

Elektronische Eigenschaften von Festkörpern

- Das Drude-Modell
- Das Sommerfeld-Modell
- Das Semiklassische Modell der Elektronendynamik
 - Bloch-Wellen
 - Die erste Brillouin-Zone
 - Energiebänder
 - Die Bewegungsgleichungen der Bandelektrenen
- Ferromagnetismus
- Supraleitung

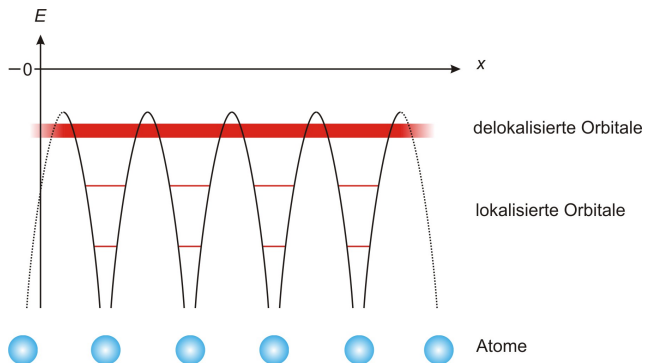
Bloch-Wellen

Elektronische Eigenschaften von Festkörpern

- Das Drude-Modell
- Das Sommerfeld-Modell
- Das Semiklassische Modell der Elektronendynamik
 - Bloch-Wellen
 - Die erste Brillouin-Zone
 - Energiebänder
 - Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen
- Ferromagnetismus & Supraleitung

Bloch-Wellen 1

- Jedes Elektron bewegt sich in einem effektiven Potential, das von den übrigen Elektronen und positiv geladenen Atomrümpfen hervorgerufen wird.
- Die potentielle Energie eines jeden Elektrons hat die Periodizität des Kristallgitters.



Bloch-Wellen 1

Kommentar 1

Im Sommerfeldmodell wird allein die kinetische Energie der Leitungselektronen berücksichtigt, von denen man annimmt, dass ihre Ladung durch die positiven Ladungen der Atomrümpfe abgeschirmt wird, so dass sie sich unabhängig voneinander bewegen können.

Diese quasi-Elektronen (Elektron + Abschirmwolke) bewegen sich in einem effektiven Potential, dessen Periodizität aufgrund des Kristallgitters vernachlässigt wird.

Die Periodizität der potentiellen Energie kann natürlich nicht vernachlässigt werden.

Seit 1928 haben sich Generationen mit dem Problem beschäftigt, die potentielle Energie der verschiedenen Elektronen zu messen und zu berechnen.

Bloch-Wellen 1

Kommentar 2

Inzwischen gibt es Programme (z.B. Wien2K), mit denen die Energie der Elektronen in einem Festkörper für viele Substanzen präzise berechnet werden kann.

Diese Rechnungen werden aus Gründen, die im folgenden deutlich werden, Bandstrukturechnungen genannt.

Obwohl die zugrundeliegenden theoretischen und mathematischen Methoden kompliziert sind, gibt es ein paar Prinzipien, mit denen die Ergebnisse dieser Rechnung gelesen und experimentelle Ergebnisse interpretiert werden können.

Diese Spielregeln sollen im folgenden behandelt werden.

Bloch-Wellen 2

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$E\varphi(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + E_{\text{pot}}(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r})$$

und

$$E_{\text{pot}}(\vec{r}) = E_{\text{pot}}(\vec{r} + \vec{R})$$

mit

$$\underline{\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3}$$

Bloch-Wellen 2

Kommentar

Die rot umrandete Formel gibt die zeitunabhängige Schrödingergleichung.

Für jedes einzelne Elektron kann eine solche Schrödingergleichung aufgeschrieben werden, wobei sich die potentielle Energie von Elektron zu Elektron unterscheiden kann.

Das wesentliche Merkmal dieser Schrödingergleichung ist, dass die potentielle Energie periodisch im Kristallgitter ist.

Die Vektoren $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{a}_3$ in der rot unterstrichenen Formel spannen die primitive Elementarzelle des Kristallgitters auf.

Die Vektoren $\vec{R}$ geben die Lage der primitiven Elementarzellen.

Bloch-Wellen 3

Lösung der Schrödinger Gleichung

$$\underline{E\varphi(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + E_{pot}(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r})} \quad \text{mit} \quad E_{pot}(\vec{r}) = E_{pot}(\vec{r} + \vec{R})$$

Da die potentielle Energie periodisch im Kristallgitter ist, ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\varphi_{\vec{k}}^* \cdot \varphi_{\vec{k}}$ des Elektrons im Kristallgitter ebenfalls periodisch

$$\underline{|\varphi(\vec{r})|^2 = |\varphi(\vec{r} + \vec{R})|^2}$$

Lösungsansatz (Felix Bloch 1928)

$$\underline{\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{r})} \quad \text{und} \quad \boxed{u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{R})}$$

Bloch-Wellen 3

Kommentar 1

Da die potentielle Energie der Elektronen periodisch im Kristallgitter ist, muss auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen periodisch im Kristallgitter sein, denn die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ergibt die Ladungsdichte der Elektronen.

Das Betragsquadrat der Wellenfunktion ist also periodisch im Kristallgitter.

Die Lösungen der Schrödingergleichung sind Bloch-Wellen.

Bloch-Wellen sind ebene Wellen, deren Amplitude eine periodische Funktion des Kristallgitters ist.

Die rot umrandete Gleichung gibt die entscheidende Forderung.

Damit erfüllt die Wahrscheinlichkeitsdichte der Elektronenwellen die geforderte Periodizität des Kristallgitters.

Bloch-Wellen 3

Kommentar 2

Auf die Bloch-Wellen können wie für die ebenen Wellen im Sommerfeld-Modell die periodischen Randbedingungen angewendet werden.

Die periodische Randbedingung bedeutet, dass der endliche Kristall in allen Raumrichtungen unendlich wiederholt wird, wobei sich in jedem Kristall exakt das gleiche abspielt.

Die Amplitudenfunktion $u(\vec{r})$ beeinträchtigt diese Forderung nicht, da sie die Periode des Kristallgitters hat.

Aufgrund dieser Forderung sind die k -Vektoren der Bloch-Wellen diskret, so wie sie es die k -Vektoren für die ebenen Wellen im Sommerfeld-Modell sind.

Bloch-Wellen 4

Erinnerung: Definition des reziproken Gitters

$$\vec{K}\vec{R} = 2\pi n$$

mit $\vec{K} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + \ell\vec{b}_3$ und $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{V_{\text{EZ}}}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{V_{\text{EZ}}}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{V_{\text{EZ}}}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)\end{aligned}$$

V_{EZ} bezeichnet das Volumen der primitiven Elementarzelle $V_{\text{EZ}} = \vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$

Bloch-Wellen 4

Kommentar

Nun wird das von Max von Laue eingeführte reziproke Gitter benötigt.

Für die Beugung von Wellen an einem Kristallgitter sind die Netzebenen wichtig.

Die Vektoren $\vec{K}$ des reziproken Gitters bestimmen die Orientierung und den Abstand der Netzebenen.

Die erste rot umrandete Formel gibt die Definitionsgleichung des reziproken Gitters.

Die Vektoren $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{a}_3$ bestimmen die primitive Elementarzelle und damit auch die Basisvektoren $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$ und $\vec{b}_3$ des reziproken Gitters.

Bloch-Wellen 5

die Bloch-Wellen sind im reziproken Gitter periodische Funktionen

$$\begin{aligned}\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= u(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \\ &= u(\vec{r}) e^{-i\vec{K}\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{+i\vec{K}\vec{r}}\end{aligned}$$

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u'(\vec{r}) e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}} \quad \text{mit} \quad u'(\vec{r}) = u(\vec{r}) e^{-i\vec{K}\vec{r}}$$

Nebenrechnung:

$$\begin{aligned}\underline{u'(\vec{r})} &= u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{-i\vec{K}\vec{r}} \quad \text{mit} \quad u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{R}) \\ &= u(\vec{r} + \vec{R}) e^{-i\vec{K}\vec{r}} \quad \text{mit} \quad \vec{K}\vec{R} = 2\pi n \\ &= u(\vec{r} + \vec{R}) e^{-i\vec{K}(\vec{r} + \vec{R})} = \underline{u'(\vec{r} + \vec{R})}\end{aligned}$$

und damit

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u'(\vec{r}) e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}} = \varphi_{\vec{k}+\vec{K}}(\vec{r})$$

Bloch-Wellen 5

Kommentar

Die Blochwellen haben die Periodizität des reziproken Gitters.

Das sieht man, wenn die erste blaue Gleichung einer Blochwelle mit den grün geschriebenen Phasenfaktoren $e^{\pm i\vec{K}\cdot\vec{r}}$ erweitert wird.

Die Erweiterung ändert den Funktionswert nicht.

Die zweite blau geschriebene Gleichung ist nun eine Blochwelle zum Wellenzahlvektor $\vec{k} + \vec{K}$, da, wie die Nebenrechnung zeigt, die neue Amplitudenfunktion $u'(\vec{r})$ wie die ursprüngliche Amplitudenfunktion $u(\vec{r})$ die Periodizität des Kristallgitters hat.

Die rot umrandete Formel fasst dieses Ergebnis zusammen.

Bloch-Wellen 6

Bloch-Wellen sind im reziproken Gitter periodische Funktionen

$$\underline{\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varphi_{\vec{k}+\vec{K}}(\vec{r})}$$

deshalb sind auch die Energieeigenwerte der Schrödinger Gleichung periodische Funktionen im reziproken Gitter

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{K})$$

die Funktionen $E(\vec{k})$ nennt man Energiebänder

Bloch-Wellen 6

Kommentar

Ist eine Blochwelle die Lösung der Schrödinger-Gleichung, dann hängen die Energieeigenwerte vom Wellezahlvektor $\vec{k}$ ab.

Da die Blochwellen die Periodizität des reziproken Gitters haben, haben auch die Energieeigenwerte diese Eigenschaft.

Die rot umrandete Gleichung formuliert dieses Ergebnis.

Die Funktionen $E(\vec{k})$ werden Energiebänder genannt.

Bei der Berechnung der Energiebänder beginnt man mit den Orbitalen der Atome.

Aus diesem Grund werden die Bänder auch häufig mit den Quantenzahlen der zugrundeliegenden atomaren Orbitale bezeichnet.

Z.B. gibt es das Band der 4s-Elektronen von Kupfer.

1. Brillouin-Zone

Elektronische Eigenschaften von Festkörpern

- Das Semiklassische Modell der Elektronendynamik
 - Bloch-Wellen
 - Die erste Brillouin-Zone
 - Energiebänder
 - Die Bewegungsgleichungen der Bandelekttronen

Kommentar

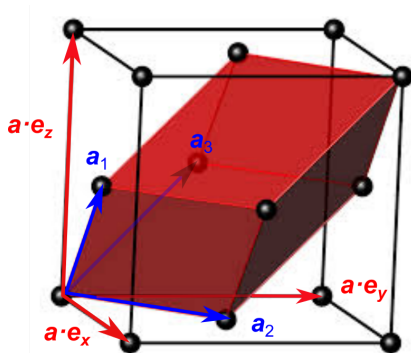
In dieser Vorlesung soll Kupfer als Beispiel für ein Metall und Silizium bzw. Germanium als Beispiele für Halbleiter betrachtet werden.

Da sowohl Kupfer als auch Silizium und Germanium in der kubischen fcc-Struktur kristallisieren, stelle ich in diesem Abschnitt einige kristallographische Eigenheiten des fcc-Gitters zusammen.

Diese Informationen werden zum Verständnis der experimentellen Ergebnisse benötigt, die im folgenden vorgestellt werden.

Die erste Brillouin-Zone 1

kubische Elementarzelle und eine mögliche primitive Elementarzelle (roter Rhomboeder) des fcc-Gitters



(Rhombhedron.mp4)

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \frac{a}{2} (\vec{e}_x + \vec{e}_z) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2} (\vec{e}_y + \vec{e}_x) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2} (\vec{e}_z + \vec{e}_y)\end{aligned}$$

Die erste Brillouin-Zone 1

Kommentar

Die Abbildung zeigt die kubische Elementarzelle der fcc-Struktur. Die Gitterkonstante der kubischen Elementarzelle ist a .

Die Kügelchen deuten die Lage der primitiven Elementarzellen an.

Im Fall von Kupfer befindet sich in jeder primitiven Elementarzelle ein Kupferatom. Beim Silizium und Germanium sind es jeweils zwei Atome.

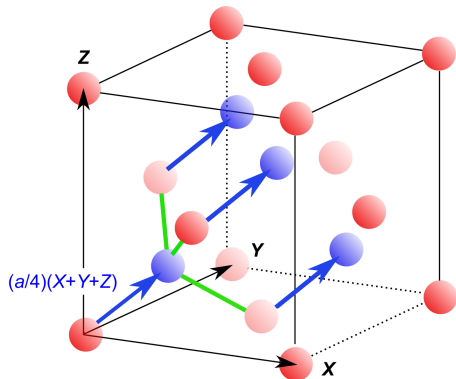
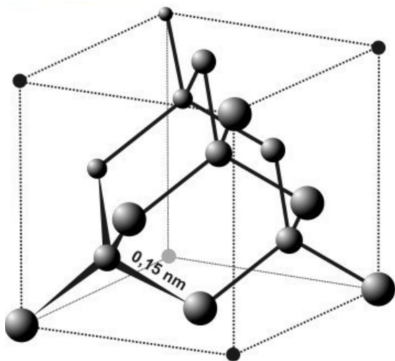
Die kubische Elementarzelle enthält 4 primitive Elementarzellen.

Die Vektoren $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{a}_3$ zeigen auf die Lage der primitiven Elementarzellen in der Mitte der Würfelflächen und spannen so eine primitive Elementarzelle auf, die rot eingezeichnet ist.

Diese primitive Elementarzelle ist ein Rhomboeder.

Die erste Brillouin-Zone 2

kubische Elementarzelle der Diamantstruktur
(fcc-Kristallgitter mit zwei Atomen (rot und blau) in der primitiven Elementarzelle)



Die erste Brillouin-Zone 2

Kommentar

Silizium und Germanium kristallisieren in der Diamantstruktur.

Die linke Abbildung zeigt die kubische Elementarzelle der Diamantstruktur.

