

Zur Vorlesung „Grundlagen der Materialwissenschaft“

Online-Lesehilfe 7: Thermodynamik (Ende); Dielektrika und Optik (Anfang)

Inhalt

Unterkapitel 5.3: Zustandsdichten und Verteilungsfunktionen

5.3.1 Die Boltzmann-Verteilung

5.3.2 Die Fermi-Dirac-Verteilung

5.3.3 Eigenschaften der Fermi-Verteilung

Unterkapitel 5.4: Zusammenfassungen zu Kapitel 5

Unterkapitel 6.1: Warum Dielektrika wichtig sind

6.1.1 Feldstärke, Stromdichte und Zeitkonstanten

6.1.2 Was wir über Dielektrika gerne wissen möchten

Unterkapitel 6.2: Elektrischer Durchbruch

6.2.1 Effekte und Mechanismen

Unterkapitel 5.3: Zustandsdichten und Verteilungsfunktionen

Nun kommen wir zur thermodynamisch Behandlung der Elektronen, und es werden einige der Fragen geklärt, die in den letzten Abschnitten offengeblieben sind. Vorab üben wir die dazu nötige „Denke“ anhand der uns besser vertrauten klassischen Beschreibung.

5.3.1 Die Boltzmann-Verteilung

Die Boltzmann-Verteilung beantwortet die folgende Frage für klassische Teilchen: *Wie verteilen sich die Teilchen des Systems im Gleichgewicht auf die vorhandenen Energiezustände?* Um diese Frage beantworten zu können, muß man auch etwas über die im System vorhandenen Energiezustände wissen. Dazu dient eine spezielle Funktion, die **Zustandsdichte $D(E)$** . Zu jedem System gehört eine eigene Zustandsdichte; sie ist eine „doppelte Dichte“, denn sie gibt die Anzahl der Plätze sowohl auf der Energieachse als auch im Raum an, d. h. wieviele Teilchen pro Kubikzentimeter und pro Elektronenvolt bei einem System maximal möglich sind.

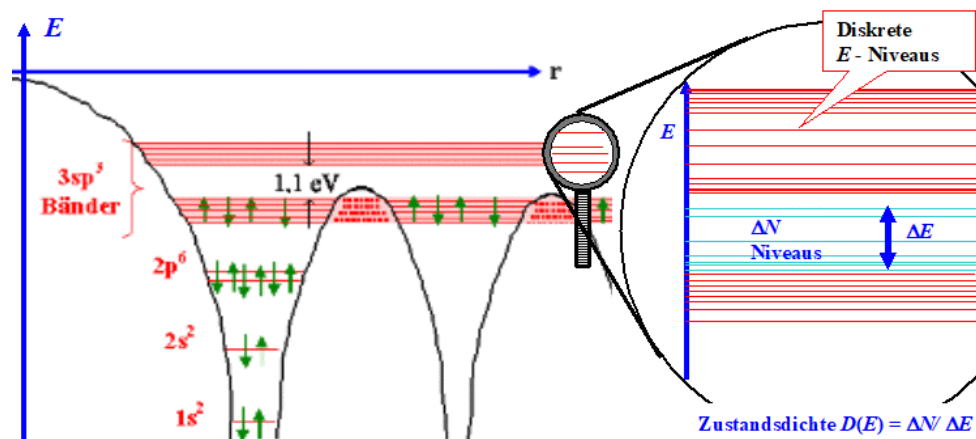
Dazu ein konkretes Beispiel: In einem Gas bewegen sich die Moleküle mit individuellen Geschwindigkeiten durch den Raum. Diese Geschwindigkeit ist eine sinnvolle Möglichkeit, den Zustand eines einzelnen Gasmoleküls anzugeben. Zu jedem Geschwindigkeitsvektor $\underline{v} = (v_x, v_y, v_z)$ gehört eine kinetische Energie $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$. Also haben alle durch irgend ein Zahlentripel (v_x, v_y, v_z) gegebenen Zustände, für die $v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = \text{const}$ gilt, dieselbe Energie. (In der Quantenmechanik spricht man in so einem Fall übrigens davon, daß diese Zustände bezüglich der Energie *entartet* seien. Wir sind bislang ohne diesen Fachbegriff ausgekommen, und wir werden ihn in Zukunft auch nicht benötigen, weil wir statt dessen die Zustandsdichte verwenden werden; ich erwähne es hier bloß, damit Sie verstehen können, was im Hyperskript damit gemeint ist.)

Anschaulich bedeutet die Bedingung „ $E_{\text{kin}} = \text{const}$ “, daß zu einem gegebenen Energiewert (bzw. Energieniveau) eine „Kugeloberfläche“ im „Raum“ der Geschwindigkeiten gehört. Die zu dieser Energie (bzw. zu diesem Energieniveau) gehörenden „Plätze“ einzeln abzuzählen, ist nicht direkt möglich, aber zumindest ist plausibel, daß eine größere Kugeloberfläche mehr

solcher Plätze hat als eine kleinere. Weitere Details sind hier unnötig; wir werden später bei einem ähnlichen Problem etwas näher darauf eingehen, wie man das wirklich exakt ausrechnen kann. Auch bei einem quantenmechanisch zu beschreibenden System (wie einem Teilchen in einem Potentialtopf oder den Elektronen in einem Halbleiterkristall) stößt man, in einem verallgemeinerten Sinn, auf „Flächen konstanter Energie“ in einem abstrakten Raum.

