Dispersion: Beschreibt Zusammenhang zwischen Wellenvektor u. Ausbreitungsgeschw einer Welle. Im Falle eines freien Elektrons, führt die Dispersion zu einem Zerlaufen d. Wellenpakets. Allgemein: Frequenzabhängigkeit d. Phasengeschw. einer Welle.

Einheitszelle: Ist eine kleine Einheit eines Kristalls, die benutzt werden kann, um den kompletten Kristall zu reproduzieren

Atome fcc: Basis $\cdot\left(8\cdot\frac{1}{8}+6\cdot\frac{1}{2}\right)$ 2

Gauss-Funktion: $f(x)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(x-\mu)^2}{\sigma^2}\right)$ (σ = Breite, μ = Erwartungswert)

Gitterkonst $a=\sqrt[3]{\frac{m}{\rho}}=\sqrt[3]{\frac{\frac{\text{Anzahl Atome}}{}\cdot M\cdot\frac{1}{N_A}}{\rho}}=[cm]$ (M = molare Masse, N_A = Konst) $=\sqrt[3]{\frac{1}{n}}$

Sichtbares Licht: 400 nm – 800 nm

Dichte Leistungselektron: $D_e=\frac{\text{Anzahl Elektronen in Leitungszelle}}{V}$

Halbleiter: LB oben, VB unten; **Auflösungslimit:** $d\approx\frac{\lambda}{2}$, **Braggsche Beugungsbedingung:** $2d\sin(\theta)=n\lambda$ $\quad\left(\nabla=\frac{d}{dx}\right)$

direkter HL: Min von LB ist bei gleichem k wie Max von VB → Wenn das nicht gilt → HL indirekt

Zustandsdichte: Bezieht sich auf eine Dichte pro Energieintervall. D.h. die Zustandsdichte gibt an, wie viele erlaubte Zustände in einem System in einem infinitesimalem Gebiet zwischen W und W+dW auftreten.

$h\cdot f=\frac{h\cdot c}{\lambda}$

$=\frac{\text{Anzahl d. Zustände}}{\text{Energie intervall}\cdot\text{Fläche}}$, $\int$ Zustandsdichte · Fermi-Dirac-Vert = Ladungsträgerdichte

$1\,\text{Å}=0{,}1\,nm=10^{-10}\,m$ $\quad E=\frac{U}{d}$ $\quad p=[kg\cdot m\cdot s^{-1}]$

Quantenmechanik

Def: Theorie, die es erlaubt, Vorhersagen über zeitliche Entwicklung eines Zustands eines Systems zu machen

EM-Wellen: $c=\lambda f$, $\lambda=\frac{2\pi}{k}$ $\quad\hbar=\frac{h}{2\pi}$ $(W_{pot}=U\cdot e)$

Photon: $W_{G/Ph}=h\cdot f$ $\left(f_G=\frac{W_A}{h}\right)$

De-Broglie: $\lambda=\frac{h}{p}$, $W_{kin}=\frac{p^2}{2m}=\frac{(\hbar k)^2}{2m}=\frac{(h/\lambda)^2}{2m}$

Schrödingergleichung: $j\hbar\frac{d\Psi(x,t)}{dt}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x,t)\right)\Psi(x,t)=\hat{H}\,\Psi(x,t)=W_{(n)}\Psi_{(n)}(x,t)$

($V(x,t)$ = Potential)

Photoeffekt: $W_A=h\cdot f-\frac{1}{2}m_eV^2=W_{Ph}-W_{kin}$, $f_G=f-\frac{1}{2}m_eV^2\frac{1}{h}$

Dosis $[J/m^2]$: $n=S\cdot A/W_{Ph}$

Taylorreihenentwicklung: $\sin(x)\approx x$, $\cos(x)\approx 1$

$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n$

$\hat{H}$:= Operator Gesamtenergie

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte: $\rho(x,t)=|\Psi(x,t)|^2=\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$

„freies Teilchen" impliziert: $V(x,t)=0$

$P=\int_{-\infty}^{\infty}P_n(x,t)\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_n^*(x,t)\Psi_n(x,t)\,dx=1$

↳ Im betrachteten Raum muss das Teilchen existieren

Streuung: Ist die Ablenkung von Teilchen- und Wellenstrahlung an Atomen

Ionisierungsenergie: Energie um ein Elektron von seinem Atom zu trennen (Bei ionischer Bindung)

Stationäre/zeitunabhängige SGL: $\underbrace{\left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}}_{W_{kin}}+\underbrace{V(x)}_{W_{pot}}\right)}_{W_{ges}}\Psi(x)=\underbrace{W}_{\text{Energieeigenwert}}\Psi(x)$

