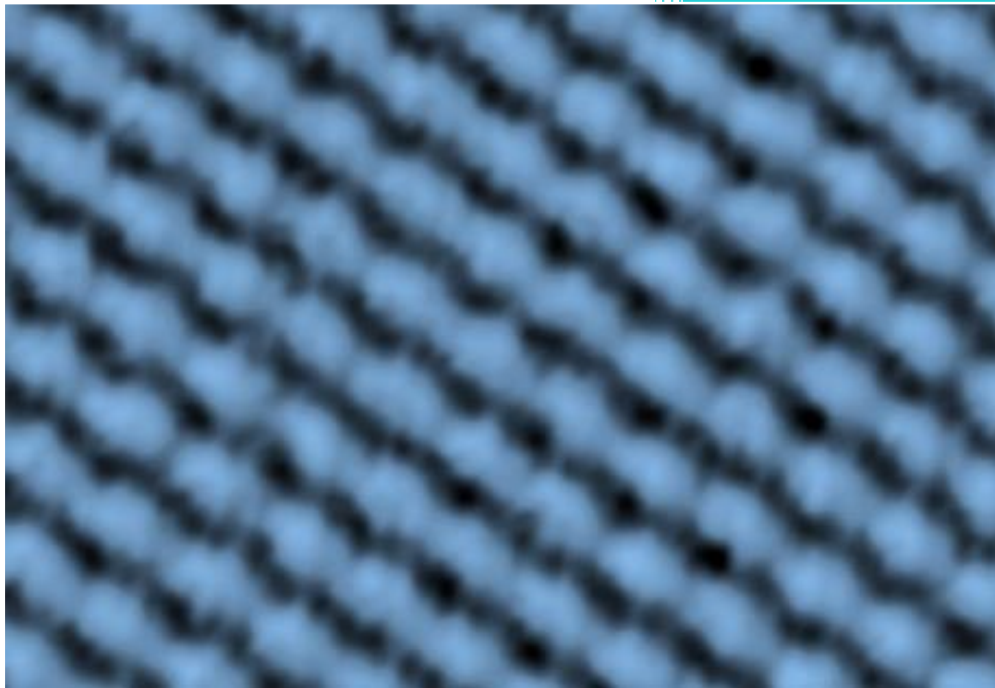


Moderne Experimentalphysik II

Festkörperphysik



Patrick Schönfeld; Marcel Walter
KIT Karlsruhe – Prof. Wegener
WS 2013/2014

Keine Garantie auf Vollständigkeit und korrekte Formeln!

Inhaltsverzeichnis	1
1. Kristalline, quasi-kristalline und amorphe Festkörper	3
1.1 Das periodische Gitter im Ortsraum	3
1.1.1 Einführung.....	3
1.1.2 Einfache Kristallstrukturen und ihre Bindung	7
1.2 Das reziproke Gitter und Methoden der Strukturbestimmung	11
1.2.1 Die Analyse der Basis-Strukturfaktoren	17
1.2.2 Der Debye-Waller-Faktor	18
1.3 Amorphe und quasi-kristalline Festkörper.....	20
2. Die Dynamik des Kristallgitters	23
2.1. Phononen und ihre Dispersionsrelation.....	23
2.2 Spezifische Wärme des Kristallgitters	28
2.3 Thermische Ausdehnung.....	34
3. Elektronische Energiebänder im Festkörper.....	36
3.1 Das Bloch-Theorem	37
3.2 „Tight-Binding“-Modell	38
3.3 Die Näherung fast freier Elektronen	41
4. Metalle	44
4.1 Das Modell effektiver Massen.....	44
4.3 Spezifische Wärme des Quantengases aus $e -$	47
4.4 Optik (dielektrische Funktion, Plasmonen)	49
4.5 Bloch-Oszillationen und Wannier-Stark-Leiter.....	51
4.6. Klassischer Transport	54
4.7. Experimentelle Bestimmung von Fermi-Flächen	59
5. Halbleiter und Isolatoren	62
5.1 Einführung.....	62
5.2 Transport durch Elektronen und Löcher	69
5.3 Der pn-Übergang.....	69
5.4 Der Halbleiter-Metall-Übergang	74
5.5 Halbleiter-Solarzellen	78

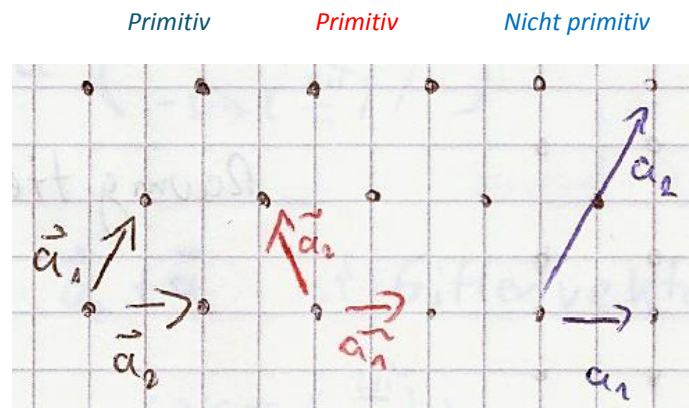
5.6 Kohärenter Transport	81
5.7 Quanten-Hall-Effekt	85
6. Magnetische Eigenschaften	88
6.1 Einführung	88
6.2 Para- und Diamagnetismus	88
6.3 Ferro- und Antiferromagnetismus	94
7. Supraleitung	100
7.1 Experimentelle Evidenzen	100
7.2 Theoretische Ansätze	103
7.3 Der Josephson-Kontakt	106

Der Mitschrieb wird noch ergänzt und korrigiert

1. KRISTALLINE, QUASI-KRISTALLINE UND AMORPHE FESTKÖRPER

1.1 DAS PERIODISCHE GITTER IM ORTSRAUM

1.1.1 EINFÜHRUNG



d.h. von den Punkten $\vec{r}, \vec{r}'$ sieht das Gitter gleich aus wenn gilt

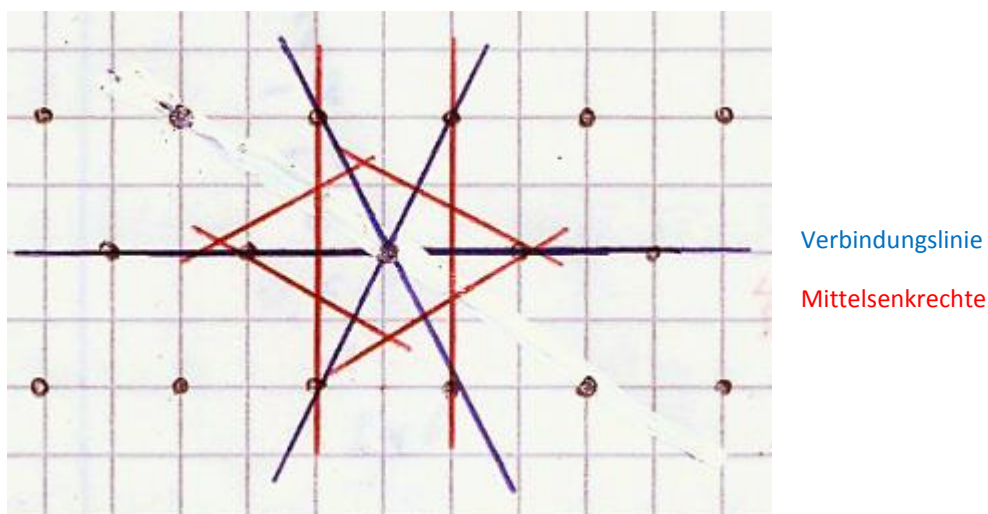
$$\vec{r}' = \vec{r} + \underbrace{u \cdot \vec{a}_1 + v \cdot \vec{a}_2 + w \cdot \vec{a}_3}_{\text{Gittertranslation } \vec{T}} \quad u, v, w \in \mathbb{Z}$$

Die Wahl von $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ ist *nicht* eindeutig. Man bezeichnet die Wahl als *primitiv*, wenn durch $\vec{T}$ *alle* gleichartigen Punkte dargestellt werden können.

Eine *primitive Elementarzelle* hat das kleinste Volumen des aufgespannten Parallelepipeds

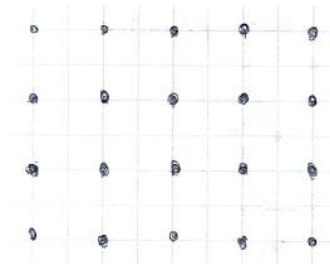
$$V = |(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \cdot \vec{a}_3|$$

Die *Wigner-Seitz-Zelle* ist eine spezielle primitive Elementarzelle. Sie hat folgende Konstruktionsvorschrift:

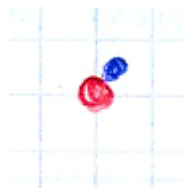


Jeder Gitterpunkt kann mit einer *Basis* von Atomen besetzt werden

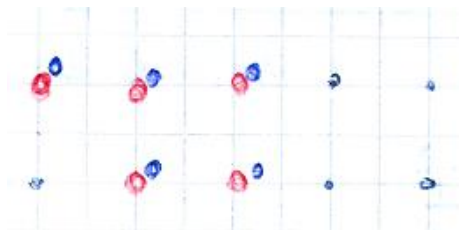
Kristallstruktur = Gitter + Basis



Raumgitter



Basis



Kristallstruktur

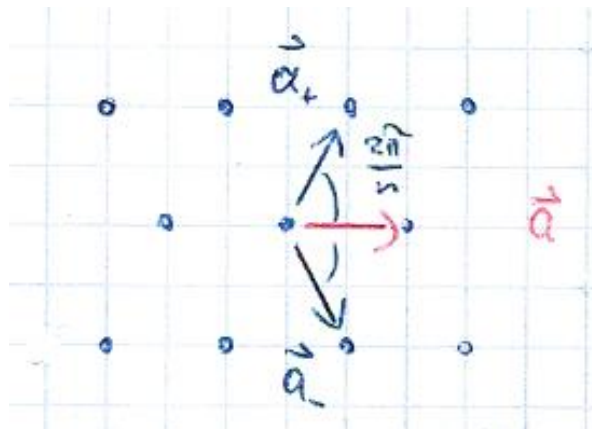
Ein Kristall zeichnet sich durch seine *Symmetrien* aus:

- Translationen (siehe oben)
- Spiegelungen
- Drehungen

DEFINITION: Eine Drehachse, bei der der Kristall nach Drehung um den Winkel $\frac{2\pi}{n}$ ($n \in \mathbb{N}$) in sich selbst übergeht heißt *n-zählige Drehachse*.

BEHAUPTUNG: $n = 1, 2, 3, 4, 6$; sonst keine Werte möglich

BEWEIS:



$\vec{a} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ist Translationsvektor

$$\vec{a}_+ = a \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) \\ \sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) \end{pmatrix} \quad \vec{a}_- = a \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) \\ -\sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) \end{pmatrix}$$

Gedachte Translationsvektoren aber auch Gittervektoren

$\Rightarrow$ auch $\vec{a}_+ + \vec{a}_-$ ist Gittervektor

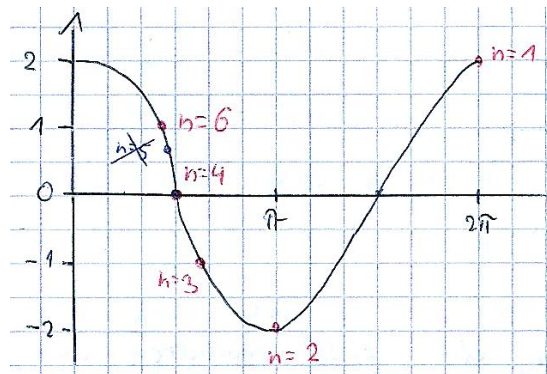
$$= a \begin{pmatrix} 2 \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) \\ 0 \end{pmatrix} \parallel \vec{a}$$

Wenn $\vec{a}$ kleinster Translationsvektor ist, muss gelten

$$\vec{a}_+ + \vec{a}_- = m \cdot \vec{a} \quad m \in \mathbb{Z}$$

$$\Rightarrow \underbrace{2 \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right)}_{\text{wann ganze Zahl?}} = m$$

Graphisch:



n	$2 \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right)$
1	2
2	-2
3	-1
4	0
5	0,618 ...
6	1
7	1.246
$\vdots$	$\vdots$

$$\Rightarrow n \in \{1, 2, 3, 4, 6\} \text{ q. e. d.}$$

In 3D $\exists$ 14 verschiedene Raumgitter, die als *Bravais-Gitter* bezeichnet werden. Diese können in sieben verschiedene *Kristallsysteme* eingeordnet werden.

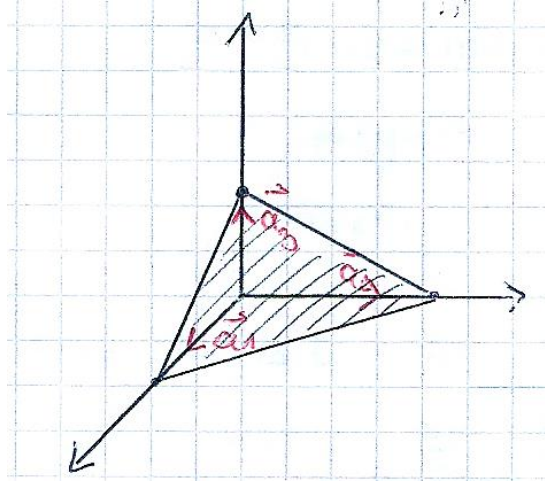
Häufig möchte man Netzebenen bzw. Netzebenenachsen benennen.

$\Rightarrow$ Millersche Indizes

DEFINITION:

Gegeben seien die Kristallachsen $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ (nicht unbedingt kartesisch, nicht unbedingt primitiv)

Die Ebene sei aufgespannt durch die drei Vektoren $n_1 \cdot \vec{a}_1, n_2 \cdot \vec{a}_2, n_3 \cdot \vec{a}_3; n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$

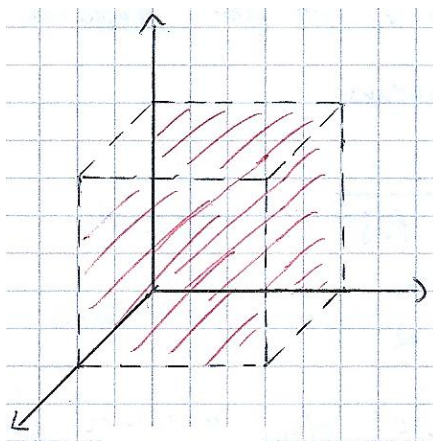


Die (kleinsten) ganzen Zahlen, die sich verhalten wie die Kehrwerte von n_1, n_2, n_3 , bilden die Millerschen Indizes.

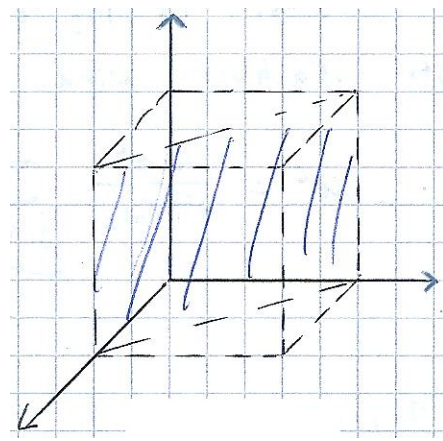
BEISPIEL: $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{1}\right) \Rightarrow (3, 2, 6)$

Meist lässt man die Kommata weg, also "(326)". Negative Werte werden durch Balken notiert, also z.B. $(3\bar{2}6)$. Wird eine Achse nicht geschnitten (ist also der Achsenabschnitt $= \infty$), so ist der zugehörige Millersche Index = 0.

BEISPIEL:



(100)



(110)

1.1.2 EINFACHE KRISTALLSTRUKTUREN UND IHRE BINDUNG

NATRIUMCHLORIDSTRUKTUR:

Beispiele: $\text{NaCl}, \text{KCl}, \text{MgO}, \text{KBr}, \dots$

Bravais-Gitter: Kubisch flächenzentriert (fcc)

Basis: ein Na mit einem Cl

Bindung: ionisch

Na hat die e^- -Konfiguration $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, für Cl ist sie $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 \Rightarrow$ gibt das Na ein e^- an das Cl ab, so weisen beide abgeschlossene Schalen auf. Es entsteht ein Na^+ und Cl^- Ion, die sich auf Grund der Coulombwechselwirkung anziehen.

Wir betrachten $N \approx N_A$ Ionenpaare. Es resultiert die Coulombenergie

$$U^C = N \cdot \sum_{\substack{j, j \neq i \\ \text{fest, aber beliebig}}} \frac{\pm e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$$

$+$ $\hat{=}$ Abstoßung $\text{Na}^+ \text{Na}^+$ (i in Na^+ gewählt)

$-$ $\hat{=}$ Anziehung $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$

Mit der Definition $r_{ij} = p_{ij} \cdot r_0$, r_0 ist der Abstand nächster Nachbarn, wird hieraus

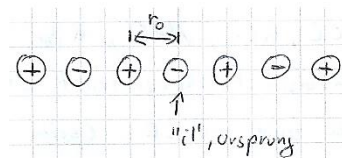
$$U^C = \frac{Ne^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \sum_{\substack{j, j \neq i \\ =: -\alpha}} \pm \frac{1}{p_{ij}}$$

$[\alpha] = 1$, $\alpha > 0$ sonst $U^C > 0$, d.h. Kristall würde explodieren.

$\alpha \hat{=}$ Madelung-Konstante

$$\Rightarrow U^C = \frac{Ne^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \cdot \alpha$$

BEISPIEL: (1D-Kette)



" i ", Ursprung

$$\alpha = 2 \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} \dots \right)$$

$$\text{Mit } \ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \frac{x^5}{5} \dots$$

$$\alpha = 2 \cdot \ln(2) \approx 1,386$$

In 3D ist die Summation i.A. *viel* schwieriger. Reihen konvergieren oft schlecht $\Rightarrow$ „geschickte Umgruppierung.“

BEISPIEL: NaCl

Ionen	Abstand
Na^+	0 Ursprung
$6Cl^-$	r_0
$12Na^+$	$\sqrt{2}r_0$
$8Cl^-$	$\sqrt{3}r_0$
$6Na^+$	$\sqrt{4}r_0$
...	...

$$\Rightarrow \alpha = \frac{6}{1} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{\sqrt{4}} \dots = 1,7475$$

$$\sum = 6, -2.48, 2.133, -0.86$$

!∃ auch eine abstoßende Wechselwirkung aufgrund der sich überlappenden e^- Hüllen und des *Pauliverbotes*. Dies ist ein quantenmechanischer Effekt. Man setzt *phänomenologisch* an

$$U_i^B = +Be^{-\frac{r_{ij}}{\rho}}$$

Born-Mayer-Potential

B und σ sind materialspezifische Konstanten.