Nun zur Zustandsdichte. Eine auf den Raum bezogene Dichte läßt sich am Beispiel der Massendichte durch „Dichte mal Volumen ist Masse dieses Volumens“ erklären. Mit der auf die Energie bezogenen Dichte ist es ebenso: Zustandsdichte mal Energieintervall gleich Anzahl der Zustände in diesem Intervall. Umgekehrt kann man die jeweilige Dichte auch anhand dieser Zusammenhänge errechnen: Die Massendichte ist Masse pro Volumen, die Zustandsdichte ist Zustandsanzahl pro Energieintervall.

Bei einzelnen Atomen ist das insofern anschaulich, als daß sich dort die unterschiedlichen atomaren Energieniveaus auf der Energieachse verteilen. Bei den tiefsten Energien (d. h. bei den Elektronen auf den inneren Schalen) sind es nur wenige, mit deutlichem Abstand voneinander; bei höheren Energien liegen die Niveaus dichter, und es passen auch mehr Elektronen auf diese Niveaus. Setzt man aus vielen solcher Atome einen Kristall zusammen, ist zum einen klar, daß jedes Atom eine entsprechende Anzahl von Zuständen „mitbringt“, und da es typischerweise um die 10^{22} Atome pro Kubikzentimeter sind (vgl. Übung 5, Aufgabe 9), liegt zum anderen auch die Anzahl der Zustände pro cm^3 in dieser Größenordnung. Zum dritten verteilen sich die Energiezustände neu auf der Energieachse und liegen in Bändern vor (vgl. Unterkapitel 2.3: Essenz der Quantentheorie). Zoomt man nur stark genug hinein, kann man auch dort eine „Feinverteilung“ diskreter Niveaus ausmachen und direkt sehen, wie dicht die Niveaus auf der Energieachse liegen – hier wieder am Beispiel des Siliziumkristalls gezeigt:



Nochmal: Die Massendichte ist Masse pro Volumen, die Zustandsdichte ist Zustandsanzahl pro Energieintervall. Wie genau die Massenverteilung im Raum (bzw. die Verteilung der Zustände bezüglich der Energie) damit erfaßt wird, hängt von der Größe des betrachteten Volumens (bzw. Intervalls) ab: Je kleiner das Volumen (bzw. das Intervall) gewählt wird (d. h. je stärker hineingezoomt wird), desto genauer können kleine Schwankungen in der Verteilung der Masse im Raum bzw. der Plätze auf der Energieachse berücksichtigt werden.

Im idealen Grenzfall sehr kleiner Volumina bzw. Intervalle führt dies auf eine differentielle bzw. integrale Beschreibung, hier für eine Massendichte: Die Gesamtmasse eines Körpers, dessen Massenverteilung anhand der Dichteverteilung $\rho(V)$ bekannt ist, lautet $m = \int \rho(V) dV$. Das Integral kann formal korrekt auch als $m = \int dm(V)$ geschrieben werden (und heißt auf schlaue dann Stieltjesintegral), woraus sich die Physiker eine Anschauung bezüglich „infini-

tesimal kleiner Massenelemente“ dm gebastelt haben. Obwohl jedem Mathematiker von dieser Physikerdenke einfach nur schlecht wird (erinnern Sie sich in diesem Zusammenhang an die „Physikerschreibweise“ bei der Substitutionsregel auf dem 1. Übungsblatt), ist sie ab und zu doch ganz nützlich; zum Glück haben die Mathematiker die nötigen theoretischen Werkzeuge entwickelt (wie zum Beispiel das Stieltjes- oder [noch viel besser!] das Lebesgue-Integral), mit denen sie (weitestgehend) reparieren können, was die Physiker da ständig verzapfen.

Im Sinne dieser infinitesimalen Physikerdenke betrachten wir ein sehr kleines Intervall dE , das sich beim Wert E auf der Energieachse befinde. Die Zustandsdichte des betrachteten Systems hat dort den Wert $D(E)$, und dementsprechend ist die (ebenfalls sehr kleine) Anzahl $dN(E)$ der Zustände in diesem Intervall bei der Energie E gegeben durch $dN(E) = D(E) dE$. Weil aber die Zustandsdichte eine doppelte Dichte ist, erhalten wir, wenn wir nur das Intervall auf der Energieachse betrachten, nicht die Anzahl der Zustände, sondern ihre Dichte im Raum. Das läßt sich leicht berücksichtigen; zusammengefaßt lautet die Aussage also:

$$dN(E) = D(E) dE = \text{Zahl der Zustände im Energieintervall von } E \text{ bis } E + dE \text{ pro cm}^3.$$

Bislang scheint diese Gleichung lediglich eine etwas seltsame Größe [nämlich $D(E)$] mit einer eher unanschaulichen Größe [nämlich $dN(E)$] zu verbinden. Zusätzlich bauen wir nun noch die Ausgangsfrage dieses Abschnitts in den Formalismus mit ein: *Wie verteilen sich die Teilchen des Systems im Gleichgewicht auf die vorhandenen Energiezustände?* Dazu stellen wir diese Frage ein wenig anders: *Mit welcher Wahrscheinlichkeit $w(E)$ ist im Gleichgewicht ein Platz bei der Energie E mit einem Teilchen des Systems besetzt?* Diese Frage haben wir für klassische Teilchen bereits beantwortet, denn diese Wahrscheinlichkeit wird durch den Boltzmannfaktor in der Boltzmannverteilung angegeben. Das bedeutet zum einen, daß wir diese Wahrscheinlichkeit genausogut (und auch genauso gut!) für quantenmechanische Teilchen angeben können, wenn wir nur deren Verteilungsfunktion kennen, und zum anderen, daß sich das Konzept der Besetzungswahrscheinlichkeit $w(E)$ universell verwenden läßt.

