



Abb. 3. Energie der α -Teilchen für die Kerne mit 84 Neutronen in Abhängigkeit von der Protonenzahl Z.

Elektronenniveaus von eindimensionalen Gitterfehlstellen

Von WALTER SCHULTZ

AEG-Forschungsinstitut Belecke

(Z. Naturforsch. **12 a**, 666—667 [1957]; eingegangen am 5. Juni 1957)

Es ist bekannt, daß an nulldimensionalen Fehlstellen (z. B. einzelnen Fremdatomen oder fehlenden Gitterbausteinen) in Halbleitern gebundene Elektronenzustände auftreten können. Bei der praktischen Berechnung solcher Niveaus muß man sich jedoch in den meisten Fällen auf Modelle beschränken. Einer der am einfachsten zu behandelnden Fälle ist das eindimensionale „Gitter“, in welchem die Periodizität des Potentials unterbrochen ist¹, z. B. dadurch, daß man an einer Stelle den Abstand zwischen zwei Potentialschwellen vergrößert. Speziell bei diesem Modell läßt sich zeigen, daß an dem Ort der Störung gebundene Elektronenzustände auftreten, deren Energie in der verbotenen Zone zwischen zwei Bändern liegt. Zahl und Lage dieser Niveaus hängen von der Abstandsvergrößerung und vom Potentialverlauf der einzelnen Schwelle ab.

Ausgehend von diesem einfachsten Modell kann man überlegen, wie sich eine eindimensionale Fehlstelle in einem zweidimensionalen Gitter auswirkt. Man stellt das gesamte Potential V dar in der Form

$$V = V_1(x) + V_2(y),$$

wobei noch angenommen wird, daß das Potential $V_2(y)$ periodisch ist, das Potential $V_1(x)$ dagegen als Störung die oben untersuchte Abstandsvergrößerung zwischen zwei Gitterebenen enthält. Man kann dann die zugehörige SCHRÖDINGER-Gleichung separieren: die Wellenfunk-

¹ z. B.: B. KOCKEL, Z. Naturforsch. **7 a**, 10 [1952]. — H. M. JAMES, Phys. Rev. **76**, 1611 [1949].

schon leicht übersehen werden, besonders wenn sie steil zur Plattenebene liegen, und da durch zufällige Kombination von einzelnen Körnchen auch gelegentlich Spuren in dieser Länge vorgetäuscht werden können, dürfte die Zerfallskonstante nicht viel besser als auf einen Faktor 2 genau bekannt sein.

Ce¹⁴² ist der einzige bekannte Kern mit 84 Neutronen, für den bisher noch keine Radioaktivität beobachtet worden war. Trägt man für alle Kerne mit 84 Neutronen die Energie der α -Teilchen^{2, 3, 4, 5} gegen die Protonenzahl Z auf, so erhält man die Kurve der Abb. 3. Der Sprung bei der Protonenzahl 64 ist wegen der weiten Aufspaltung des 4-d-Terms für Protonen zu erwarten.

² E. C. WALDRON, V. A. SCHULTZ u. T. P. KOHMAN, Phys. Rev. **93**, 254 [1954].

³ W. PORSCHEN u. W. RIEZLER, Z. Naturforsch. **11 a**, 143 [1956].

⁴ D. C. DUNLAVEY u. G. T. SEABORG, Phys. Rev. **92**, 206 [1953].

⁵ J. O. RASMUSSEN jr., S. G. THOMPSON u. A. GHIORSO, Phys. Rev. **89**, 33 [1953].