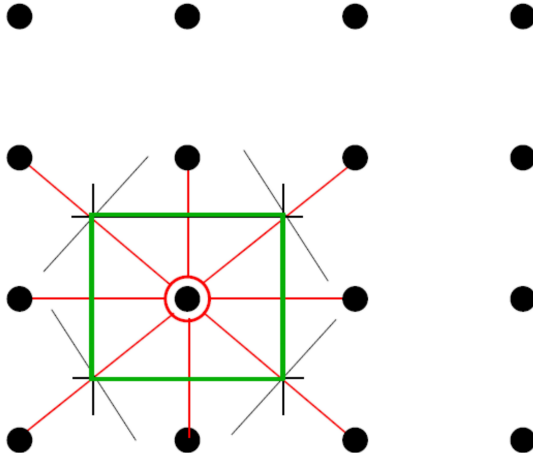
Die Diamantstruktur ist ein fcc-Gitter. Dabei befinden sich jeweils zwei Atome in einer primitiven Elementarzelle.

In der rechten Abbildung ist die Lage der Atome farblich markiert. Die primitive Elementarzelle enthält ein rot und ein blau markiertes Atom.

Die rot markierten Atome belegen die Ecken und Flächen des Würfels, wie im einfachen fcc-Gitter von Kupfer. Die blau markierten Atome sind in Richtung der Raumdiagonale um ein Viertel der kubischen Gitterkonstante verschoben und es ergibt sich so die tetraederförmige Anordnung der Atome aufgrund der sp^3 -Hybridorbitale.

Die erste Brillouin-Zone 3

Konstruktion der Wigner-Seitz-Zelle



Die erste Brillouin-Zone 3

Kommentar 1

Die primitiven Elementarzellen, die im fcc-Gitter von den Vektoren $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{a}_3$ aufgespannt werden, sind mathematisch einfach zu handhaben.

Doch lassen die Rhomboeder die Symmetrie des kubischen Gitters nicht mehr erkennen.

Da die Symmetrie der Elementarzelle eine wichtige Information ist, wird zur Konstruktion einer primitiven Elementarzellen, welche die Symmetrie des Gitters weiterhin erkennen läßt, ein spezielles Verfahren angewendet.

Dieses Verfahren illustriert die Abbildung für den simplen Fall eines einfach kubischen Gitters.

Die erste Brillouin-Zone 3

Kommentar 2

Ausgehend von einem Gitterpunkt wählt man die Vektoren zu den benachbarten Gitterpunkten.

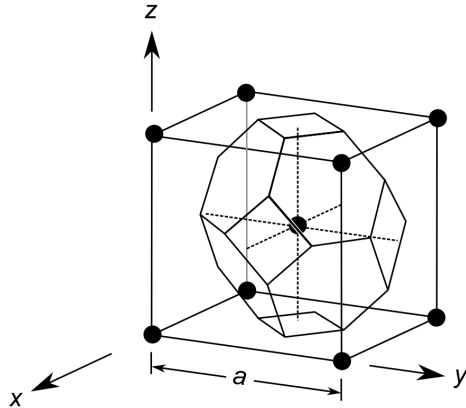
Die primitive Elementarzelle wird von den Ebenen eingeschlossen, die diese Vektoren senkrecht in der Mitte schneiden.

Die grünen Linien deuten die Ebenen an.

Die resultierende primitive Elementarzelle wird Wigner-Seitz-Zelle genannt.

Die erste Brillouin-Zone 4

Wigner-Seitz-Zelle für ein bcc-Gitter



Die erste Brillouin-Zone 4

Kommentar

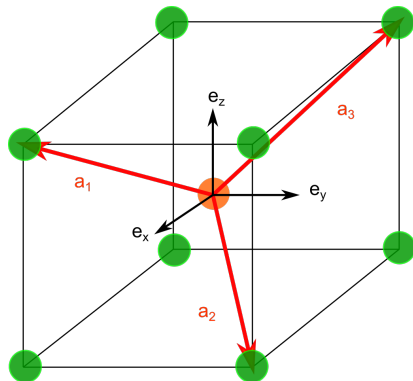
Die Abbildung zeigt die Wigner-Seitz-Zelle für ein bcc-Gitter.

Die hexagonalen Flächen stehen senkrecht auf den Diagonalen des Würfels und teilen diese in der Mitte.

Die quadratischen Flächen liegen auf den Flächen der kubischen Elementarzelle und teilen die Verbindungsvektoren zwischen den zentralen Punkten des bcc-Gitters in der Mitte.

Die erste Brillouin-Zone 5

Die rhomboedrische primitive Elementarzelle eines bcc-Gitters



$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \frac{a}{2}(\vec{e}_x - \vec{e}_y + \vec{e}_z) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(\vec{e}_y - \vec{e}_z + \vec{e}_x) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2}(\vec{e}_z - \vec{e}_x + \vec{e}_y)\end{aligned}$$

Die erste Brillouin-Zone 5

Kommentar

Die Abbildung zeigt die kubische Elementarzelle eines bcc-Gitters mit der Kantenlänge a .

Die Vektoren $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{a}_3$ verbinden die benachbarten Streuzentren und spannen die primitive rhomboedrische Elementarzelle auf.

(Nochmals zur Sicherheit: Die Punkte geben die Lage der primitiven Elementarzellen und stellen keine Atome dar!)

Die erste Brillouin-Zone 6: Das reziproke Gitter eines fcc-Gitters

Mit den Vektoren der primitiven Elementarzelle eines fcc-Gitters auf Seite 1 ergeben sich die Basisvektoren des reziproken Gitters

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{e}_x + \vec{e}_z) \quad \rightarrow \quad \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_{EZ}}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{2\pi}{a}(\vec{e}_x - \vec{e}_y + \vec{e}_z)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{e}_y + \vec{e}_x) \quad \rightarrow \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_{EZ}}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \frac{2\pi}{a}(\vec{e}_y - \vec{e}_z + \vec{e}_x)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{e}_z + \vec{e}_y) \quad \rightarrow \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_{EZ}}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{2\pi}{a}(\vec{e}_z - \vec{e}_x + \vec{e}_y)$$

Die erste Brillouin-Zone 6

Kommentar

Schwarz geschrieben stehen links die Vektoren, welche die rhomboedrische primitive Elementarzelle des fcc-Gitters aufspannen (blaue Vektoren auf Seite „Die erste Brillouin-Zone 1“).

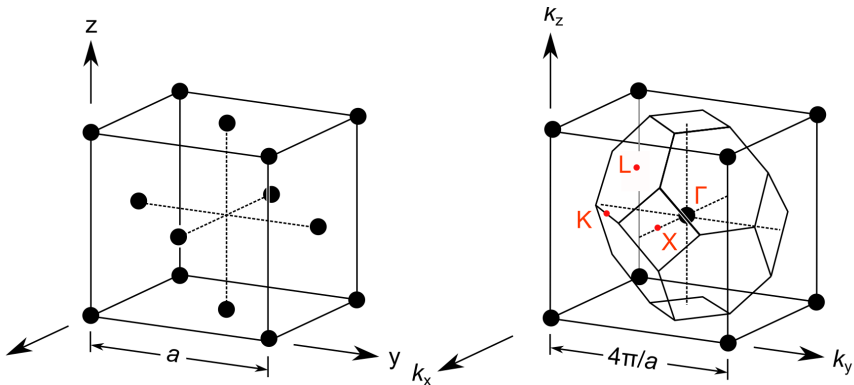
Werden die Formeln für die Basisvektoren des reziproken Gitters angewendet, dann ergeben sich die blau geschriebenen Vektoren.

Diese Vektoren ergeben eine bcc-Struktur, wie der Vergleich mit den Vektoren der primitiven Elementarzelle des bcc-Gitters zeigt.

Die erste Brillouin-Zone 7

Bemerke:

Das reziproke Gitter eines fcc-Gitters ist ein bcc-Gitter!



Die erste Brillouin-Zone 7

Kommentar

Die linke Abbildung zeigt die kubische Elementarzelle des fcc-Gitters.

Die rechte Abbildung zeigt die kubische Elementarzelle der bcc-Struktur im reziproken Gitter.

Der Vergleich mit der bcc-Struktur eines Kristallgitters ergibt, dass die Kantenlänge der kubischen Elementarzelle im reziproken Gitter $4\pi/a$ beträgt.

Im reziproken Gitter kann eine primitive Elementarzelle ebenfalls nach den Verfahren für die Wigner-Seitz-Zelle konstruiert werden.

Im reziproken Gitter wird diese Elementarzelle die 1. Brillouin-Zone genannt.

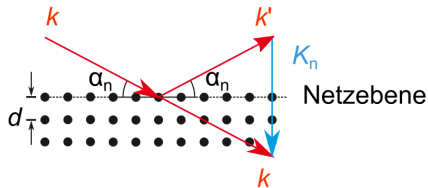
Die erste Brillouin-Zone 8

Bemerke:

Die Brillouin-Zonen werden von Netzebenen begrenzt!

Laue-Bedingung für konstruktive Interferenz

$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{K}_{h,k,\ell}$$



Die erste Brillouin-Zone 8

Kommentar

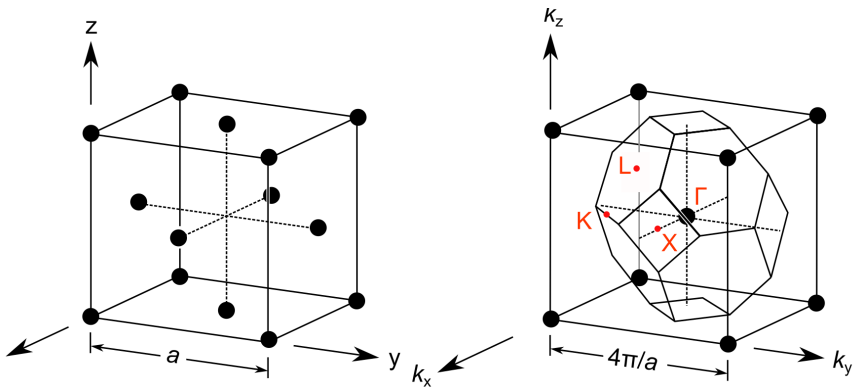
Gemäß der Konstruktionsvorschrift wird die 1. Brillouin-Zone von Netzebenen begrenzt.

Zur Erinnerung zeigt die Abbildung nochmals den Zusammenhang zwischen der Bragg- und Laue-Bedingung bzw. den Zusammenhang zwischen dem reziproken Gittervektor $\vec{K}$ und der entsprechenden Netzebene.

Lässt man die Beschränkung auf die benachbarten Gitterpunkte fallen, dann ergeben sich Brillouin-Zonen höherer Ordnung (die in dieser Vorlesung aber nicht benötigt werden).

Die erste Brillouin-Zone 9

Die 1. Brillouin-Zone des fcc-Gitters



Die erste Brillouin-Zone 9

Kommentar 1

Die rechte Abbildung zeigt die kubische Elementarzelle des reziproken Gitters eines fcc-Gitters.

Außerdem zeigt die Abbildung die 1. Brillouin-Zone eines fcc-Gitters.

Symmetriepunkte der 1. Brillouin-Zone werden mit Buchstaben gekennzeichnet. Das Zentrum der 1. Brillouin-Zone ist der Γ -Punkt, die Mitte der hexagonalen Fläche der L-Punkt und die Mitte der quadratischen Fläche der X-Punkt. Auf den Mitten der Kanten liegen die K-Punkte.

Da die Blochwellen und die Energiebänder periodisch im reziproken Gitter sind, muss man Lösungen der Schrödinger-Gleichung nur in der 1. Brillouin-Zone kennen.

Die erste Brillouin-Zone 9

Kommentar 2

Um die Energie der Elektronenwellen zu beschreiben, gibt man die Energie $E(\vec{k})$ entlang der Verbindungslinien der Symmetriepunkte an (z.B. auf dem Weg Γ -X-K-L- Γ).

Energiebänder

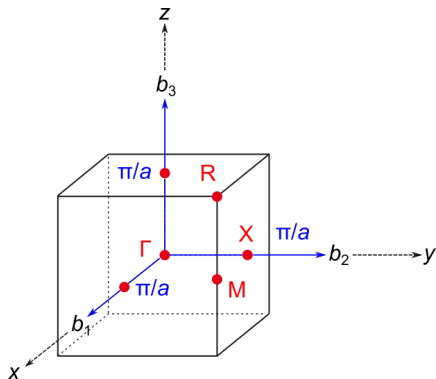
Elektronische Eigenschaften von Festkörpern

- Das Semiklassische Modell der Elektronendynamik
 - Bloch-Wellen
 - Die erste Brillouin-Zone
 - Energiebänder
 - Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen

Energiebänder 1

1. Brillouin-Zone für das sc-Gitter: Mit $\vec{a}_1 = a\vec{e}_x$, $\vec{a}_2 = a\vec{e}_y$, $\vec{a}_3 = a\vec{e}_z$

und $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_{EZ}}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$, $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_{EZ}}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)$, $\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_{EZ}}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)$



$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a^3}(a\vec{e}_y \times a\vec{e}_z) = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_x$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_y$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_z$$

Energiebänder 1

Kommentar 1

Um die Grundlagen zu erläutern, die in den Jahren 1931/2 von Alan Herries Wilson erarbeitet wurden, sollen zuerst Energiebänder quasi freier Elektronen in einem einfach kubischen Gitter betrachtet werden.

Die Abbildung zeigt die 1. Brillouin-Zone für ein einfach kubisches Gitter mit der Kantenlänge a .

Die Vektoren $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{a}_3$ sind entlang der Koordinatenachsen orientiert.

Mit den Formeln für die Vektoren $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$ und $\vec{b}_3$ findet man, dass diese Vektoren parallel zu den Vektoren $\vec{a}_i$ sind.

Die Netzebenen schneiden die Vektoren $\vec{b}_i$ in der Mitte und es gibt sich die in der Abbildung gezeigte 1. Brillouin-Zone.

Energiebänder 1

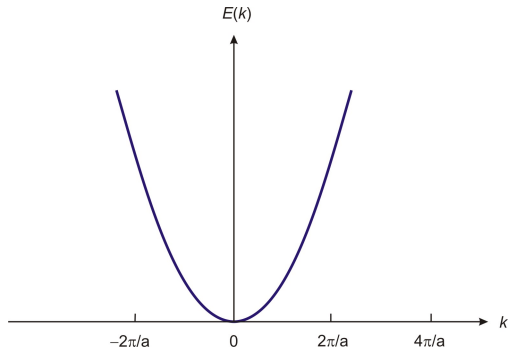
Kommentar 2

Die Mitte der Zone wird mit Γ bezeichnet und die Mitte der quadratischen Flächen mit X.