Wenn wir die „Plätze“, die das System seinen Teilchen bietet, mit der Wahrscheinlichkeit zusammenbringen, daß ein solcher Platz besetzt ist, ergibt das die tatsächliche Anzahl (pro cm^3) von Teilchen – d. h. ihre Dichte $n(E)$ –, die wir bei dieser Energie antreffen:

$$n(E) = D(E) w(E) dE.$$

Um es sehr deutlich zu sagen: *Das ist eine im Prinzip einfache, aber ungeheuer wichtige Beziehung, die wir noch oft brauchen werden!* Und weil sie so wichtig ist, soll sie an einem einfachen Beispiel erläutert werden: Wie können Sie ermitteln, wieviel Sprit sich noch im Tank eines Fahrzeugs befindet? Ganz einfach: Sie schauen auf die Tankanzeige, die liefert effektiv den Füllstand in Prozent. Dann nehmen Sie das mit dem Volumen des eingebauten Tanks mal, und heraus kommt die tatsächliche Menge Sprit in Litern.

So verhält es sich auch mit den beiden wesentlichen Faktoren in der obigen Gleichung für die Teilchendichte (den Faktor dE lassen wir hier außer Betracht): Dem Füllstand in Prozent entspricht die Besetzungswahrscheinlichkeit $w(E)$, denn auch diese kann in Prozent angegeben werden; dem Tankvolumen entspricht die Zustandsdichte $D(E)$. Es lohnt sich sehr, sich das in Ruhe selber klarzumachen. (Im Unterschied zum Auto gilt das dann zwar formal nur für die eine Energie, aber was für eine beliebige Energie gilt, gilt auch für alle anderen.)

Wichtig: Mit nur zwei unterschiedlichen „Wahrscheinlichkeitsfunktionen“ $w(E)$ (die auf schlau Verteilungsfunktionen heißen) kann man **alle** Systeme auf der Welt (und im gesamten Universum) beschreiben! Es sind zwei und nur zwei, weil es genau zwei grundverschiedene Teilchensorten gibt: Bosonen und Fermionen. Zur Erinnerung: Der fundamentale Unterschied zwischen diesen beiden Teilchensorten liegt in folgender Eigenschaft:

Fermionen: Auf einem Zustand kann immer nur genau ein Fermion sitzen.

Bosonen: Auf einem Zustand können beliebig viele Bosonen sitzen.

Es ist klar, daß sich dieser fundamentale Unterschied darauf auswirkt, wie sich die Teilchen auf die Plätze verteilen, und daß es also zwei unterschiedliche Verteilungsfunktionen gibt.

Es geht sogar noch weiter: *Falls die Teilchen eines gegebenen Systems die verfügbaren Plätze (gegeben durch die Zustandsdichte des betreffenden Systems) nach Maßgabe der zuständigen Verteilungsfunktion besetzen, ist das System im thermodynamischen Gleichgewicht (d. h. im Minimum seiner freien Energie).* Das bedeutet, daß einem die Verwendung der Verteilungsfunktionen die mühsame Rechnung zur Minimierung der freien Energie erspart.

Das ist eine enorme Erleichterung, denn die beiden Verteilungsfunktionen für Fermionen bzw. Bosonen sind mathematisch so einfach, wie es gerade noch geht, um die benötigten Eigenschaften zu erhalten. Zudem kann man diese beiden Verteilungsfunktionen oft (genauer: unter bestimmten Umständen, die wir noch genauer anschauen werden) in sehr guter Näherung durch eine einzige mathematisch noch einfachere Verteilungsfunktion beschreiben, nämlich der für klassische Teilchen – und das ist die Boltzmann-Verteilung, die wir schon kennen.

„Klassische Teilchen“ gibt es eigentlich nicht, denn ein Teilchen ist entweder ein Boson oder ein Fermion (entsprechend seinem Spin). Aber es gibt das *Modell* des klassischen Teilchens, und mit dem hier angegebenen Hintergrund können wir sehr einfach definieren, wann sich ein Bosonen oder Fermion wie ein klassisches Teilchen verhält – nämlich unter solchen Umständen, bei denen die Boltzmann-Verteilung zur näherungsweise Beschreibung vollkommen ausreicht. Wir werden noch sehr oft davon Gebrauch machen!

Die Boltzmannverteilung ist eine mit der Energie abfallende Exponentialfunktion, ausgedrückt durch den Boltzmannfaktor. Falls die weitaus überwiegende Zahl der Teilchen im untersten Energieniveau (hier bei $E = 0$ eV) sitzt, kann man sie vereinfacht schreiben als

$$n_i = n_{\text{total}} \exp[-E_i/(k_B T)].$$

Sie gibt bei gegebener Temperatur T die Dichte n_i der Teilchen mit der Energie E_i an.