Fouriertransformation: $g(k)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\,e^{-jkx}\,dx$ $\quad(\omega=2\pi f=2\pi\nu)$

$J=\frac{kg\cdot m^2}{s^2}=V\cdot A\cdot s=W\cdot s$

$eV/6{,}242\cdot10^{18}=J$

Wellenansatz: $\Psi(x,t)=A\,e^{j(kx-\omega t)}$

Dispersionsrelation:

$\omega(k)=\frac{\hbar k^2}{2m}$ (Elektron) $\;|\;\omega(k)=ck$ (Photon)

Phasengeschwindigkeit: $v_P=\frac{\omega(k)}{k}$

$\frac{d}{dt}(kx-\omega t)=0\Rightarrow kv_{Ph}-\omega=0$

Gruppengeschw: $v_g=\frac{d\omega(k)}{dk}$ ⇒ Geschw. des Schwerpunkts des Wellenpakets

Dispersionsparameter: $\beta=\frac{1}{2}\frac{d^2\omega}{dk^2}$

⇒ Doppelspaltexp: Die Aspekte des Experiments belegen die Wellennatur der Elektronen. (Welle-Teilchen-Dualismus)

Wasserstoffatom

Eigenenergien: $W_n=-\underbrace{\frac{e^4 m_e}{8h^2\varepsilon_0^2}}_{W_{Ryd}}\cdot\frac{1}{n^2}$

Balmer-Serie (n=2):

$W=W_n-W_2=-W_{Ryd}\cdot\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{4}\right)$

Paschen: n=3, Lyman: n=1

$(W_{Ryd}=13{,}6eV)$, $\lambda=\frac{c}{f}=\frac{hc}{W}$

$\Rightarrow\Psi_{n,l,m}=R_{n,l}(r)\,Y_{l,m}(\phi,\theta)$

⇒ Grundzustand: $\Psi_{1,0,0}$ (n=1, l=0, m=0) (s-Orb: $\Psi_{2,0,0}$)

Ortserwartungswert:

$\langle r\rangle=\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\Psi_{n,l,m}\,r^2\,dr\,d\varphi\,d\theta$

Die Lösungen der SGL sind echt komplexe Funktionen (Im Gegensatz zum el. Feld) Das ist gestattet, da die Wellenfkt keinen Messwert darstellt und somit nicht reell sein muss (el. Feld ist messbar und muss daher rein reell sein)

Keine räumliche Abh. ⇒ Teilchen ist delok.

$\Rightarrow|\Psi(x,t)|^2=|A|^2$ von $-\infty$ bis $+\infty$

$(\Psi(x,t)=A\exp(j(kx-\omega t))$

Wellenfkt nicht messbar, Aufenthaltswhslk ist messbar.

$\int_{-A}^{0}|\Psi(x)|^2dx=\int_{-A}^{0}|t|^2e^{-2jk_ix}dx$ $\quad=|t|^2\int_{-A}^{0}e^{2k_ix}dx$ $\quad k_i$ in J!

Doppelspalt Exp: 2 Spalten mit Elektron beschießen → Interferenzmuster

Del(Konstr.: Gangunterschied ist un/ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge

Unschärferelation: $\Delta x\cdot\Delta p\geq\frac{\hbar}{2}$ $(\Delta p=m\cdot\Delta v)$

⇒ Eine gleichzeitig, beliebig genaue Aussage über Ort und Impuls ist unmöglich

Parabolisches Potential (Harmonisches Potential)

$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ $\;(\Leftrightarrow W_{pot}=\frac{1}{2}\underbrace{m\omega^2}_{=k}x^2)$ $\;W_n=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$, $\Psi(x,y,z)=\Psi(x)\cdot\Psi(y)\cdot\Psi(z)$

$\Psi_n(x)=\frac{C_{nx}}{\sqrt{b_x}}H_{nx}\left(\frac{x}{b_x}\right)e^{-\frac{x^2}{2b_x^2}}$ $\quad$ Hier: Grundzustand bei $n=0$!

$b=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}$

$\left(W=W_x+W_y+W_z=\hbar\omega_x(n_x+\frac{1}{2})+\hbar\omega_y(n_y+\frac{1}{2})+\ldots\right)$

Kovalent: 2 Atome teilen sich Elektron (Valenzelektron) **Ionisch:** Atom gibt ein Elektron an ein anderes Atom ab. **Van-der-Waals:** Wechselwirkung zwischen Atomen und Molekülen (tritt bei Dipolen auf) **Metallisch:** Elektronen sind delokalisiert (frei beweg)

Ionisierungsenergie: Energie, die aufgebracht werden muss um das äußerste Elektron aus Atom zu trennen **Akzeptor:** W_A-W_V, **Do:** W_L-W_D

