandstrukturen und Möglichkeiten zu ihrer Veranschaulichung	86
6.2.1.	Eindimensionales Modell	86
6.2.2.	Veranschaulichung der Bandstruktur in drei Dimensionen	87
6.3.	Bandstruktur und Materialeigenschaften	92
6.3.1.	Effektive Masse und Quasiteilchenbegriff	92
6.3.2.	Rekombinationslebensdauer	94
6.3.3.	Amphotere Dotierbarkeit	95
6.3.4.	Zusammenhang zwischen Bauelementefunktion und Bandstruktur	96
	Literatur zu Kapitel 6	100

G. Lehmann

Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Festkörperphysik und Werkstofforschung, Dresden

7.	Elektronenstruktur von reinen, kompakten Metallen, Metallegierungen und dünnen Metallschichten	101
7.1.	Einleitung	101
7.2.	Bandstruktur als Folge der Periodizität	102
7.3.	Besonderheiten bei Oberflächen und dünnen Schichten	107
7.4.	Bandstruktur reiner Metalle	111
7.5.	Besonderheiten der Bandstruktur bei Legierungen	119
7.6.	Schluß	122
	Literatur zu Kapitel 7	123

M. Abraham und Ch. Schnittler

Technische Hochschule Ilmenau, Sektion Physik und Technologie elektronischer Bauelemente

8.	Bestimmung der Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen eindimensionaler Festkörpermodelle mit Hilfe des Analogrechners	125
8.1.	Grundzüge der elektronischen Struktur von Festkörpern	125
8.2.	Lösung von Eigenwertproblemen mit Hilfe des Analogrechners	127
8.3.	Grundeigenschaften der Wellenfunktionen und Energieeigenwerte eindimensionaler Festkörpermodelle	129
8.3.1.	Reelle und komplexe Wellenfunktionen	129
8.3.2.	Gerades Potential	130
8.3.3.	Periodische Randbedingungen	130
8.3.4.	Erlaubte Wellenzahlen	131
8.3.5.	Entartung	131
8.3.6.	Knotensatz	132
8.4.	Untersuchung unbegrenzter, geordneter Festkörpermodelle mit dem Analogrechner	132

8.5.	Untersuchung begrenzter, geordneter Kristallmodelle mit dem Analogrechner	135
8.6.	Untersuchung unbegrenzter, ungeordneter Kristallmodelle mit dem Analogrechner	141
8.7.	Schlußbemerkungen	144
	Literatur zu Kapitel 8	145

K. Unger

Karl-Marx-Universität Leipzig, Sektion Physik

9.	Elektronenstruktur von reinen und gemischten Halbleitern	146
9.1.	Einleitung — Problemstellung	146
9.2.	Die Pseudopotentialmethode zur Berechnung von Halbleiter-Bandstrukturen	147
9.2.1.	Berechnungsmethoden	147
9.2.2.	Bandstrukturerggebnisse und erkennbare chemische Trends	149
9.2.3.	Die räumliche Elektronendichteverteilung	152
9.3.	Die Abschirmung bei gemischter kovalent-ionarer Bindung	154
9.3.1.	Lineare Abschirmung im freien Elektronengas und im Halbleiterkristall	156
9.3.2.	Die elektronische Dielektrizitätskonstante in Element- und Verbindungshalbleitern	158
9.3.3.	Bindungsladungen und nichtlineare Abschirmung	159
9.4.	Valenzbandstruktur und chemische Trends	161
9.4.1.	Ergebnisse der Röntgenspektroskopie und der Photoelektronenspektroskopie	161
9.4.2.	Einflüsse der Wechselwirkung nächster und übernächster Nachbarn auf die Valenzbandstruktur	165
9.5.	Die Bandstruktur und Elektronendichteverteilung gemischter Halbleiter	166
9.5.1.	Eigenschaftsänderungen innerhalb von Mischkristallreihen	166
9.5.2.	Einflüsse der chemischen Unordnung auf die Elektronenstruktur	168
9.5.3.	Kristallstruktur von Mischkristallen	170
9.6.	Zusammenfassung und Ausblick	171
	Literatur zu Kapitel 9	172

H. Herbst

Kombinat VEB Halbleiterwerk Frankfurt/O., Hauptbereich Forschung, Stahnsdorf

10.	Störstellen in Halbleitern und ihre meßtechnische Erfassung	176
10.1.	Einleitung	176
10.2.	Störstellenzustände	176
10.2.1.	Flache Störstellen	176
10.2.2.	Tiefe Störstellen	181
10.2.3.	Isoelektronische Störstellen	183
10.2.4.	Störstellenkomplexe	184
10.3.	Meßtechnische Erfassung von Störstellen	185
10.3.1.	Halleffekt und Leitfähigkeit	186
10.3.2.	Optische Absorption durch Elektronen in lokalisierten Zuständen	191
10.3.3.	Photolumineszenz	196

10.3.4. Thermisch stimulierte Leitfähigkeit	201
10.3.5. Lokalisierte Schwingungsmoden	204
10.3.6. Paramagnetische Elektronenresonanzen	205
Literatur zu Kapitel 10	208