Summation also nur über nächste Nachbarn (NN)

$$U^B = N \cdot z \cdot B \cdot e^{-\frac{r_0}{\rho}}$$

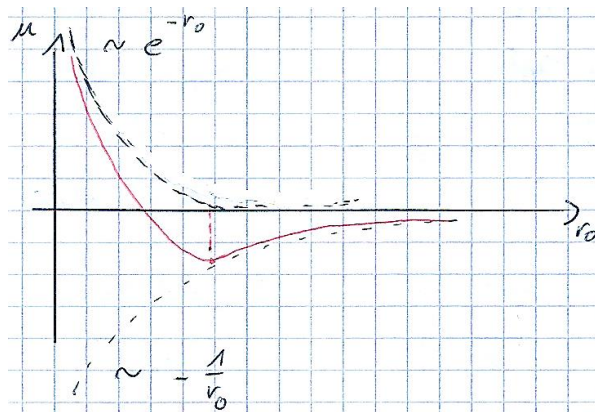
N : Zahl der Ionenpaare

z : Zahl der NN (Koordinationszahl), für Na^+ $z = 6$

Die gesamte Energie ist

$$U = U^C + U^B = -N \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \alpha - z \cdot B e^{-\frac{r_0}{\rho}} \right)$$

GRAPHISCH:



Gleichgewichtslage bei $\frac{dU}{dr_0} = 0$

$$\Rightarrow 0 = -N \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \alpha - z \cdot B \left(-\frac{1}{\rho} \right) e^{-\frac{r_0}{\rho}} \right)$$

$$zB e^{-\frac{r_0}{\rho}} = \frac{\rho}{r_0} \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \alpha$$

Einsetzen:

$$\Rightarrow U = -\frac{Ne^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \alpha \left(1 - \frac{\rho}{r_0} \right)$$

Die Bindungsenergie pro Ionenpaar N ist

$$E_B := \frac{U}{N}$$

Beispiel: NaCl

$$\left. \begin{array}{l} r_0 = 0,28 \text{ nm} \\ \rho = 0,03 \text{ nm} \end{array} \right\} E_B = 8,23 \text{ eV (starke Bindung)}$$

CAESIUMCHLORID

Beispiele: $\text{CsCl}, \text{CaPd}, \text{AlNi}, \text{AgMg}$

Bravais-Gitter: Einfach kubisch

Basis: Ein Cs und ein Cl Ion

Bindung: Ionisch

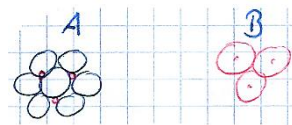
Cs hat e^- -Konfiguration ... $6s^1, \text{Cl}$... $3p^5 \Rightarrow$ Analog zum NaCl

HEXAGONAL DICHTESTE KUGELPACKUNG

Beispiele: $\text{He}, \text{Zn}, \text{Co}, \text{Opale}, \dots$

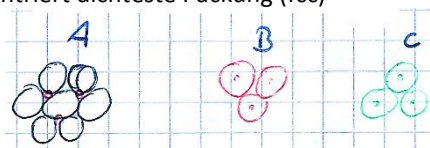
Bravais-Gitter: $\exists$ zwei Möglichkeiten dichtester Kugelpackung (= 74%)

1. Hexagonal dichteste Packung (hcp)



Schichtfolge $ABAB \dots \Rightarrow$ hexagonal primitive Elementarzelle mit Basis aus zwei Atomen

2. Kubisch flächenzentriert dichteste Packung (fcc)



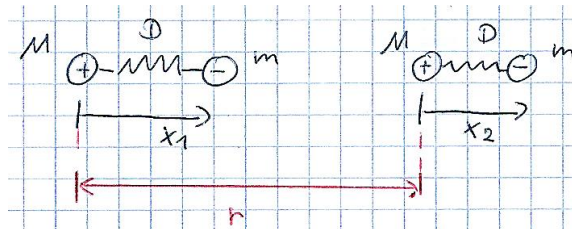
Schichtfolge $ABCABC \dots \Rightarrow$ fcc Elementarzelle mit einer einatomigen Basis

Bindung:

Van der Waals Wechselwirkung:

Edelgasatome (z.B. He , Ne) besitzen bereits abgeschlossene Schalen. Die Bindungsenergie durch vdW WW ist sehr klein, z.B. $Ne: E_B = 0,02 \frac{eV}{Atom}$

EINFACHES MODELL:



Näherungen: $M \gg m, r \gg |x_1|, |x_2|$

$\Rightarrow$ quantenmechanische Grundzustandsenergie

$$= \frac{\hbar}{2} \left(2 \sqrt{\frac{D}{m}} - \frac{2}{8} \left(\frac{2e^2 m}{4\pi\epsilon_0 r^3} \right)^2 \right) \sim \frac{1}{r^6}$$

$\Rightarrow \hbar = 0 \Rightarrow$ keine Wechselwirkung

DIAMANTSTRUKTUR

Beispiele: $C, Si, Ge, \dots$

Bravais-Gitter: fcc

Basis: Zwei identische Atome bei $(0,0,0)$ und $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$

Die Raumauffüllung ist sehr schlecht mit 34% (vgl. 74% bei hcp)

Bindung:

Kovalent:

Die e^- -Konfiguration des C -Atoms ist $1s^2 2s^2 2p^2$, d.h. es fehlen $4e^-$ um die Schale zu schließen.

$\Rightarrow$ tetraedrische Bindung mit 4 NN.

Typische Bindungsenergien:

$$C: E_B = 3,6 eV$$

$$Si: E_B = 1,8 eV$$

Zwischen der *kovalenten* und der *ionischen* Bindung gibt es einen kontinuierlichen Übergang. Elemente der Hauptgruppen *III, IV, V* tendieren zur kovalenten Bindung (z.B. $GaAs$), Elemente mit fast abgeschlossenen Schalen zur ionischen Bindung. Bei der *metallischen Bindung* werden die e^- völlig delokalisiert, d.h. feste Ionenrümpfe und ein freies e^- ($\Rightarrow$ gute Leitfähigkeit).

KUBISCHE ZINKSULFIDSTRUKTUR

Beispiele: CdS, ZnS, SiC

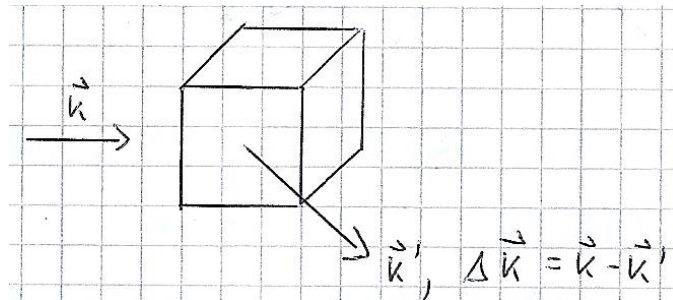
Bravais-Gitter: fcc

Basis: Ein Zn und ein S

$\Rightarrow$ keine Inversionssymmetrie ($\vec{r} \nrightarrow -\vec{r}$)

1.2 DAS REZIPROKE GITTER UND METHODEN DER STRUKTURBESTIMMUNG

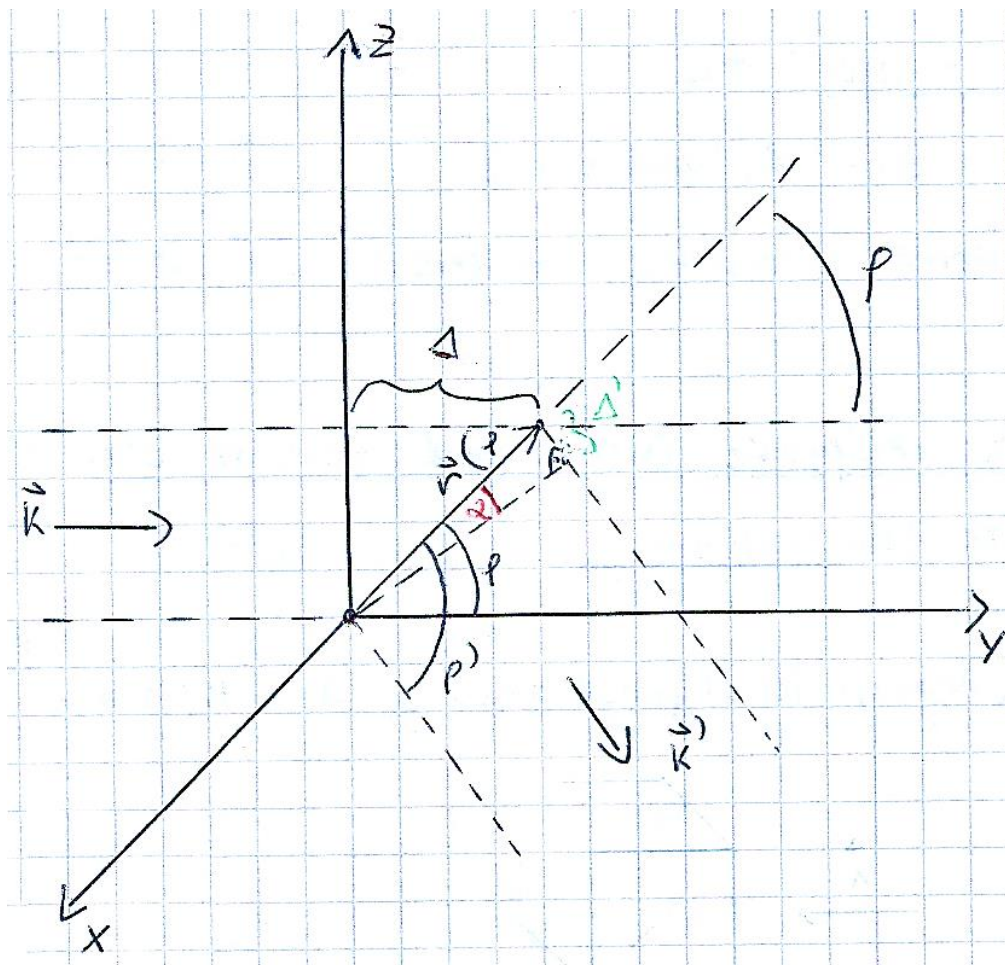
Beugung der Röntgenstrahlung am Kristall:



BEHAUPTUNG: Die Beugungsamplitude ist proportional zur Fouriertransformierten der Elektronendichte $\rho(\vec{r})$.

BEWEIS: Voraussetzungen:

- 1) Elastische Beugung $\Leftrightarrow$ Energieerhaltung $\Leftrightarrow |\vec{k}| = |\vec{k}'|$
- 2) Einmalige Streuung im Kristall
- 3) Lokale Amplitude $\sim \rho(\vec{r})$



$$\Delta = \cos \varphi \cdot |\vec{r}|, \Delta\varphi = \frac{2\pi\Delta}{\lambda} \cong \text{Phasenverschiebung}$$

$$\Rightarrow \Delta\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} \cos \varphi \cdot |\vec{r}| = |\vec{k}| \cdot |\vec{r}| \cdot \cos \varphi = \vec{k} \cdot \vec{r}$$

$$\Delta' = \sin \alpha \cdot |\vec{r}| = \sin(\varphi' - 90^\circ) \cdot |\vec{r}| = -\cos(\varphi') \cdot |\vec{r}|$$

$$\Rightarrow \Delta\varphi' = -\frac{2\pi}{\lambda \cos \varphi'} \cdot |\vec{r}|$$

$$\Delta\varphi_{ges} = (\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r} =: \Delta\vec{k} \cdot \vec{r}$$

Summiere über alle Orte $\vec{r}$

$\Rightarrow$ Beugungsamplitude

$$A(\Delta\vec{k}) \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3x$$

Oder umgekehrt

$$\rho(\vec{r}) \sim \int_{-\infty}^{+\infty} A(\Delta\vec{k}) \cdot e^{(+i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r})} d^3(\Delta k)$$

- i.A. werden jedoch Intensitäten gemessen (Betrag des Poynting-Vektors)
Messung $\Rightarrow |A|^2 \hat{=}$ Intensität $\nRightarrow A \in \mathbb{C} \Rightarrow \rho(\vec{r})$ kann nicht ohne weiteres bestimmt werden
- A ist Funktion von
 - o Richtungsänderung
 - o Wellenlänge

Die Ladungsdichte $\rho(\vec{r})$ ist eine Gitterfunktion und bzgl. Translation um Gittervektoren invariant, d.h. $\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{T})$ mit $\vec{T} = u\vec{a}_1 + v\vec{a}_2 + w\vec{a}_3$; $u, v, w \in \mathbb{Z}$.

$$\begin{aligned} A(\Delta\vec{k}) &\sim \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3x = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho\left(\underbrace{\vec{r} + \vec{T}}_{:=\vec{r}}\right) e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3x = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{T})} d^3\tilde{x} \\ &= \underbrace{e^{+i\Delta\vec{k} \cdot \vec{T}}}_{=1} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3\tilde{x} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Damit $A(\Delta\vec{k}) \neq 0$ muss gelten (notwendige Bedingung)

$$\Delta\vec{k} \cdot \vec{T} = m \cdot 2\pi$$

Also nur in bestimmten Richtungen kann die Beugungsamplitude von Null verschieden sein.

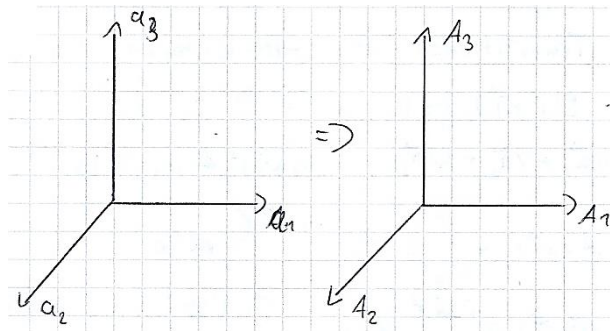
ANSATZ: $\Delta\vec{k} = h\vec{A}_1 + k\vec{A}_2 + l\vec{A}_3$ $h, k, l \in \mathbb{Z}$

$$\Rightarrow (h\vec{A}_1 + k\vec{A}_2 + l\vec{A}_3) \cdot (u\vec{a}_1 + v\vec{a}_2 + w\vec{a}_3) = m \cdot 2\pi$$

$$\Rightarrow \vec{A}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

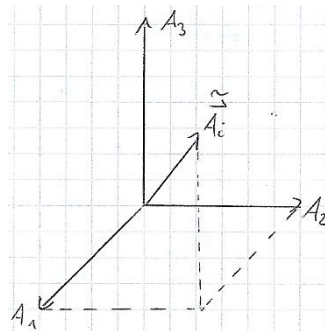
ERLÄUTERUNG:

BEISPIEL:



1. ALTERNATIVE:

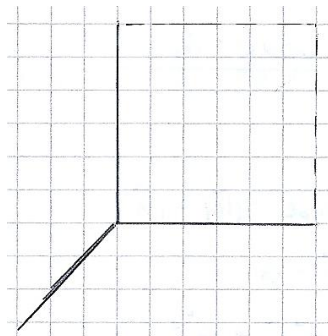
$$\vec{\widetilde{A}}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \quad \forall i, j$$



$\Rightarrow \vec{\widetilde{A}}_i$ spannen nicht den Raum auf.

2. ALTERNATIVE:

$$\vec{\widetilde{A}}_1 \cdot \vec{a}_1 = 2\pi \quad \vec{\widetilde{A}}_1 \cdot \vec{a}_2 = 2\pi \quad \vec{\widetilde{A}}_1 \cdot \vec{a}_3 = 0$$



BEHAUPTUNG:

$$\vec{A}_i = \epsilon_{ijk} \cdot 2\pi \cdot \frac{(\vec{a}_j \times \vec{a}_k)}{\vec{a}_i \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

bzw.

$$\vec{a}_l = \epsilon_{ijk} \cdot 2\pi \cdot \frac{(\vec{A}_j \times \vec{A}_k)}{\vec{A}_1 \cdot (\vec{A}_2 \times \vec{A}_3)}$$

BEWEIS:

$$\vec{A}_1 = 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{A}_1 \cdot \vec{a}_1 = 2\pi \quad \vec{A}_1 \cdot \vec{a}_2 = 0 \quad \vec{A}_1 \cdot \vec{a}_3 = 0$$

Die $\vec{A}_l$ spannen das *reziproke Gitter* auf.

$$\vec{G} = h \cdot \vec{A}_1 + k \vec{A}_2 + l \vec{A}_3$$

$$[\vec{G}] = m^{-1}$$

$\vec{G}$ ist der *reziproke Gittervektor*.

Damit können wir die Beugungsbedingung schreiben:

$$\Delta \vec{k} = \vec{G}$$

oder durch Multiplikation von links

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 \cdot \Delta \vec{k} &= 2\pi h \\ \Rightarrow \vec{a}_2 \cdot \Delta \vec{k} &= 2\pi k \quad \text{Laue - Gleichungen} \\ \vec{a}_3 \cdot \Delta \vec{k} &= 2\pi l \end{aligned}$$

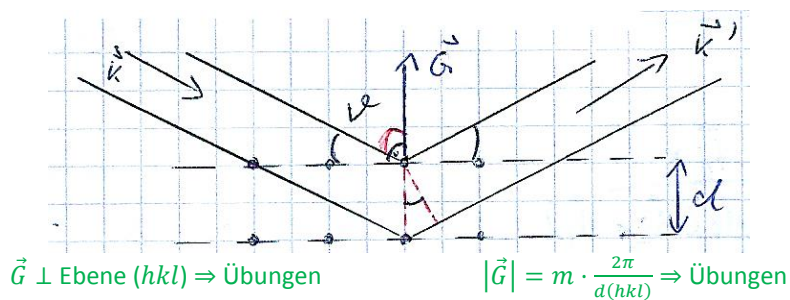
oder auch mit $\Delta \vec{k} = \vec{G}$ und $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$

$$\vec{G} = \Delta \vec{k} = \vec{k} - \vec{k}' \Leftrightarrow \vec{k}' = \vec{k} - \vec{G}$$

$$\Rightarrow \vec{k}'^2 = (\vec{k} - \vec{G})^2 = \vec{k}'^2 - 2\vec{k}\vec{G} + \vec{G}^2$$

$$\Rightarrow \vec{G}^2 = 2\vec{G} \cdot \vec{k} \quad \text{Brillouin - Bedingung}$$

$$\Rightarrow |\vec{G}| \cdot |\vec{G}| = 2 \cdot |\vec{G}| \cdot |\vec{k}| \cdot \cos \angle(\vec{G}, \vec{k})$$



$$\Rightarrow |\vec{G}| = 2 \cdot |\vec{k}| \cdot \sin \vartheta = m \cdot \frac{2\pi}{d(hkl)} = 2 \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \sin \vartheta$$

$$\Rightarrow 2 \cdot d \cdot \sin \vartheta = m \cdot \lambda \quad \text{Braggsche Beugung}$$

Mögliche Darstellungen der Beugungsbedingung:

$$m\lambda = 2d \cdot \sin \vartheta$$

$$\Delta \vec{k} = \vec{G}$$

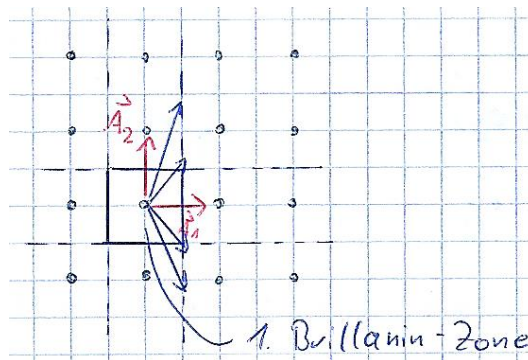
$$\vec{a}_i \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi h_i$$

$$\vec{G}^2 = 2\vec{G} \cdot \vec{k}$$

Geometrische Interpretation der Brillouin-Bedingung

$$\Rightarrow \frac{1}{2} = \frac{\vec{k} \cdot \hat{\vec{G}}}{|\vec{G}|} \quad \hat{\vec{G}} = \frac{\vec{G}}{|\vec{G}|}$$

BEISPIEL: sc (Ortsraum und im reziproken Raum)



Die eingezeichneten $\vec{k}$ erfüllen die obige Beugungsbedingung. Bilden wir alle Mittelsenkrechten zu allen $\vec{G}$ entsteht eine Zone, die wir als 1. Brillouin-Zone bezeichnen wollen.

Die 1. Brillouin-Zone ist die Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters.

Vom Ursprung aus gesehen ist ihre Brandung die Menge aller kleinsten $\vec{k}$, die die Beugungsbedingungen erfüllen.