Da wir uns nicht näher mit Bosonen beschäftigen werden (Photonen sind z. B. welche), benötigen wir deren Verteilungsfunktion (die Bose-Einstein-Verteilung) nicht und lassen sie einfach weg. Damit kommen wir direkt zur Verteilungsfunktion für die Fermionen.

5.3.2 Die Fermi-Dirac-Verteilung

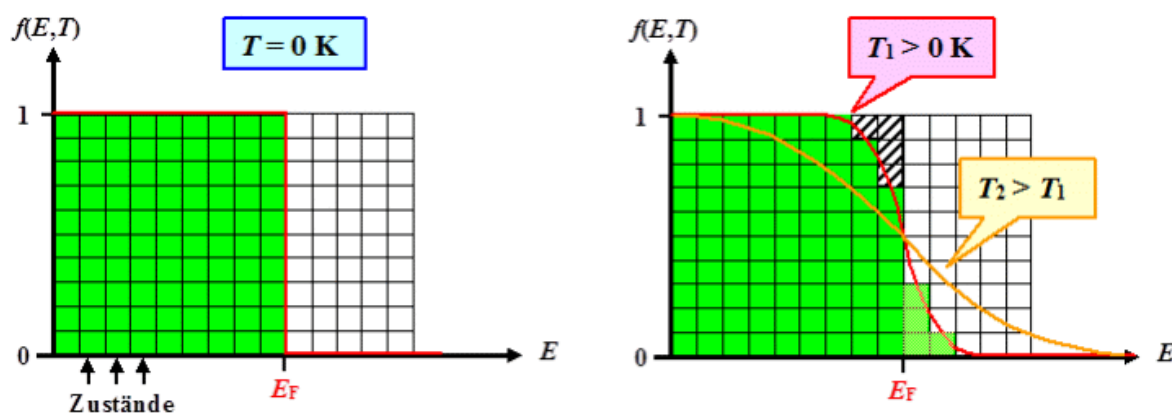
Letztlich wollen wir wissen, wie sich die Elektronen der Halbleiterkristalle auf die Energiebänder verteilen, die wir bekommen, sobald wir aus einzelnen Atomen einen Kristall machen. (Diese Energiebänder haben wir im Abschnitt 2.3.1 behandelt.) Dazu benötigen wir die Zustandsdichte $D(E)$ des jeweiligen Halbleiters und die zugehörige Verteilungsfunktion. Wie wir zu der Zustandsdichte kommen, ist erst mal egal (im Zweifelsfall kann man dafür einfach gemessene Daten verwenden – ja, $D(E)$ ist eine meßbare Größe!); statt dessen kümmern wir uns jetzt nur um die Verteilungsfunktion. Grundlegende Eigenschaften dieser Funktion kann man sich nämlich bereits anhand des Pauli-Prinzips und des Prinzips der Minimierung der freien Energie selbst leicht klar machen.

Zur **Vereinfachung** betrachten wir jetzt ein **Modellsystem** mit konstanter Zustandsdichte. Wir werden es später zwar nicht mit so unrealistischen System zu tun haben (also müssen wir uns hüten, zuviel davon für „echt“ zu halten; Prinzipzeichnungen bitte nicht mit der Realität verwechseln!), aber es hilft einem sehr, den Kerngedanken der Fermi-Verteilung zu verstehen. („Dirac“ wird meistens weggelassen, so wie „Einstein“ bei der Bose-Verteilung. Enrico Fermi

hat 1938 den Physik-Nobelpreis erhalten, und zwar für kernphysikalische Entdeckungen; bevor er Experimentator wurde, war er Professor für Mathematik und Theoretische Physik.)

In unserem Modellsystem geben wir 10 Plätze pro eV über den ganzen Energiebereich vor, d. h. $D = 10 \text{ eV}^{-1}$ ist eine Konstante (wir schenken uns das cm^{-3} in der Dimension). Das hat wegen der obigen Gleichung für die Teilchendichte (die dann $n(E) = D w(E) dE$ lautet) zur Folge, daß sich die Energieabhängigkeit von $w(E)$ direkt auf die Verteilung $n(E)$ der Elektronen „durchpaust“ – und daß es damit auch umgekehrt möglich ist, anhand einer Elektronenverteilung, die man sich anhand allgemeiner Kriterien klarmacht, auf die hier gesuchte Funktion $w(E)$ zu schließen (die dann die Fermiverteilung $f(E)$ sein wird); genau das werden wir jetzt machen, nur dazu wurde dieses Modellsystem so vorgegeben.

In dieses System stecken wir 90 Elektronen. Wir könnten auch $D = 10^{11} \text{ eV}^{-1}$ und 10^{12} Elektronen (oder jede beliebige andere sinnvolle Kombination) nehmen, aber das ist nicht so leicht zu zeichnen. Jetzt schauen wir und gedanklich an, was bei $T = 0 \text{ K}$ und $T > 0 \text{ K}$ jeweils in unserem System passiert. Klar ist, daß es sich jeweils im Minimum der freien Energie befindet. Und weil im Fall $T = 0 \text{ K}$ die Entropie egal ist (zur Erinnerung: $G = U - TS$), haben wir dann den Zustand mit minimaler Energie vor uns. Damit ist die Verteilung der Elektronen auf die Zustände bei $T = 0 \text{ K}$ bereits klar: Es werden erst mal alle 10 Plätze bei der niedrigsten Energie besetzt, dann alle 10 Plätze bei der zweitniedrigsten Energie usw., bis wir alle 90 Elektronen energiegünstigst untergebracht haben – siehe in der folgenden Abbildung links.