Im folgenden werden Elektronenwellen betrachtet, die sich in Richtung der Koordinatenachsen x , y oder z ausbreiten.

Energiebänder 2

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



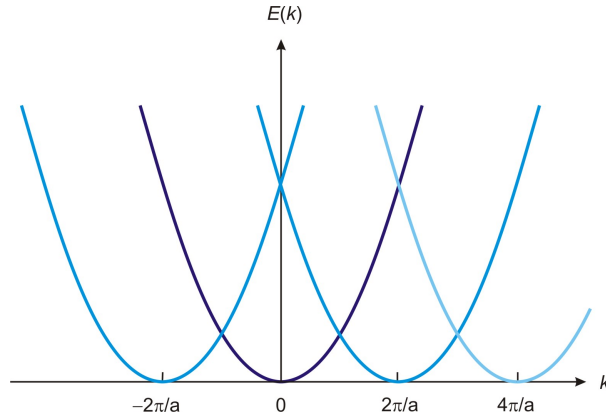
Energiebänder 2

Kommentar

Ist die potentielle Energie unabhängig vom Ort des Elektrons im Kristall, dann enthält die Schrödinger-Gleichung nur den Term für die kinetische Energie und die Energie hängt quadratisch gemäß der blau geschriebenen Formel von der Wellenzahl des Elektrons ab.

Die Abbildung zeigt den parabelförmigen Verlauf der Energie über der Wellenzahl.

Energiebänder 3



$$E_{\text{pot}}(\vec{r}) \approx 0 \text{ und } \vec{k} \parallel \vec{b}_{1,2,\text{ or }3}$$

Energiebänder 3

Kommentar

Die Abbildung zeigt den Fall, dass die potentielle Energie der Leitungselektronen nur sehr schwach die Periodizität des Gitters zeigt.

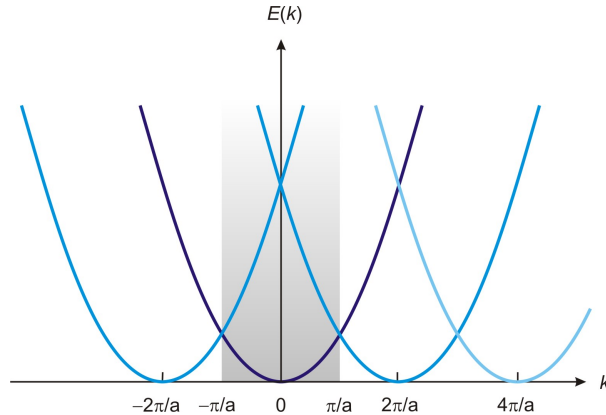
Die kinetische Energie der quasi freien Elektronen wird also kaum durch die leicht modulierte potentielle Energie beeinflusst.

Die Lösungen der Schrödingergleichung sind Bloch-Wellen, und die Energieeigenwerte der Elektronen sind periodisch im reziproken Gitter.

Die parabelförmige Abhängigkeit der Energie vom Wellenzahlvektor wiederholt sich mit der Periodizität des reziproken Gitters.

So ergeben sich in der Abbildung die hellblau gezeichneten Parabeln.

Energiebänder 4



$$E_{\text{pot}}(\vec{r}) \approx 0 \text{ und } \vec{k} \parallel \vec{b}_{1,2,\text{ or }3}$$

Energiebänder 4

Kommentar

Da die Blochwellen und die Energiebänder im reziproken Gitter periodisch sind, kann man sich bei der Lösung der Schrödingergleichung auf den Bereich der 1. Brillouin-Zone beschränken.

In der Abbildung ist dieser Bereich grau hinterlegt.

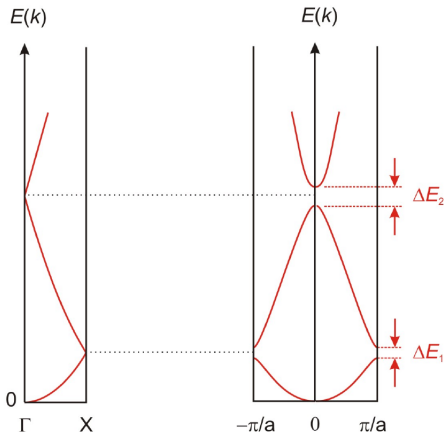
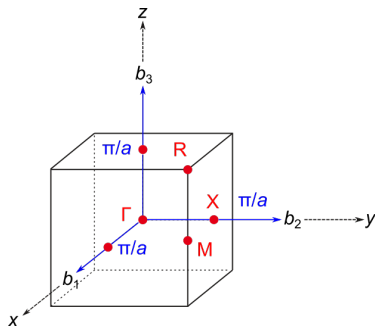
Zusätzliche Bemerkung: Bislang galt der feste Zusammenhang zwischen dem Impuls und dem Wellenzahlvektor $\vec{p} = \hbar \vec{k}$.

Das Schema der Energiebänder zeigt, dass dieser Zusammenhang in einem Kristallgitter nicht mehr gelten kann.

Zu jedem Impuls kann der Impuls $\hbar \vec{K}$ addiert werden, ohne dass sich die Energie des Elektrons ändert. Der Impuls eines Elektrons im Kristallgitter wird deshalb Quasiimpuls oder Kristallimpuls genannt.

Energiebänder 5

- An Kreuzungspunkten stoßen sich die Energieniveaus ab
→ Energielücken



Energiebänder 5

Kommentar 1

Die linke Abbildung zeigt die 1. Brillouin-Zone des einfach kubischen Gitters.

Die mittlere Abbildung zeigt die Energiebänder im Bereich zwischen den Γ -Punkt und dem X-Punkt.

Die rechte Abbildung illustriert, was geschieht, wenn der Einfluss der potentiellen Energie nicht länger vernachlässigt werden kann.

Im Energieniveauschema macht sich der Einfluss der periodischen potentiellen Energie dadurch bemerkbar, dass sich Energielücken an den Kreuzungspunkten der Energiebänder öffnen.

Energiebänder 5

Kommentar 2

Diese Energielücken öffnen sich symmetrisch um die Kreuzungspunkte und werden umso größer, je größer der Einfluss der potentiellen Energie wird.

Wachsen die Energielücken an, dann engen sie die Energiebereiche der Bänder ein, so dass diese immer flacher werden.

Je stärker die Mobilität der Elektronen durch die Modulation der potentiellen Energie eingeschränkt wird, desto flacher und schmaler werden die Energiebänder.

Energiebänder 6

Zahl der k -Zustände in der 1. Brillouin-Zone:

Volumen eines k -Zustands

$$\frac{(2\pi)^3}{V}$$

Volumen der 1. Brillouin-Zone des einfach kubischen Gitters

$$\frac{(2\pi)^3}{a^3}$$

Es gilt allgemein:

Die Zahl der k -Zustände in der 1. Brillouin-Zone ist gleich der Anzahl der Elementarzellen im Kristall

Energiebänder 6

Kommentar 1

Wie bei den ebenen Wellen des Sommerfeld-Modells müssen auch bei den Bloch-Wellen periodische Randbedingungen verwendet werden, um die Eigenschaften eines endlichen Kristalls beschreiben zu können.

Wie beim Sommerfeld-Modell haben die k -Zustände einen bestimmten Abstand zueinander und können gemäß dem Pauli-Prinzip maximal mit zwei Elektronen besetzt werden.

Die erste unterstrichene Formel gibt das Volumen den ein k -Zustand umgibt. Dabei bezeichnet V das Volumen des Kristalls.

Energiebänder 6

Kommentar 2

Das Volumen der 1. Brillouin-Zone kann für ein einfach kubisches Gitter leicht bestimmt werden. Es ergibt sich die zweite unterstrichene Formel.

Damit findet man, dass die Zahl der k -Zustände in der 1. Brillouin-Zone durch die Anzahl der primitiven Elementarzellen in einem Kristallgitter gegeben ist.

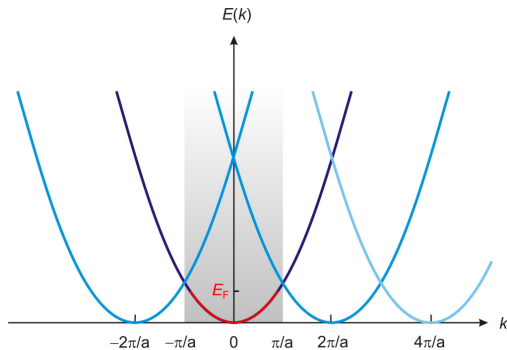
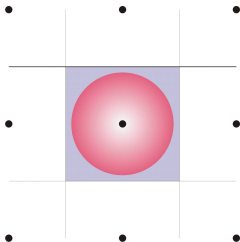
Dieses Ergebnis gilt nicht nur für ein einfach kubisches Gitter, sondern ist allgemein für alle Kristallgitter gültig.

Maximal können $2N$ Elektronen die k -Zustände innerhalb der 1. Brillouin-Zone besetzen.

Energiebänder 7

1 Elektron je Elementarzelle im sc-Gitter:

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} = \frac{(3\pi^2)^{\frac{1}{3}}}{a} = \frac{3,09}{a} < \frac{\pi}{a}$$



Energiebänder 7

Kommentar

Als Beispiel soll ein einfach kubisches Gitter betrachtet werden, bei dem es in der Elementarzelle ein Elektron gibt, für das der Einfluss der potentiellen Energie vernachlässigbar klein ist.

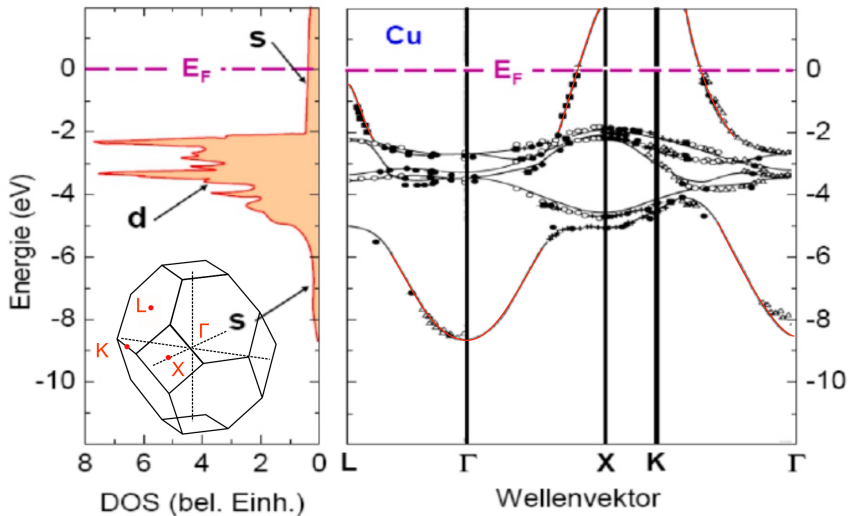
Die Dichte der Elektronen ist damit $1/a^3$ und es ergibt sich die Fermi-Wellenzahl $k_F = 3,09/a$.

Die Fermi-Kugel liegt somit innerhalb der 1. Brillouin-Zone, wie es in der linken Abbildung gezeigt wird.

Die rechte Abbildung zeigt die Bandstruktur der Elektronen.

Die besetzten k -Zustände sind durch eine rote Linie angedeutet.

Energiebänder 8



Energiebänder 8

Kommentar 1

Als realistisches Beispiel soll kristallines Kupfer betrachtet werden. Die Abbildung zeigt links die Zustandsdichte und rechts die Bandstruktur von Kupfer.

Die 3d-Orbitale der Kupferatome sind vollständig mit Elektronen besetzt und es gibt ein Elektron im 4s Orbital.

Die Bandstruktur zeigt die Energiebänder für Elektronenwellen, die sich zwischen den Symmetriepunkten der 1. Brillouin-Zone ausbreiten.

Kupfer kristallisiert in einem fcc-Gitter. Die 1. Brillouin-Zone eines fcc-Gitters habe ich zur besseren Orientierung in die Abbildung der Zustandsdichte eingefügt.

Zwischen Γ und dem L-Punkt ist der Wellenzahlvektor einer Elektronenwelle parallel zur Würfeldiagonalen. Zwischen Γ und X ist der Wellenzahlvektor parallel zu einer der Koordinatenachsen x , y oder z , etc.

Energiebänder 8

Kommentar 2

Die durchgezogenen Linien zeigen das Ergebnis einer Bandstrukturechnung, während die Punkte die Ergebnisse von Messungen zeigen.

Das Energieband der 4s-Elektronen habe ich durch eine rote Linie markiert.

Sie zeigt näherungsweise den parabolischen Verlauf, der für ein quasi freies Elektron erwartet wird.

Das Band der 4s-Elektronen wird von den fünf Bändern der 3d-Elektronen gekreuzt und es ergeben sich Energielücken.

Im Gegensatz zum Band der 4s-Elektronen sind die Bänder der 3d-Elektronen schmal, was zeigt, dass die 3d-Elektronen sich im Kristallgitter weniger gut bewegen können, als die 4s-Elektronen.

Energiebänder 8

Kommentar 3

4s-Elektronen, die einen k -Zustand in der Nähe des Γ -Punkts besetzen, sind stärker als die 3d-Elektronen gebunden.

Erst für größere Werte der Wellenzahl k übersteigt die Energie der 4s-Elektronen die Energie der 3d-Elektronen aufgrund ihrer kinetischen Energie.

Dass die Energie der 3d- und 4s-Elektronen sehr nahe beieinander liegt, ist bereits bei der Diskussion des Periodensystems aufgefallen.

Die Fermi-Energie wird nur von den 4s-Elektronen erreicht, die damit die Leitungselektronen des Kupfers sind.

Energiebänder 8

Kommentar 4

Die linke Abbildung zeigt die Zustandsdichte der 3d- und 4s-Elektronen.

Da es fünf 3d-Bänder gibt, die zudem auf einen kleineren Energiebereich beschränkt sind, ist die Zustandsdichte der 3d-Elektronen sehr viel größer als die Zustandsdichte der 4s-Elektronen.

Die Zustandsdichte der 4s Elektronen zeigt näherungsweise den wurzelförmigen Verlauf der für quasi-freie Elektronen erwartet werden kann.