BEISPIEL: einfach kubisches Raumgitter (sc)

$$\vec{a}_1 = a \cdot \hat{e}_x \quad \vec{a}_2 = a \cdot \hat{e}_y \quad \vec{a}_3 = a \cdot \hat{e}_z$$

Einsetzen in allgemeine Vorschrift:

$$\vec{A}_l = \epsilon_{ijk} \cdot 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{a_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\Rightarrow \vec{A}_1 = 1 \cdot 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{a_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = 2\pi \cdot \frac{a^2 \hat{e}_x}{a_3} = \frac{2\pi}{a} \cdot \hat{e}_x$$

analog dazu erhält man

$$\Rightarrow \vec{A}_2 = \frac{2\pi}{a} \cdot \hat{e}_y \quad \vec{A}_3 = \frac{2\pi}{a} \cdot \hat{e}_z$$

$\Rightarrow$ Das reziproke Gitter ist wieder einfach kubisch.

BEISPIEL: Reziprokes Gitter des kubisch raumzentrierten Gitters (bcc)

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{e}_x + \hat{e}_y - \hat{e}_z)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}a(-\hat{e}_x + \hat{e}_y + \hat{e}_z)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{e}_x - \hat{e}_y + \hat{e}_z)$$

$$\vec{A}_i = \epsilon_{ijk} \cdot 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{a_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{A}_1 = 1 \cdot 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{a_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\Rightarrow \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{1}{4}a^2 \cdot (\hat{e}_z + \hat{e}_y - \hat{e}_z + \hat{e}_x + \hat{e}_y + \hat{e}_z) = \frac{1}{2}a^2(\hat{e}_x + \hat{e}_y)$$

$$\Rightarrow \vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{a}{2}(\hat{e}_x + \hat{e}_y - \hat{e}_z)(\hat{e}_x + \hat{e}_y) \cdot \frac{a^2}{2} = \frac{a^3}{4} \cdot 2$$

$$\Rightarrow \vec{A}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{e}_x + \hat{e}_y)$$

Analog dazu für $\vec{A}_2$ und $\vec{A}_3$:

$$\vec{A}_2 = \frac{2\pi}{a}(\dots) \quad \vec{A}_3 = \frac{2\pi}{a}(\dots)$$

Raumgitter	Reziprokes Gitter
sc	sc
bcc	fcc
fcc	bcc

1.2.1 DIE ANALYSE DER BASIS-STRUKTURFAKTOREN

Wir hatten

$$A(\Delta \vec{k}) \sim \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\vec{r}) \cdot e^{-i\Delta \vec{k} \cdot \vec{r}} d^3x$$

$$\Rightarrow A(\Delta \vec{k}) \sim N \underbrace{\int \rho(\vec{r}) e^{-i\Delta \vec{k} \cdot \vec{r}} d^3x}_{\substack{\text{EZ} \\ \text{Strukturfaktor } S_{\vec{G}}}}$$

Enthält die Elementarzelle weiterhin s Atome, können wir $\rho(\vec{r})$ schreiben als

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{j=1}^s \rho_j(\vec{r} - \vec{r}_j)$$

wobei $\vec{r}_j$ das Zentrum des j -ten Atoms ist.

$$S_{\vec{G}} = \sum_{j=1}^s \rho_j(\vec{r} - \vec{r}_j) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} d^3x = \sum_{j=1}^s e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j} \cdot \underbrace{\int \rho_j(\vec{r} - \vec{r}_j) e^{-i\vec{G} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_j)} d^3x}_{\text{Atomformfaktor } f_j}$$

$$\Rightarrow S_{\vec{G}} = \sum_{j=1}^s e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j} \cdot f_j \quad (*)$$

oder mit $\vec{G} \cdot \vec{r}_j = (h\vec{A}_1 + k\vec{A}_2 + l\vec{A}_3)(x_{1j} \cdot \vec{a}_1 + x_{2j} \cdot \vec{a}_2 + x_{3j} \cdot \vec{a}_3) = 2\pi(\dots$

$$S_{\vec{G}}(hkl) = \sum_{j=1}^s f_j \cdot e^{-2\pi i(hx_{1j} + kx_{2j} + lx_{3j})}$$

! Selbst wenn die Beugungsbedingung erfüllt ist, kann der Strukturfaktor und damit die Beugungsintensität Null sein.

BEISPIEL: Strukturfaktoren des kubisch raumzentrierten Gitters (bcc), bei z.B. metallischem Na

Betrachte kubische Einheitszelle, je ein identisches Atom bei

$$\vec{r}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow S_{\vec{G}}(h, k, l) = f \left(1 + e^{-2\pi i \frac{1}{2}(h+k+l)} \right) = \begin{cases} 0 & h+k+l \text{ ungerade} \\ 2f & h+k+l \text{ gerade} \end{cases}$$

also z.B. keine „Reflexe“ $(1\ 0\ 0)$, $(3\ 0\ 0)$, $(1\ 1\ 1)$

¹ Eigentlich Integral über endlichen Kristall mit N Zellen

1.2.2 DER DEBYE-WALLER-FAKTOR

Bei endlichen Temperaturen sind die Orte r_j nicht fest, sondern fluktuieren zeitlich, also

$$\vec{r}_j \rightarrow \vec{r}_j^0 + \vec{u}(t)$$

Einsetzen in (*)

$$\Rightarrow S_{\vec{G}} = \sum_{j=1}^s e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j^0} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{u}} f_j$$

In die Messung geht der Mittelwert ein, also

$$\langle S_{\vec{G}} \rangle = \sum_{j=1}^s e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j^0} f_j \underbrace{\langle e^{-i\vec{G} \cdot \vec{u}} \rangle}_{\substack{\text{kleine Fluktuation} \\ \rightarrow \text{Taylor}}}$$

$$e^{-i\vec{G} \cdot \vec{u}} \approx 1 - i\vec{G} \cdot \vec{u} - \frac{1}{2}(\vec{G} \cdot \vec{u})^2 + \dots$$

$$\Rightarrow \langle e^{-i\vec{G} \cdot \vec{u}} \rangle = \langle 1 \rangle - i \underbrace{\langle \vec{G} \cdot \vec{u} \rangle}_{=0} - \frac{1}{2} \langle (\vec{G} \cdot \vec{u})^2 \rangle$$

$$\langle (\vec{G} \cdot \vec{u})^2 \rangle = \langle \vec{G}^2 \rangle \cdot \langle \vec{u}^2 \rangle \cdot \underbrace{\cos^2(\theta)}_{=\frac{1}{3}}$$

$$\langle e^{-i\vec{G} \cdot \vec{u}} \rangle = 1 - \frac{1}{6} \langle \vec{G}^2 \rangle \langle \vec{u}^2 \rangle + \dots \approx e^{-\frac{1}{6} \vec{G}^2 \langle \vec{u}^2 \rangle}$$

$\Rightarrow$ mit steigendem Schwankungsquadrat $\langle \vec{u}^2 \rangle$ *sinkt* die Beugungsintensität.

ANNAHME: Schwingungen wie harmonischer Oszillator.

$\Rightarrow$ Mittlere kinetische Energie = mittlere potentielle Energie und 3 Freiheitsgrade

$$\frac{3}{2} k_B T = \frac{1}{2} D \langle \vec{u}^2 \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \vec{u}^2 \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \vec{u}^2 \rangle = \frac{3 k_B}{m \omega^2} T$$

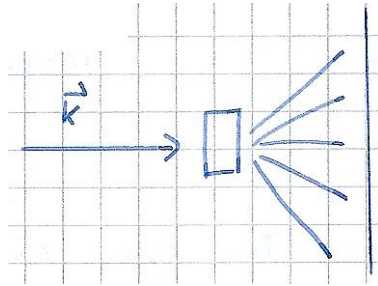
$$\Rightarrow I = I_0 e^{-\frac{k_B T}{m \omega^2} G^2}$$

$$\hat{=} \text{Beugungsintensität} = f(T) \sim |S_{\vec{G}}|^2$$

¹ entspricht nur korrelierten Fluktuationen

EXPERIMENTELLE METHODEN

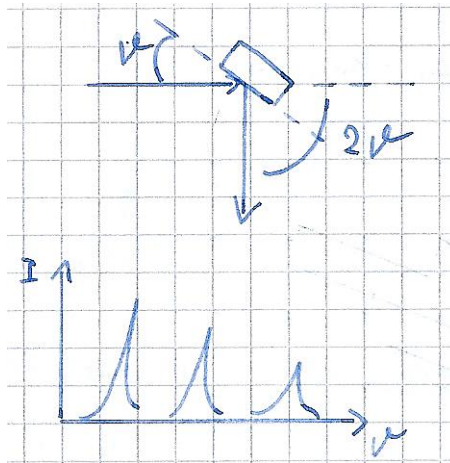
LAUE-VERFAHREN:



Einfallswinkel θ fest und λ polychromatisch

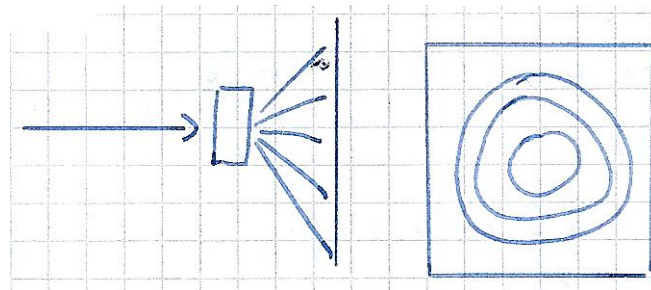
⇒ Orientierung bekannter Kristallstrukturen

DREHKRISTALLVERFAHREN:



⇒ Bestimmung von Gitterkonstanten

PULVERMETHODE:



keine Einkristalle, sondern Pulver (⇒ beliebig orientiert) – λ fest.

1.3 AMORPHE UND QUASI-KRISTALLINE FESTKÖRPER

Kristalle haben *sowohl* eine *Nahordnung* als auch eine *Fernordnung*.

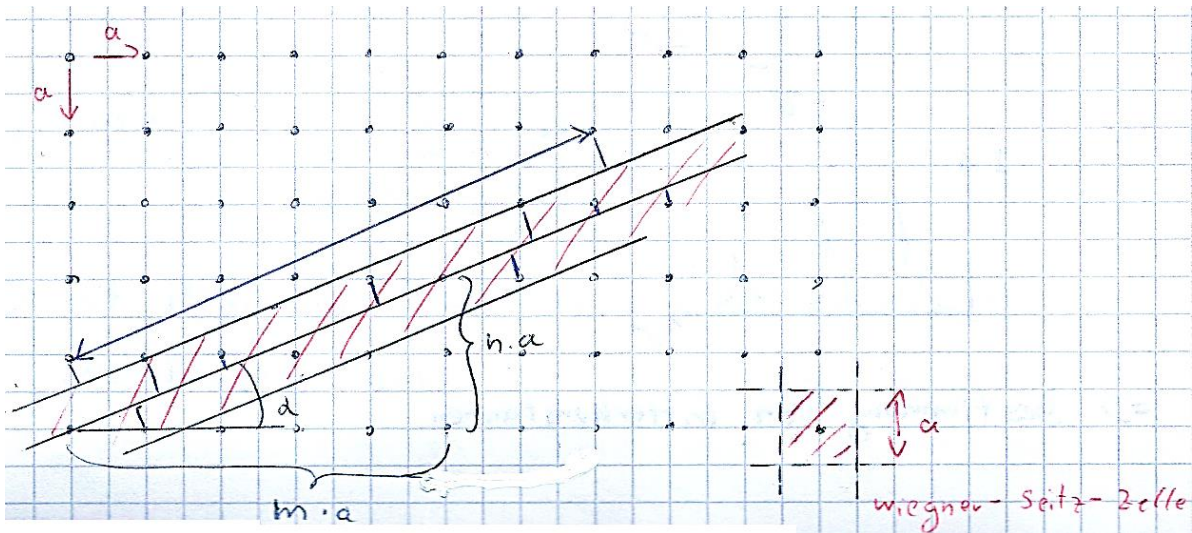
QUASI-KRISTALLE:

? $\exists$ Laue-Beugungsbilder mit 5- bzw. 10-zähligen Drehachsen $\notin \{1,2,3,4,6\}$?

1984 fand Daniel Shechtman Festkörper mit 5- bzw. 10-zähligen Drehachsen.

3D Quasi-Kristalle kann man erzeugen durch einen 6D sc Kristall, der im Raum gedreht und dann auf 3D „projiziert“ wird.

VERANSCHAULICHUNG MIT 1D QUASI-KRISTALL:

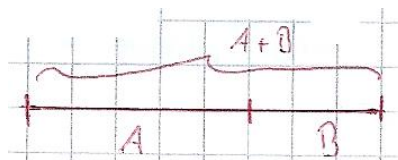


$$\tan \alpha = \frac{n}{m} \quad n, m \in \mathbb{N}$$

mit 1D-Periode $a' = a\sqrt{n^2 + m^2}$, falls n, m teilerfremd sind.

Idee: $a' \rightarrow \infty$ für irrationale Werte von $\tan(\alpha)$

? Was ist eine besonders irrationale Zahl ? - ! *goldene Zahl* ϕ !



$$\phi = \frac{A}{B} = \frac{A+B}{A} = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1,618 \dots$$

$$= 1 + \frac{B}{A} = 1 + \frac{1}{\frac{A}{B}} = 1 + \frac{1}{\phi}$$

$$\phi = 1 + \frac{1}{\phi} = \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \dots}}}$$

oder über Fibonacci-Folge

$$f_{n+1} = f_n + f_{n-1} \Rightarrow \frac{f_{n+1}}{f_n} = 1 + \frac{1}{\frac{f_n}{f_{n-1}}}$$

$$\Rightarrow \phi = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f_{n+1}}{f_n} = 1; \frac{2}{1}; \frac{3}{2}; \frac{5}{3}; \frac{8}{5}; \frac{13}{8}; \dots$$

$$f_n = 0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, \dots$$

$$\Rightarrow \tan(\alpha) = \frac{1}{\phi} = 0.618 \dots \Rightarrow \alpha \approx 31,7175 \dots^\circ$$

Quasi-Kristalle haben eine *Fernordnung*, die aber nicht periodisch ist.

AMORPHE FESTKÖRPER:

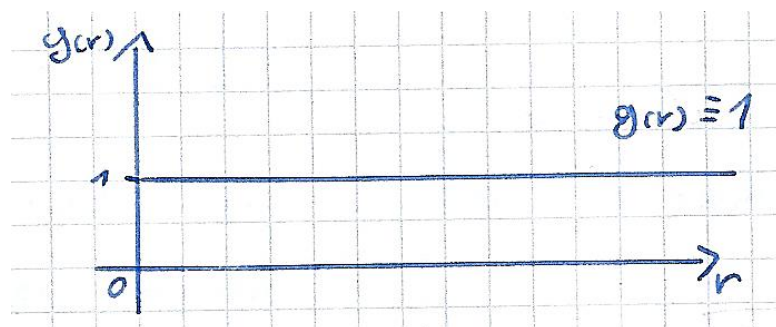
- Die Atompositionen sind nicht ganz zufällig, bzw. es gibt Korrelation.
- Es gibt *eine Nahordnung*, aber *keine Fernordnung*

Die Nahordnung kann man quantifizieren durch die *Paarverteilungsfunktion* $g(r)$

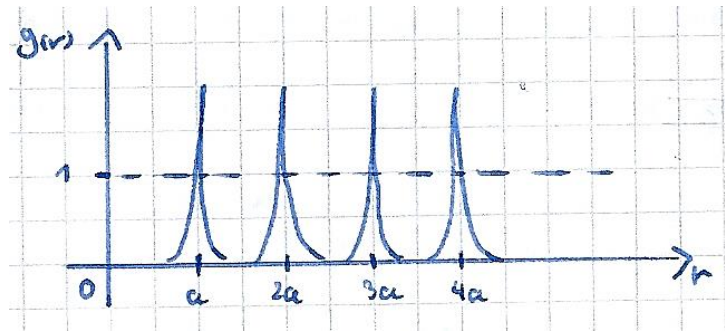
$$\text{Volumen-Teilchendichte; } [\rho] = \text{m}^{-3} \quad \tilde{\rho} \cdot g(r) \cdot 4\pi r^2 dr; \quad [g] = 1$$

sei die (mittlere) Teilchenzahl in einer Kugelschale mit Radius r und Dicke dr wenn bei $r = 0$ bereits ein Teilchen sitzt.

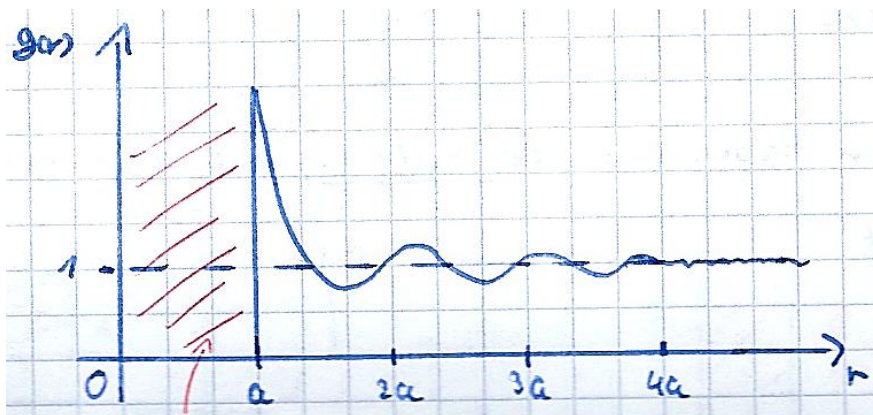
BEISPIEL: streng zufällige homogene Verteilung



BEISPIEL: 1D-Kette mit Periode a



BEISPIEL: amorpher Festkörper aus harten Kugeln mit Radius R , $a = 2R$



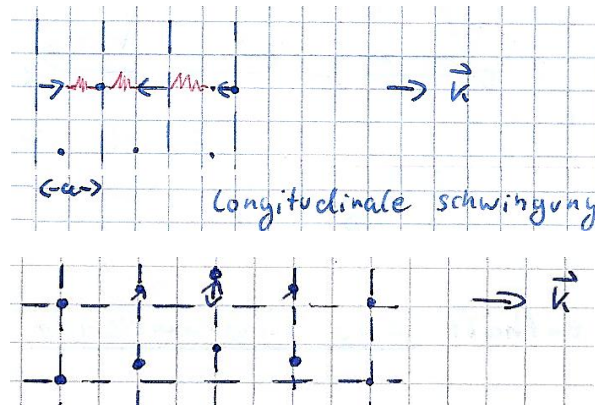
hier kann keine harte Kugel sein

⇒ Beugungsbild zeigt schwach ausgeprägte Ringe um die 0-te Ordnung.

2. DIE DYNAMIK DES KRISTALLGITTERS

2.1. PHONONEN UND IHRE DISPERSIONSRELATION

1D-MODELL, EINATOMIGE BASIS:



2 transversale Schwingungen

$$M\ddot{u}_n = D((u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1})) = D(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})$$

D kann für longitudinal/transversal verschieden sein.