Elektronenaffinität: Energie, die freigesetzt wird, wenn ein Elektron zugegeben wird, so dass Atom neutral wird

Bindungsenergie: Energie, die durch die Bindung freigesetzt wird

Erwartungswert: $\langle\hat{A}\rangle=\frac{\int\Psi^*(x,t)\,\hat{A}\,\Psi(x,t)\,dx}{\int\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,dx}$ weg, wenn Ψ normiert ist

Teilchenort: $\hat{x}=x$

Impuls: $\hat{p}=-j\hbar\frac{d}{dx}$

Normierung: $\Psi_n=N\cdot\Psi$, $1\stackrel{!}{=}N^2\int\Psi(x,t)\Psi^*(x,t)\,dx$

Harmonischer Oszillator

Hamilton Operator: $\left(\hat{p}_x^2=-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\right)$

$\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2}{2m}+\frac{1}{2}m\,\omega_x\,x^2+\frac{1}{2}m\,\omega_y\,y^2+\frac{1}{2}m\,\omega_z\,z^2$

1D

2D

3D

Grundzustand gerade

Keine Knoten an Rändern

Potentialtöpfe (endlich und unendlich)

Ansatz für Potentialbereiche: $\Psi_i(x)=A\,e^{jk_ix}+B\,e^{-jk_ix}$

Randbedingungen: $\Psi_i(d_1)=\Psi_{(i+1)}(d_1)$, $\Psi_i'(d_1)=\Psi'_{(i+1)}(d_1)$

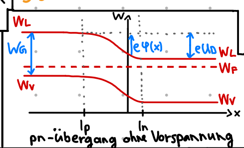
(d_1: Ort wo sich die Fkt ändern) (n=1,2,3,4...)

Wellenzahl k bestimmen:

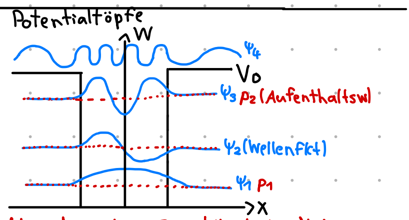
Wellenfunktionen $\Psi_i(x)$ in stat. SGL einsetzen und nach k_i tiert.

$\Rightarrow W\Psi_i(x)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(-k_i)^2+V(x)\right)\Psi_i(x)\Rightarrow k_i=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(W-V_i(x))}=j\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_i(x)-W)}=j\,k_i$

Flüssigelektrolyt: Durch freie/Brownsche Bewegung werden gelöste Ionen transpor



Potentialtöpfe



$1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^6\,4s^2\,3d^{10}\,4p^6$

$5s^2\,4d^{10}\,5p^6\,6s^2\,4f^{14}\,5d^{10}\,6p^6\,5f^{14}$

Effekt an Potentialbarrieren: Tunneleffekt

Reflexion/Transmission: $J_0+J_r\stackrel{!}{=}J_t$

$\underbrace{e^{jk_ix}}_{\Psi_{ein}}+\underbrace{r\,e^{-jk_ix}}_{\Psi_r}=\underbrace{t\,e^{jk_{i+1}x}}_{\Psi_t}$ $\quad\Psi_1(x)=\Psi_2(x)$, $\Psi_1'(x)=\Psi_2'(x)$

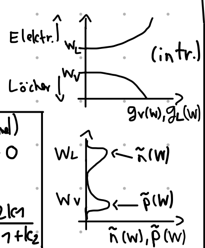
DGL:

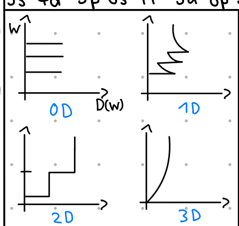
$u''(x)+a\,u'(x)+b=0$

$\Rightarrow\lambda^2+a\lambda+b=0$

⇒ $\lambda_{1,2}$ bestimmen (PQ-Formel)

$\Rightarrow A\,e^{\lambda_1x}+B\,e^{\lambda_2x}$ $\quad t>0$





Unendlicher Potentialtopf:

– Überlagerung von rechts/links laufender Welle

– Stetigkeit am Rand

– Ansatz: $\Psi(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx)$

$\Psi(x,t)=A\,e^{j(kx-\omega t)}+B\,e^{-j(kx-\omega t)}$

Wenn $x=0$: $r=\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}$, $t=\frac{2k_1}{k_1+k_2}$

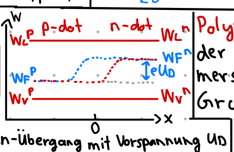
Für t, r+1 einsetzen.