In der letzten Vorlesung habe ich gezeigt, dass die Wärmekapazität des Elektronengases proportional zur Zustandsdichte bei der Fermi-Energie ist.

Diese Abhängigkeit wurde auf eine effektive Masse umgerechnet, die im Fall von Kupfer nicht sehr von der freien Elektronenmasse abweicht. Es ergibt sich $m^*/m_e = 1,4$.

Energiebänder 8

Kommentar 5

Beim Eisen ergibt sich mit $m^*/m_e = 10$ eine größere Abweichung von der Masse des freien Elektrons, was eine große Zustandsdichte anzeigt.

Ein Blick auf die Zustandsdichte der Abbildung zeigt, dass beim Eisen die Fermi-Energie im Bereich der 3d-Orbitale liegen muss, was der Grund für die große Zustandsdichte bei der Fermi-Energie ist.

Die effektive Masse, die aus den Messungen der Wärmekapazität bestimmt wird, ist schlicht ein Parameter, der die Zustandsdichte $D(E_F)$ bei der Fermi-Energie beschreibt.

Der Zusammenhang mit der Dynamik der Elektronen ist indirekt.

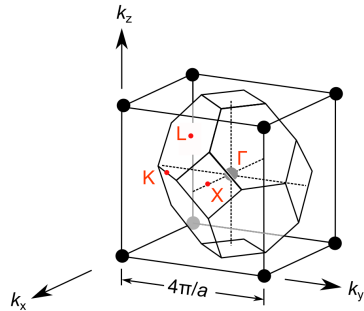
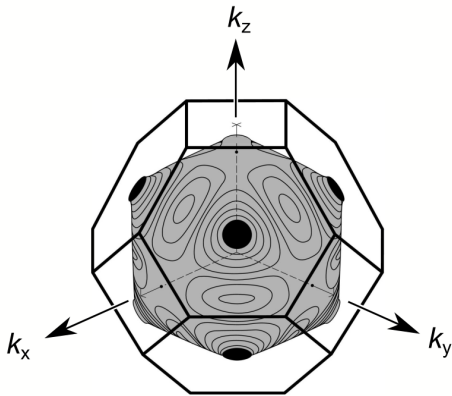
Eine große effektive Masse bedeutet eine hohe Zustandsdichte bei der Fermi-Energie, die durch schmale Energiebänder verursacht wird.

Energiebänder 8

Kommentar 6

Schmale Energiebänder gegeben sich, wenn die Beweglichkeit der Elektronen durch die Periodizität des Kristallgitters eingeschränkt ist.

Energiebänder 9: Fermi-Fläche von Kupfer



Energiebänder 9

Kommentar 1

Die linke Abbildung zeigt die Fermi-Fläche von Kupfer.

Auf der Fermi-Fläche liegen die Endpunkte der $\vec{k}$ -Vektoren, welche der Fermi-Energie entsprechen.

Im Sommerfeld-Modell ist die Fermi-Fläche die Oberfläche der Fermi-Kugel.

Obwohl die potentielle Energie die Fermi-Fläche beeinflusst, kann im Fall von Kupfer die Fermi-Kugel sehr gut erkannt werden.

Auffällig sind die schwarzen Flächen, bei den L-Punkten der 1. Brillouin-Zone.

Schaut man sich die Bandstruktur in diesem Bereich an, dann erkennt man, dass die 4s-Elektronen am L-Punkt die Fermi-Energie nicht erreichen.

Energiebänder 9

Kommentar 2

Somit kann es im Bereich der L-Punkte auch keine Fermi-Fläche geben, was durch die schwarzen Flächen angedeutet wird.

Nahe bei den L-Punkten gibt es eine Linie, bei der die Fermi-Energie erst auf der Begrenzungsfläche der 1. Brillouin-Zone erreicht wird.

Die Niveaulinien in diesem Bereich zeigen an, dass sich die Fermi-Fläche über die Kugelfläche der zugrundeliegenden Fermi-Kugel erhebt.

Die rechte Abbildung zeigt zur besseren Orientierung noch einmal die Lage der 1. Brillouin-Zone in der kubischen Elementarzelle des reziproken Gitters, wie sie im vorigen Abschnitt diskutiert worden ist.

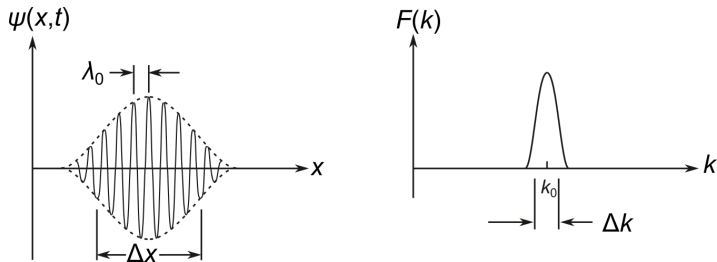
Bandelekttronen

Elektronische Eigenschaften von Festkörpern

- Das Semiklassische Modell der Elektronendynamik
 - Bloch-Wellen
 - Die erste Brillouin-Zone
 - Energiebänder
 - Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 1

Leitungselektronen werden durch Wellenpakete beschrieben.



Wellenpakete bewegen sich mit der Gruppengeschwindigkeit

z.B. gilt in x-Richtung:

$$v_x(\vec{k}_0) = \left. \frac{\partial \omega(\vec{k})}{\partial k_x} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_0} = \frac{1}{\hbar} \left. \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_x} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_0}$$

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 1 Kommentar 1

In einem ungestörten Zustand besetzen die Elektronen die k -Zustände bis zur Fermi-Fläche.

Die Bewegungen der Elektronen kompensieren sich, da es zu jeder Bloch-Welle eine gegenläufige Welle gibt.

Der ungestörte Zustand kann z.B. dadurch gestört werden, dass eine elektrische Potentialdifferenz oder ein Temperaturgradient an den Kristall angelegt wird.

Die Elektronen in der Nähe der Fermi-Fläche werden angeregt und besetzen Bloch-Wellen, deren Energie die Fermi-Energie übersteigt.

Sowohl bei thermischen Anregungen als auch bei Anregungen durch eine elektrische Potentialdifferenz ist die Anregungsenergie klein im Vergleich zur Fermi-Energie, solange das Metall nicht zum Schmelzen oder gar zum Verdampfen gebracht wird.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 1 Kommentar 2

Obwohl nur ein kleiner Anteil der Elektronen angeregt werden kann, handelt es sich dabei um eine sehr große Zahl von Elektronen.

Gibt es z.B. 1 mol Valenzelektronen und betrifft die Anregung nur ein Hundertstel dieser Elektronen, dann sind es immer noch 10^{21} Elektronen, die betroffen sind.

Aus dem Erfolg des Drude-Modells bei der Beschreibung der Elektronendynamik kann man schließen, dass die Annahme wohl lokalisierter Elektronen ein sehr erfolgreicher Ansatz ist.

Dieser Ansatz scheint der Schrödinger-Gleichung zu widersprechen, deren Lösung Blochwellen sind, die sich über den gesamten Kristall erstrecken.

An dieser Stelle hilft ein Blick auf eine ruhige Wasseroberfläche, die durch einen Steinwurf angeregt wird.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 1 Kommentar 3

Dabei entstehen Wellenpakete, die sich über die Wasseroberfläche ausbreiten.

Ähnlich verhält es sich bei den Elektronen, von denen sehr viele angeregt werden, und deren Bloch-Wellen sich zu Wellenpaketen überlagern.

Die Abbildung illustriert die Formation eines Wellenpakets.

Die Wellenpakete setzen sich aus Bloch-Wellen zusammen, deren Wellenzahlvektoren eine gewissen Verteilung um einen mittleren Wellenzahlvektor $\vec{k}_0$ haben.

Die Wellenpakete haben eine endlichen Ausdehnung, die in der eindimensionalen Darstellung der Abbildung mit Δx bezeichnet ist.

Die Wellenpakete haben auch eine endliche Lebensdauer, da die Elektronen durch Streuung in andere k -Zustände übergehen können.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 1 Kommentar 4

Wird als Beispiel Kupfer betrachtet, dann kann man aus dem Ohmschen Gesetz eine mittlere Stoßzeit bzw. eine mittlere Lebensdauer der Wellenpakete von $\approx 24 \cdot 10^{-15}$ s abschätzen.

Damit ergibt sich mit der Zeit-Energie Unschärferelation $\Delta t \Delta E \geq \hbar/2$ eine Energieunsicherheit von rund 0,01 eV, die im Vergleich zur Fermi-Energie klein ist.

Diese Wellenpakete werden oft schlicht (und irreführend) als Elektronen bezeichnet, obwohl es sich um Quasiteilchen handelt, die für den Transport der Ladung in Metallen und auch Halbleitern verantwortlich sind.

Während die zugrundeliegenden Blochwellen sich mit der Phasengeschwindigkeit ω/k ausbreiten, bewegen sich Wellenpakete mit der Gruppengeschwindigkeit, die durch den Gradienten der Kreisfrequenz ω gegeben ist.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 1 Kommentar 5

Wird die Formel mit $\hbar$ erweitert, dann ergibt sich der Zusammenhang der Geschwindigkeit mit der Bandstruktur $E(\vec{k})$.

Alle die Merkwürdigkeiten, die mit Leitungselektronen beobachtet werden können, sind darauf zurückzuführen, dass die Leitungselektronen nicht die Elementarteilchen der Teilchenphysik sind, sondern Wellenpakete bzw. Quasiteilchen.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 2

Die Kraft auf ein Wellenpaket in einem elektromagnetischen Feld ist

$$\hbar \dot{\vec{k}} = \vec{F} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B} \quad \text{mit} \quad q = -e$$

Für die räumliche Beschleunigung eines Wellenpakets gilt

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} \right) = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \right) \hbar k$$

Vergleich mit

$$a = m^{-1} F$$

ergibt die effektive Masse

$$m^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2}$$

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 2 Kommentar 1

Rudolf Peierls zeigte, dass ein elektrisches oder magnetisches Feld auf ein Wellenpaket genauso wirkt, als wäre es eine klassische elektrische Ladung.

Die rot umrandete Formel besagt, dass die Kraft, die auf ein Wellenpaket wirkt, durch die Summe von elektrischer Kraft und Lorentzkraft gegeben ist.

Dabei ist die Kraft wie in der Newtonschen Mechanik durch die zeitliche Ableitung von $\hbar \vec{k}$ gegeben. Dabei ist $\hbar \vec{k}$ nicht der Impuls der klassischen Mechanik, sondern der Quasi- bzw. Kristallimpuls der Bloch-Wellen.

Da die Bewegungsgleichung eines Wellenpakets formal der Newtonschen Bewegungsgleichung entspricht, wird die resultierende Dynamik der „Elektronen“ als semi-klassische Elektronendynamik bezeichnet.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektrenen 2 Kommentar 2

Der Einfachheit wegen, soll nun der Vektorcharakter der Bewegungsgleichungen vernachlässigt werden.

Aus der Gruppengeschwindigkeit der Wellenpakete kann durch die Ableitung nach der Zeit deren räumliche Beschleunigung berechnet werden.

Mit der Formel für die Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets ergibt sich die rot unterstrichene Formel, die durch Anwendung der Kettenregel weiter ausgewertet werden kann.

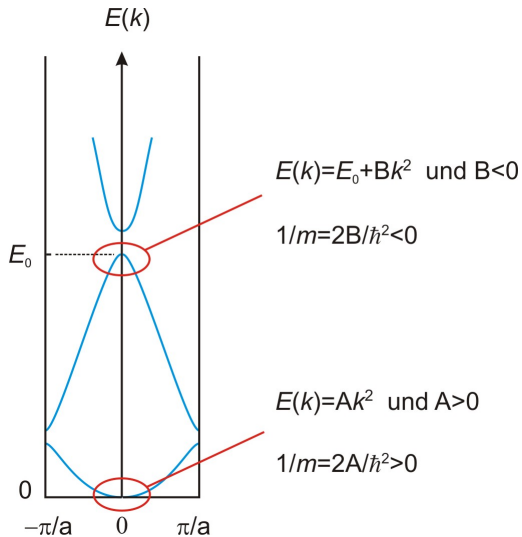
Der Vergleich mit der Newtonschen Bewegungsgleichung zeigt, dass der blau geschriebene Term vor $\hbar \dot{k}$ als eine inverse Masse interpretiert werden kann.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 2 Kommentar 3

Die rot umrandete Formel gibt die inverse Masse ohne Indizes, welche die Komponenten des Wellenzahlvektors, d.h. k_x , k_y und k_z spezifizieren.

Tatsächlich ist die inverse Masse jedoch ein Tensor, was im folgenden nicht berücksichtigt wird.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 3



Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 3 Kommentar 1

Die effektive Masse, mit der ein Wellenpaket, d.h. ein Leitungselektron auf ein angelegtes elektromagnetisches Feld reagiert, hängt davon ab, wo in der Nähe der Fermi-Fläche sich die k -Zustände befinden, die das Wellenpaket bilden.

Die Abbildung skizziert den Fall, dass sich die k -Zustände in der Nähe des Γ -Punktes befinden.

Liegt die Fermi-Energie in der Nähe einer Energiemulde, dann hat die zweite Ableitung der Bandenergie einen positiven Wert.

Die effektive Masse ist somit positiv.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelekttronen 3 Kommentar 2

Liegt die Fermi-Energie in der Nähe eines Maximums der Bandenergie, dann hat die zweite Ableitung einen negativen Wert.

Die effektive Masse hat somit einen negativen Wert.

Da eine negative Masse in einer Bewegungsgleichung ungewohnt ist, wird in der semiklassischen Bewegungsgleichung das Vorzeichen der Ladung q geändert.

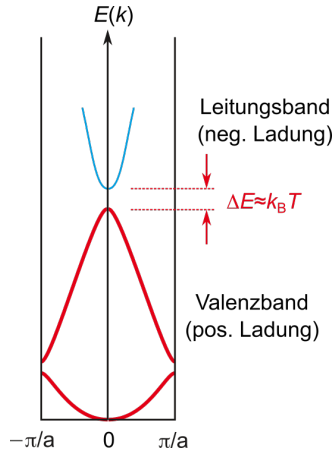
Befindet sich die Fermi-Energie in der Nähe eines Maximums der Bandenergie, dann reagieren die Wellenpakete, d.h. die Leitungselektronen auf ein angelegtes Feld so, als wären sie positiv geladen.