ANSATZ:

$$u_n = u \cdot e^{ika \cdot n} \cdot e^{-i\omega t}$$

$$\Rightarrow -\omega^2 m u e^{ikan} e^{-i\omega t} = D(u e^{ikan} e^{-i\omega t} e^{ika} - 2u e^{ikan} e^{-i\omega t} + u e^{ikan} e^{-i\omega t} e^{-ika})$$

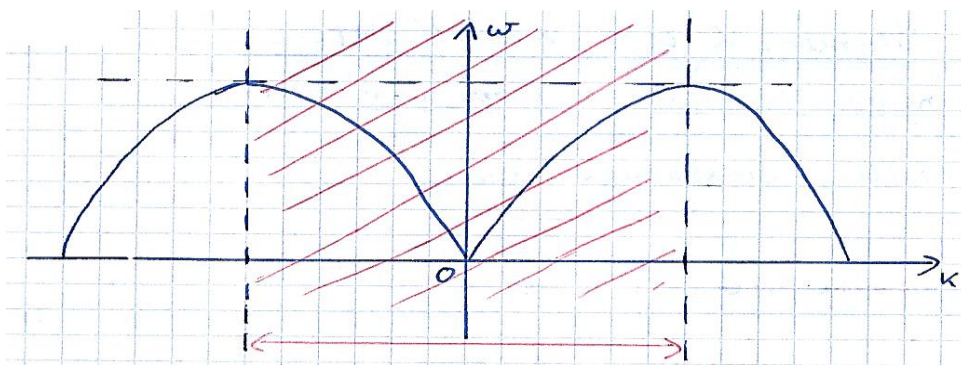
$$\omega^2 = \frac{D}{M} (2 - (e^{ika} + e^{-ika})) = 2 \frac{D}{M} (1 - \cos(ka)) = 4 \frac{D}{M} \sin^2\left(\frac{1}{2}ka\right)$$

$$\Rightarrow \omega = (+ -) 2 \sqrt{\frac{D}{M}} \left| \sin\left(\frac{1}{2}ka\right) \right|$$

+ wegen $k \rightarrow -k$ Symmetrie

PHONON-DISPERSIONSRELATION

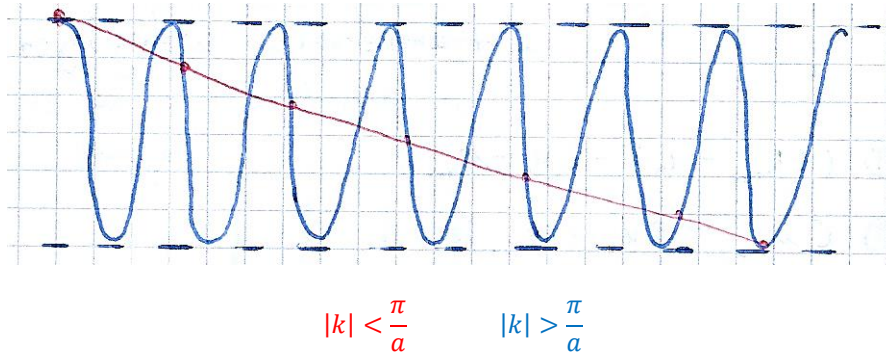
GRAPHISCH:



1.Brillouin-Zone (=Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters)

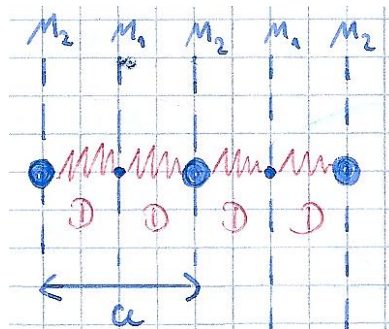
Für $|k| \ll \frac{\pi}{a} \Rightarrow \frac{\omega}{k} = \text{const.} = \sqrt{\frac{D}{M}} a = \text{Schallgeschwindigkeit}$

Die 1. Brillouin-Zone enthält *alle Information*



Physikalisch ist die Auslenkung *nur an* den Gitterpunkten *relevant!* *Phononen* sind die Quanten der klassischen (harmonischen) Gitterschwingungen.

1D-MODELL, ZWEIATOMIGE BASIS:

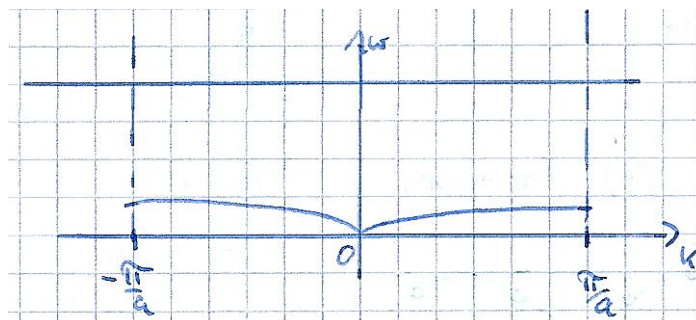


... (längere Rechnung)

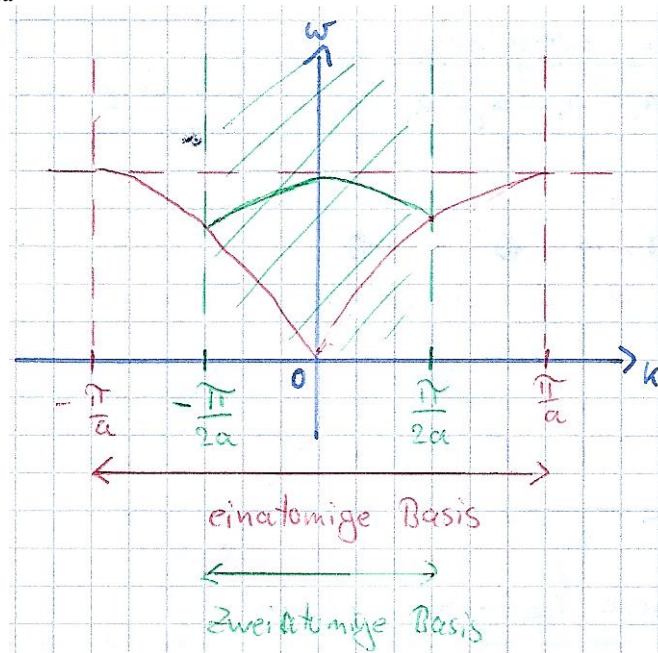
$$\Rightarrow \omega^2 = D \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \cdot \sin^2 \left(\frac{1}{2} ka \right)}$$

VERANSCHAULICHUNGEN:

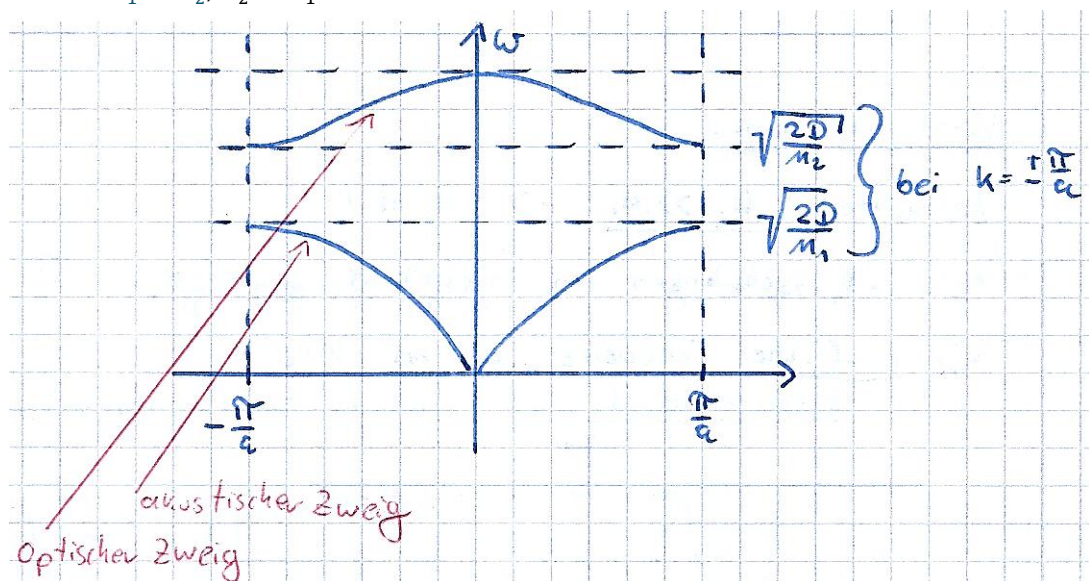
- Betrachte $M_2 \gg M_1 \Rightarrow M_2$ fest: alle M_1 schwingen im Gleichtakt gegen $M_2 \Rightarrow$ *endliche* Frequenz ω bei $k = 0$.



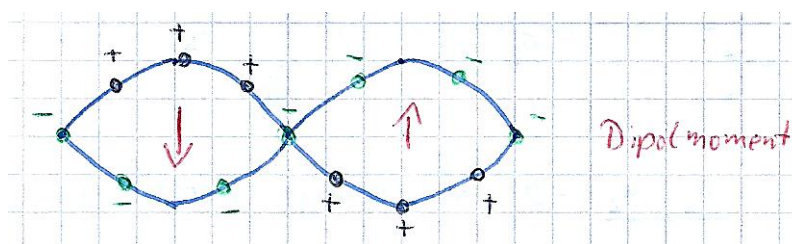
- Betrachte $M_1 = M_2 \Rightarrow$ wie einatomige Kette nur $a \rightarrow 2a$ (nicht-primitive Einheitszelle) $\Rightarrow$ Rand der 1. Brillouin-Zone $\frac{\pi}{a} \rightarrow \frac{\pi}{2a}$



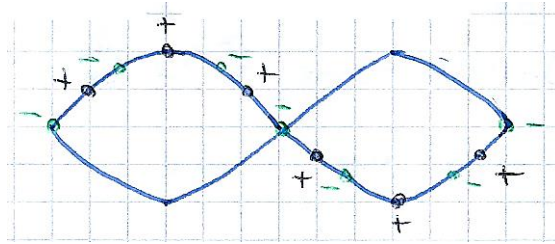
- Betrachte $M_1 \neq M_2, M_2 > M_1$



TRANSVERSAL OPTISCHE (TO) PHONONEN



TRANSVERSAL AKUSTISCHE (TA) PHONONEN



Man hat „TO,TA,LO,LA“ Phononen.

ZWEIATOMIGE BASIS:

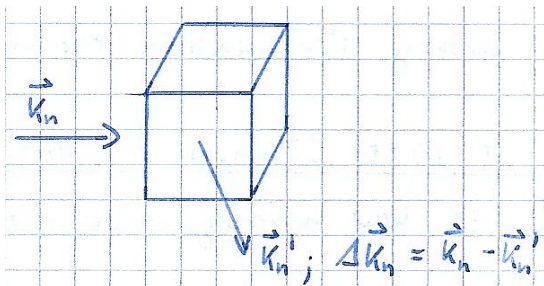
- 3 akustische Zweige (1 LA, 2TA)
- 3 optische Zweige (1 LO, 2TO)

p-ATOMIGE BASIS:

- 3 akustische Zweige
- 3p-3 optische Zweige

EXPERIMENTELLE BESTIMMUNG DER PHONONDISPERSIONSRELATION

INELASTISCHE NEUTRONENSTREUUNG:



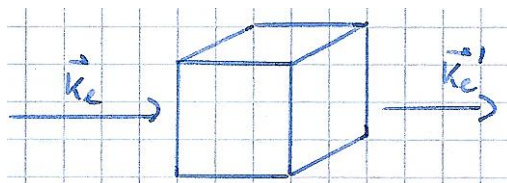
$$\Delta \vec{k}_n = \vec{G} \pm \vec{k} \quad (\text{inelastisch})$$

+ $\hat{=}$ Emission eines Phonons
 - $\hat{=}$ Absorption eines Phonons

Energiebilanz des Neutrons:

$$E' = E \pm \hbar\omega(\vec{k})$$

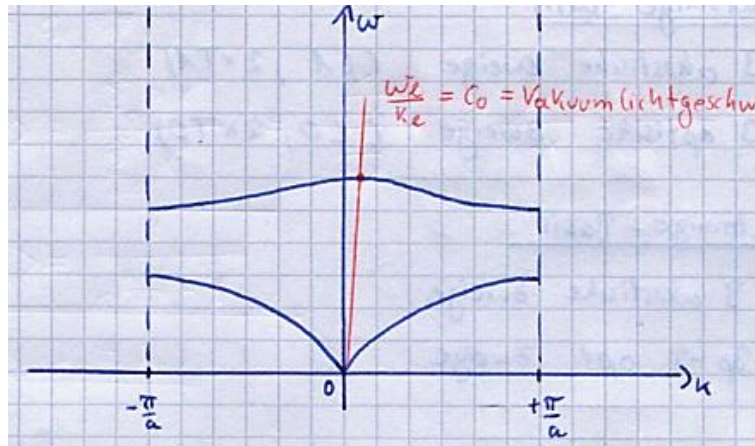
INELASTISCHE LICHTSTREUUNG (RAMAN-STREUUNG)



$$\Delta \vec{k}_l = \vec{G} \pm \vec{k}$$

= 0, denn keine Beugung

$$\hbar\omega'_l = \hbar\omega_l \pm \hbar\omega(\vec{k})$$



$$\frac{\omega_L}{k_L} = c_0 = \text{Vakuumlichtgeschwindigkeit}$$

$c_0 \gg$ Schallgeschwindigkeit $\Rightarrow$ Photon k_L sehr klein $\Rightarrow$ *messte* näherungsweise $\omega(\vec{k} = 0)$

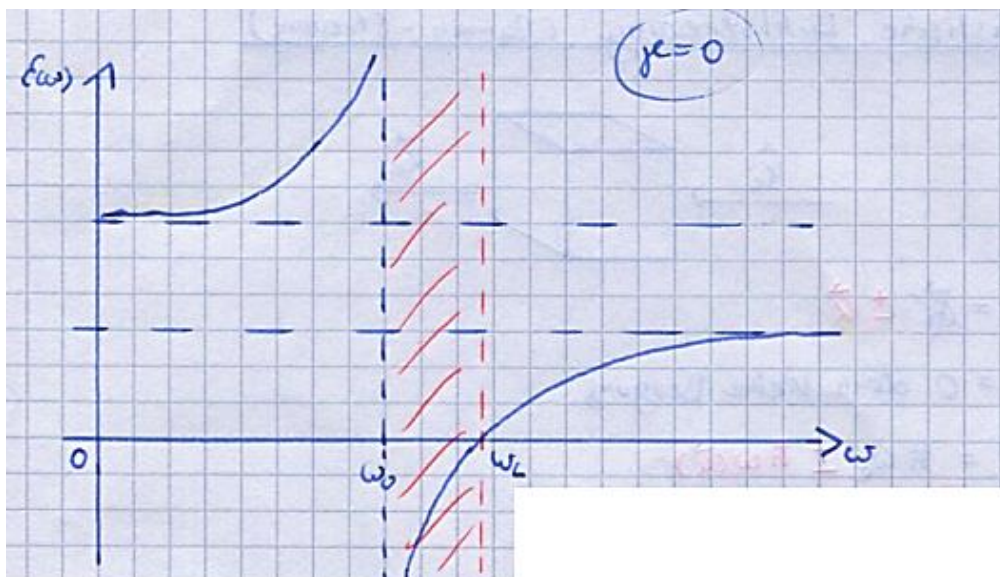
(Analog Brillouin-Streuung für akustische Phononen.)

ELASTISCHE WECHSELWIRKUNG MIT LICHT (TRANSMISSION, REFLEXION)

Wegen $|\vec{k}_L| \ll \frac{\pi}{a} \Rightarrow$ Wechselwirkung näherungsweise mit optischen Phononen bei $\vec{k} = 0 \hat{=} \text{homogene Anregung im Ortsraum} \Rightarrow \text{Lorentz-Oszillator-Modell (Siehe Klassische Experimentalphysik II + III)}$

$\omega_0 \hat{=} \text{optische Phononenergie bei } \vec{k} = 0 \Rightarrow \text{optische dielektrische Funktion } \epsilon(\omega)$

$$\epsilon\left(\underset{\text{Licht } \omega}{\omega}\right) = \epsilon_b \left(1 + \frac{\frac{f}{\epsilon_b}}{\omega_0^2 - \omega^2 - fi\gamma\omega} \right)$$



keine optische Wellenausbreitung $\Rightarrow$ Reflexion = 100%

ω_L : longitudinal Frequenz mit $\epsilon(\omega) = 0 \Rightarrow \text{div } \vec{D} = 0 = \text{div } (\epsilon \vec{E})$ auch für longitudinale Polarisation erfüllt.

2.2 SPEZIFISCHE WÄRME DES KRISTALLGITTERS

In der Festkörperphysik interessiert man sich oft für die Temperaturabhängigkeit von Größen, d.h. für den thermischen Erwartungswert.

Hier innere Energie $U(T) \Rightarrow$ spezifische Wärme

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$$

$\Rightarrow$ siehe klassische Experimentalphysik III

ERINNERUNG:

Würfel: $\langle A \rangle$ Erwartungswert Augenzahl

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{n=1}^6 A_n \cdot p_n}{\sum_{n=1}^6 p_n} = 3$$

$$A_n = 1, 2, 3, 4, 5, 6 \quad p_n = \text{const.}$$

Physik:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n A_n \cdot e^{-\frac{E_n}{k_B T}}}{\sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}}}$$

$e^{-\frac{E_n}{k_B T}}$: Boltzmann-Faktor $\sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}}$: „Zustandssumme“ $\hat{=}$ Normierung

BEISPIEL: Erwartungswert Zahl der Phononen $n_{\vec{k}}$ bei Wellenvektor $\vec{k}$

$$\langle n_{\vec{k}} \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \cdot e^{-\frac{n \cdot \hbar \omega_{\vec{k}}}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n \cdot \hbar \omega_{\vec{k}}}{k_B T}}}$$

mit $X := e^{-\frac{\hbar \omega_{\vec{k}}}{k_B T}}$

$$= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \cdot X^n}{\sum_{n=0}^{\infty} X^n} = \frac{\frac{x}{(1-x)^2}}{\frac{1}{1-x}} = \frac{x}{1-x} = \frac{1}{x^{-1} - 1}$$

$$\Rightarrow \langle n_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_{\vec{k}}}{k_B T}} - 1}$$

Bose-Faktor

EINSTEIN-MODELL

Näherungen:

- Berücksichtige nur optische Phononen
- Dispersionslos, d.h. $\omega(\vec{k}) = \omega_{\vec{k}} = \omega_0 = \text{const.}$
- Polarisationsunabhängig

$$\Rightarrow \langle U \rangle = \left\langle \sum_{\substack{\vec{k}, \sigma \\ \text{3 Pol.}}} n_{\vec{k}} \cdot \hbar \omega_{\vec{k}} \right\rangle = 3 \cdot \hbar \omega_0 \cdot \langle n_{\vec{k}} \rangle \cdot \left(\sum_{\vec{k}} \right)_{\substack{\text{ } \\ \text{:=N}}}$$

$N \hat{=}$ Zahl der möglichen Werte von $\vec{k}$

$$= 3 \cdot N \cdot \hbar \omega_0 \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}} - 1} = \langle U \rangle$$

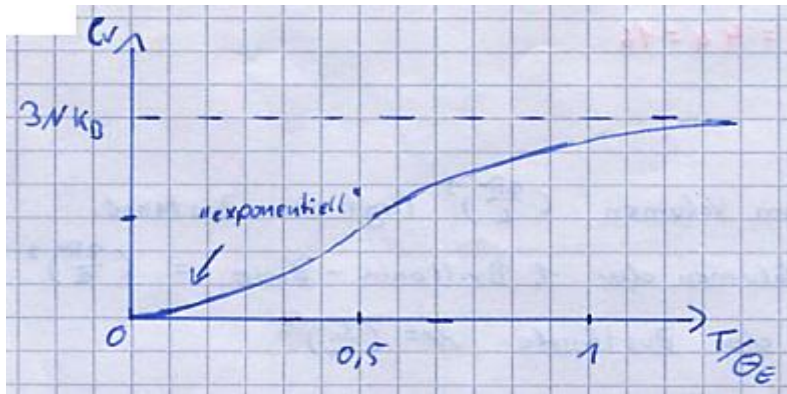
mit $\Theta_E := \frac{\hbar \omega_0}{k_B} \hat{=}$ Einstein-Temperatur

$$\Rightarrow C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3 \cdot N \cdot \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 k_B \cdot \frac{e^{\frac{\Theta_E}{T}}}{\left(e^{\frac{\Theta_E}{T}} - 1 \right)^2}$$

$$\Rightarrow C_V(T \rightarrow 0) = 0$$

$\Rightarrow C_V(T \rightarrow \infty) = 3Nk_B \hat{=}$ klassischer Grenzfall bzw. *Gesetz von Dulong-Petit*

GRAPHISCH:



Für einen unendlich großen Kristall ist $N = \infty$. Was ist $N = \sum_{\vec{k}}$ für einen endlichen Kristall?