Bei irgendeiner Energie sitzt das „letzte“ Elektron. Dieser Energie geben wir einen Namen, sie heißt ab sofort **Fermi-Energie** und hat das Symbol E_F . Per definitionem sind bei $T = 0 \text{ K}$ alle Zustände bis zur Fermienergie besetzt; darüber ist alles leer. Offenbar gibt es genau eine Möglichkeit, alle 90 Elektronen unterhalb der Fermienergie unterzubringen; damit ist auch klar, daß wir „automatisch“ die Entropie gleich richtig mit behandelt haben.

Aber Vorsicht: Wir sind hier in unserem Modellsystem, das bei jeder Energie besetzbare Zustände hat. In einem Halbleiter gibt es die berühmte Bandlücke und damit einen Energiebereich, in dem es *keine* besetzbaren Zustände gibt. Das bedeutet, daß wir bei Halbleitern für eine saubere Definition der Fermienergie eine andere Herangehensweise brauchen.

Jetzt machen wir mal das Gleiche bei einer endlichen Temperatur T_1 . Dann liegt im Minimum der freien Energie etwas Unordnung vor, aber bei möglichst geringer Energieerhöhung. Die Unordnung kommt hier dadurch zustande, daß es dann unterschiedliche Möglichkeiten gibt, die zur Verfügung stehenden „Plätze“ zu besetzen: Wenn aus einem zuvor voll besetzten Energieniveau wenige Elektronen herausgenommen und auf bisher unbesetzten Niveaus bei höheren Energien untergebracht werden, bleiben zum einen wenige Plätze leer, zum anderen werden wenige andere neu besetzt. Bei all diesen Plätzen ist aber nur die Energie vorgegeben; welcher Platz das im einzelnen ist, der zu dieser Energie gehört, ist nicht festgelegt. Und

genau das schafft Unordnung, weil wir jetzt mehr als eine Möglichkeit haben, um z. B. acht bzw. zwei Elektronen auf die verfügbaren zehn Plätze (bei einer bestimmten Energie) zu verteilen. In diesem Zusammenhang erinnern wir uns an das Beispiel vom Anfang mit den Gasmolekülen: Zu einer bestimmten, fest vorgegeben Energie kann es unterschiedliche tatsächliche Realisierungsmöglichkeiten geben, und daher bedeutet eine gewisse „Unordnung“ in der Energieverteilung auch eine tatsächliche Unordnung.

Es ist klar, daß wir das Herausnehmen der Elektronen bei den höchsten besetzten Energieniveaus machen und die so freigesetzten Elektronen auf die niedrigsten unbesetzten Niveaus bringen, denn nur das minimiert den Energie„preis“ für die Transaktion. Qualitativ wird das so aussehen, wie oben rechts mit der roten Kurve gezeigt; insgesamt haben wir vier Elektronen umgeordnet. Die orangefarbene Kurve zeigt das Ganze bei noch höherer Temperatur und deshalb mit noch mehr Unordnung. Offenbar wird die einhüllende Kurve (= unsere gesuchte Verteilungsfunktion) mit steigender Temperatur immer „weicher“.

Das war's aber auch schon. Die im Bild oben gezeigte rote bzw. orangefarbene Kurve stellt ganz offensichtlich wegen $D = \text{const}$ die gesuchte Verteilungsfunktion dar. Diese Verteilungsfunktion nennen wir Fermi-Dirac-Verteilung oder in Kurzform schlicht **Fermi-Verteilung**.

Mit der Mathematik dazu haben wir ein Problem: Bei $T = 0 \text{ K}$ ist die Fermiverteilung unstetig, denn sie macht einen Sprung von $w(E < E_F) = 1$ auf $w(E > E_F) = 0$. Bei höheren Temperaturen macht sie den Übergang stetig (wie gezeigt). Welcher mathematische Funktionsausdruck $w(E; E_F, T)$ kann das leisten? (Diese Schreibweise soll darauf hinweisen, daß nur die Energie E die Variable ist, von der diese Funktion abhängt; E_F und T sind Systemparameter.) Es ist dieser:

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

Wichtig: Man muß diese Formel nicht unbedingt auswendig hinschreiben können, man muß aber die Formel der Fermiverteilung als solche erkennen und ihren Funktionsverlauf qualitativ zeichnen können!

Wie man im Vergleich mit der Boltzmannverteilung sieht, ist eigentlich $E - E_F$ die Variable; es kommt bei der Fermiverteilung immer nur diese Kombination vor. Ein bißchen komplizierter als die Boltzmannverteilung ist die Fermiverteilung zwar schon, aber es ist die einfachste Funktion, die das tut, was nötig ist – inklusive des möglichen Übergangs zur klassischen Beschreibung mittels Boltzmannverteilung! Fermiverteilung und Fermienergie sind fundamental für Halbleiter und daraus gefertigte Bauelemente; wir werden uns deshalb die Eigenschaften der Fermiverteilung in nächsten Abschnitt noch etwas genauer anschauen.