Die Peierls Theorie der semiklassischen Bewegungsgleichung der Bandelekttronen erklärt somit zwanglos, weshalb Leitungselektronen mit einer positiven Ladung auf ein externes elektrisches und magnetisches Feld reagieren können.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 4

Isolatoren: $k_B T \ll \Delta E$

Halbleiter: $k_B T \approx \Delta E$



Die Bewegungsgleichungen der Bandelekttronen 4 Kommentar 1

Sind alle k -Zustände in der 1. Brillouin-Zone für das Energieband mit der höchsten Energie besetzt, dann gibt es keine freien k -Zustände in die Elektronen gestreut werden können.

Die Elektronen sind in ihren k -Zuständen blockiert und der Kristall ist ein elektrischer Isolator.

Die Abbildung skizziert diese Situation für quasi freie Elektronen in einem einfach kubischen Kristallgitter. Der $\vec{k}$ -Vektor ist entlang einer Koordinatenachse orientiert.

Ähnliche Bilder ergeben sich für andere Ausbreitungsrichtungen.

Gibt es aber auch nur eine Ausbreitungsrichtung, für die ein Band nicht vollständig besetzt ist, dann ist der Kristall kein Isolator, sondern ein Metall.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 4 Kommentar 2

So kommt man zur Einsicht, dass ein Material ein Isolator sein kann, obwohl es Elektronenwellen gibt. Solche Isolatoren nennt man „Band-Isolatoren“ oder „Bloch-Wilson-Isolatoren“.

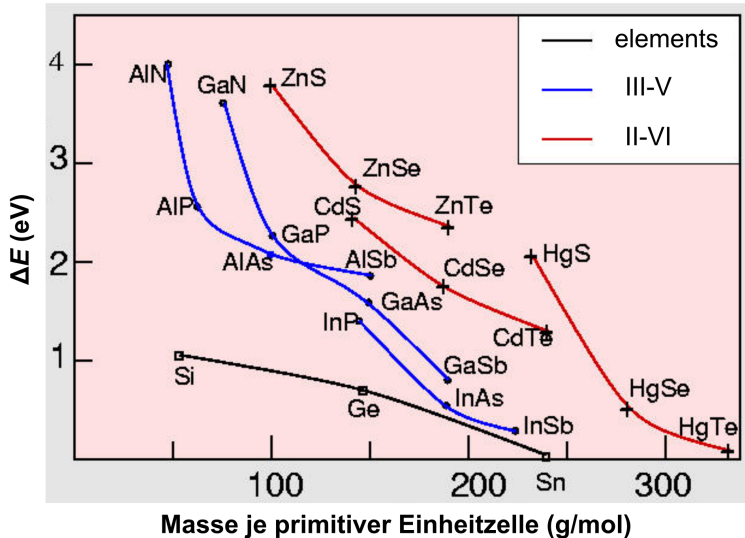
Nun soll der Fall betrachtet werden, dass die thermische Energie groß genug ist, um Elektronen in k -Zustände des nächsten unbesetzten Energiebands anzuregen.

Das zunächst vollständig besetzte Band wird dann als Valenzband bezeichnet.

Das zunächst unbesetzte angeregte Band wird als Leitungsband bezeichnet.

Für die in der Abbildung skizzierte Situation, verhalten sich die Elektronen im Valenzband wie positiv geladene Ladungsträger, während sich die Elektronen im Leitungsband „normal“ verhalten.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 5



Die Bewegungsgleichungen der Bandelektroden 5

Kommentar

Halbleiter ergeben sich, wenn die Energielücke zum nächsten angeregten Band so klein ist, dass eine thermische Anregung möglich wird.

Die Abbildung gibt einen Überblick über die Energielücken verschiedener Halbleiter (zum Vergleich: $k_B \cdot 300 \text{ K} = 26 \text{ meV}$).

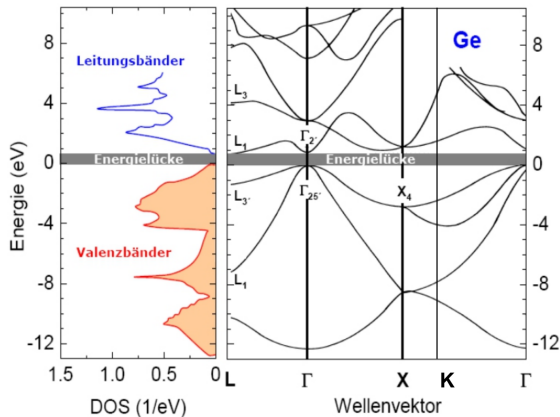
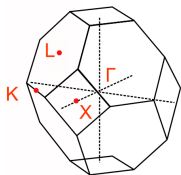
Die schwarze Linie verbindet die Elemente Silizium, Germanium und Zinn.

Die blaue Linie verbindet die III-V Halbleiter und die rote Linie die II-VI Halbleiter.

Werden Elemente aus verschiedenen Gruppen des Periodensystems kombiniert, dann kann dadurch die Energielücke beeinflusst werden.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 6

Bandstruktur von Germanium: Elektronenkonfiguration $[\text{Ar}] 3d^{10} 4sp^3$



Die Bewegungsgleichungen der Bandelektrenen 6 Kommentar 1

Die Abbildung zeigt links die 1. Brillouin-Zone, dann die Zustandsdichte und rechts die Bandstruktur von Germanium.

Wie beim Kupfer geht es vom Γ -Punkt nach links zum L-Punkt und rechts über X und K zurück zum Γ -Punkt.

Alle Orbitale von Germanium sind vollständig mit Elektronen besetzt, so dass auch alle k -Zustände in der 1. Brillouin-Zone für die besetzten Bänder vollständig mit Elektronen belegt sind.

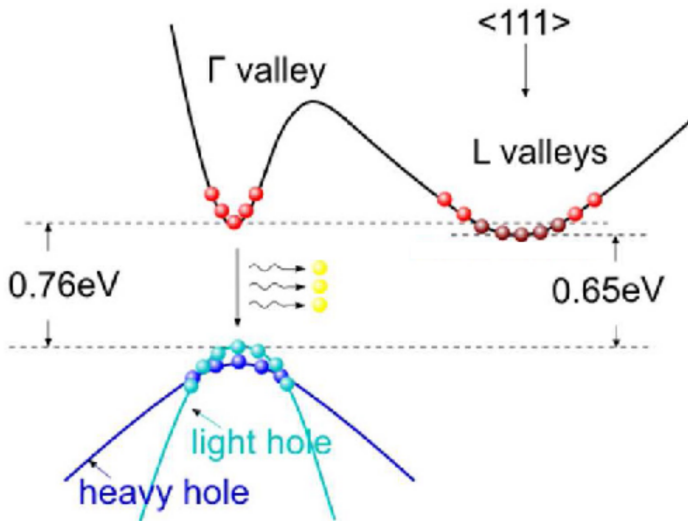
Die Bewegungsgleichungen der Bandelektrenen 6 Kommentar 2

Die Energielücke zum nächsten angeregten Band beträgt rund 1 eV was einer Anregungsenergie von $\text{eV}/k_B \approx 11600 \text{ K}$ entspricht.

Die höchste Energie des Valenzbands liegt beim Γ -Punkt, so dass sich dort bei thermischer Anregung positive Ladungsträger ergeben.

Die kleinste Energie des Leitungsbands liegt nicht am Γ -Punkt, sondern am L-Punkt der 1. Brillouin-Zone, so dass Elektronen bei der Anregung nicht nur die Energie, sondern auch den Impuls ändern müssen.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 7



Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 7 Kommentar 1

Diese Abbildung zeigt die entscheidenden Bänder etwas genauer.

Im Gegensatz zur vorigen Abbildung ist der L-Punkt nun rechts vom Γ -Punkt gezeichnet.

Man erkennt, dass es am Γ -Punkt zwei Valenzbänder gibt, die eine verschiedene Krümmung haben.

Bei Halbleitern ist es üblich die positiven Ladungsträger als Elektronen-Löcher zu bezeichnen.

Gemäß der Abbildung gibt es also zwei effektiven Massen und man spricht von einem leichten und einem schweren Elektronen-Loch.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektrenen 7 Kommentar 2

Die Bezeichnung Elektronen-Loch deutet darauf hin, dass die elektrische Leitfähigkeit den unbesetzten k -Zuständen zugeordnet werden kann.

Tatsächlich kann der elektrische Strom immer berechnet werden, indem über die besetzten k -Zustände oder alternativ über die unbesetzten k -Zustände summiert wird.

Der Grund dafür ist, dass es zu jeder Welle, die mit Elektronen besetzt ist, eine gegenläufige Welle gibt, wenn alle k -Zustände der 1. Brillouin-Zone mit Elektronen besetzt sind.

Deshalb kann kein elektrischer Strom fließen, wenn alle k -Zustände der 1. Brillouin-Zone mit Elektronen besetzt sind.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 7 Kommentar 3

$$0 = \sum_{\text{alle } \vec{k}} \vec{j} \propto \sum_{\vec{k}, \text{ besetzt}}$$

und damit

$$0 = \sum_{\text{alle } \vec{k}} = \sum_{\vec{k}, \text{ besetzt}} + \sum_{\vec{k}, \text{ unbesetzt}}$$

und somit

$$\vec{j} \propto \sum_{\vec{k}, \text{ besetzt}} = - \sum_{\vec{k}, \text{ unbesetzt}}$$

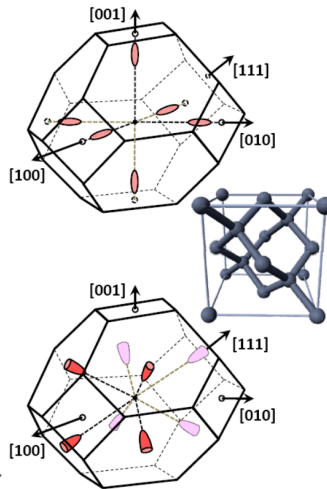
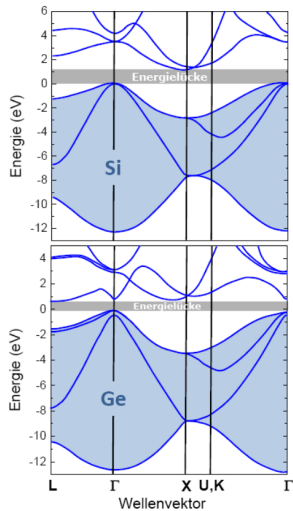
Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 7 Kommentar 3

Bei der Berechnung des elektrischen Stroms kann über alle besetzten k -Zustände summiert werden, oder alternativ über all k -Zustände, die unbesetzt sind.

Die beiden Summen unterscheiden sich nur im Vorzeichen.

Da an der Bandspitze positive Ladungsträger aufgrund der Bandkrümmung auftreten, liegt es nahe diese mit den unbesetzten k -Zuständen zu identifizieren.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 8



Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 8 Kommentar 1

In dieser Abbildung werden auf der linken Seite die Bandstrukturen von Silizium und Germanium verglichen.

Während beim Germaniumatom das 4s und 4p-Orbital besetzt ist, sind es beim Silizium das 3s und 3p-Orbital.

Beide Elemente kristallisieren aufgrund der sp^3 Hybridorbitale in der Diamantstruktur und die Bandstrukturen ähneln sich sehr¹.

Die höchste Energie des Valenzbands liegt bei beiden Substanzen beim Γ -Punkt.

¹Die Bandlücke bei Diamant selbst ist groß und beträgt $\approx 5,6$ eV, so dass Diamant ein Isolator ist.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelekttronen 8 Kommentar 2

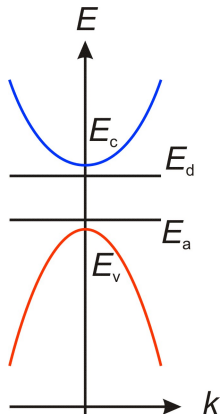
Im Gegensatz zum Germanium liegt beim Silizium die kleinste Energie des Leitungsbands nicht beim L-Punkt, sondern irgendwo auf dem Weg vom Γ -Punkt zum X-Punkt.

Auf der rechten Seite der Abbildung geben die rot gezeichneten Flächen in der 1. Brillouinzone die Lage der k -Zustände mit der kleinsten Energie des Leitungsbandes an.

Beim Silizium liegen diese zigarrenförmigen Gebilde auf dem Weg zwischen dem Γ und dem X-Punkt, während sie beim Germanium auf der sechseckigen Begrenzungsfläche der 1. Brillouin-Zone enden.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 9

Schematische Bandstruktur mit den Energieniveaus eines Donator und eines Akzeptor-Atoms



Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 9 Kommentar 1

Die Abbildung zeigt eine schematische Bandstruktur.

Die horizontalen Linien deuten die Energieniveaus eines Donator-Atoms E_d und eines Akzeptor-Atoms E_a an.

Die Elektronen der Donator/Akzeptor-Atome sind lokalisiert, so dass das entsprechende Energieband schlicht eine horizontale Linie ergibt.