tion stellt sich dar als Produkt der Eigenfunktionen, die Energie als Summe der Energien der beiden eindimensionalen Fälle. Trägt man die möglichen Energiewerte als Funktion von k_y , der Wellenzahl in y -Richtung auf, wobei die Wellenzahl in x -Richtung, k_x , als Parameter auftritt, so sieht man, daß aus dem einzelnen diskreten Störniveau ein kontinuierliches „Störband“ entsteht von der Breite des eindimensionalen Valenzbandes. Zu jedem einzelnen Energiewert gehört eine bestimmte Wellenzahl k_y . Das bedeutet also, daß längs der eindimensionalen Gitterstörung Elektronenwellen ungehindert laufen können, in Richtung senkrecht dazu dagegen exponentiell abklingen. Durch geeignete Wahl der Parameter kann man es erreichen, daß dieses zusätzliche, an die eindimensionale Störung örtlich gebundene „Störband“ die gesamte verbotene Zone zwischen zwei Energiebändern des ungestörten Kristalls vollständig überdeckt. Wenn man als Zahlenbeispiel ein KRONIG-Potential so wählt, daß im eindimensionalen Fall die verbotene Zone die eineinhalbfache Breite des Valenzbandes aufweist, so tritt eine vollständige Überdeckung der verbotenen Zone dann auf, wenn der vergrößerte Gitterabstand eine Breite im Bereich zwischen 1,25 und 1,6 normalen Gitterabständen besitzt.

Als nächstes ist das Verhalten von eindimensionalen Fehlstellen im dreidimensionalen Gitter zu untersuchen. Während man die obigen Fälle noch exakt berechnen konnte, ist man hier auf Näherungsmethoden angewiesen. Eine verhältnismäßig leicht zu behandelnde eindimensionale Fehlstelle kann dadurch dargestellt werden, daß man in einem einfach kubischen Gitter eine Atomreihe, z. B. die mit den Koordinaten $(0, 0, z)$, fortläßt. Man entwickelt nun die Eigenfunktion des gestörten Systems nach den WANNIER-Funktionen des ungestörten Kristalls², wobei nur die Wechselwirkung zwi-

² G. F. KOSTER u. J. C. SLATER, Phys. Rev. **96**, 1208 [1954].



schen nächsten Nachbarn berücksichtigt wird. Dann zeigt sich, wenn man zunächst nur die Funktionen eines Energiebandes des ungestörten Kristalls berücksichtigt, daß außerhalb des regulären Bandes ein „Störband“ auftreten kann mit denselben Eigenschaften, wie sie sich im zweidimensionalen Fall ergaben. Das Ergebnis läßt bei diesem speziellen Modell folgende anschauliche Interpretation zu: Es werden zunächst die Energieniveaus (d. h. Bänder und diskrete Störniveaus) in einer einzelnen xy -Ebene berechnet. Setzt man nun viele solcher Ebenen in z -Richtung hintereinander, spaltet jedes einzelne Niveau — ähnlich wie bei einer Atomkette — in ein Band auf. Die Bedingung für das Auftreten dieses „Störbandes“ und seine energetische Lage hängen jedoch von dem Zahlenwert eines Energieparameters ab, den im wesentlichen bereits GOODWIN³ für das Auftreten von Oberflächenzuständen an einer eindimensionalen Atomkette herangezogen hat. Die dort angegebene Abschätzung zeigt, daß mit dem Auftreten solcher „Störbänder“ außerhalb des regulären Bandes zu rechnen ist. Bei der Berücksichtigung von zwei Bändern, nämlich von Valenz- und Leitungsband des Modellhalbleiters, ergibt sich, daß bei schwacher Wechselwirkung zwischen beiden regulären Bändern die Breite

des Störbandes unverändert bleibt, seine energetische Lage aber verschoben wird.

Im vorliegenden wurde zwar nur ein spezielles Modell einer eindimensionalen Gitterstörung untersucht, welches im Realkristall kaum eine Bedeutung haben wird, jedoch darf man wohl die prinzipiellen Ergebnisse auf den allgemeinen Fall übertragen. So wird z. B. bei einer Stufenversetzung mit senkrechter Versetzungslinie die in einer waagerechten Ebene vorliegende Störung in jeder darüberliegenden Ebene wiederholt, so daß auch in diesem Fall bei geeigneter Wahl der Parameter Störbänder⁴ auftreten können, die sich gegenseitig überlappen und den Energiebereich zwischen Valenz- und Leitungsband überdecken können. Die „Störbänder“ können dann zur Deutung der strahlungslosen Rekombination an Versetzungen herangezogen werden, da in diesem Fall eine genügende Zahl von erlaubten Energieniveaus vorhanden ist, um den Elektronen des Leitungsbandes durch Wechselwirkung mit den Gitterschwingungen in einer Folge von Einquantenprozessen einen Übergang ins Valenzband zu ermöglichen.