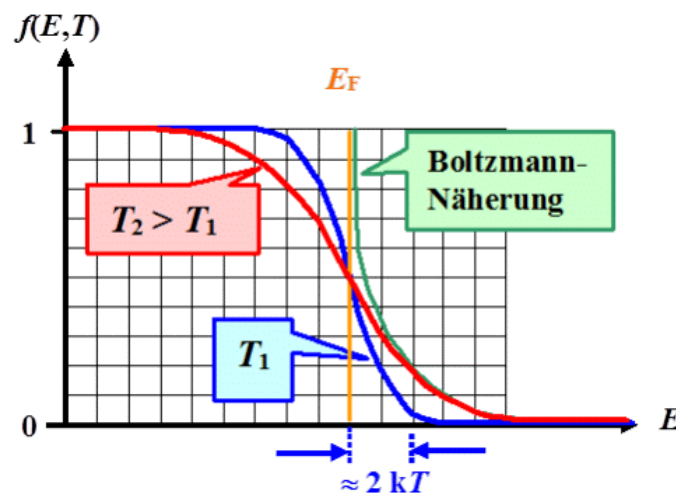
5.3.3 Eigenschaften der Fermi-Dirac-Verteilung

Zunächst betrachten wir das Grenzverhalten für $T \rightarrow 0 \text{ K}$. Das sollte beim Überschreiten der Fermi-Energie eine abrupte Stufe von 1 auf 0 ergeben. Wichtig ist, daß dieser Grenzwert bei einem festgehaltenen Wert von E berechnet wird – und nicht umgekehrt; eine Variation von E bei bereits gegen null gegangenem T ist mathematisch sinnlos. Wir erhalten folgende Fälle:

$$E - E_F =: \Delta E < 0: \lim_{T \rightarrow 0} 1 / \{\exp[\Delta E / (k_B T)] + 1\} = 1 / \{\exp[-\infty] + 1\} = 1$$

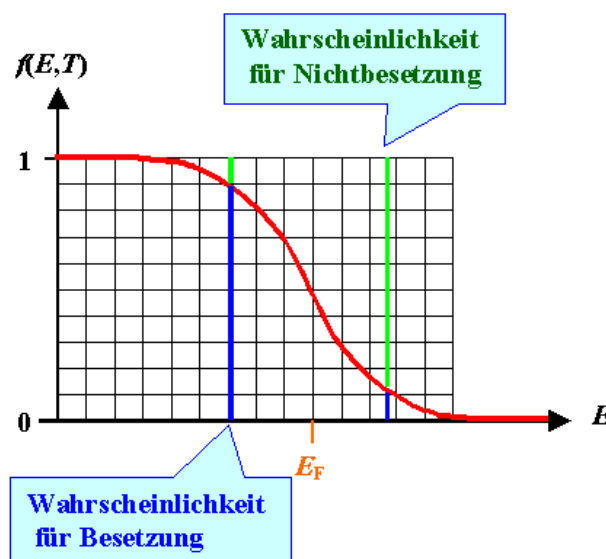
$$E - E_F = \Delta E > 0: \lim_{T \rightarrow 0} 1 / \{\exp[\Delta E / (k_B T)] + 1\} = 1 / \{\exp[+\infty] + 1\} = 0$$

Der Wert direkt bei $E = E_F$ ist für $T \rightarrow 0$ K nicht definiert, denn dort ist die Stufe. Wenn man die Fermiverteilung für eine gegebene Temperatur und Fermienergie ausrechnet, erhält man Kurven wie diese:



Die Stufenfunktion, die sich bei $T = 0$ K ergibt, bekommt mit steigender Temperatur eine immer weicher werdende Flanke. Das **Aufweichungsintervall** (bzw. der **Aufweichungsbereich**) hat dabei eine Breite von ungefähr $4 k_B T$. Eine weitere Eigenschaft ist unmittelbar klar: $f(E = E_F) = 1/2$. **Die Fermienergie liegt also bei der Energie, bei der die Wahrscheinlichkeit, daß die Elektronen die Plätze dort besetzen, gleich $1/2$ ist.** Das ist eine viel bessere, weil allgemeinere Definition der Fermienergie; wir werden sie noch oft brauchen. Sie ist vollständig kompatibel mit unserer alten Definition. Wir können zudem vermuten, daß der „Hochenergieschwanz“ der Fermiverteilung, also die Wahrscheinlichkeit, daß Plätze bei $E \gg E_F$ besetzt sind, durch die Boltzmannverteilung approximiert werden kann; auch das ist oben eingezeichnet. Es läßt sich leicht zeigen, daß für $E - E_F = \Delta E \gg k_B T$ gilt: $f(E; E_F, T) \approx \exp[-\Delta E/(k_B T)]$.

Zuletzt noch eine zunächst seltsam anmutende Beziehung, die wir aber noch oft brauchen werden: Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit w_h dafür, daß ein Platz bei der Energie E **nicht** mit einem Elektron besetzt ist (so daß wir auf diesem Platz sozusagen ein „Loch“ [engl. *hole*] haben)? Weil sich die Wahrscheinlichkeiten für Besetzung und für Nichtbesetzung immer zu 1 addieren, folgt sofort $w_h(E; E_F, T) = 1 - f(E; E_F, T)$. Das ist in der folgenden Graphik veranschaulicht (siehe nächste Seite; blauer plus grüner Balken gleich 1).