– diskrete Energieeigenwerte

– Abwechselnd symmetrische/antisymmetrische Wellenfunktionen

$\Psi_n(x)=A_n\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ (von 0 bis L), $\Psi_n(x,t)=A_n\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)e^{-j\omega_nt}$

$W_n=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n}{L}\right)^2=\frac{\hbar^2}{2m}k^2$, $k=\frac{\pi n}{L}$, $n\geq1$ ← Aus SGL



Polymere: Innerhalb der ortsfesten Polymerstrukturen können die Gegenionen der funktionellen Gruppen über den Vehikel-Mechanismus oder den Grotthuss Mech./das Protonen-Hopping transp. werden

Ungebundene Zustände W>V₀:

– kontinuierliche Energien

– unendlich ausgedehnt (delokalisiert)

– nicht normierbar

Gebundene Zustände W<V₀:

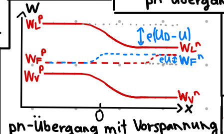
– diskrete Energien

– räumlich begrenzt

– normierbar, lokalisiert

Transmissions-/Reflexionsk.

$T=\frac{|A_{III}|^2}{|A_I^+|^2}$, $R=\frac{|A_I^-|^2}{|A_I^+|^2}$ $\quad$ In unendlich hoher Barriere: $\Psi_i(x)=0$



Festkörper: Die Bewegung von Fehlstellen wie z.B. der Schottky- oder Frenkel-Defekte führt zum Ionentransport.

Orthonormierung (unend. Pot. topf) ⇒ $\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_{x,n}^*\Psi_{k,m}\,dx=\begin{cases}1 & \text{für } n=m\\ 0 & \text{für } n\neq m\end{cases}$

Entartung: Energiezustand mit mehr als einer Realisierungsmgl bzw. nicht eindeutig einer Wellenfkt zuordbar

Quantenzahlen

Orbital: Die zu einem bestimmten Satz Quantenzahlen gehörige Wellenfkt. nennt man Orbital

Hauptquantenzahl: $n=1,2,3..$ (Abstand El.z. Kern, Energie d. Zustands)

Nebenquantenzahl: $l=0,1,2,3\ldots(n-1)$; $|\vec{L}|=\hbar\sqrt{l(l+1)}$ (Form d. Wellenfkt/Orbitals)

Magnetquantenzahl: $m=-l,(-l+1),\ldots 0\ldots,(l-1),l$; $L_z=\hbar m$ (Räuml. Ausrichtung d. Orbitals)

Spinquantenzahl: $s=\pm\frac{1}{2}\hbar$ (Eigendrehimpuls d. Elektrons)

Anzahl möglicher Quantenzahlen: $2l+1$

Überlagerungszustand: $\Psi=c_1\Psi_1+c_2\Psi_2$ $(c_1,c_2\in\mathbb{C})$

Stern-Gerlach-Versuch: Silberatome durch inhomogenes H-Feld → Spinnachweis

Fermionen: Teilchen mit halbzahligem Spin (z.B. Elektron)

Bosonen: ganzzahliger Spin (z.B. Photonen)

Pauli-Prinzip: 2 Fermionen in einem Atom dürfen nicht in allen QZ übereinstimmen

Born-Oppenheimer-Näherung: H-Atom: $m_{Kern}\gg m_{Elektron}$

Kristalle
Vollkommene Translationssymetrie in alle Raumrichtungen. (Basis + Gitter)
-> Bausteine: Einheitszellen

Effektive Masse: $m_{eff} = \hbar^2 \left(\frac{d^2 W(k)}{dk^2}\right)^{-1} \stackrel{?}{=} \frac{F}{a}$
(Scheinbare Masse eines Teilchens in einem Kristall in einer semiklassischen Betrachtung)
=> Proportional zur Krümmung des Bandes

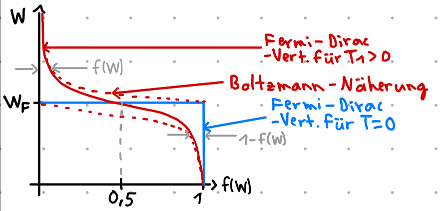
Gruppengeschwindigkeit: $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dW(k)}{dk}$

Bandlücke: $[0, \frac{\pi}{a}] \to k = \frac{\pi}{a}$
W_{LBK} = TP vom LB
W_{VBK} = HP vom VB
$W_{DL} = W_{LBK} - W_{VBK} = W_G$

$\Delta j \propto v_g$ (Gesamtstromdichte)
$j \propto \sum_{k=-\pi/a}^{\pi/a} v_a(k) = 0$