Wir hatten in 1D

$$u(n \cdot a) = u_n = u e^{i k n a} e^{-i \omega t}$$

Fordere periodische Randbedingung, d.h.

$$u(n \cdot a + L) = u(n \cdot a)$$

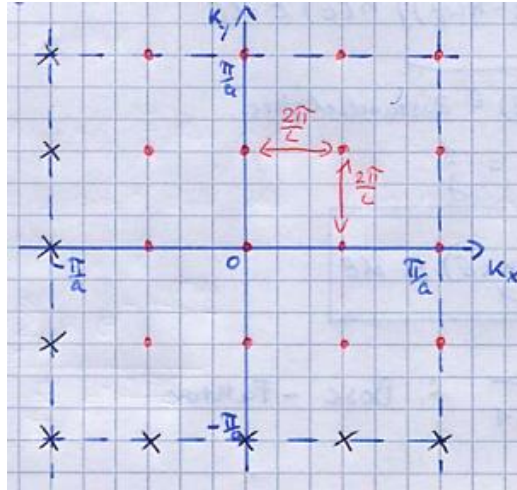
mit L : Länge des Kristalls <Kristallbild>

$$\Rightarrow e^{ikL} = 1$$

$$\Rightarrow k = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{2\pi}{L}, \dots, + \frac{M\pi}{L}$$

mit M : gerade, $M = \frac{L}{a}$

oder übertragen auf 2D



$$\frac{L}{a} = 4 \Rightarrow 4 \cdot 4 = 16$$

3D:

- Im $\vec{k}$ -Raum-Volumen $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ liegt ein Zustand.
- Gesamtes Volumen der 1. Brillouin-Zone = $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$
- $\Rightarrow$ Zahl der Zustände $N = \left(\frac{L}{a}\right)^3$

DEBEYE-MODELL

NÄHERUNGEN:

- Berücksichtige nur akustische Phononen
- Nähere Dispersion $\omega_{\vec{k}} = \omega(\vec{k}) = \omega(k) = v^l \cdot k$
- Polarisationsunabhängigkeit

$$U = \left\langle \sum_{\vec{k}, \sigma} n_{\vec{k}} \cdot \hbar \omega_{\vec{k}} \right\rangle = 3 \cdot \sum_{\vec{k}} \langle n_{\vec{k}} \rangle \cdot \hbar \omega_{\vec{k}} = 3 \cdot \sum_{\vec{k}} \langle n_{\vec{k}} \rangle \cdot \hbar \omega_{\vec{k}} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \delta(E - \hbar \omega_{\vec{k}}) \cdot dE}_{=1}$$

$$= 3 \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\vec{k}} (\langle n_{\vec{k}} \rangle \hbar \omega_{\vec{k}} \cdot \delta(E - \hbar \omega_{\vec{k}})) dE = 3 \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\left(\sum_{\vec{k}} \delta(E - \hbar \omega_{\vec{k}}) \right)}_{=: D(E) \hat{=} \text{Zustandsdichte}} n(E) \cdot E \cdot dE$$

^l v : Schallgeschwindigkeit

^{ll} ! Nur Summanden mit $\hbar \omega_{\vec{k}} = E$ sind von Null verschieden!

$$\Rightarrow U = 3 \int_{-\infty}^{\infty} D(E) \cdot n(E) \cdot E \cdot dE$$

$$N(E) = \frac{1}{e^{\frac{E}{k_B T}} - 1} \hat{=} \text{Bose-Faktor}$$

ZUSTANDSDICHTE

MATHEMATISCH:

$$D(E) = \sum_{\vec{k}} \delta(E - \hbar\omega_{\vec{k}})$$

$$\approx \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \cdot \int \delta(E - \hbar\omega_{\vec{k}}) \cdot d^3k$$

(makroskopischer Festkörper, d.h. $L \gg a$)

ANSCHAULICH:

$$\int_0^E D(\tilde{E}) d\tilde{E} \hat{=} \text{Zahl der Zustände mit Energien } [0, E] =: N(E)$$

$$N(E) = \frac{\frac{4}{3}\pi k^3(E)}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$$

Dreisatz – mit $E = \hbar\omega_{\vec{k}} = \hbar vk$ folgt:

$$= \frac{4}{3}\pi \left(\frac{E}{\hbar v}\right)^3 \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{-3} = \frac{V}{3 \cdot 2 \cdot \pi^2 \hbar^3 v^3} E^3$$

$$\Rightarrow D(E) = \frac{dN}{dE}$$

$$\Rightarrow D(E) = \frac{V}{2\pi^2 \hbar^3 v^3} E^{21} \sim E^2$$

ZUSTANDSDICHTE DER AKUSTISCHEN PHONONEN IN 3D

! $\exists$ maximales $k \Rightarrow$ maximales E !

Zahl der Zustände: $N = \left(\frac{L}{a}\right)^3$

$$\Rightarrow N(E) \leq N ! \quad \Rightarrow \frac{V}{6\pi^2 \hbar^3 v^3} E^3 \leq \left(\frac{L}{a}\right)^3 \quad L^3 = V$$

$$\Rightarrow E_{\max} = \hbar \cdot \frac{1}{a} \cdot (6\pi^2 \cdot v^3)^{\frac{1}{3}} = \hbar\omega_{\max} = \hbar vk_{\max}$$

$$\Rightarrow k_{\max} = \frac{(6\pi^2)^{\frac{1}{3}}}{a} \approx 0,68 \cdot \frac{\pi}{a} < \frac{\pi}{a}$$

¹ formal $\cdot \theta(E)$

$k_{max} = k_D \hat{=} \text{Debye-Wellenvektor}$ genannt

$$U = 3 \cdot \frac{V}{2\pi^2 \hbar^3 v^3} \cdot \int_0^{E_{max}} \frac{E^3}{e^{\frac{E}{k_B T}} - 1} dE \quad (*)$$

Substitution mit $x := \frac{E}{k_B T} \Rightarrow dE = k_B T$:

$$\Rightarrow U = 3 \cdot \frac{V}{2\pi^2 \hbar^3 v^3} (k_B T)^4 \cdot \int_0^{x_{max}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

GRENZFALL:

$$T \rightarrow 0 \Rightarrow x_{max} \rightarrow \infty$$

mit $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$

$$\Rightarrow U = \frac{9\pi^4}{15} N k_B T \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

mit der *Debye-Temperatur* θ_D

$$\hbar \omega_{max} =: k_B \theta_D$$

$$\Rightarrow \theta_D = \frac{\hbar v}{k_B} \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}$$

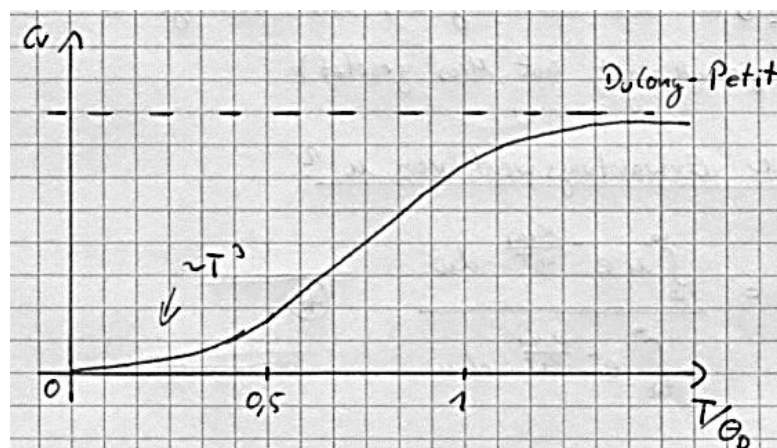
typische Werte liegen bei 100 – 400 K

$$\Rightarrow C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v = \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

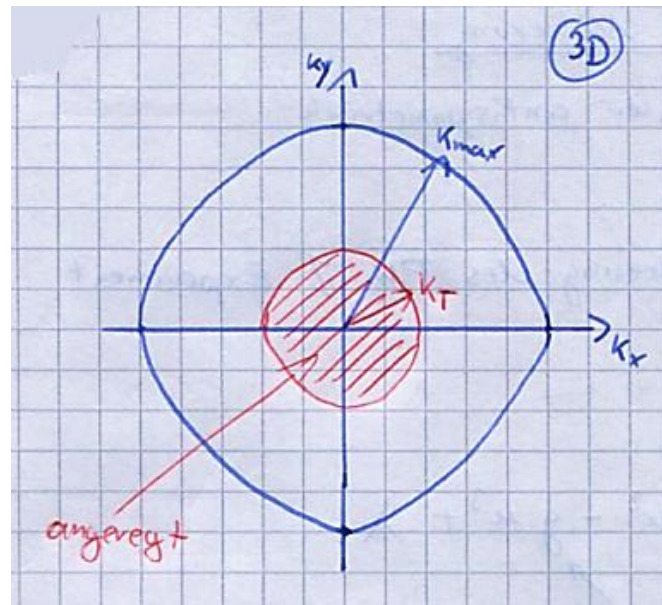
Debeyesches T³-Gesetz ($T \rightarrow 0$), analog zum Stefan-Boltzmann-Gesetz

Für beliebige Temperaturen kann (*) nur numerisch gelöst werden.

GRAFISCH:



„ANSCHAULICH“:



$$k_B T \Rightarrow \hbar \omega_T = k_B T \Rightarrow \hbar \omega_T = \hbar v k_T$$

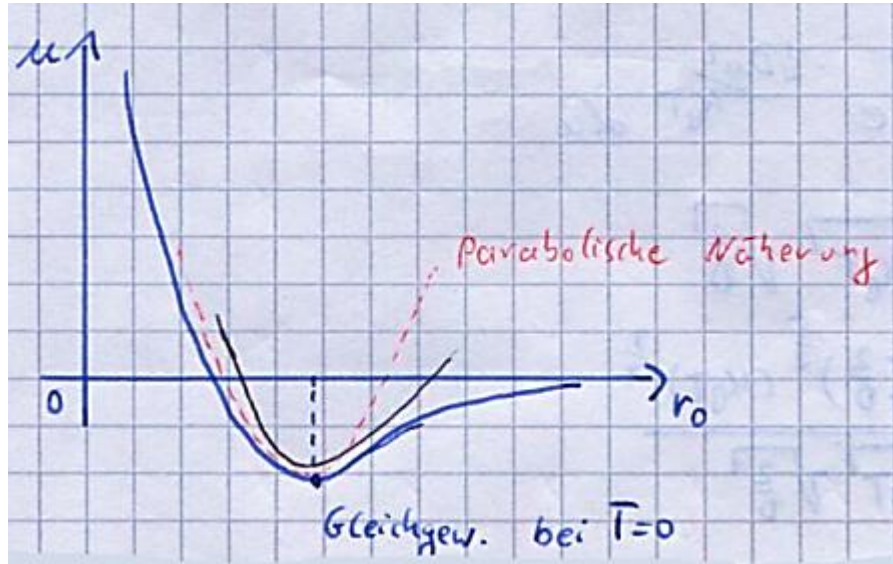
$$\Rightarrow U \sim k_B T \left(\frac{k_T}{k_{\max}} \right)^3 \sim k_B T \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

$$\Rightarrow C_v \sim T^3$$

2.3 THERMISCHE AUSDEHNUNG

ERINNERUNG:

Energie eines Atoms/Ions U



$U = \frac{1}{2}Du^2$ mit der Auslenkung aus der Ruhelage u (Energienullpunkt auf $U(0)$ gesetzt).

THERMISCHER ERWARTUNGSWERT VON U ?

$$\langle u \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} u \cdot e^{-\frac{U(u)}{k_B T}} du}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{U(u)}{k_B T}} du} \quad (*)$$

$U(u)$ IN PARABOLISCHER NÄHERUNG

- Integrand im Zähler antisymmetrisch
- $\langle u \rangle = 0$
- keine Längenänderung des Festkörpers *BLITZ* Experiment

BESSERE NÄHERUNG

$$U(u) = \frac{1}{2}Du^2 - \underset{>0 \text{ im Bild}}{g} \cdot u^3 + \dots$$

Zähler von (*)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} u \cdot e^{-\frac{U(u)}{k_B T}} du &\stackrel{\substack{\text{e-Fkt. entwickelt} \\ \text{OK für } T \rightarrow \infty}}{\approx} \int_{-\infty}^{\infty} u \cdot e^{-\frac{\frac{1}{2}Du^2}{k_B T}} \cdot \left(1 + \frac{1}{k_B T} g u^3 + \dots\right) du \\ &= \frac{g}{k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} u^4 e^{-\frac{\frac{1}{2}Du^2}{k_B T}} du = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} \cdot g \cdot \left(\frac{2}{D}\right)^{\frac{5}{2}} \cdot (k_B T)^{\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

Nenner von (*)

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{U(u)}{k_B T}} du \approx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\frac{1}{2} D u^2}{k_B T}} du = \sqrt{\pi} \cdot \sqrt{k_B T} \cdot \sqrt{\frac{2}{D}}$$

$$\Rightarrow \langle u \rangle = \frac{\frac{3}{4} \sqrt{\pi} \cdot g \cdot \left(\frac{2}{D}\right)^{\frac{5}{2}} \cdot (k_B T)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi} \cdot \sqrt{k_B T} \cdot \sqrt{\frac{2}{D}}}$$

$$\Rightarrow \langle u \rangle = \frac{3}{4} \cdot g \cdot \left(\frac{2}{D}\right)^2 k_B T \sim T$$

Anharmonizität g : $g > 0$: Expansion $g < 0$: Kontraktion

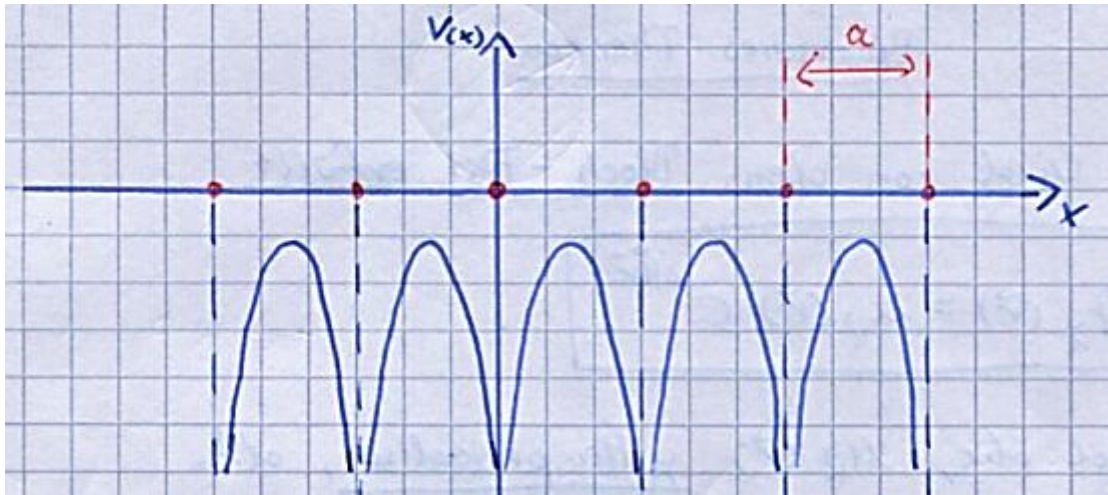
3. ELEKTRONISCHE ENERGIEBÄNDER IM FESTKÖRPER

NÄHERUNG: Vernachlässige die Wechselwirkung der e^- untereinander

$\Rightarrow e^-$ bewegen sich im Potential der Kerne

$$\Rightarrow \hat{H}\psi = E\psi \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$$

EINDIMENSIONAL:



Schwieriges Problem! Können wir die Gitterperiodizität ausnutzen?

3.1 DAS BLOCH-THEOREM

Wir definieren den *Translationsoperator* $\hat{T}$

$$\hat{T}\psi(\vec{r}) := \psi(\vec{r} + \vec{T})$$

$$\text{Gittertranslation } \vec{T} = u\vec{a}_1 + v\vec{a}_2 + w\vec{a}_3, u, v, w \in \mathbb{Z}$$

$$[\hat{H}, \hat{T}] = 0 \quad \forall \vec{T} \quad (\text{wegen } \hat{T}V(\vec{r}) = V(\vec{r})\hat{T})$$

$\Rightarrow \hat{H}$ und $\hat{T}$ haben ein gemeinsames Eigenfunktionssystem

EIGENWERTGLEICHUNG FÜR $\hat{T}$:

$$\hat{T}\psi(\vec{r}) = \underbrace{f(\vec{T})}_{\text{Eigenwert}} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{T})$$

$$\Rightarrow \psi(\vec{r} + \vec{T}_1 + \vec{T}_2) = f(\vec{T}_1 + \vec{T}_2)\psi(\vec{r}) = f(\vec{T}_1)\psi(\vec{r} + \vec{T}_2) = f(\vec{T}_1)f(\vec{T}_2)\psi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow f(\vec{T}_1 + \vec{T}_2) = f(\vec{T}_1)f(\vec{T}_2) \quad \forall \vec{T}_1, \vec{T}_2$$

$\Rightarrow f$ ist Exponentialfunktion in $\vec{T}$

$$\Rightarrow f(\vec{T}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{T}}$$

$i\vec{k}$ dabei zunächst mathematischer Parameter

$$\Rightarrow \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{T}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Blochsches Theorem

Diese Bedingung wird von den *Bloch-Funktionen* erfüllt

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Hierbei sind die $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ *gitterperiodisch*, d.h.

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

BEISPIEL: $V(\vec{r}) = 0$

$$\Rightarrow \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (\text{nicht normiert}) \hat{=} \text{ebene Welle}$$

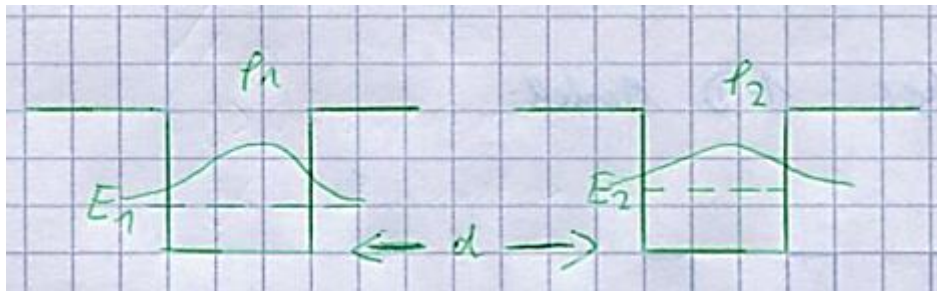
$\Rightarrow \vec{k}$ bedeutet physikalisch *Wellenvektor*

OHNE BEWEIS

Dies ist auch schon die *allgemeinste Lösung*.