Mit der Fermiverteilung haben wir ein mächtiges Werkzeug, um die elektronisch bedingten Eigenschaften der Materialien und speziell der Halbleiter verstehen zu können. Denn alle elektronischen Eigenschaften kommen vom Verhalten der Elektronen im Kristall, und die sind nun mal Fermionen. (Das ist übrigens auch gut so: Falls sie Bosonen wären, hätten wir arge Probleme – die damit anfangen würden, daß es uns gar nicht gäbe.)

Unterkapitel 5.4: Zusammenfassungen zu Kapitel 5

Die „Merkmale“ in 5.4.1 sind eine Kurzzusammenfassung dessen, was ich Ihnen hier präsentiert habe; das sollten Sie alles verstanden haben bzw. sollte es Ihnen sehr bekannt vorkommen. Worum es bei „Was man wissen muß“ unter 5.4.2 geht, erklärt sich von selbst. Es empfiehlt sich, beizeiten mit dem Auswendiglernen von Formeln und Zahlen zu beginnen; achten Sie darauf, daß Sie die Zuordnungen in den Tabellenzeilen gleichermaßen „vorwärts“ (von links nach rechts) wie „rückwärts“ (von rechts nach links) beherrschen.

Unterkapitel 6.1: Warum Dielektrika wichtig sind

Obwohl wir jetzt bestens gerüstet sind, um die Leitfähigkeitseigenschaften von Metallen und Halbleitern zu verstehen, beschäftigen wir uns zuvor in zwei weiteren Kapiteln erst noch mit weiteren generellen Eigenschaften von Festkörpern, die für Anwendungen in der ET&IT relevant sind. Dazu gehört auch der Magnetismus; was aber für dessen Verständnis nötig ist, läßt sich zunächst anschaulicher anhand der dielektrischen Polarisation erarbeiten. Darüber hinaus funktionieren elektronische Schaltungen nur, wenn die Leiterbahnen untereinander isoliert sind, und auch noch weitere Eigenschaften des isolierenden Dielektrikums spielen für das Funktionieren elektronischer Schaltungen eine wichtige Rolle. Und da ist noch viel mehr...

6.1.1 Feldstärke, Stromdichte und Zeitkonstanten

Die Feldstärke E in einer Schicht der Dicke d mit angelegter Spannung = Potentialdifferenz U (man denke an den Plattenkondensator) ist bekanntlich $E = U/d$. (Achtung: Wir sind nicht mehr im Thermodynamik-Kapitel, hier bedeutet U nicht mehr die innere Energie – sondern die elektrische Spannung.) Um die Größe der Feldstärke abzuschätzen, genügt es, typische Werte für Spannung und Schichtdicke einzusetzen; sie liegen im Bereich einzelner Volt und ca. 10 nm. Das liefert für die Feldstärke eine Größenordnung von $(1 \text{ V}) / (10 \text{ nm}) = 0,1 \text{ V} / (10^{-7} \text{ cm}) = 10^6 \text{ V/cm} = 1000 \text{ kV/cm}$. Zum Vergleich: Die Durchschlagsfestigkeit von Luft liegt bei etwa 30 kV/cm (gültig für ein homogenes Feld, d. h. ohne Spitzeneffekte).

Auf ähnlich extreme Werte (extrem im Vergleich zu den im Alltag relevanten) kommt man auch bei den in den Leiterbahnen fließenden Stromdichten; die Details sind hier aber nicht weiter relevant. Statt dessen ist wichtig, daß die parallelen Leiterbahnen einen parasitären Kondensator bilden. Zusammen mit dem ohmschen Widerstand einer solchen Leiterbahn haben wir also ein klassisches RC-Glied vor uns, dessen Zeitkonstante $\tau = RC$ die Grenzfrequenz $f_{\max}$, d. h. die maximale Frequenz, mit der Information übertragen werden kann, auf ungefähr $f_{\max} \approx 1/\tau$ limitiert. In der Kapazität steckt wiederum die relative Dielektrizitätskonstante ϵ_r ; für das in solchen Fällen lange Zeit übliche SiO_2 gilt $\epsilon_r(\text{SiO}_2) \approx 3,7$. Seit einigen Jahren sind aber bereits Dielektrika mit kleineren Dielektrizitätskonstanten im Einsatz, was die höheren Taktfrequenzen erst möglich gemacht hat. („Höhere Taktfrequenz“: Lange Zeit wurden die Prozessoren mit Frequenzen im MHz-Bereich betrieben; erst Anfang der 2000er Jahre wurden der heute gängige GHz-Bereich erreicht. Es war ein technologisches Rennen, immer höhere Frequenzen zu erreichen. Seit etwa 2004 stagnieren die Prozessorfrequenzen – aber warum eigentlich? Wir werden darauf zurückkommen.)

Darüber hinaus sind Dielektrika noch wichtig für die Funktionsweise eines MOS-Transistors (besonders kritisch ist dessen Gate-Dielektrikum). Hier liegt der Schlüssel zu immer kleineren und schnelleren Transistoren in solchen Materialien, die ein *höheres* ϵ_r als SiO_2 besitzen (englisches Schlagwort: *high-k dielectrics*). Ferner beruht die Wirkung eines Mikrowellenofens auf den dielektrischen Eigenschaften von Wasser. Für die optische Nachrichtenübertragung mit Laserlicht über Glasfasern ist der Brechungsindex n der optischen Materialien relevant. Für n gilt aber die extrem einfache Gleichung $n^2 = \epsilon_r$, die auch die Optik auf die dielektrischen Eigenschaften des Materials zurückführt.