E-Feld = 0: Ansatz: $\Delta p(t) = A \cdot e^{-bt}$
$\Rightarrow \frac{d\Delta p}{dt} = g_L - r_p = g_L - \frac{\Delta p}{\tau_p}$
$t \leq 0$: $\frac{d\Delta p}{dt} = 0 = const \Rightarrow \Delta p = g_L \cdot \tau_p$
$t > 0$: $\Delta p(0) = g_L \cdot \tau_p = A$, $\Delta p(t \to \infty) = 0$
Δp einsetzen in $\frac{d\Delta p}{dt} = -\frac{\Delta p}{\tau_p}$ $(g_L = 0)$
$\frac{dA \cdot e^{-bt}}{dt} = -\frac{A \cdot e^{-bt}}{\tau_p}$ $\left(\frac{d\Delta p}{dt} \neq 0\right)$ $b = \frac{1}{\tau_p}$

Fermi-Dirac-Verteilung
Beschreibt die Besetzungswhsl eines Zustandes einer best. Energie W in Abh. von d. Temp. und d. Fermienergie



$f(W,T) = \frac{1}{1 + e^{\frac{W-W_F}{k_B T}}}$ $(W - W_F = \Delta W)$

Gitterschwingung: $\langle v \rangle = \frac{F}{m_{eff}} \tau = -\mu E \to \mu = \frac{e\tau}{m_{eff}}$

mittlere Geschwindigkeit: $\bar{v} = \mu E = \frac{x}{\tau}$ $(x = \frac{d}{2})$

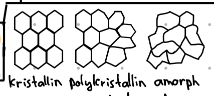
Gesamtleitfähigkeit: $\sigma = e(p\mu_p + n\mu_n)$ [S/m]
-> p-dot -> Elektronen vernachlässigt: $\sigma = e p \mu_p$

Stromdichte: $J = \sigma \cdot E = \frac{1}{\rho} \cdot E$
$(E = \frac{U}{d})$
spez. Widerstand
$\sigma = \frac{1}{R} \cdot \frac{L}{A}$
$R = \rho \frac{L}{A} = \rho \frac{L}{d \cdot w}$

Raumladung (pn):
$n_D L_n = n_A L_p$
Stetigkeit: $E_p(d) = E_n(d)$
$E = \frac{1}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx$
$\Delta \phi = -\frac{dE}{dx} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}$

Flächenwiderstandsmessung: Van-der-Pauw, Vierpunktmessung

Bloch: $\Psi(x) = e^{ikx} \cdot u(x)$ -> periodisch, $u(x+a) = u(x)$
Bloch-Oszillation: $F = \hbar \frac{dk}{dt} \Rightarrow k(t) = k(0) + \frac{F}{\hbar} t$
Für den Ort gilt: $x(t) = x_0 + \int v_g(k(t)) dt$ $(F = e_0 E)$
Wenn Periode der Bloch Oszillation T >> Streuzeit τ ist, kann ein ger. Strom fließen



Quantenstatistik / Quantenpunkte
3D
$W(|\vec{k}|) = \frac{\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2 m_{eff}} = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2 m_{eff}}$
$k_{x,y,z} = \frac{\pi}{L} n_{x,y,z}$, $\Psi(x,y,z) = \Psi_x(x) \Psi_y(y) \Psi_z(z)$

Zustandsdichte eines HL: $g_{3D}(W) = \frac{4\pi (2 m_{eff})^{3/2}}{h^3} \sqrt{W - W_L}$ $\left[\frac{1}{J m^3}\right]$

Anzahl Zustände: $N(W) = \frac{V_{alle\ Zustände}}{V_{Zustand}} = L^3 \frac{(2 m_{eff})^{3/2}}{6 \pi^2 \hbar^3} W^{3/2}$

$V_{Zustand} = \frac{8\pi^3}{L^3} = \frac{8\pi^3}{V_{Kristall}}$

Energiedichte: $D(W) = \frac{dN(W)}{dW} = L^3 \frac{(2 m_{eff})^{3/2}}{4 \pi^2 \hbar^3} W^{1/2}$

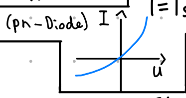
Zustandsdichte: $g(W) = 2 \frac{1}{V} \frac{dN(W)}{dW}$ $(V = L^3)$

$j_{Drift} = e(n\mu_n + p\mu_p) E$ (bei Raumtemp.)
$j_{Diff} = e(D_n \nabla n - D_p \nabla p)$
Amorph: Keine krist. Ber., nur Nahordnung
Polykristallin: Einzelne kristalline Bereiche, getrennt durch Korngrenz

Diffusionsspannung
$U_D = U_T \ln\left(\frac{n_A n_D}{n_i^2}\right)$
$U_T = \frac{k_B T}{e}$

Anz. Zustände
$N = \int_{W_L}^{\infty} \tilde{n}(W,T) dW$

$I(U) = I_S \left(\exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1\right)$
$I = I_S (e^{U/U_T} - 1)$