3.2 „TIGHT-BINDING“-MODELL

ZUR ERINNERUNG: gekoppelte Potentialtöpfe



Schrödinger-Gleichung in Matrixschreibweise und Diagonalform:

$$\hat{H}\varphi = E\varphi$$

mit

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

Betrachte nun die Wechselwirkung zwischen Töpfen

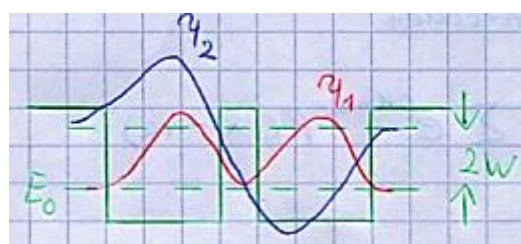
$$\Rightarrow \hat{H} \rightarrow \hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & W \\ W & E_2 \end{pmatrix}$$

$$\det(\hat{H} - E) = 0 \quad E_1 = E_2 = E_0$$

Diagonalisierung:

$$\Rightarrow (E_0 - E)^2 - W^2 = 0$$

$$\Rightarrow E_0 - E = \pm W$$



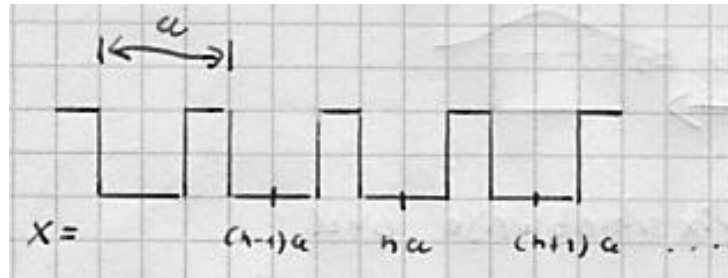
$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$$

ANALOGIEN:

- gekoppelte klassische harmonische Oszillatoren
- Hybridisierung (Chemie)

BETRACHTE EINFACHES 1D MODELL:



Die Funktionen $\phi(x - na)$ seien die Wellenfunktion der ungekoppelten Töpfe

NÄHERUNG:

Betrachte nur die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn (plausibel wegen exponentiellem Abklingen der Wellenfunktion in Barrieren)

$$\Rightarrow \hat{H} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & W & E_0 & W & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \ddots & 0 & W & E_0 & W & 0 & 0 & \ddots \\ \ddots & 0 & 0 & W & E_0 & W & 0 & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

ANSATZ:

periodische Randbedingungen, N Gitterzellen

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \sum_n e^{ikna} \cdot \phi(x - na)$$

Bloch-Theorem erfüllt?

$$\begin{aligned} \psi_k(x + a) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \sum_n e^{ikna} \cdot \phi(\underbrace{x + a - na}_{x - \underbrace{(n-1)a}_m}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \sum_m e^{ik(m+1)a} \cdot \phi(x - ma) \\ &= e^{ika} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \sum_m e^{ikma} \cdot \phi(x - ma) = e^{ika} \psi_k(x) \end{aligned}$$

Einsetzen in Schrödingergleichung (n -te Zeile)

$$E_0 \psi_k + W(e^{ika} + e^{-ika}) \cdot \psi_k = E(k) \psi_k$$

$$\Rightarrow E(k) = E_0 + 2W \cdot \cos(ka)$$

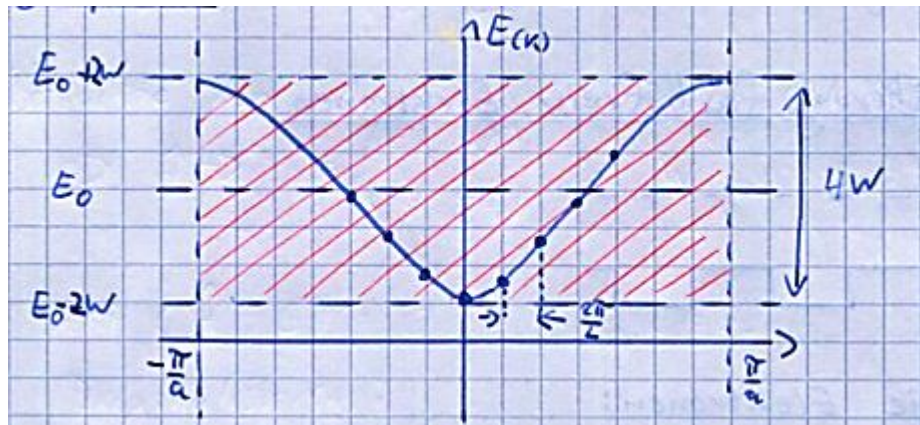
analog in *2D-Quadratgitter*:

$$E(\vec{k}) = E_0 + 2W \cdot (\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$$

bzw. in *3D*

$$E(k) = E_0 + 2W \cdot (\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a))$$

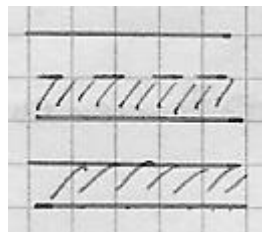
GRAPHISCH: ($W < 0$)



Im endlichen Kristall mit Kantenlänge L sind wieder (siehe Phononen) nur ganzzahlige Vielfache von $\frac{2\pi}{L}$ möglich.
Bei N Elementarzellen im Kristall und unter Berücksichtigung der Einstellung des e^- -Spins hat man $2N$ Zustände (Band)

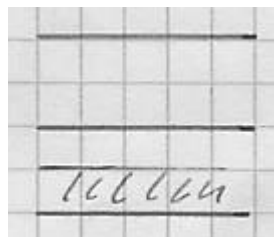
Beispiel:

1 Atom/Elementarzelle, das $1e^-$ zum Band beiträgt $\Rightarrow$ Band *halb besetzt*



$T = 0 \hat{=} \text{Metall}$

Beispiel:



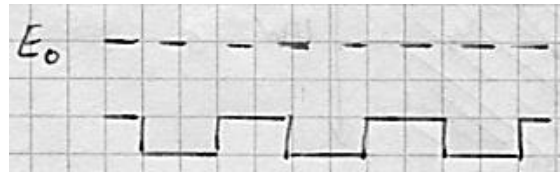
$T = 0 \hat{=} \text{Halbleiter bzw. Isolator}$

Taylorentwicklung von $E(k)$ für $|k| \ll \frac{\pi}{a}$:

$$E(k) = E_0 + 2W \cdot \cos(ka) \approx E_0 + 2W \left(1 - \frac{1}{2}(ka)^2 + \dots \right) = E'_0 - Wa^2k^2 =: E'_0 + \frac{\hbar^2}{2m_{eff}}k^2$$

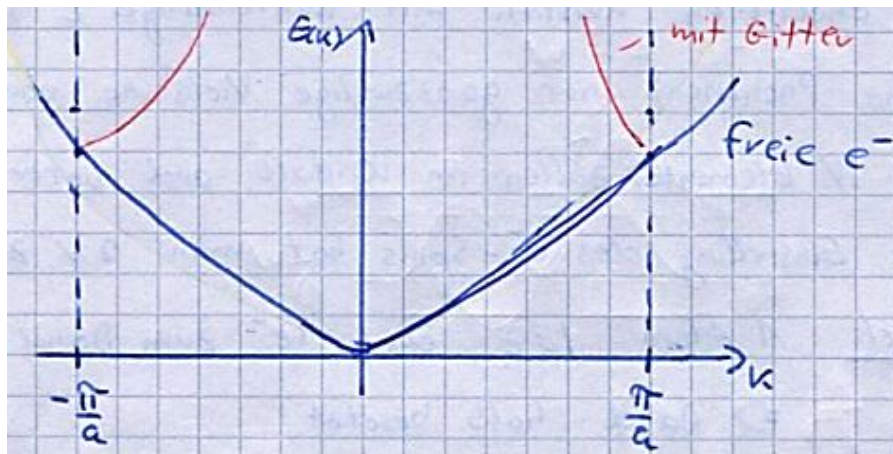
- $\rightarrow$ *effektive Masse* $m_{eff} = -\frac{\hbar^2}{2Wa^2} \sim \frac{1}{W}$
- $\rightarrow$ Masse kann positiv oder negativ sein
- $\rightarrow$ $|W|$ klein $\Rightarrow$ Masse groß, $|W|$ groß $\Rightarrow$ Masse klein

3.3 DIE NÄHERUNG FAST FREIER ELEKTRONEN



„Ganz“ freie Elektronen:

$$\psi_k(x) = e^{ikx} \quad H\psi_k(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi_k$$



$V(\vec{r})$ ist gitterperiodisch $\rightarrow$ Fourierentwicklung möglich

ZUR ERINNERUNG: 1D

$$V(x) = \sum_n \tilde{V}_n \cdot e^{\frac{i n \cdot 2\pi}{a} x} = \sum_G \tilde{V}_G \cdot e^{i G x}$$

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V(\vec{G}) \cdot e^{i \vec{G} \cdot \vec{r}}$$

$\psi_k(\vec{r})$ genügen dem Blochschen Theorem, $u_k(\vec{r})$ ist gitterperiodisch $\Rightarrow$ Fourierreihenentwicklung

$$u_k(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \tilde{u}_k(\vec{G}) \cdot e^{i \vec{G} \cdot \vec{r}}$$

$$\Rightarrow \psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot \sum_{\vec{G}} \tilde{u}_{\vec{G}}(\vec{k}) e^{i \vec{G} \cdot \vec{r}}$$

Eigenfunktion des „leeren“ Kristalls:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_0 \right) \psi_k^0(\vec{r}) = E_0 \psi_k^0(\vec{r})$$

$$\text{mit } E_0(k) = V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$\psi_k(\vec{r})$ IN SCHRÖDINGERGLEICHUNG EINSETZEN:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \sum_{\vec{G}''} \tilde{V}(\vec{G}'') e^{i\vec{G}'' \cdot \vec{r}} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot \sum_{\vec{G}'} \tilde{u}_k(\vec{G}') e^{i\vec{G}' \cdot \vec{r}} = E(k) \cdot \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot \sum_{\vec{G}'} \tilde{u}_k(\vec{G}') e^{i\vec{G}' \cdot \vec{r}} \\ & \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{V}} \cdot \sum_{\vec{G}'} \left(\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G}')^2 - E(k) \right) \tilde{u}_k(\vec{G}') - e^{i(\vec{k} + \vec{G}') \cdot \vec{r}} + \frac{1}{\sqrt{V}} \cdot \sum_{\vec{G}''} \tilde{V}(\vec{G}'') e^{i\vec{G}'' \cdot \vec{r}} \\ & \quad \cdot \sum_{\vec{G}'} \tilde{u}_k(\vec{G}') \cdot e^{i(\vec{k} + \vec{G}') \cdot \vec{r}} = 0 \end{aligned}$$

- multipliziere $\frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}}$
- integriere $\int_{-\infty}^{\infty} d^3x$, mit $\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} d^3x = \delta(\vec{G})(2\pi)^3$

$$\Rightarrow \left(\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2 - E(k) \right) \cdot \tilde{u}_k(\vec{G}) + \sum_{\vec{G}'} \tilde{V}(\vec{G} - \vec{G}') \tilde{u}_k(\vec{G}') = 0$$

Hauptgleichung zur Bestimmung der $\tilde{u}_k(\vec{G})$

JEDE NÄHERUNG: $\tilde{V}(\vec{G})$ und $\tilde{u}_k(\vec{G})$ fallen ab für große $|\vec{G}|$, hoffentlich schnell

$$\begin{aligned} & \Rightarrow \left(\frac{\hbar^2}{2m} \cdot (\vec{k} + \vec{G})^2 - \underbrace{E(k)}_{E_0(k) = \frac{V_0}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \right) \cdot \tilde{\mu}_k(\vec{G}) + \tilde{V}(0) \tilde{\mu}_k(\vec{G}) + \tilde{V}(\vec{G}) \tilde{\mu}_k(0) = 0 \\ & \Rightarrow \tilde{\mu}_k(\vec{G}) = \frac{\tilde{V}(\vec{G}) \tilde{\mu}_k(0)}{\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}^2 - (\vec{k} + \vec{G})^2)} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ groß für $\vec{k}^2 = (\vec{k} + \vec{G})^2$ und $\vec{G}^2 = 2\vec{k} \cdot \vec{G} \hat{=} \text{Brillouin-Beugungsbedingung} \Rightarrow$ wir beschränken uns auf $\vec{k} = \vec{k}_B$

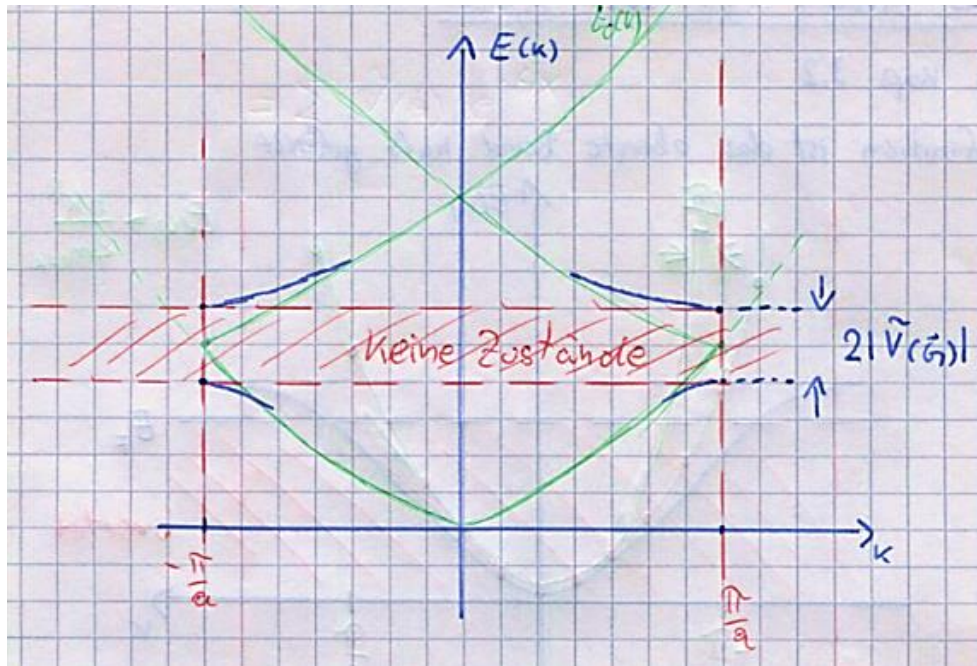
Gleichungen für die dominanten Beiträge $\tilde{\mu}_{k_B}(0), \tilde{\mu}_{k_B}(\vec{G})$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}_B^2}{2m} - E(\vec{k}_B) \right) \tilde{\mu}_{k_B}(0) + \tilde{V}(0) \tilde{\mu}_{k_B}(0) + \tilde{V}(-\vec{G}) \tilde{\mu}_{k_B}(\vec{G}) = 0 \\ & \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}_B^2}{2m} - E(\vec{k}_B) \right) \cdot \tilde{\mu}_{k_B}(\vec{G}) + \tilde{V}(\vec{G}) \tilde{\mu}_{k_B}(0) + \tilde{V}(0) \tilde{\mu}_{k_B}(\vec{G}) = 0 \\ & \Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 \vec{k}_B^2}{2m} - E(\vec{k}_B) + \tilde{V}(0) & \tilde{V}(-\vec{G}) \\ \tilde{V}(\vec{G}) & \frac{\hbar^2 \vec{k}_B^2}{2m} - E(\vec{k}_B) + \tilde{V}(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\mu}_{k_B}(0) \\ \tilde{\mu}_{k_B}(\vec{G}) \end{pmatrix} = 0 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ nichttriviale Lösung für $\det(\cdot) = 0$ mit $E_0(\vec{k}_B) = \frac{\hbar^2 \vec{k}_B^2}{2m} + \tilde{V}(0)$

$$\Rightarrow \left(E(\vec{k}_B) - E_0(\vec{k}_B) \right)^2 = |\tilde{V}(\vec{G})|^2$$

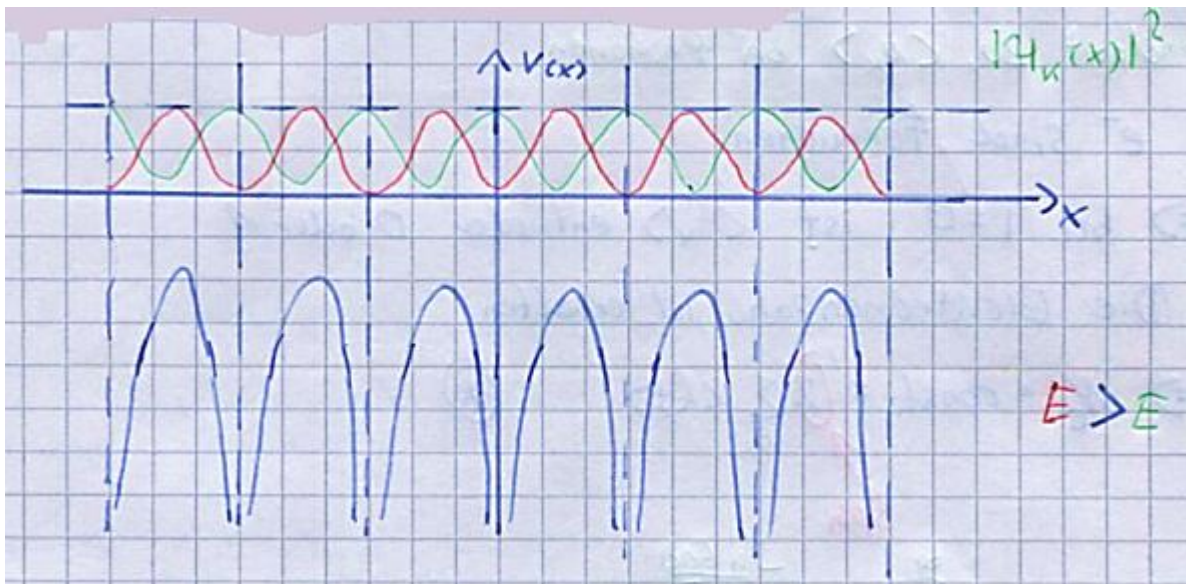
$$\Rightarrow E(\vec{k}_B) = E_0(\vec{k}_B) \pm |\tilde{V}(\vec{G})|$$



ANSCHAULICHE INTERPRETATION:

Elektron mit $k = \frac{\pi}{a}$ wird Bragg-reflektiert zu $k = -\frac{\pi}{a} \Rightarrow$ *stehende Welle*

$\Rightarrow \psi_k(x) \sim \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$ oder $\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)$

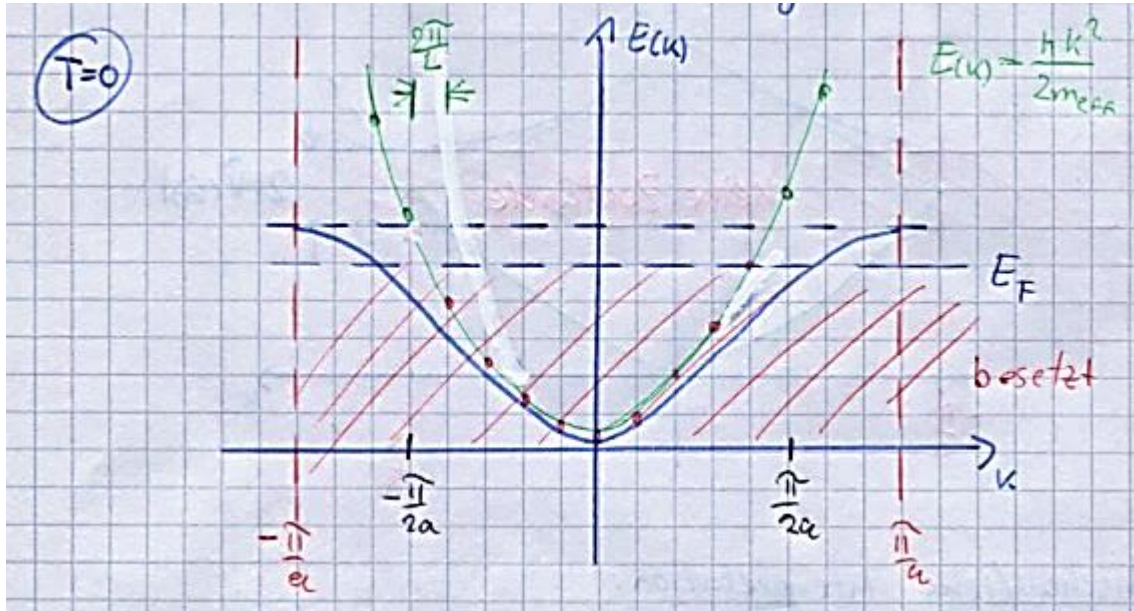


Konstruktion von Isoenergieflächen $\Rightarrow$ *Folien*

4. METALLE

4.1 DAS MODELL EFFEKTIVER MASSEN

⇒ siehe 3.2 „Tight-Binding“-Modell: per Definition ist das oberste Band halb gefüllt



E_F = Fermi-Energie bei $T = 0$

$\langle f_k \rangle$ sei der thermische Erwartungswert der Zahl der e^- bei k . Pendant zu $\langle \mu_k \rangle$ bei Phononen

! e^- sind Fermionen ⇒ bei $T = 0$ ist $\langle f_k \rangle$ entweder 0 oder 1

! Die Elektronenzahl ist erhalten ⇒ $N_e = \text{const.} = \underbrace{2}_{\text{Spin}} \cdot \sum_{\vec{k}} \langle f_{\vec{k}} \rangle$ (*)

$$\langle \mu_k \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \cdot e^{-\frac{nE(k)}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nE(k)}{k_B T}}}$$

$$\langle f_k \rangle = \frac{\sum_{f=0}^1 f \cdot e^{-\frac{fE(k)}{k_B T}}}{\sum_{f=0}^1 e^{-\frac{fE(k)}{k_B T}}}$$

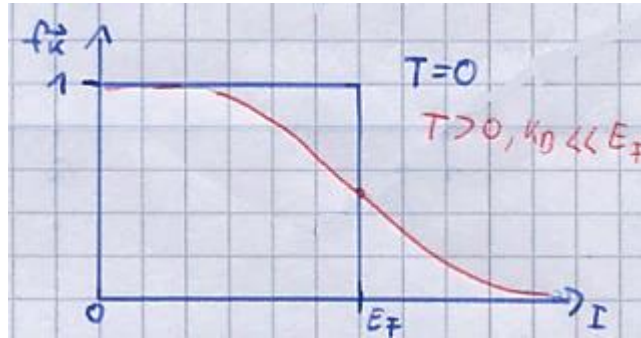
... OHNE BEWEIS:

$$\langle f_k \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E(k) - \mu}{k_B T}} + 1} =: f_{\vec{k}}$$

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E(k) - \mu}{k_B T}} - 1} =: n_{\vec{k}}$$

mit dem chemischen Potential μ , $[\mu] = J$. ! $\mu = \mu(T)$ aus Nebenbedingung (*)!