Herrn Prof. Dr. SCHERZER möchte ich für Anregungen und kritische Diskussionen herzlich danken.

³ E. T. GOODWIN, Proc. Cambr. Phil. Soc. **35**, 221 [1939]. — Während GOODWIN die entsprechenden Matrix-Elemente mit Atom-Eigenfunktionen formulierte, werden sie hier mit WANNIER-Funktionen gebildet.

⁴ Auf die Möglichkeit solcher Störbänder bei Stufenversetzungen im Diamantgitter hat bereits W. SHOCKLEY, Phys.

Rev. **91**, 228 [1953] hingewiesen. Siehe auch W. C. DUNLAP, An Introduction to Semiconductors, New York 1957, S. 189. Vgl. dagegen W. T. READ, Phil. Mag. **45**, 775 [1954]; **46**, 111 [1955]; Defects in Crystalline Solids, The Physical Society, London 1955, S. 143.

Elektrostatische Aufladung von CdS-Einkristallen unter der Wirkung hoher Felder

Von K. W. BÖER und U. KÜMMEL

II. Physikalisches Institut der Humboldt-Universität, Berlin, und Laboratorium für die Physik des elektrischen Durchschlags der Deutschen Akademie der Wissenschaften, Berlin
(Z. Naturforschg. **12 a**, 667—668 [1957]; eingegangen am 12. Juli 1957)

Werden hohe elektrische Felder an CdS-Einkristalle gelegt so laden sich diese unter Verletzung der Quasineutralitätsbedingung elektrostatisch auf. ROSE und SMITH^{1, 2} haben durch Auswerfen des Kristalls aus einer Kontaktzange in die Auffangpfanne eines Elektrometers eine negative Aufladung nachgewiesen und sie als einen experimentellen Hinweis für die Richtigkeit ihrer theoretischen Vorstellungen behandelt. Danach soll eine Injektion von Elektronen aus der Kathode unter Wirkung des elektrischen Feldes und eine Begrenzung des durch den Kristall fließenden Stromes durch ein hierdurch bedingtes Raumladungsgebiet an der Kathode auftreten.

Verf. haben die von ROSE und SMITH angegebenen Experimente an einer größeren Anzahl von Kristallen fortgeführt und insbesondere die Abhängigkeit der

Aufladung von Dauer und Größe der wirkenden Feldstärke sowie den Einfluß des Elektronenmaterials untersucht. Es wurden dabei die folgenden Resultate erhalten:

1. Die Größe der Aufladung ist entscheidend von der relativen Lage des Kristalls in der Kontaktzange abhängig. Es treten sowohl positive als auch negative Aufladungen auf.

2. Wird der untersuchte Kristall stets möglichst an derselben Stelle in die Kontaktzange gespannt, so streuen die Werte der Aufladungen bedeutend weniger.

3. Es existieren Kristalle, die hinsichtlich einer kleinen Veränderung ihrer Lage in der Kontaktzange sehr empfindlich sind und andere, die auch bei geringfügiger Änderung ihrer Lage noch etwa gleiche Aufladungen zeigen.

4. Eine große Zahl von Kristallen zeigt sowohl positive als auch negative Aufladungen in Abhängigkeit von der Polungsrichtung der angelegten Spannung relativ zum Kristall. Einige Kristalle zeigen nur eine negative, andere Kristalle lediglich positive Aufladung.

5. Die Größe der gemessenen Aufladung nimmt zunächst mit der angelegten Spannung etwa linear zu, durchläuft dann ein Maximum und sinkt dann mit wachsender Spannung ab (vgl. Abb. 1).

6. Die Aufladung ist für Gleichspannungen größer als für Wechselspannungen, welche vor dem Ausklin-

¹ A. ROSE, Phys. Rev. **97**, 1538 [1955].

² R. W. SMITH u. A. ROSE, Phys. Rev. **97**, 1531 [1955].