$g_L(W,T) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{N_L}{k_B T} \sqrt{\frac{W - W_L}{k_B T}}$

Boltzmann-Näherung
Wenn $W - W_F \gg k_B T$ oder $e^{\frac{W-W_F}{k_B T}} \gg 1$, kann die Verteilung durch eine Boltzmann-Näherung approximiert werden: $f_B(W,T) = e^{-\frac{W-W_F}{k_B T}}$

Fermienergie: Gibt die höchste Energie an, die ein Teilchen in einem Vielteilchensystem haben kann, wenn das System als ganzes in seinem Grundzustand ist

Elektronendichte: $\tilde{n}(W,T) = g_L(W) \cdot f(W,T)$
Löcherdichte: $\tilde{p}(W,T) = g_V(W) \cdot (1 - f(W,T))$

Gunn-Effekt: großes E -> Nebenminimum

Intr. HL ($W_G = W_L - W_V$ Bandlückenenergie)

Ladungsträgerdichte: $n_i = \sqrt{n_{(t)} p_{(t)}} = \sqrt{N_L N_V} e^{-\frac{W_G}{2 k_B T}}$ [cm^{-3}], $(W_G = \frac{h \cdot c}{\lambda})$

$= 2 \cdot (m_e^* m_p^*)^{3/4} \cdot \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{W_G}{2 k_B T}}$

Butler-Volmer-Gleichung:
$j_{rkt} = zFr = j_0 \left(\exp\left(\frac{\alpha z F \eta}{RT}\right) - \exp\left(\frac{-(1-\alpha) z F \eta}{RT}\right)\right)$
$r = r_{ox} - r_{red}$; $\sim r_{ox}$; $\sim r_{red}$

(Effek Zustandsd.)
$\Rightarrow n = p = n_i$
$N_L = N_V = 2\left(\frac{m_{eff} k_B T}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2}$
$p = N_V \cdot e^{-\frac{W_F - W_V}{k_B T}}$
$n = N_L e^{-\frac{W_L - W_F}{k_B T}}$

2D
Fläche eines Zustands: $F_{Zustand} = \frac{4\pi^2}{L^2}$

Anzahl Zustände: $N(W) = \frac{F_{Kreis}}{F_{Zustand}} = \frac{\pi k_R^2}{\frac{4\pi^2}{L^2}} = \frac{\pi 2 m W L^2}{4 \hbar^2 \pi^2} = \frac{m W L^2}{2 \hbar^2 \pi}$

Energiedichte: $D(W) = \frac{dN(W)}{dW} = \frac{m L^2}{2 \hbar^2 \pi}$

Zustandsdichte: $g(W)_{2D} = 2 \frac{1}{F} D(W) = \frac{m}{\pi \hbar^2}$ $\left[\frac{1}{J m^2}\right]$ $(F = L^2)$
Normierung

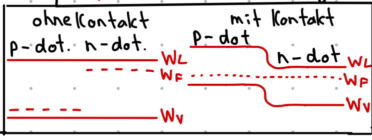
$W = \frac{\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m} \Rightarrow k_x^2 + k_y^2 = \frac{2mW}{\hbar^2} \Rightarrow k_R = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}$

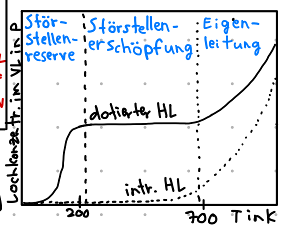
Reduktion: Aufnahme von e^-
$M^+ + e^- \xrightarrow{red} M$
Oxidation: Abgabe von e^-
$M \xrightarrow{rox} M^+ + e^-$

Diffuse Doppelsch.: Exp. Pot. verlauf
Starre Doppelsch.: Linearer Potentialverlauf

Fermieenergie intr. HL: $W_F = \frac{1}{2}(W_F + W_V) + \frac{3}{4} k_B T \ln\left(\frac{m_{eff,h}}{m_{eff,e}}\right)$

Ferminiveau: Besetzungswahrscheinlichkeit = 0,5





1D
$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k^2 = \frac{2mW}{\hbar^2} \Rightarrow k_R = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}$ $L_{Zustand} = \frac{2\pi}{L}$

Anzahl Zustände: $N(W) = \frac{L_{Strecke}}{L_{Zustand}} = \frac{2 k_R}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{\sqrt{2mW} L}{\pi \hbar}$

Energiedichte: $D(W) = \frac{dN(W)}{dW} = \frac{\sqrt{m} L}{\pi \hbar \sqrt{2W}}$ Kein Gefälle: D = 0

Zustandsdichte: $g(W)_{1D} = 2 \frac{1}{L} D(W) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} \frac{1}{\sqrt{W}}$ $\left[\frac{1}{J m}\right]$