⇒ i.A. $\mu(T) \neq E_F = \mu(T = 0)$



E_F bei Metallen typischerweise einige eV:

$$T = 300K \quad \Rightarrow k_B T = 26 meV \quad \Rightarrow \frac{k_B T}{E_F} \ll 1$$

E_F kann bei Halbleitern einige meV sein, somit kann gelten: $\frac{k_B T}{E_F} > 1$

AUSARBEITUNG DER NEBENBEDINGUNG (*):

$$N_e = const. = 2 \cdot \sum_{\vec{k}} \langle f_{\vec{k}} \rangle = \int D(E) \cdot f(E) \cdot dE$$

Zustandsdichte $D(E)$ der e^- in effektiver Massennäherung und 3D:

$N(E) \hat{=}$ Anzahl der Zustände mit Energie $\in [0, E]$

$$= N_k(E) = \underbrace{2}_{\text{Spin}} \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}^{\dagger}$$

(mit $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$)

$$= 2 \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{4}{3}\pi \cdot \frac{(2mE)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3}$$

$$\Rightarrow D(E) = \frac{dN(E)}{dE} = 2 \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{4}{3}\pi \cdot \frac{(2m)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \cdot \frac{3}{2}\sqrt{E}$$

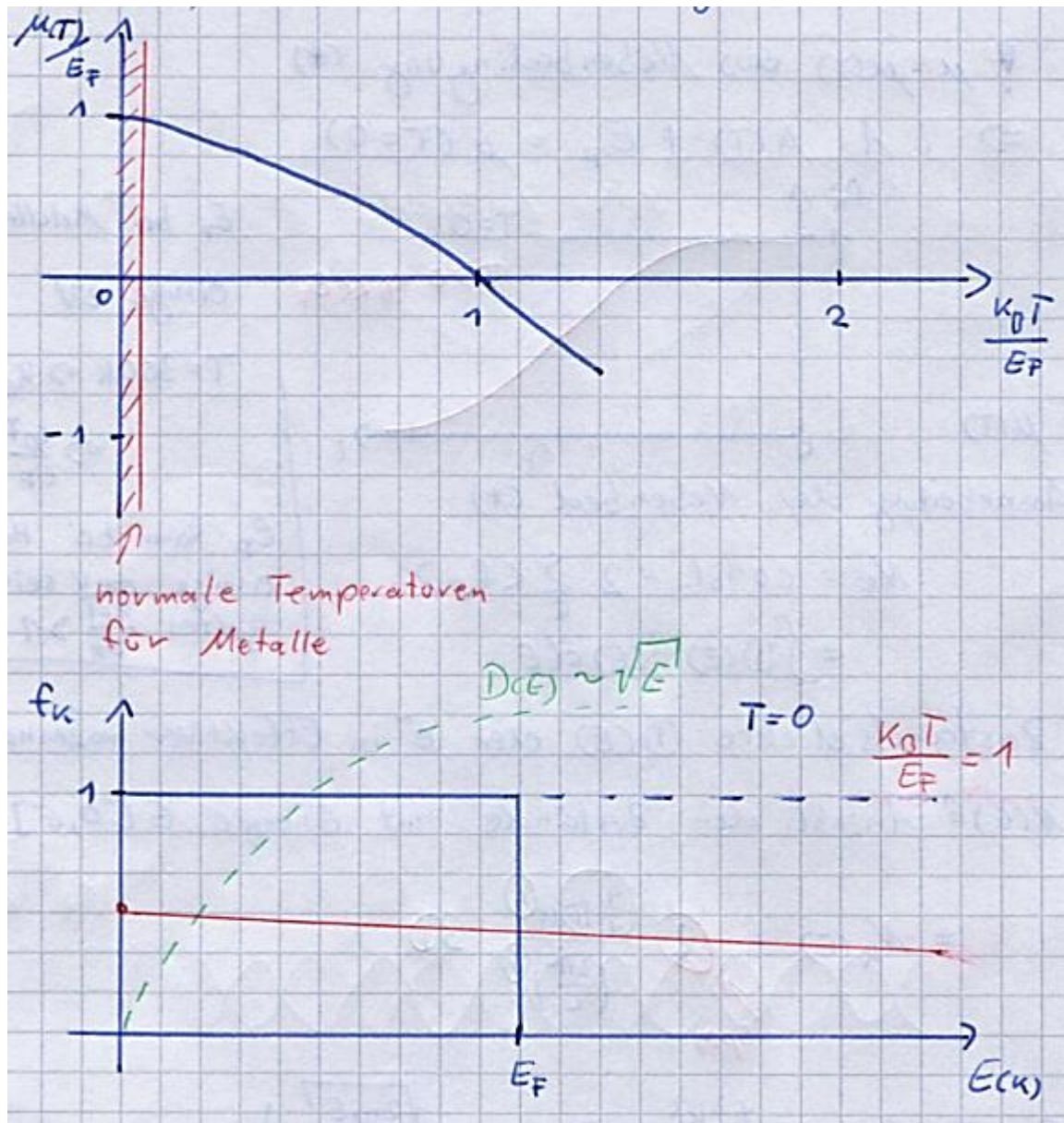
$$\Rightarrow D(E) = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \sqrt{E} \cdot \theta(E)$$

Effektivmassennäherung in 3D

$$N_e = const. = \int_0^\infty \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \sqrt{E} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E-\mu(T)}{k_B T}} + 1} dE$$

Auflösen nach $\mu(T)$ nicht analytisch möglich.

[†] 3. Potenz und $\frac{4}{3}\pi k^3$ wegen 3D



4.3 SPEZIFISCHE WÄRME DES QUANTENGASES AUS e^-

INNERE ENERGIE:

$$U = \int_0^{\infty} D(E) \cdot f(E) \cdot E \cdot dE$$

ANNAHME: $\mu(T) = \mu(0) = E_F$

$$U = \int_0^{\infty} D(E) \cdot f(E) \cdot (E - E_F) \cdot dE + E_F \cdot \underbrace{\int_0^{\infty} D(E) \cdot f(E) \cdot dE}_{\substack{= N_e \\ \neq g(T)}}$$

$$\Rightarrow C_V = \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_V = \int_0^{\infty} D(E) \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right) \cdot (E - E_F) \cdot dE$$

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \right) = - \left(\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \right)^2 \cdot e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} \cdot \left(- \frac{E - E_F}{k_B} \cdot \frac{1}{T^2} \right)$$

$$\Rightarrow C_V = D(E_F) \cdot \int_0^{\infty} (E - E_F) \cdot \frac{E - E_F}{k_B T^2} \cdot \frac{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1 \right)^2} \cdot dE$$

$k_B T \ll E_F: -\infty$

Substitution: $\frac{E-E_F}{k_B T} = x \Rightarrow dE = k_B T \cdot dx$

$$= D(E_F) \cdot k_B^2 T \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \cdot \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} \cdot dx}_{= \frac{\pi^2}{3}}$$

$$\Rightarrow C_V = D(E_F) \cdot \frac{k_B^2 \pi^2}{3} \cdot T \sim T$$

spezifische Wärme des Elektronengases bei tiefen Temperaturen

In 3D und in *Effektivmassennäherung* gilt weiterhin

$$N_e = \int_0^{\widehat{E_F}} D(E) dE \stackrel{k_B T \ll E_F}{=} \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \int_0^{E_F} \sqrt{E} \cdot dE = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{2}{3} \cdot E_F^{\frac{3}{2}}$$

$$\Rightarrow \frac{N_e}{E_F} = \frac{2}{3} \cdot \underbrace{\frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}}_{=: D(E_F)} \cdot \sqrt{E_F}$$

$$\Rightarrow D(E_F) = \frac{3}{2} \cdot \frac{N_e}{E_F}$$

$$\Rightarrow C_V = \frac{3}{2} \cdot \frac{N_e}{E_F} \cdot \frac{k_B^2 \pi^2}{3} \cdot T$$

Für die Elektronen gilt:

$$C_V = aT$$

Für die akustischen Phononen gilt:

$$C_V = bT^3$$

Daraus folgt zusammen:

$$C_V = aT + bT^3$$

$$\Rightarrow \frac{C_V}{T} = a + b \cdot T^2$$

4.4 OPTIK (DIELEKTRISCHE FUNKTION, PLASMONEN)

Im Bild freier klassischer e^- erhält man das Lorentz-Oszillatormodell ohne Rückstellkraft, also $D = 0$ oder $\Omega = 0$ (siehe Klassische Experimentalphysik II + III) $\hat{=}$ Drude-Modell

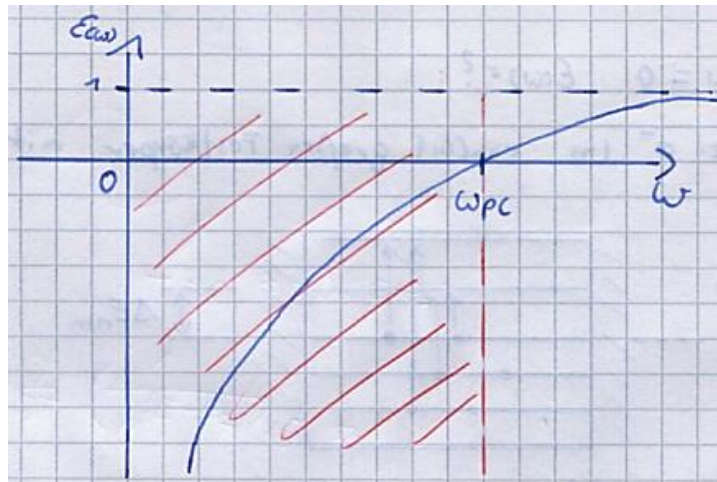
$\Rightarrow$ optische dielektrische Funktion (für $\epsilon_b = 1$, $\gamma = 0$)

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{N_e e^2}{V m \epsilon_0} \cdot \frac{1}{\Omega^2 - \omega^2}$$

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}$$

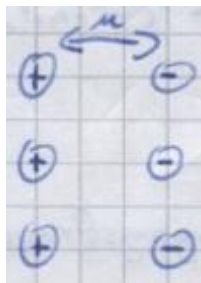
mit der Plasmafrequenz ω_{pl}

$$\omega_{pl}^2 = \frac{N_e e^2}{V m \epsilon_0}$$



keine propagierenden Wellen $\Rightarrow R = 100\%$

Ohne äußeres Feld schwingt das Elektronen-Gas gegen den positiven Ladungshintergrund mit der Plasmafrequenz.



u sei die Auslenkung aus der Ruhelage

- Dipolmoment eines $e^- = -e \cdot u$
- Polarisation $P = -\frac{N_e}{V} \cdot e u$

Mit $D = \epsilon_0 E + P = 0 \hat{=}$ kein äußeres Feld

$$\Rightarrow E = -\frac{P}{\epsilon_0} = +\frac{N_e e}{V \epsilon_0} \cdot u$$

Mit $m \cdot \ddot{u} = -e \cdot \frac{N_e e}{V \epsilon_0} \cdot u$

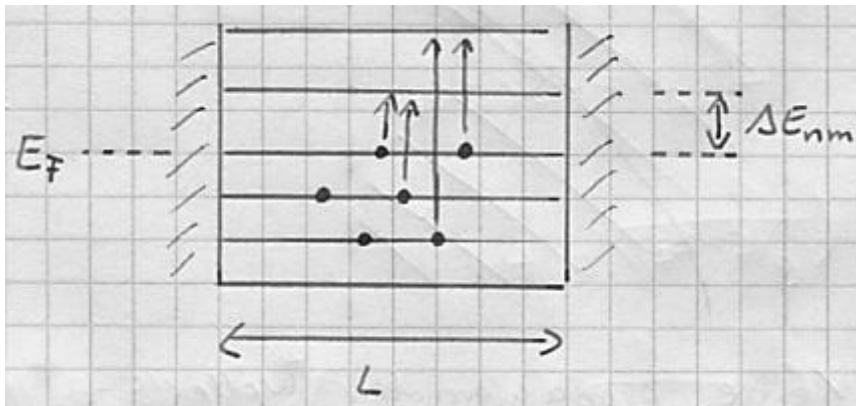
$$\Rightarrow u = u_0 \cdot \cos(\omega_{pl} \cdot t)$$

$$\Rightarrow \omega_{pl}^2 = \frac{N_e e^2}{V m \epsilon_0}$$

Die Quanten der Plasmaschwingungen heißen *Plasmonen*.

ZUR FRAGE, $\omega \rightarrow 0$:

Betrachte freie e im endlich großen Festkörper mit Kantenlänge L in $1D$



Jeder Übergang entspricht einer Lorentz-Resonanz mit Frequenz Ω_{nm} , $\hbar \Omega_{nm} = \Delta E_{nm}$

$$\Delta E_{nm} = \frac{\hbar^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2}{2m} (n^2 - m^2) \sim L^{-2} \quad n > m$$

! Für *endliches* $L \exists$ kleinste Übergangsfrequenz unterhalb derer gilt $\epsilon(\omega) > 0$

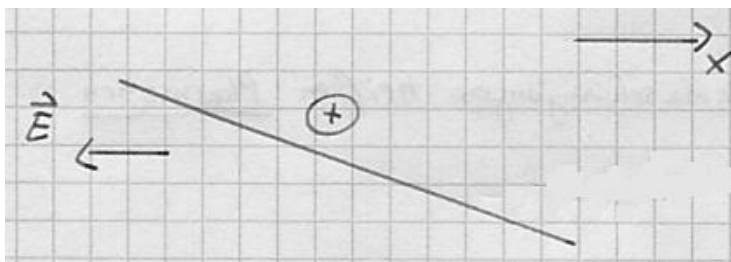
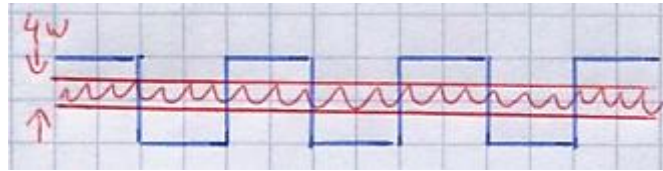
$$\Rightarrow \epsilon(0) > 0$$

! Diese Betrachtung

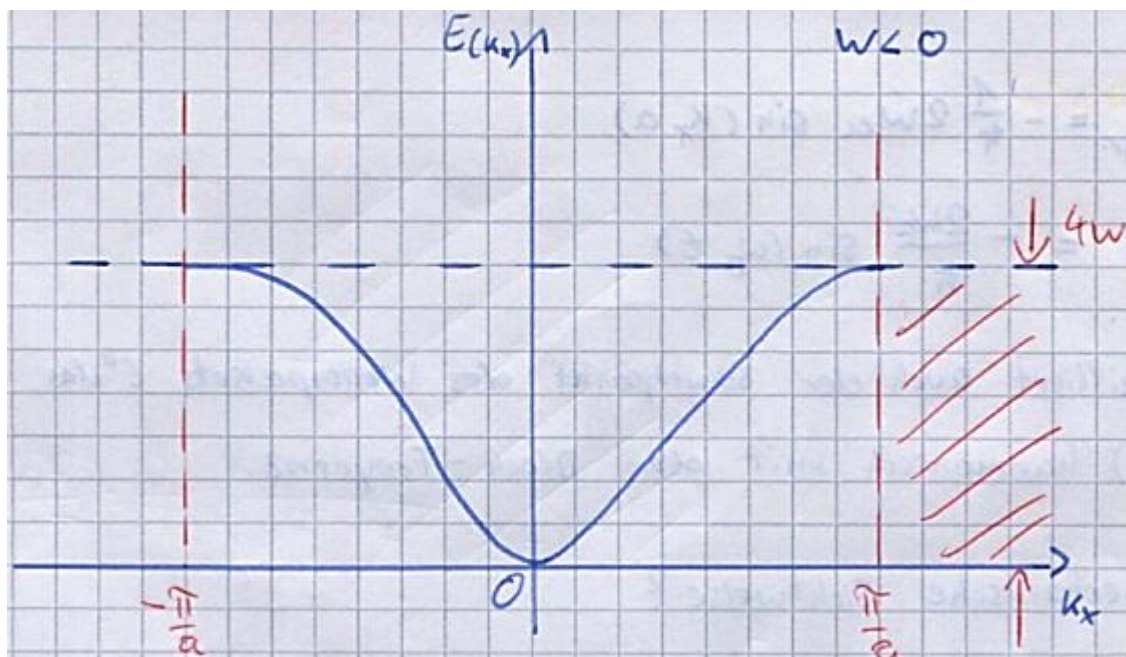
4.5 BLOCH-OSZILLATIONEN UND WANNIER-STARK-LEITER

Was passiert wenn wir ein konstantes und homogenes elektrisches Feld an einem Festkörper anlegen?