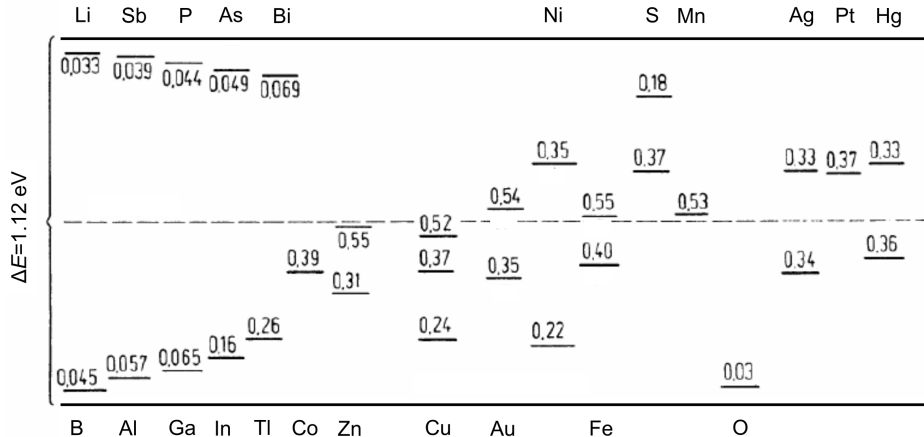
Die Energielücke zwischen der kleinsten Energie im Leitungsband und der relevanten Energie des Donator-Atoms ist klein, so dass ein Elektron mit einer großen Wahrscheinlichkeit thermisch vom Donator-Atom in das Leitungsband angeregt werden kann.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektrenen 9 Kommentar 2

Entsprechend ist die Energielücke zwischen dem relevanten Energieniveau des Akzeptor-Atoms und der höchsten Energie im Valenzband so klein, dass ein Elektron mit großer Wahrscheinlichkeit aus dem Valenzband in ein Energieniveau eines Akzeptor-Atoms angeregt werden kann.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 10

Energieniveaus von Donator und Akzeptor-Atomen in der Energielücke von Silizium

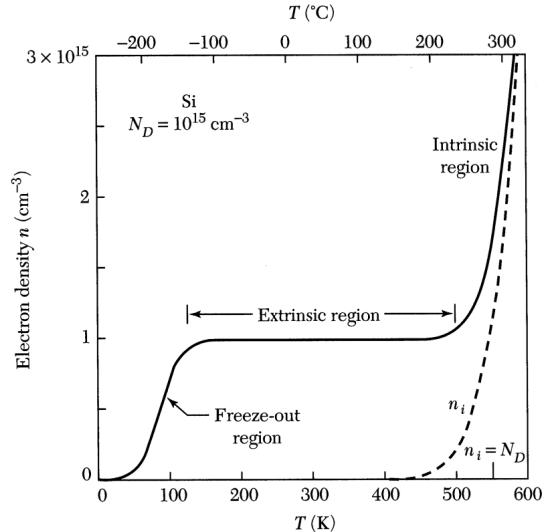


Die Bewegungsgleichungen der Bandelektrenen 10 Kommentar

Die Abbildung gibt einen Überblick über die Energie der Donator- bzw. Akzeptor-Niveaus verschiedener Elemente, wenn sie als Fremdatome in das Kristallgitter von Silizium eingebaut werden.

Beim Lithium (Li), Antimon (Sb), Phosphor (P) und Arsen (As), sowie beim Bor (B), Aluminium (Al), Gallium (Ga) und Sauerstoff (O) sind die Energielücken so klein, dass sie thermisch gut bei Raumtemperatur (thermische Energie $\approx 0,026$ eV) angeregt werden können.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 11



Die Bewegungsgleichungen der Bandelektrenen 11 Kommentar 1

Die Abbildung zeigt die Elektronendichte im Leitungsband von Silizium (S.M. Sze Semiconductor Devices Physics and Technology 2ndEd. Wiley 2002).

Die gestrichelte Linie gibt die intrinsische Elektronendicht von reinem Silizium.

Für Temperaturen unterhalb von 400 K ist die Elektronendichte vernachlässigbar klein, da die Energielücke zwischen dem Valenz- und Leitungsband mit 1,12 eV recht groß ist, so dass große Temperaturen nötig sind, um Elektronen aus dem Valenzband in das Leitungsband anzuregen.

Wird Silizium mit einem Donator-Atom dotiert, dann ist die Energielücke für die Anregung von Elektronen in das Leitungsband sehr viel kleiner und beginnt in der Abbildung schon im Bereich von 100 K.

Die Bewegungsgleichungen der Bandelektronen 11 Kommentar 2

In einem großen Temperaturbereich entspricht die Elektronendichte im Leitungsband dann der Dichte der Donator-Atome.

Erst wenn die Temperatur deutlich über 400 K anwächst, steigt aufgrund der intrinsischen Anregung die Elektronendichte im Leitungsband wieder an.

Ferromagnetismus

Elektronische Eigenschaften von Festkörpern

- Das Drude-Modell
- Das Sommerfeld-Modell
- Das semiklassische Modell der Elektronendynamik
- Ferromagnetismus
- Supraleitung

Ferromagnetismus 1

[illegible]

Ferromagnetismus 1

Kommentar 1

Dieses Periodensystem zeigt an, dass die meisten Elemente bei tiefen Temperaturen supraleitend werden.

Viele werden spontan supraleitend und bei anderen muss mit einem hydrostatischen Druck nachgeholfen werden.

Einige wenige Elemente zeigen Magnetismus.

Das 3d-Element Chrom ist antiferromagnetisch und ordnet bei einer Néel-Temperatur von 311 K.

Beim Mangan gibt es vier verschiedene Kristallgitter, wobei nur α -Mangan unterhalb einer Néel-Temperatur von 100 K antiferromagnetisch ordnet.

Eisen, Cobalt und Nickel ordnen ferromagnetisch.

Ferromagnetismus 1

Kommentar 2

Der Ferromagnetismus verschwindet bei Temperaturen oberhalb der Curie-Temperatur.

Die Curie-Temperatur beträgt bei Eisen rund 1000 K, bei Cobalt 1400 K und bei Nickel 630 K.

Neben den Übergangsmetallen der 3d-Elemente bilden die 4f-Elemente der Seltenen-Erden magnetische Strukturen.

Es ergeben sich komplizierte magnetische Spiralstrukturen, die auf die Wechselwirkung der lokalisierten magnetischen Momente der 4f-Orbitale mit den Leitungselektronen der 5d und 6s-Orbitale zurückgeführt werden können.

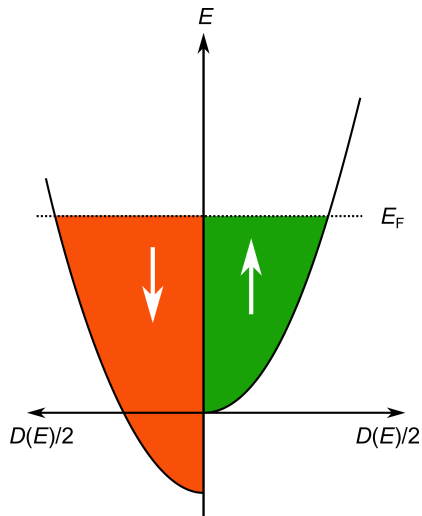
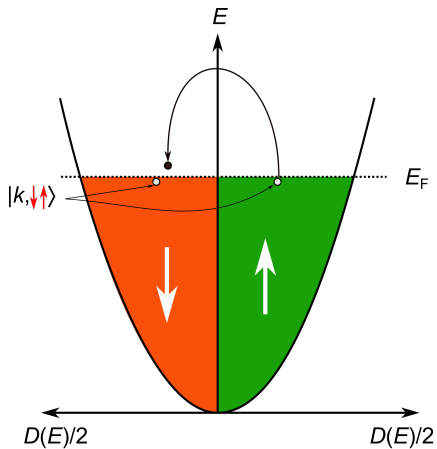
Ferromagnetismus 1

Kommentar 3

Obwohl magnetische Ordnung nur bei wenigen Elementen beobachtet wird, sind die magnetischen Phasen relativ robust gegen thermische Anregungen.

Das steht im Kontrast zur Supraleitung, bei der die Übergangstemperatur meist weit unterhalb von 10 K liegt.

Ferromagnetismus 2



Ferromagnetismus 2

Kommentar 1

Im Folgenden soll nur der einfachste Fall: der Ferromagnetismus von Eisen, Cobalt und Nickel besprochen werden.

Im Sommerfeldmodell ist die Zustandsdichte proportional zur Wurzel aus der Energie und die k -Zustände sind bis zur Fermi-Energie mit Elektronen besetzt.

Die linke Abbildung zeigt die Zustandsdichte getrennt nach der Spinquantenzahl $m_s = \pm 1/2$.

Die besetzten k -Zustände mit der Spinquantenzahl $m_s = -1/2$ sind rot markiert, während die k -Zustände mit der Spinquantenzahl $+1/2$ grün markiert sind.

Die kleinen Kreise deuten zwei Elektronen an, die einen gemeinsamen k -Zustand nahe bei der Fermi-Energie besetzen sollen.

Ferromagnetismus 2

Kommentar 2

Bei der Diskussion der Austauschwechselwirkung wurde bemerkt, dass Elektronen im Rahmen der Energieunschärferelation, ihre Quantenzustände verlassen und sozusagen etwas Neues ausprobieren können.

Der Pfeil in der linken Abbildung deutet an, dass ein Elektron nahe der Fermi-Energie aus dem grünen Feld in einen freien k -Zustand auf der anderen Seite wechselt und dazu seine Spinquantenzahl ändert.

Wird die Temperatur $T = 0$ betrachtet, dann muss das Elektron seine kinetische Energie etwas erhöhen, da alle k -Zustände bis zur Fermi-Energie mit Elektronen besetzt sind.

Gleichzeitig reduziert es aber die elektrische Abstoßungskraft aufgrund der Austauschwechselwirkung.

Ferromagnetismus 2

Kommentar 3

Bei den meisten Elementen überwiegt die zusätzliche Energie den Energiegewinn aufgrund der reduzierten elektrischen Abstoßungskraft.

Im Fall von Eisen, Cobalt und Nickel ist der Energiegewinn aufgrund der reduzierten Abstoßungskraft jedoch größer als die zusätzliche kinetische Energie, so dass viele Elektronen permanent die Seite wechseln können.

Es ergibt sich dadurch die rechte Abbildung.

Die Zustandsdichten für die beiden Spinquantenzahlen verschieben sich gegeneinander, bis sich die zusätzliche Energie und die reduzierte potentielle Energie aufgrund der elektrischen Abstoßungskraft die Waage halten.

Ferromagnetismus 2: Stoner-Kriterium

Kommentar 4

Edmund Clifton Stoner veröffentlichte 1939 einen Ansatz, in dem diese Idee quantitativ formuliert wird.

Stoner betrachtet $2n$ Elektronen die paarweise Bloch-Wellen bei der Fermi-Energie besetzen: $n = n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$.

Die zusätzliche Energie der Coulomb-Abstoßung aufgrund der antiparallelen Orientierung der Elektronenspins sei U , so dass die Austauschwechselwirkung zu einer zusätzlichen potentiellen Energie der antiparallelen Spins führt

$$U_{\text{Austausch}} = U n_{\uparrow} n_{\downarrow}.$$

Werden Δn Elektronen angeregt und deren Spin gedreht, dann reduziert sich die potentielle Energie

$$\Delta U_{\text{Austausch}} = U(n_{\uparrow} - \Delta n)(n_{\downarrow} + \Delta n) - U n_{\uparrow} n_{\downarrow} = -U(\Delta n)^2.$$

Ferromagnetismus 2: Stoner-Kriterium

Kommentar 5

Die zusätzliche kinetische Energie $\Delta E_{\text{kin}} = \Delta n \Delta E$ kann mit der Zustandsdichte bei der Fermi-Energie berechnet werden

$$D(E_F) = \frac{1}{V} \frac{\Delta n}{\Delta E} \Big|_{E=E_F} \quad \text{d.h.} \quad \Delta E = \frac{\Delta n}{VD(E_F)}$$

Die gesamte Energieänderung ist damit

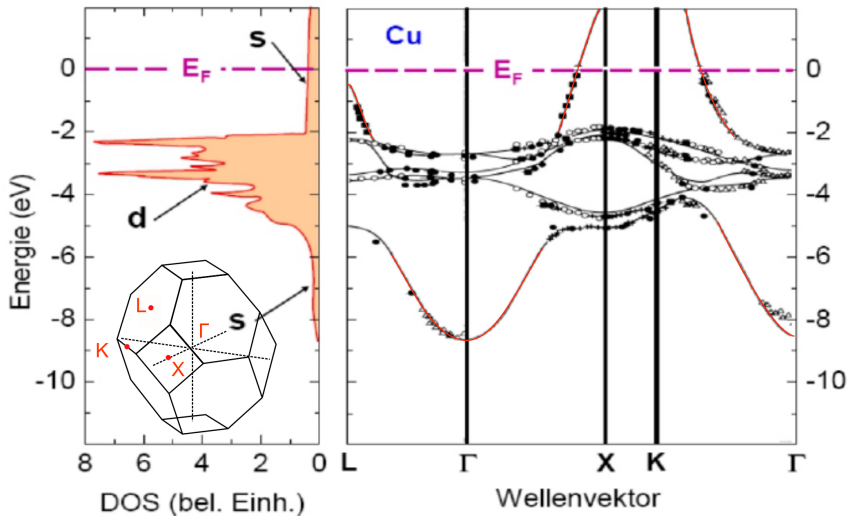
$$\Delta E = \Delta U_{\text{Austausch}} + \Delta E_{\text{kin}} = (\Delta n)^2 \left(-U + \frac{1}{VD(E_F)} \right) = \frac{(\Delta n)^2}{VD(E_F)} (-UVD(E_F) + 1)$$

Die Energie erniedrigt sich, wenn das Stoner-Kriterium erfüllt ist

$$UVD(E_F) \geq 1,$$

d.h. es werden für den Ferromagnetismus der Bandelektrenen große Zustandsdichten bei der Fermi-Energie benötigt.

Ferromagnetismus 3



Ferromagnetismus 3

Kommentar 1

Die Abbildung zeigt nochmal die Zustandsdichte und Bandstruktur von Kupfer, die in der letzten Vorlesung diskutiert worden ist.

Die Leitungselektronen bei Kupfer stammen aus dem 4s-Orbital.

Die Abschnitte der Bandstruktur, die eindeutig dem 4s-Orbital zugeordnet werden können, sind rot markiert.

Kupfer ist unmagnetisch.

Ändert ein 4s-Elektron seine Spinrichtung, dann ist die zusätzliche Energie größer als der Energiegewinn aufgrund der reduzierten elektrischen Abstoßungskraft.

Im Gegensatz zu den 4s-Elektronen sind die Energiebänder der 3d-Elektronen auf einen sehr viel kleineren Energiebereich beschränkt und die Zustandsdichte kann sehr große Werte erreichen.