Membranmat.
Nafion: Ist für Protonen leitend, weist entspr. Werte für Leitf., Ladungsträgerdichte bei T = 300 K auf

Dotierte HL
Donatoren geben Elektronen ins LB ab (n-dot)
Akzeptoren nehmen Elektronen vom VB auf (p-d)
Massenwirkungsgesetz: $n \cdot p = n_i^2$ [cm^{-3}]
Ladungsneutralität: $n + n_A^- = p + n_D^+$, **Entartete HL**: Ferminiveau im Band
Kontinuitätsgleichung: $e\frac{dn}{dt} = \vec{\nabla} \vec{J} + e(g_n - r_n) = e \vec{\nabla}(n\mu \vec{E} + D \vec{\nabla} n) + e(g_n - r_n)$
$n_A = n_A^x \cdot n_A^- \Rightarrow n_A^- = n_A \cdot f_A(W)$ Wenn alle Störst. ion.: $p = p_0 + n_A^- = p_0 + n_A \sim n_A$ (p-dot)

Piezzoel:
$\varepsilon_M = s^E \cdot \sigma_M + d_p \cdot E$
$D = d_p \cdot \sigma_M + \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r^T \cdot E$
$\varepsilon_M = s^D \cdot \sigma_M + g_p \cdot D$
$E = -g_p \cdot \sigma_M + \frac{D}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r}$

ε_M: mech. Dehnung $= \Delta x / x$
σ_M: mech. Spannung $= \frac{F}{A}$
s^E: Elastizität (konst E)
s^D: Elastizität
d_p: Ladungskonst
g_p: Spannungskonst

Festionenleiter: Ionische Kristalle leiten meist keine Ionen. Ionen bewegen sich nur leicht im Gitter. Um sie ionenleitend zu machen: Einbau von Fehlstellen (Dotieren)
Schottky-Deffekt: Fehlstellen im Kristall, **Frenkel-Deffekt**: Zwischengitterionen
mit komp. Fehlstellen; Wiederholte Bewegung von FS und ZI führen zu Ionentransport = Ladungstransp.

Don: $f(W) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}\exp\left(\frac{W - W_F}{k_B T}\right)}$
Akz: $f_A(W) = \frac{1}{1 + 2\exp\left(\frac{W - W_F}{k_B T}\right)}$
$n_A^- = n_A \frac{1}{1 + 2\exp\left(\frac{W_A - W_F}{k_B T}\right)}$
(n_A^-: Ionisierte Akzep)

dn/dt: Zeitl. Änderung der Elektronendichte
$\vec{\nabla} \vec{J}$: Einfluss durch Ladungsträgerströme

Wenn p-dot, muss Dot-Element kleinere Hauptgruppe haben

Kondensatoren
Kapazität: $C = \varepsilon_r \cdot \varepsilon_0 \cdot \frac{A}{d}$ $E = \frac{U}{d}$
Ladung: $Q = C \cdot U$ $\frac{dQ}{dt} = -C\left(\frac{dU}{dt}\right) = I$
ε_r: Isotrop => Skalar, Anisotrop => Tensor
Piezoelektrika: Polarisation durch mechanische Dehnung; Nicht notwendiger Weise Hystereseverhalten; remanente Pol.
Ferroelektrika: Immer Piezoelektrisch, Spontane Pol (durch äußeres Feld beeinflussbar), Hystereseverhalten mit remanenter Polarisation
Dielektrika: Leiten keine Elektronen, reagieren auf E mit Polarisierung durch Dipole
Elektrolyte: Leiten (normalerweise) keine El., enthalten Ionen hoher Beweglichkeit => Ionen bewegen sich bei E zur Elektrolyte => Ionenleiter
Rückstellkraft: $Q \cdot E = k_{ion} \cdot d$

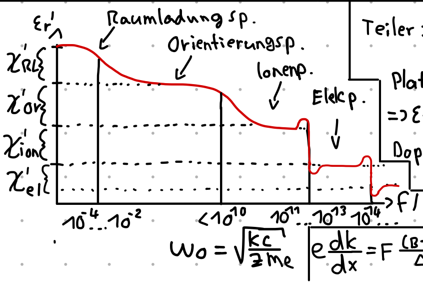
Flussdichte (Dielektrikum): $\vec{D} = \varepsilon_0 \cdot \vec{E} + \vec{P}$ **Vakuum**: $\vec{D}_0 = \varepsilon_0 \cdot \vec{E}$ <- gilt in Materie allgemein nur ohne Vektoren
$D = \frac{Q}{A}$
Polarisation (lineare Materie): $\vec{P} = \varepsilon_0 \cdot \chi_e \cdot \vec{E}$ (unpolar: nur χ_{el})
Suszebilitäten: $\chi_e = \chi_{el} + \chi_{ion} + \chi_{or} + \chi_{RL}$, $\chi_e = \varepsilon_r - 1 \left(= \frac{P}{\varepsilon_0}\right) \cdot \alpha \leftarrow$ für $\chi_e \ll 3$) $(n = N_A / V_{Mol} = N_A \cdot c)$