G. O. Müller

Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Elektronenphysik,
Berlin

11. Strahlende Rekombination in Halbleitern und Phosphoren	211
11.1. Einleitung	211
11.2. Absorption und Emission im Festkörper	213
11.3. Arten der Rekombination freier Ladungsträger	215
11.3.1. Band-Störstellen-Übergänge	216
11.3.2. Störstellen-Störstellen-Übergänge	218
11.3.3. Exzitonen	221
11.3.4. Gebundene Exzitonen	226
11.3.5. Isoelektronische Störstellen	228
11.3.6. Komplikationen	232
11.4. Hohe Anregungen	234
11.5. Anwendungen und Ausblick	237
Literatur zu Kapitel 11	238

K. Kreher

Karl-Marx-Universität Leipzig, Sektion Physik

12. Strahlungslose Elektronenübergänge in Halbleitern	240
12.1. Einleitung	240
12.2. Theoretische Grundlagen	240
12.2.1. Quasiteilchen und ihre Dispersionsrelationen	240
12.2.2. Wechselwirkungsmechanismen in Halbleitern	242
12.3. Beispiele für experimentelle Untersuchungsmöglichkeiten	245
12.3.1. Nachweis von Auger-Prozessen	245
12.3.2. Nachweis von Phononenprozessen	250
Anhang. Berechnung der Schwellenenergie für Stoßionisation bzw. Auger-Effekt bei einfachen parabolischen Bändern	254
Literatur zu Kapitel 12	255

Wechselwirkungen Kristallstruktur – Elektronenzustände

K. Hübner

Wilhelm-Pieck-Universität Rostock, Sektion Physik

13. Ionizität und Struktur von Halbleiterkristallen	257
13.1. Einleitung	257
13.2. Gemischt ionogen-kovalente chemische Bindungen	258
13.2.1. Ionizitätskonzept	258
13.2.2. Methode der relativen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten	263
13.3. Abgrenzung zwischen tetraedrisch und oktaedrisch koordinierten Kristall- strukturen	265

13.4. Abgrenzung zwischen Zinkblende- und Wurtzit-Struktur	270
13.4.1. Kompaktes Material	270
13.4.2. Epitaxieschichten	273
13.5. Schlußbemerkungen	275
Literatur zu Kapitel 13	276

K.-R. Schulze und B. Gobsch¹⁾

Karl-Marx-Universität Leipzig, Sektion Physik

14. Einfluß der Gitterdeformation in der Umgebung von Störstellen auf deren lokale Energieniveaus	279
14.1. Einleitung	279
14.2. Eigenwertproblem des gestörten Kristalls — Effektiv-Massen-Näherung	280
14.3. Störpotentialanteile	282
14.4. Polarisation der Valenzelektronen	283
14.5. Gitterdeformation	284
14.6. Konzepte zur theoretischen Behandlung des Deformationseinflusses	285
14.6.1. Minimalisierung der Gesamtenergie	286
14.6.2. Zusatzpotential durch explizite Bausteinverschiebung	288
14.6.3. Energiekorrektur mittels Deformationspotentialmethode	291
14.6.4. Energieänderung in einer dynamischen Relaxationsnäherung	292
14.6.5. Weitere Konzepte	294
14.7. Deformation durch freie Ladungsträger	296
14.8. Schlußbemerkungen	297
Literatur zu Kapitel 14	297

H. Neumann

Karl-Marx-Universität Leipzig, Sektion Physik

15. Modelle der Elektron-Phonon-Wechselwirkung und deren Auswirkung auf die Transporteigenschaften	300
15.1. Einleitung	300
15.2. Elektronen und Phononen	304
15.3. Elektron-Phonon-Wechselwirkung	310
15.4. Modelle der Elektron-Phonon-Wechselwirkung	312
15.5. Einfluß der Elektron-Phonon-Wechselwirkung auf Transporterscheinungen	315
15.5.1. Boltzmann-Gleichung	316
15.5.2. Elektrische Leitfähigkeit	317
15.6. Schlußbemerkungen	321
Literatur zu Kapitel 15	321

H. Berger und G. Jäniche

Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Elektronenphysik, Berlin, und Humboldt-Universität Berlin, Sektion Physik

16. Realstruktur und Leitfähigkeit von halbleitenden Schichten	324
16.1. Schichtwachstum und Realstruktur	324

¹⁾ Jetzt: Technische Hochschule Ilmenau, Sektion Physik und Technologie elektronischer Bauelemente.