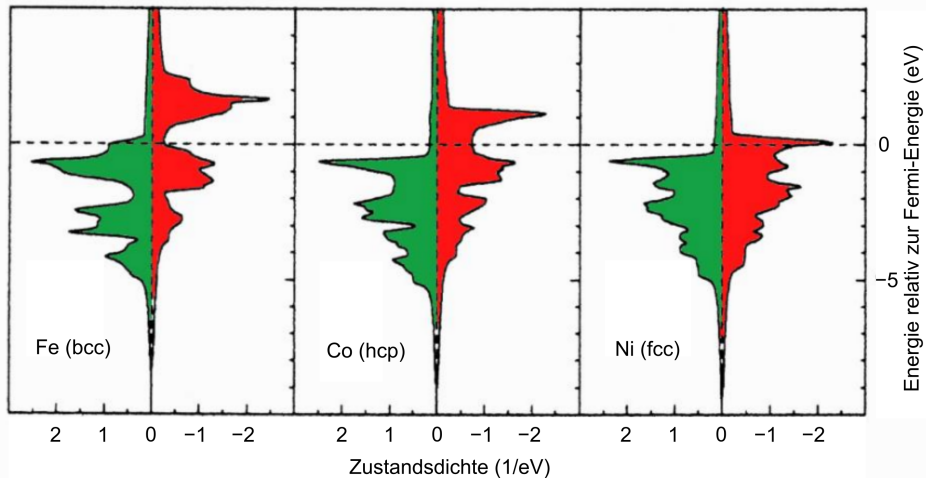
Ferromagnetismus 3

Kommentar 2

Ich zeige an dieser Stelle nochmal die Bandstruktur von Kupfer, da die Abbildung das Zustandekommen der Zustandsdichte veranschaulicht.

Ähnliche Zustandsdichten ergeben sich für Eisen, Nickel und Cobalt, die spinpolarisiert im folgenden gezeigt werden.

Ferromagnetismus 4



Ferromagnetismus 4

Kommentar 1

Eisen, Kobalt und Nickel sind ferromagnetisch.

Die Abbildung zeigt für die drei Metalle die Zustandsdichten.

Die Zustandsdichten der Übergangsmetalle sind sehr ähnlich, wie der Vergleich mit Kupfer zeigt.

Im Bereich der Fermi-Energie sind die Zustandsdichte der 4s und 3d-Bänder wichtig.

Die Abbildungen zeigen, dass die Zustandsdichten für die up- und down-Spins sich gegeneinander verschieben und eine Spinrichtung bevorzugt wird.

Die rot markierte Spinrichtung wird entvölkert und die grün markierte Spinrichtung stärker besetzt.

Offensichtlich ist es die hohe Zustandsdichte der 3d-Bänder, die zum Ferromagnetismus der Bandelektronen führt.

Ferromagnetismus 4

Kommentar 2

Beim Cobalt und Nickel werden die 3d-Bänder für die grün markierte Spinrichtung vollständig besetzt und tauchen unter die Fermi-Energie ab.

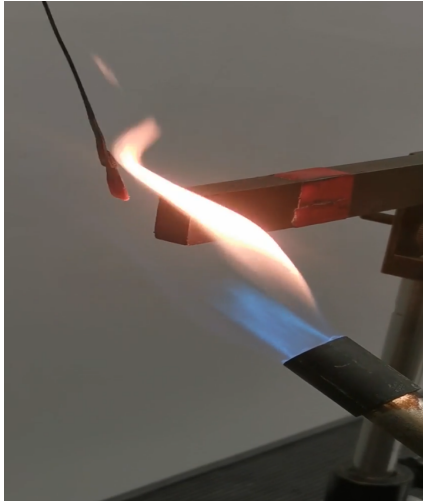
Für die grün markierte Spinrichtung sind es die 4s-Elektronen, die zur Leitfähigkeit beitragen.

Für die rot markierte Spinrichtung tragen sowohl 4s als auch 3d-Elektronen bei.

Beim Eisen werden die 3d-Bänder der grün markierten Spinrichtung stärker besetzt.

Sie tauchen dabei aber im Gegensatz zu Cobalt und Nickel nicht unter die Fermi-Energie ab und tragen für beide Spinpolarisationen weiterhin zur Leitfähigkeit bei.

Ferromagnetismus 5



(CurieEisen3.mp4)

Ferromagnetismus 5

Kommentar 1

Mit wachsender Temperatur werden immer mehr Elektronen thermisch angeregt, so dass das Wechselspiel der zusätzlichen Energie und der potentieller Energie gegenüber der thermischen Anregungsenergie seine Bedeutung verliert.

Die Referenztemperatur ist die Fermi-Temperatur.

Deshalb sind relativ hohe Temperaturen notwendig, wenn die thermische Anregung über die Austauscheffekte dominieren soll.

Für Temperaturen oberhalb der Curie-Temperatur, werden die angeregten k -Zustände wieder gleichmäßig mit Elektronen der beiden Spinquantenzahlen $\pm 1/2$ besetzt und der Ferromagnetismus verschwindet.

Das Video zeigt ein Stückchen Eisen, das am Ende eines Pendels angebracht ist.

Ferromagnetismus 5

Kommentar 2

Das Stückchen Eisen wird von einem Magneten angezogen, so dass das Pendel aus seiner Ruhelage ausgelenkt wird.

Die Curie-Temperatur von Eisen beträgt 758°C und das Eisenstückchen wird durch einen Bunsenbrenner erwärmt.

Übersteigt die Temperatur des Eisenstückchens die Curie-Temperatur, dann verschwindet das magnetische Moment von Eisen und das Pendel kann frei schwingen.

Die Temperatur des Eisenstückchens kann anhand seiner Farbe abgeschätzt werden. Glüht es dunkelrot, dann liegt die Temperatur im Bereich von 740°C . Glüht das Eisen hellrot, dann liegt die Temperatur im Bereich von 850°C . Die gelbe Zusatzflamme ist ein lästiger Defekt des im Experiment verwendeten Bunsenbrenners.

Ferromagnetismus 5

Kommentar 3

Für die Leitungselektronen der 4d- und 5d-Orbitale wird kein Magnetismus beobachtet.

Aufgrund der größeren radialen Ausdehnung dieser Orbitale sind diese Elektronen beweglicher als die 3d-Elektronen.

Die Energiebänder der 4d- und 5d-Elektronen erstrecken sich über einen größeren Energiebereich, so dass der Gewinn an potentieller Energie geringer ist als die erforderliche Zusatzenergie, wenn die Spinquantenzahl verändert wird.

Folglich bildet sich keine spontane Magnetisierung für diese Elemente aus.

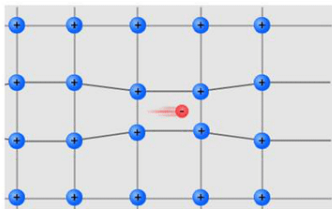
Supraleitung

Elektronische Eigenschaften von Festkörpern

- Das Drude-Modell
- Das Sommerfeld-Modell
- Das semiklassische Modell der Elektronendynamik
- Ferromagnetismus
- **Supraleitung**

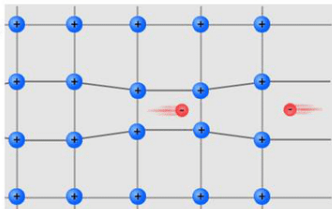
Supraleitung 1

BCS-Theorie der Supraleitung (John Bardeen, Leon Cooper, Robert Schrieffer 1957): Cooper-Paare $\{+\vec{k} \uparrow, -\vec{k} \downarrow\}$



räumliche Ausdehnung der Wellenfunktion

$$\xi_0 \approx 2-1000 \text{ nm}$$



Makroskopische Wellenfunktion

$$\psi = \psi_0 e^{-iEt/\hbar}$$

Supraleitung 1

Kommentar 1

Nach der Entdeckung der Supraleitung im Jahr 1911 dauerte es bis 1957, ehe die erste mikroskopische Theorie der Supraleitung von Bardeen, Cooper und Schrieffer veröffentlicht wurde.

Die Grundidee der BSC-Theorie ist, dass sich zwei gegenläufige Elektronen mit der gleichen Wellenzahl in einem neuen Quantenzustand binden.

Die Abbildung illustriert, wie man sich den Kopplungsmechanismus im Rahmen der BCS-Theorie vorstellt.

Da die Atome nicht starr auf ihren Gitterplätzen verharren, sondern um ihre Gleichgewichtslagen schwingen, können sie darauf reagieren, wenn ein Elektron vorbei fliegt.

Die obere Abbildung zeigt, wie sich die Atome in Richtung des Elektrons bewegen.

Supraleitung 1

Kommentar 2

Da die Elektronen mit sehr großen Geschwindigkeiten unterwegs sind und die Atome im Vergleich dazu sich nur sehr langsam bewegen, entsteht ein Kanal, den das gegenläufige Elektron nutzen kann, um mit einer verkleinerten potentiellen Energie durch das Kristallgitter zu fliegen.

Die positiv geladenen Atome rücken näher an die Elektronen und erhöhen dadurch ihre Bindungsenergie.

Durch diesen Energiegewinn bilden die beiden gegenläufigen Elektronen einen neuen Quantenzustand.

Supraleitung 1

Kommentar 3

Wegen dem Pauli-Prinzip kann dieser Quantenzustand nur von zwei Elektronen gebildet werden, die sich in ihrer Spinquantenzahl unterscheiden.

Dieser gebundene Zustand von zwei Leitungselektronen wurde von Leon Cooper 1956 entdeckt.

Seither nennt man diese gebundenen Elektronenzustände Cooper-Paare.

Mit den Elektronen sind Wellenpakete gemeint, in denen sich die angeregten Elektronen befinden.

Supraleitung 1

Kommentar 4

Die Wellenpaketen haben eine gewisse räumliche Ausdehnung.

Aus diesem Grund haben auch die Cooper-Paar eine räumliche Ausdehnung, die der der Wellenpakete entspricht und Korrelationslänge ξ_0 genannt wird.

Sie liegt je nach Substanz im Bereich von 2 bis 1000 nm.

Die Korrelationslänge ξ_0 der Cooper-Paare ist groß, so dass es in diesem Bereich sehr viele Elektronen gibt.

Deshalb ist es nicht möglich, einem Cooper-Paar zwei bestimmte Elektronen zuzuordnen.

Supraleitung 1

Kommentar 5

Ständig kommen und gehen Elektronen, so dass die Bezeichnung „Paar“ nicht zwei bestimmte Elektronen meint.

Cooper-Paare sind stabil, obwohl die zugrundeliegenden Elektronen ständig ausgetauscht werden.

Da sich die Spins der Elektronen in den Cooper-Paaren zum Gesamtspin Null addieren, verhalten sich die Cooper-Paare anders als einzelne Elektronen.

Während Elektronen aufgrund des Pauli-Prinzips jeden Quantenzustand nur einfach besetzen können und sich aus dem Weg gehen müssen, können Cooper-Paare einen Quantenzustand in einer beliebigen Anzahl besetzen.

Supraleitung 1

Kommentar 6

Darin ähneln Cooper-Paare den Photonen, die bei einem Laser einen Quantenzustand in großer Zahl besetzen, der dann die kohärente Lichtwelle bzw. den Laserstrahl ergibt.

Wie die Photon beim Laser besetzen die Cooper-Paare einen gemeinsamen Quantenzustand und formen eine makroskopische Wellenfunktion, die sich über den gesamten Festkörper erstreckt.

Ähnlich wie mit den Laserstrahlen können auch mit den supraleitenden Wellenfunktionen Interferenzexperimente durchgeführt werden.

Elektrische Schaltkreise, die diese Interferenzen ausnutzen, nennt man Squids.

Die Abkürzung Squid steht für „Superconducting Quantum Interference Device“.

Supraleitung 2: Meißner-Effekt



(Moebiusband.mp4)

Supraleitung 2

Kommentar

Das Video zeigt einen Supraleiter, der sich in einem bestimmten Abstand über einer Bahn befindet, die mit Permanentmagneten belegt ist.

Das Magnetfeld induziert im Supraleiter Abschirmströme, die instantan reagieren, wenn sich der Abstand zwischen dem Supraleiter und der Bahn ändert.

Das magnetische Moment des Supraleiters aufgrund der Abschirmströme stellt sich stets so ein, dass sich der Abstand zur Bahn nicht verändert.

Der Supraleiter befindet sich zur thermischen Isolation in einem Styroporbehälter.

Bei dem Supraleiter handelt es sich um einen sogenannten Hochtemperatursupraleiter, der bereits mit flüssigem Stickstoff unter seine Übergangstemperatur abgekühlt werden kann.

Supraleitung 3: London-Gleichungen

Fritz und Heinz London (1935): Bewegungsgleichung für supraleitende Ladungsträger

$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = q \vec{E}$$

mit der supraleitenden Stromdichte

$$\vec{j}_s = q n_s \vec{v}$$

folgt

$$\frac{m}{q^2 n_s} \frac{\partial \vec{j}_s}{\partial t} = \vec{E}$$

und es wird die Londonsche Eindringtiefe definiert.

$$\lambda_L^2 = \frac{m}{\mu_0 q^2 n_s}$$

Supraleitung 3

Kommentar 1

Eine erste phänomenologische Theorie zur Supraleitung wurde bereits 1935 von Fritz und Heinz London formuliert.

Die London-Theorie nimmt an, dass es supraleitende Ladungsträger gibt, welche wie üblich auf ein angelegtes elektrisches Feld reagieren.

Die erste Gleichung formuliert diese Annahme.

Die supraleitenden Ladungsträger wurden später als die Cooper-Paare identifiziert und tragen die Ladung $q = -2e$.

Der größte Unterschied zwischen der Dynamik der Cooper-Paare und normalen Ladungsträgern besteht darin, dass Cooper-Paare keinen Streuprozessen unterliegen.

Supraleitung 3

Kommentar 2

Die zweite Gleichung gibt die supraleitende Stromdichte j_s , welche sich aus mit der Dichte n_s der supraleitenden Ladungsträgern, deren Ladung $q = -2e$ und deren Driftgeschwindigkeit ergibt.

Die rot unterstrichene Gleichung ergibt sich, wenn die Stromdichte in die Bewegungsgleichung der ersten Zeile eingesetzt wird.

Wird der Vorfaktor durch die magnetische Feldkonstante $\mu_0 \approx 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Vs/Am}$ ergibt sich eine Größe die in Quadratmetern gemessen wird.

Es zeigt sich, dass diese Größe die London-Eindringtiefe zum Quadrat ist.

Diese Eindringtiefe charakterisiert den Bereich, in den ein Magnetfeld in einen Supraleiter eindringen kann.

Supraleitung 4

1. London-Gleichung

$$\vec{E} = \mu_0 \lambda_L^2 \frac{\partial \vec{j}_s}{\partial t}$$

Wird die 1. London-Gleichung in die 3. Maxwell-Gleichung (Induktionsgesetz) eingesetzt

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \underbrace{\mu_0 \lambda_L^2 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \vec{j}_s}_{\text{2. London-Gleichung}}$$

dann ergibt sich die 2. London-Gleichung

2nd London equation

$$\vec{B} = -\mu_0 \lambda_L^2 \nabla \times \vec{j}_s$$

Supraleitung 4

Kommentar

Die rot umrandete Gleichung gibt die 1. London-Gleichung mit der Londonschen Eindringtiefe.