Innere Helmholtzfläche: Adsorbierte Ionen, Ausger. Dipole
Äußere Helmholtzfläche: Solvasierte Überschussladungen

χ_{el}: Elektronenpolarisation: Auslenkung von Atomkern und -hülle => $\chi_{el} = 4\pi n R^3 = \frac{n\,\alpha_{el}}{\varepsilon_0}$ } leichter gebunden, gut beweglich
χ_{ion}: Ionenp.: Auslenkung von Kationen und Anionen => $\chi_{ion} = \frac{n Q^2}{\varepsilon_0 k_{ion}}$
χ_{or}: Orientierungsp.: Ausrichtung permanent vorhandener Dipole => $\chi_{OR} = \frac{n p^2}{3 k_B T} = \alpha_{OR} \cdot n$ } stark gebunden, schwer beweglich $\left(\sum_i n\alpha_i = \varepsilon_0 \chi_e\right)$
χ_{RL}: Raumladungsp.: Ansammlung freier Ladungsträger an isolierenden Korngr.
$(\alpha_{EA} = \alpha_{eL,A})$ (Bei T -> Or + eL Pol.)

(Neg = Anionen)

Massenwirkungsgesetz: $(F = e_0 N_A)$
$K = \prod_i a_i^{\nu_i} = \frac{\prod a_{Produkte}}{a_{Edukte}} = \exp\left(-\frac{\Delta G_{rxn}}{RT}\right) = \exp\left(\frac{zF(\Phi_{M,0} - \Phi_{E,0})}{RT}\right)$
(ν_i = Anzahl bet. Atome)
(K = Massenwirkungskonst, a_i = Aktivität des Stoffs)
Leitfähigk.: $\sigma_{ion} = e_0 z n \mu$



Teiler: $\varepsilon_r = \frac{C_{Probe}}{C_{Ref}} = \frac{U_{Mess}}{U_0 - U_{Mess}}$
Plattenk.: $Q = C_0 \cdot U_0 = C_1 \cdot U_1$
$\Rightarrow \varepsilon_{r,1} = \frac{U_0}{U_1}$; $\varepsilon_{r,0} \cdot U_0 = \varepsilon_{r,1} \cdot U_1$
Doppels. Kapazität:
$C_d = \frac{Q}{\Phi_M - \Phi_E}$ (Φ_M: Pot. Elektrode) (Φ_E: Pot. Elektrolyt)
$\omega_0 = \sqrt{\frac{k_C}{z\,m_e}}$
$e\frac{dk}{dx} = F\frac{(C_B - C_A)}{\Delta x}$

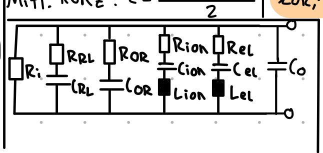
Beweglichkeit: $\mu_{ion} = \frac{e_0 z}{k_B T} D$ [m²/(V·s)]
$a_{flüssig} = \frac{c}{c_0}$
$a_{gasf.} = \frac{p}{p_0}$
$C° + 273 = K$
Mitl. Konz: $\bar{c} = \frac{c_{A,H^+} + c_{B,H^+}}{2}$

Migrationsstrom: $j_{Mig} = z e_0 \mu E = \frac{z^2 e_0^2}{k_B T} c N_A D E = \frac{z^2 e_0}{k_B T} c F D E$ (Ion. Leitf. wird nicht durch äuß. Defekte beeinflusst)

Einstein-Relation: $D = \frac{k_B T}{q} \mu$, $D_i = D_{i0} \exp\left(-\frac{W_i}{k_B T}\right)$
Bei extrinsischen Temp.

$\chi_{OR,1} = \chi_{OR,2} \frac{T_2}{T_1} = (\chi_{e,1} - \chi_{e,2}) \frac{T_2}{T_2 - T_1}$

$H_2 \rightleftharpoons 2H^+ + 2e^-$ (Diffusion)



Diffusionstrom (Elek./Ionen) (A/m²)
$j_{n,Dif} = e_0 D_n \frac{dn}{dx}$ | $j_{a,Dif} = -z_a e_0 D_a \frac{da}{dx}$
$j_{p,Dif} = -e_0 D_p \frac{dp}{dx}$ | $j_{k,Dif} = -z_k e_0 D_k \frac{dk}{dx}$ (z = Ladungszahl)

$E_{Lok} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0}$