6.1.2 Was wir über Dielektrika gerne wissen möchten

Wir werden auf drei Fragen eingehen (aber dabei nur das Grundsätzliche beleuchten):

- 1.) Welche max. (= kritische) Feldstärke E_{krit} hält ein Dielektrikum jeweils aus? Wie lange? Wovon hängt das ab? Gibt es z. B. Unterschiede zwischen einkristallinem und amorphem Quarz oder 3D- und 2D-Quarz (d. h. dickes Volumenmaterial und dünne Schichten)?
- 2.) Die Tabelle des Gleichspannungs- ϵ_r im Hyperskript läßt erkennen, warum es „Tantal-Kondensatoren“ gibt und warum Bariumtitanat bei Billigkondensatoren so beliebt ist. Die Daten legen auch die Frage nahe, welche (atomaren) Mechanismen die Dielektrizitätskonstante eines Materials bestimmen.
- 3.) Die Dielektrizitätskonstante von Wasser zeigt eine ausgeprägte Frequenzabhängigkeit: Bei 0 Hz hat ϵ_r den Wert 88 und erstreckt sich über 77 bei 2,5 GHz, 30 bei 10 GHz und dann aber knapp unter 2 bei 10^{14} Hz (optische Frequenzen). Letzteres ist an sich keine Überraschung – zumindest, wenn man die Formel $n^2 = \epsilon_r$ kennt und weiß, daß Diamant mit $n = 2,42$ den höchsten Brechungsindex im Sichtbaren hat, d. h. der höchste ϵ_r -Wert im Sichtbaren liegt bei 5,86. Was bestimmt diese kräftige Frequenzabhängigkeit der Dielektrizitätskonstante?

Unterkapitel 6.2: Elektrischer Durchbruch

6.2.1 Effekte und Mechanismen

Mit Gewalt kann man alles kaputtmachen, und Dielektrika sind diesbezüglich keine Ausnahme. Erhöht man die Spannung an einem klassischen Kondensator und dadurch die Feldstärke im Dielektrikum, wird es früher oder später knallen. Wir haben elektrischen Durchschlag oder Durchbruch, d. h. plötzliches und sehr schnelles Anwachsen des Stromes von praktisch null auf Werte, die das Material in Bruchteilen von Sekunden zerstören. Dummerweise ist die kritische Feldstärke E_{krit} , bei der es knallt, keine besonders wohldefinierte Materialeigenschaft, sie hängt von allem möglichen ab; z. B. auch von der Zeit, die das Dielektrikum schon einem Feld ausgesetzt war. Werte von E_{krit} technisch relevanter Materialien liegen im Bereich von 200 kV/cm (Öl, Glas, Porzellan) über bis zu 900 kV/cm bei Polymeren, 1800 kV/cm bei Ölpapier bis zu 15000 kV/cm bei sehr gutem SiO_2 (siehe die Tabelle im Hyperskript).

Folgende Durchschlagsmechanismen sind bekannt:

Thermischer Durchschlag – Ein winziges Strömchen fließt lokal durch eine Schwachstelle des Dielektrikums. Mit zunehmender Feldstärke steigt dieser Strom, produziert lokale Erwärmung, die erzeugt atomare Fehlstellen im Kristall oder ähnliches. Ionische Leitfähigkeit setzt ein, die Temperatur steigt lokal noch mehr an – bumm! Das ist der am weitesten verbreitete Mechanismus in billigen und nicht sehr perfekten Materialien.

Lawinendurchbruch – Auch der perfektteste Isolator enthält noch ein paar freie Elektronen; es gibt dafür eine ganze Reihe von Gründen. In großen elektrischen Feldern werden diese Elektronen beschleunigt, und bei großem Feld nehmen sie viel Energie auf (d. h. sie werden

sehr schnell), bevor sie wieder irgendwo reinknallen. Falls sie so viel Energie bekommen, daß sie aus den Atomen weitere Elektronen herausschlagen können, setzt eine Art Kettenreaktion ein mit dem bekannten Ergebnis: Bumm!

Lokale Entladungen – In kleinen Hohlräumen, wie sie z. B. in gesinterten Keramiken immer vorhanden sind, ist die Feldstärke größer als im soliden Material. Das kann dazu führen, daß in dem Hohlraum oder Void ein Mikrolichtbogen entsteht, der das Material „abbrennt“. Der Hohlraum wird größer, der Lichtbogen kräftiger – bumm!

Elektrolytischer Durchschlag – Lokale elektrolytische „Mikrostrompfade“ transportieren Ionen ins Material, die sich im Laufe der Zeit abscheiden und einen leitenden Pfad ins Innere des Materials bilden. Dadurch wird lokal die Dicke des Dielektrikums reduziert, die Feldstärke geht hoch – bumm!

Auch bei Halbleiterbauelementen können solche Effekte eine Rolle spielen; dort kommt als weiterer Durchbruchmechanismus noch der *Tunneleffekt* hinzu. Sie begrenzen z. B. die Sperrspannung eines gleichrichtenden Bauteils (Diode). Allgemeine Werte für E_{krit} lassen sich dafür aber kaum angeben, weil der Mechanismus ja nicht nur auf der Feldstärke selbst beruht und zudem noch von spezifischen Materialeigenschaften (speziell der Dotierung) abhängt.

(Fortsetzung folgt.)