Wir die 1. London-Gleichung in das Induktionsgesetz eingesetzt, dann ergibt sich die 2. London-Gleichung (rot umrandet).

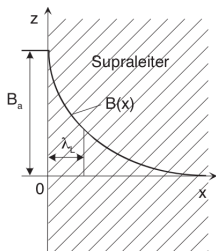
Supraleitung 5

Mit den 2. Londonsche Gesetz und dem Ampereschen Gesetz $\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j}_s$ ergibt sich

$$\vec{B} = \lambda_L^2 \nabla^2 \vec{B}$$

mit $\nabla \vec{B} = 0$ (2. Maxwell-Gleichung) und $\nabla \times (\nabla \times \vec{B}) = \nabla(\nabla \vec{B}) - \nabla^2 \vec{B}$

in einer Dimension gilt $B(x) = \lambda_L^2 \frac{\partial^2 B(x)}{\partial x^2} \rightarrow B(x) = B_a e^{-x/\lambda_L}$



ein magnetisches Feld kann nur in einer dünnen Oberflächenschicht in einen Supraleiter eindringen → Meißner-Effekt

Supraleitung 5

Kommentar 1

Die rot unterstrichene Gleichung ergibt sich, wenn die 2. London-Gleichung in das Amperesche Gesetz eingesetzt wird.

Die Abbildung illustriert die Bedeutung dieser Gleichung.

Ein magnetisches Feld B_a wird parallel zur Oberfläche eines Supraleiters entlang der z-Achse angelegt.

Der Abfall des magnetischen Felds im Supraleiter senkrecht zur Oberfläche kann mit der Differentialgleichung berechnet werden.

Die Lösung ist ein exponentieller Abfall, wobei die charakteristische Länge durch die Londonsche Eindringtiefe gegeben ist.

Supraleitung 5

Kommentar 2

Das Magnetfeld kann nur in eine dünne Oberflächenschicht eindringen.

Innerhalb des Supraleiters ist das Magnetfeld immer Null.

Das ist der Meißner-Effekt.

Abschirmströme fließen, sobald der Supraleiter unter seine kritische Temperatur abgekühlt wird.

Wir ein Magnetfeld oberhalb der Übergangstemperatur angelegt, so werden ebenfalls Abschirmströme induziert, die aber aufgrund des elektrischen Widerstand schnell abklingen, so dass das Magnetfeld den Supraleiter durchdringen kann.

Supraleitung 5

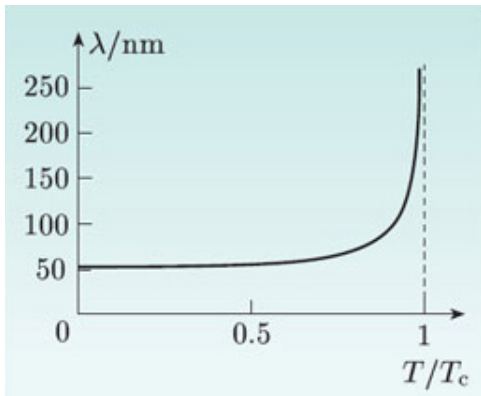
Kommentar 3

Wird der Supraleiter unter seinen Übergangstemperatur abgekühlt, entstehen die Abschirmströme auch ohne die Wirkung des Induktionsgesetzes.

Die Abschirmströme bewirken ein starkes magnetische Moment des Supraleiters, das sehr schnell auf eine Änderung des äußeren Magnetfelds reagieren kann.

Supraleitung 6

Londonsche Eindringtiefe für verschiedene Elemente



Element	T_c [K]	$\lambda_L(T \rightarrow 0)$ [nm]
Cd	0.56	110
Al	1.196	16
Sn	3.72	34
Pb	7.19	37
Nb	9.26	39

Supraleitung 6

Kommentar

Die Londonsche Eindringtiefe ist temperaturabhängig.

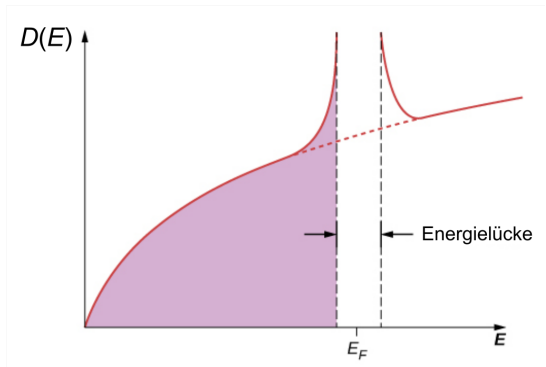
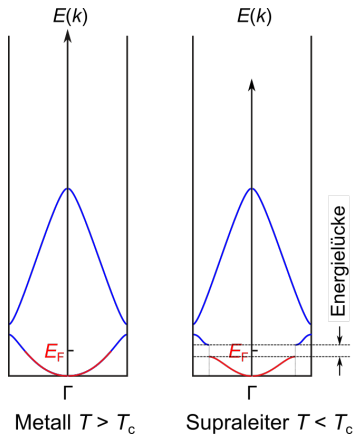
Der kleinste Wert ergibt sich für $T \rightarrow 0$. Die Eindringtiefe divergiert für $T \rightarrow T_c$ gemäß der Formel

$$\lambda_L(T) = \lambda_L(0) / \sqrt{1 - (T/T_c)^4}$$

Die Tabelle gibt die Übergangstemperaturen und die Londonsche Eindringtiefe für verschiedene Elemente.

Supraleitung 7

Energielücke bei der Fermi-Energie



Supraleitung 7

Kommentar

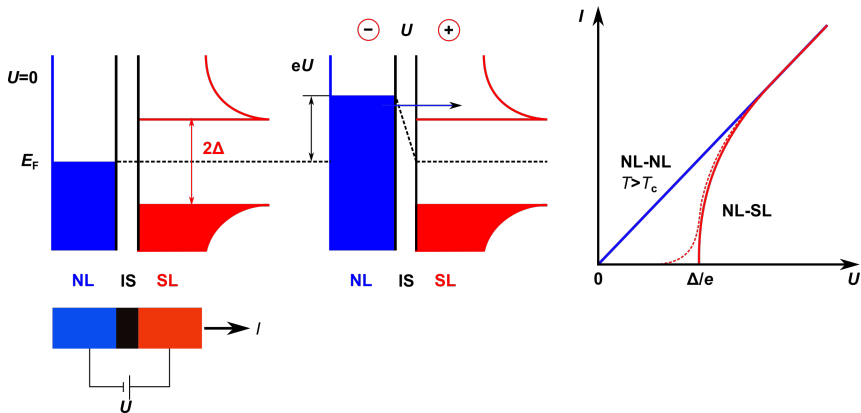
Da die Elektronen bei der Fermi-Energie Cooper-Paare formen und dadurch ihre Energie absenken, öffnet sich bei der Fermi-Energie eine Energielücke.

Die Abbildung zeigt die Zustandsdichte für das freie Elektronengas, die mit der Wurzel der Energie E variiert.

Durch die Energieabsenkung erhöht sich die Zustandsdichte der k -Zustände sowohl unterhalb als auch oberhalb der Energielücke.

Supraleitung 8

Messung der Energielücke mit einem Tunnelkontakt zwischen einem Normalleiter und einem Supraleiter. (z.B. Al-Al₂O₃-Pb)



Supraleitung 8

Kommentar 1

Die Größe der supraleitenden Energielücke kann mit einem Tunnelkontakt gemessen werden.

Als Beispiel soll der Tunnelkontakt von Aluminium und Blei betrachtet werden.

Die beiden Metalle sind durch eine dünne Aluminiumoxidschicht getrennt, durch die ein elektrischer Strom tunneln kann.

Aluminium wird unterhalb von 1,2 K supraleitend, während Blei bereits bei 7,19 K supraleitend wird.

Wird die Strom-Spannungs-Kennlinie bei einer Temperatur oberhalb von 7,2 K gemessen, dann liegt die Oxidbarriere zwischen zwei normalleitenden Metallen und es ergibt sich die blaue Kennlinie. Der Strom durch den Kontakt wächst mit der Spannung linear an.

Supraleitung 8

Kommentar 2

Wird die Strom-Spannungs-Kennlinie bei einer Temperatur unterhalb von 7,2 K aber oberhalb von 1,2 K gemessen, dann ergibt sich die in der linken Abbildung gezeichnete Situation.

Für Blei öffnet sich eine Energielücke und es kann kein Strom vom Aluminium zum Blei fließen.

Erst wenn durch eine angelegte Spannung die Fermi-Energie des Aluminiums über die Energielücke von Blei angehoben wird, können Elektronen vom Aluminium in die unbesetzten k -Zustände im Blei tunneln.

Es ergibt sich die rot gezeichnete Kennlinie.

Der Stromanstieg bei der Spannung Δ/e ist durch die Temperatur etwas verrundet.

Supraleitung 9

BCS Energielücke

$$2\Delta(T=0) = 3,52 k_B T_c$$

Element	T_c [K]	$2\Delta(0)/k_B T_c$
Cd	0,56	3,2
Al	1,196	3,4
In	3,4	3,6
Sn	3,72	3,5
Ta	4,48	3,6
V	5,3	3,4
Pb	7,19	4,3
Nb	9,26	3,8

Supraleitung 9

Kommentar

Die BCS-Theorie ermöglicht quantitative Vorhersagen, die experimentell überprüft werden können.

Die rot umrandete Formel zeigt den Zusammenhang der Energielücke extrapoliert zur Temperatur $T = 0$ mit der supraleitenden Übergangstemperatur.

Diese Formel wird durch die tabellierten Zahlenwerte bestätigt.

Revision

Revision

1

1. In welchen Kristallgittern kristallisieren die Elemente am häufigsten?
2. Skizzieren Sie die kubische Elementarzelle eines fcc-Gitters.
3. Wieviele Streuzentren enthält die kubische Elementarzelle des fcc-Gitters?
4. Was versteht man unter einer primitiven Elementarzelle?
5. Welches Volumen hat die primitive Elementarzelle des fcc-Gitters?
6. Wie ist Wigner-Seitz-Zelle eines Kristallgitters definiert?
7. Was versteht man unter der 1. Brillouin-Zone?
8. Skizzieren Sie die 1. Brillouin-Zone eines kubischen Kristallgitters mit der Gitterkonstante a .
9. Welche Kantenlänge hat die 1. Brillouin-Zone eines kubischen Kristallgitters mit der Gitterkonstante a ?

Revision

2

10. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons in einem Kristallgitter hat die Periode des Kristallgitters. Was folgt daraus für die Energie des Elektrons?
11. Was sind Energiebänder?
12. Wie ist eine Blochwelle definiert?
13. Wie ändert sich die Blochwelle, wenn zum Wellenzahlvektor eines Elektrons ein reziproker Gittervektor hinzuaddiert wird?
14. Was ist die Fermi-Fläche?
15. Weshalb können bei endlichen Temperaturen nur Elektronen, deren Wellenzahlvektoren sich in der Nähe der Fermi-Fläche befinden, zum elektrischen Strom beitragen?
16. Was folgt daraus für die Wellenfunktionen der Leitungselektronen?

Revision

3

17. Schreiben Sie die Formel für die Gruppengeschwindigkeit auf.
18. Schreiben Sie die Bewegungsgleichung für Leitungselektronen auf.
19. Wie kommt es bei Elektronenwellen zu positiven Ladungsträgern?
20. Skizzieren Sie die Bandstruktur eines Halbleiters.
21. Erklären Sie, weshalb es bei einem Halbleiter wie Silizium oder Germanium positive Ladungsträger gibt.
22. Was versteht man unter p-Dotierung eines Halbleiters?
23. Welche Bedingung muss ein Fremdatom in einem Halbleiter erfüllen, dass es zur n-Dotierung kommt.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis

1. Vorlesung

- Eindimensionale Wellengleichung
- Reflexion und Transmission
- Stehende Wellen
- Dreidimensionale Wellen
- Schallwellen

2. Vorlesung

- Elektromagnetische Wellen
- Kohärenz
- Michelson Interferometer
- Interferenz an dünnen Schichten
- Beugung am Doppelspalt
- Beugung am Gitter

Inhaltsverzeichnis

3. Vorlesung

- Fabry-Perot Interferometer
- Beugung am Einzelspalt
- Bragg'sches Gesetz
- Laue Bedingung
- Michelson Morley Experiment

4. Vorlesung

- Die Einsteinschen Postulate
- Lorentz Transformation
- Zeitdilatation und Längenkontraktion
- Das Experiment von Hall und Rossi
- Zwillingsparadoxon
- „sichtbare Effekte“ der Lorentz Transformation
- Der invariante Abstand
- Relativistische Invarianten

Inhaltsverzeichnis

5. Vorlesung

- Doppler-Effekt
- Relativistische Mechanik
- Wärmestrahlung

6. Vorlesung

- Plancksches Strahlungsgesetz
- Laser

7. Vorlesung

- Photoelektrischer Effekt
- Compton Effekt
- Materiewellen

8. Vorlesung

- Unschärferelationen
- Elektron und Elementarladung
- Kern und Elektronenwolke
- Das Spektrum des Wasserstoffatoms
- Das Bohrsche Atommodell

Inhaltsverzeichnis

9. Vorlesung

- Die Spektren der Alkalimetalle
- Die Spektren der Röntgenstrahlung
- Das Frank-Hertz Experiment
- Die Schrödinger Gleichung
- Das Kastenpotential
- Bahndrehimpuls

10. Vorlesung

- Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom
- normaler Zeeman Effekt

11. Vorlesung

- Stern-Gerlach Experiment
- Spin-Bahn-Kopplung
- Addition von Drehimpulsen

12. Vorlesung

- Periodensystem der Elemente
- Austauschwechselwirkung
- Neon
- Cadmium
- Quecksilber
- Festkörper
- Ohmsches Gesetz

Inhaltsverzeichnis

13. Vorlesung

- Drude-Modell
- Sommerfeld-Modell
- Fermi-Kugel
- Fermi-Verteilungsfunktion
- Zustandsdichte
- Wärmekapazität des Elektronengases

14. Vorlesung

- Blochwellen
- 1. Brillouin-Zone
- Energiebänder
- Die Bewegungsgleichungen der Bandelektrenen
- Ferromagnetismus
- Supraleitung