16.2.	Leitfähigkeitseinhomogenitäten senkrecht zum Substrat	327
16.3.	Polykristalline Halbleiterschichten und laterale Leitfähigkeitseinhomogenitäten	330
16.4.	Dominierende Streuprozesse in Halbleiterschichten	335
16.5.	Schlußbemerkungen	340
	Literatur zu Kapitel 16	341

H. Böttger

Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Elektronenphysik,
Berlin

17.	Quasieindimensionale Festkörper	342
17.1.	Einleitung	342
17.2.	Quasieindimensionale Systeme und deren Struktur	343
17.3.	Einige physikalische Eigenschaften quasieindimensionaler Festkörper	346
17.4.	Peierls-Instabilität und Kohn-Anomalie	347
17.5.	Fröhlich-Mechanismus der Supraleitung	352
17.6.	Schlußbemerkungen	353
	Literatur zu Kapitel 17	353

R. Boyn

Humboldt-Universität Berlin, Sektion Physik

18.	Einfluß der Elektron-Phonon-Wechselwirkung auf die optischen Spektren von Halbleitern	355
18.1.	Indirekte Interbandübergänge	355
18.2.	Phononenassistierte Exzitonenübergänge	359
18.3.	Phononenassistierte Übergänge zwischen Störstellenniveaus	364
18.4.	Schlußbemerkungen	369
	Literatur zu Kapitel 18	370

G. O. Müller

Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Elektronenphysik,
Berlin

19.	Physikalische Grundlagen der Akustoelektronik	371
19.1.	Einleitung	371
19.2.	Dämpfung und Verstärkung von akustischen Wellen in Halbleitern	372
19.3.	Experimente zur Ultraschallverstärkung	378
19.4.	Inhomogenitäten und Nichtlinearitäten	380
19.5.	Anwendungen	381
19.6.	Oberflächenwellen	382
19.7.	Nichtlinearitäten	390
19.8.	Opto-Akustoelektronik	393
19.9.	Ausblick	394
	Literatur zu Kapitel 19	395

H. Böttger

Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Elektronenphysik,
Berlin

20.	Elektronen, Phononen und Elektron-Phonon-Wechselwirkung in nicht-kristallinen Festkörpern	396
20.1.	Einleitung	396
20.2.	Lokalisierte Zustände	397
20.2.1.	Lokalisierung von Elektronenzuständen	397
20.2.2.	Lokalisierung von Schwingungszuständen	400
20.3.	Hoppingleitfähigkeit	401
20.4.	Untersuchung des Lokalisierungsproblems und der Hoppingleitfähigkeit mit Hilfe der Percolationstheorie	403
20.5.	Bandmodelle und Beweglichkeitsgap	406
20.6.	Nahordnung und Zustandsdichte	407
20.7.	Thermische Anomalien bei tiefen Temperaturen	408
20.8.	Abschließende Bemerkungen	409
	Literatur zu Kapitel 20	410

G. Schmidt

Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Sektion Physik

21.	Struktur und Stoffeigenschaften der Ferroelektrika	412
21.1.	Einleitung	412
21.2.	Kennzeichnung der Ferroelektrika	412
21.3.	Phänomenologische Theorie der ferroelektrischen Phasenumwandlung	413
21.3.1.	Landausche Theorie der Phasenumwandlung 2. Ordnung	413
21.3.2.	Eigentliche Ferroelektrika	416
21.3.3.	Uneigentliche Ferroelektrika	418
21.3.4.	Klassifizierung der strukturellen Phasenumwandlungen	419
21.3.5.	Schwankungserscheinungen	420
21.4.	Zur mikroskopischen Theorie der Ferroelektrizität	423
21.4.1.	Einteilung der Ferroelektrika	423
21.4.2.	Ferroelektrika vom Verschiebungstyp	424
21.4.3.	Ferroelektrika vom Ordnungs-Unordnungs-Typ	427
21.5.	Domänen und Schalteigenschaften	428
21.5.1.	Domänenstruktur	428
21.5.2.	Untersuchung der Domänenstruktur	429
21.6.	Ferroelektrika mit diffuser Phasenumwandlung	431
	Literatur zu Kapitel 21	431

H. Wich

Akademie der Wissenschaften der DDR, Zentralinstitut für Festkörperphysik
und Werkstofforschung, Dresden

22.	Struktur und Stoffeigenschaften magnetischer Festkörper	433
22.1.	Einleitung	433
22.2.	Theorie und Grundlagen magnetischer Erscheinungen	433
22.2.1.	Atomarer Ursprung magnetischer Momente	434
22.2.2.	Magnetische Ordnungsstrukturen	437

22.2.3. Mechanismen der Spinkopplung	442
22.2.4. Magnetisch verdünnte und konzentrierte Lösungen	443
22.3. Magnetische Domänen	445
22.4. Anisotropien und Vorzugslagen	447
22.4.1. Magnetokristalline Energie E_K	447
22.4.2. Magnetoelastische Energie E_σ	447
22.5. Magnetisierungskurve	449
22.5.1. Magnetisierungsprozesse	449
22.5.2. Hystereseigenschaften	450
22.5.3. Magnetfeldinduzierte Richtungsordnung	451
22.5.4. Gleitungsinduzierte Anisotropie	452
22.5.5. Dynamische Magnetisierung	453
22.6. Anwendungsgebiete der Werkstoffe	455
Literatur zu Kapitel 22	458
Sachregister	459