Betrachte wieder 1D-Modell



$$+e \cdot E_x \cdot x = V(x)$$



SEMIKLASSISCHE BETRACHTUNG:

$\hbar k_x$ ist Impuls des e^-

Ansatz: Impuls gemäß Newtonschem 2. Axiom

$$\Rightarrow \hbar \dot{k}_x = -eE_x \quad E_x = \text{const.}, k_x(0) = 0$$

$$\Rightarrow k_x(t) = -\frac{eE_0}{\hbar} \cdot t$$

Zum Zeitpunkt $t = \frac{T}{2}$ erreicht das e^- den Rand der 1. Brillouin-Zone bei $k_x = \frac{\pi}{a}$ (für $E_x < 0$)

$$\frac{\pi}{a} = \frac{e|E_x|}{\hbar} \cdot \frac{T}{2}$$

⇒ Bragg-Reflektion zu $k_x = -\frac{\pi}{a}$

Nach einer weiteren Zeitspanne $\frac{T}{2}$ kehrt das e^- zu $k_x = 0$ zurück. Periode T :

$$\Rightarrow T = 2\pi \cdot \frac{\hbar}{ae|E_x|} = \frac{2\pi}{\omega_B}$$

mit der Bloch-Oszillationsfrequenz

$$\omega_B = \frac{a \cdot e \cdot |E_x|}{\hbar}$$

WIE BEWEGT SICH DAS WELLENPAKET? - Betrachte *Gruppengeschwindigkeit*:

$$v_{gr} = \frac{d\omega}{dk_x} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dk_x}$$

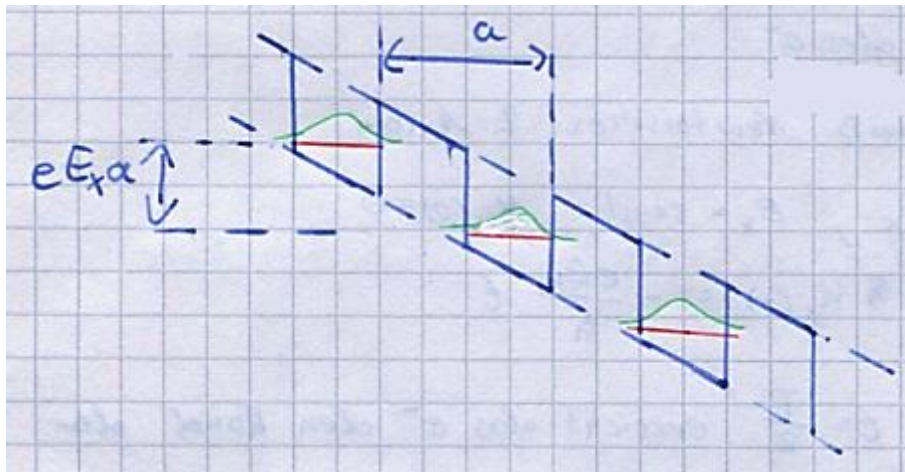
mit $E(k_x) = E_0 + 2W \cdot \cos(k_x \cdot a)$

$$v_{gr} = -\frac{1}{\hbar} \cdot 2Wa \cdot \sin(k_x \cdot a) = -\frac{2Wa}{\hbar} \cdot \sin(\omega_B \cdot t)$$

Daher oszilliert auch der Schwerpunkt des Wellenpaketes („das Elektron“) harmonisch mit der Bloch-Frequenz.

QUANTENMECHANISCHE SICHTWEISE?

Betrachte großen Abfall der potentiellen Energie über einer Einheitszelle: $eE_x \cdot a > 4W$



WANNIER-STARK-LEITER

⇒ Wieder *lokalisierte* Zustände

Bei einem Wellenpaket aus zwei benachbarten Topfwellenfunktionen tritt Schwebungsfrequenz

$$\omega_B = \frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{eE_x \cdot a}{\hbar}$$

auf. ! Gleiches Resultat wie semiklassisch!

WO IST OHMSCHES GESETZ?

Dämpfung bzw. *Streuung* spielen meist eine entscheidende Rolle.

SEMIKLASSISCH, PHÄNOMENOLOGISCH:

$$\hbar \dot{k}_x = -eE_x - \hbar \gamma k_x \quad \gamma = \frac{1}{\underbrace{\tau}_{\text{typ. Stoßzeit}}}$$

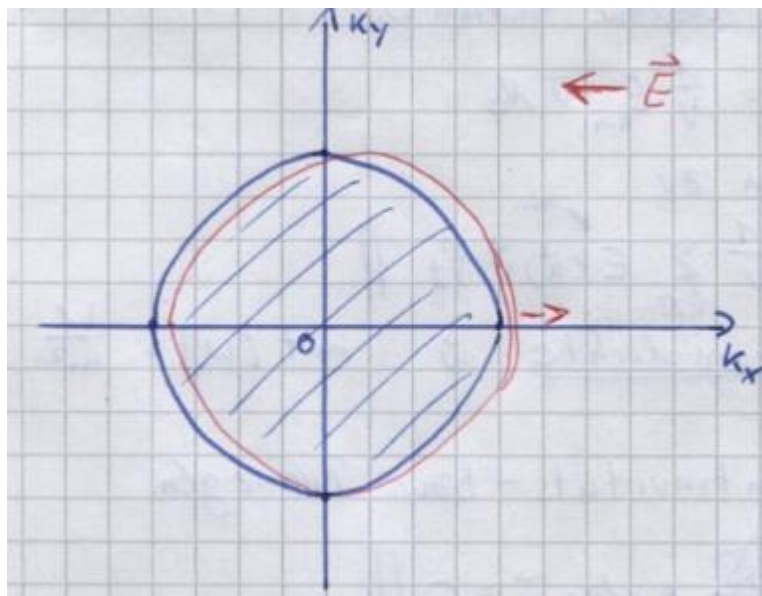
= 0 im statischen Fall

$$\Rightarrow k_x = -\frac{eE_x}{\hbar} \cdot \tau$$

Damit haben wir auch die Geschwindigkeit und die Stromdichte $\sim E_x \tau \Rightarrow$ *Ohmsches Gesetz*

3D & ELEKTRONENGAS MIT FERMI-ENERGIE E_F :

Fermi-Kugel wird leicht verschoben entlang der Achse des elektrischen Feldes:



BEISPIEL:

$$e = 1,6 \cdot 10^{-14} C \quad \hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} Js \quad E_x \approx 10^6 \frac{V}{m} = 1 \frac{V}{\mu m} \hat{=} \text{sehr groß} \quad \tau = 100 fs \text{ (typischerweise eher noch weniger)} \quad a = 0,5 nm$$

$$\Rightarrow |k_x| = \frac{eE_x}{\hbar} \tau \approx \underbrace{0,02}_{\text{winzig!}} \frac{\pi}{a}$$

4.6. KLASSISCHER TRANSPORT

Elektrische Felder, also Gradienten des elektrostatischen Potentials, wie auch Temperaturgradienten führen zu einem *Teilchentransport*. Über die Ladung der Elektronen bzw. über ihre kinetische Energie ist dies verknüpft mit einem *elektrischen Strom* und einem *Wärmestrom*.

Für eine konstante Geschwindigkeit $\vec{v}$ hätten wir:

$$\vec{j} = \rho \cdot \vec{v} = -\frac{Q}{V} \cdot \vec{v} \cdot N_e$$

Mit dem Spin σ verallgemeinern wir zu:

$$\vec{j} = -\frac{e}{V} \cdot \sum_{\vec{k}, \sigma} \vec{v} \cdot f_{\vec{k}}$$

$$\text{Stromdichte } \vec{j} \text{ mit } [j] = \frac{A}{m^2}$$

Für eine konstante Geschwindigkeit hätten wir:

$$\vec{w} = \frac{1}{V} \cdot E_{kin} \cdot \vec{v} \cdot N_e$$

Wir verallgemeinern wieder zu:

$$\vec{w} = \frac{1}{V} \cdot \sum_{\vec{k}, \sigma} E_{kin}(\vec{k}) \cdot \vec{v} \cdot f_{\vec{k}}$$

$$\text{Wärmestromdichte } \vec{w} \text{ mit } [w] = \frac{W}{m^2}$$

Es gelten die Kontinuitäts- bzw. Bilanzgleichungen

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{w} = +\vec{j} \cdot \vec{E}$$

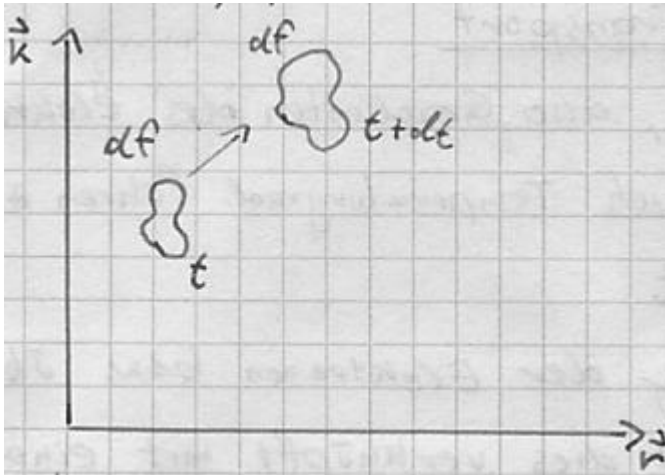
μ ist dabei die Energiedichte, $[\mu] = \frac{J}{m^3}$

BEISPIEL: $f_{\vec{k}}$ sei Gleichgewichts-Fermiverteilungsfunktion = f_0

$$\Rightarrow \vec{j} = \vec{w} = 0 \text{ (Symmetrie)}$$

$\Rightarrow$ Nichtgleichgewichtsverteilungsfunktion wichtig

? Bestimmung der $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$



Anzahl der e^- bleibt gleich,
nur die Form ändert sich

$$\frac{df}{dt} = 0 \text{ ohne Streuung}$$

$$\frac{df}{dt} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{Streu}} = ? \quad \text{mit Streuung}$$

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \dot{\vec{k}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} + \dot{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \right) \cdot f$$

= totale Zeitableitung

Dabei gilt:

$$\Rightarrow \text{klassisch: } \dot{\vec{p}} = \hbar \dot{\vec{k}} = -\vec{\nabla}_{\vec{r}} \cdot V(\vec{r}) - e \cdot \dot{\vec{r}} \times \vec{B}$$

$$\Rightarrow \dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\hbar \vec{k}}{m} = \frac{1}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} \cdot E(\vec{k}) \text{ mit } E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar \vec{k}}{m} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} - (\vec{\nabla}_{\vec{r}} \cdot V(\vec{r})) \cdot \vec{\nabla}_{\hbar \vec{k}} \right) \cdot f = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{Streu}}$$

Boltzmann-Gleichung

Annahme: Abweichung vom Gleichgewicht klein, d.h.:

$$f = f_0 + \delta f \quad \delta f \ll f_0$$

mit der Fermi-Verteilungsfunktion f_0

RELAXATIONSZEITNÄHERUNG:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{Streu}} = -\frac{\delta f}{\tau}$$

$\tau = \tau(\vec{k}, T, \dots)$, oft $\tau = \text{const.}$ beschreibt Elektron-Elektron- und Elektron-Phonon-Stöße

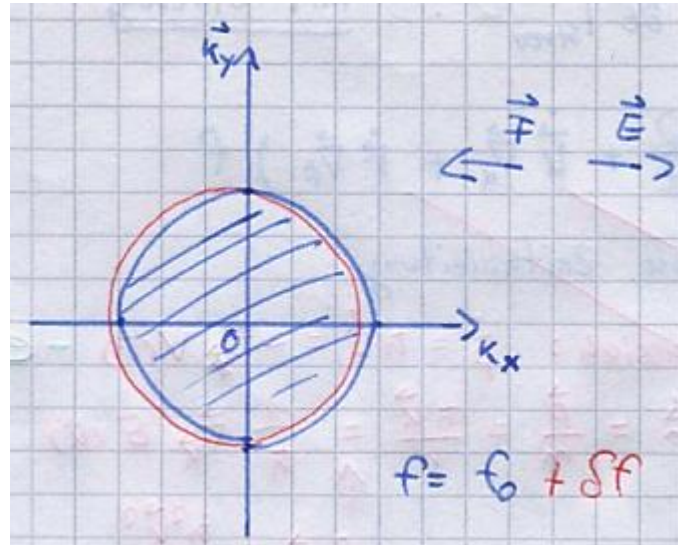
BEISPIEL: statisches $\vec{E}$ -Feld, Stationarität, d.h. $\frac{\partial}{\partial t} = 0$:

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}} \cdot V(\vec{r}) = -\vec{F} = +e\vec{E}$$

Boltzmann-Gleichung:

$$\begin{aligned}\Rightarrow -e\vec{E} \cdot \vec{\nabla}_{\hbar\vec{k}}(f_n + \delta f) &= -\frac{\delta f}{\tau} \\ \Rightarrow \delta f &= \tau \cdot e \cdot \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_{\hbar\vec{k}} \cdot f_0\end{aligned}$$

GRAFISCH:



$\Rightarrow$ Verschiebung der Fermikugel

Für den elektrischen Strom j_x folgt:

$$j_x = -\frac{e}{V} \cdot \sum_{\vec{k}, \sigma} \vec{v} \cdot \delta f = -\frac{e^2}{V} \cdot E_x \cdot \frac{\tau}{m} \cdot \sum_{\vec{k}, \sigma} \hbar \vec{k} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial (\hbar k_x)}$$

partielle Integration $\int uv' = uv - \int u'v$

$$= -\frac{e^2}{V} \cdot E_x \cdot \frac{\tau}{m} \cdot \underbrace{(\hbar k_x f_0(k_x))|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} + \frac{e^2}{V} \cdot E_x \cdot \frac{\tau}{m} \cdot \underbrace{\sum_{\vec{k}, \sigma} f_0(\vec{k})}_{N_e = V n_e} = \sigma E_x$$

$$\Rightarrow \sigma = \frac{e^2 \tau n_e}{m}$$

elektrische Leitfähigkeit

Häufig führt man noch die *Beweglichkeit* μ_e ein

$$\sigma =: n_e e \mu_e$$

$$\Rightarrow \mu_e = \frac{e\tau}{m}$$

BEISPIEL: $\frac{\partial}{\partial t} = 0, \vec{B} = 0$

Boltzmann-Gleichung: $\Rightarrow \delta f \Rightarrow \vec{j}, \vec{w} \dots$

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\eta}{e} \right) = \frac{\vec{j}}{\sigma^1} + \epsilon \cdot \vec{\nabla} \cdot T$$

$$\vec{w} = \Pi \cdot \vec{j} - \kappa \cdot \vec{\nabla} \cdot T$$

$$\eta := \mu - e\phi \hat{=} \text{elektrochemisches Potential}$$

mit dem chemischen Potential μ und der elektrostatischen potentiellen Energie $e\phi$

- ϵ : Seebeck-Koeffizient (oder Thermokraft)
- Π : Peltier-Koeffizient
- κ : Wärmeleitfähigkeit

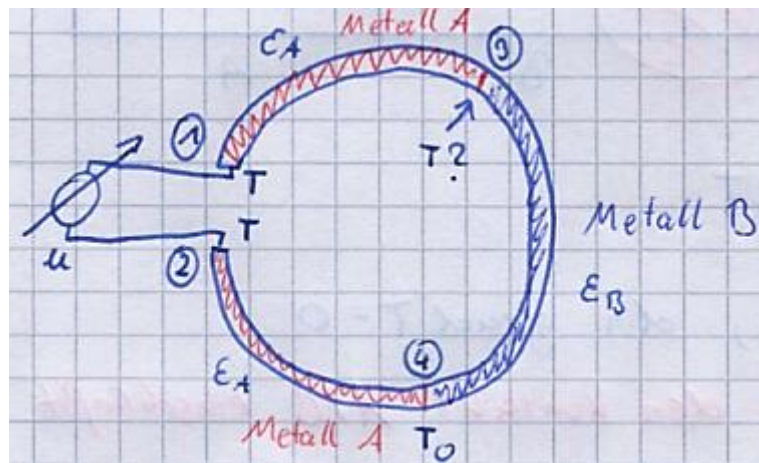
Es gilt:

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \cdot \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \cdot T = L \cdot T$$

Wiedemann-Franzsches-Gesetz

d.h. Wärmeleitfähigkeit und elektrische Leitfähigkeit sind direkt verknüpft.

BEISPIEL: Thermoelement



messe stromlos, d.h. $\vec{j} = 0$

$$\Rightarrow \text{grad} \left(\frac{\eta}{e} \right) = \epsilon \cdot \text{grad}(T)$$

○ Wegintegral, $\eta = \mu - e\phi$

¹ Hier die elektrische Leitfähigkeit

$$\int_1^2 \text{grad} \left(\frac{\eta}{e} \right) d\vec{r} = \frac{1}{e} \left(\underbrace{\mu_2 - \mu_1}_{=0} \right) - (\phi_2 - \phi_1)$$

$$\int_1^2 \epsilon \cdot \overbrace{\text{grad}(T) d\vec{r}}^{dT} \stackrel{\int_1^3 + \int_3^4 + \int_4^2}{=} \epsilon_A(T_? - T) + \epsilon_B(T_0 - T_?) + \epsilon_A(T - T_0) = (\epsilon_A - \epsilon_B)(T_? - T_0) = -U$$

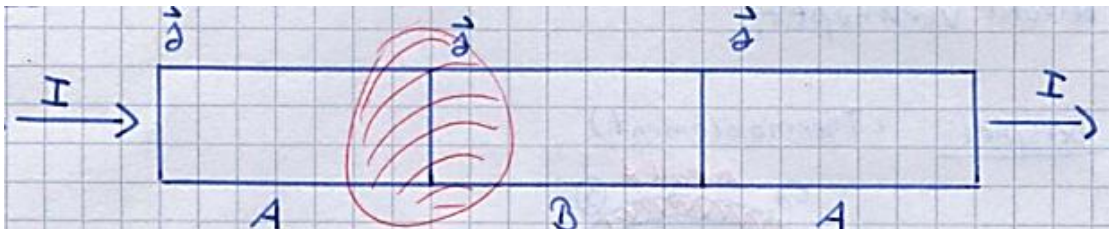
$$\Rightarrow U = \left(\underbrace{\epsilon_B - \epsilon_A}_{\text{bekannt}} \right) (T_? - T_0)$$

z.B. $Ni - CrNi$ $Fe - CuNi$ $NiCr - CuNi$...

Typische Messbereiche: $-200^\circ C \dots 1000^\circ C$

Typische Spannungen liegen $\approx 10 \frac{\mu V}{K}$

BEISPIEL: (Peltier-Element)



$$\vec{w} = \Pi \cdot \vec{j} - \kappa \cdot \text{grad}(T)$$

Zunächst gelte $T = \text{const.}$, d.h. $\text{grad}(T) = 0$

Betrachte Volumen, das den Kontakt A/B einschließt.

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} + \text{div}(\vec{w}) = \vec{j} \cdot \vec{E} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \cdot \int_V \mu dV = - \int_V \text{div}(\vec{w}) dV = - \int_{A(V)} \vec{w} \cdot d\vec{A} = -(\Pi_B - \Pi_A) \cdot I$$

$\Rightarrow$ je nach Vorzeichen von $(\Pi_B - \Pi_A)$ und I wird Aufheizung bzw. **Abkühlung** erreicht. Beim anderen Kontakt jeweils umgekehrt, sodass U im gesamten Volumen = const.

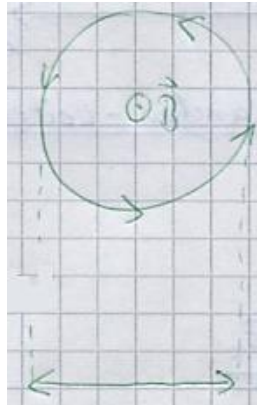
4.7. EXPERIMENTELLE BESTIMMUNG VON FERMI-FLÄCHEN

ZUR ERINNERUNG: Klassisches e^- im Magnetfeld $\vec{B}$

⇒ Kreisbahnen $\perp \vec{B}$ mit Zyklotronfrequenz ω_c

$$\omega_c = \frac{eB}{m}$$

„von oben“



„von der Seite“

„sieht aus wie harmonischer Oszillator“

Was ist das quantenmechanische Pendant?

Hamilton-Operator (minimale Kopplung)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \underbrace{Q}_{=-e} \vec{A} \right)^2$$

mit $\vec{B} = (0,0,B_z) = \text{rot}(\vec{A})$

$$\Rightarrow \vec{A} = (0, B_z \cdot x, 0) \quad \underbrace{\text{div}(\vec{A}) = 0}_{\text{Landau-Eichung}}$$

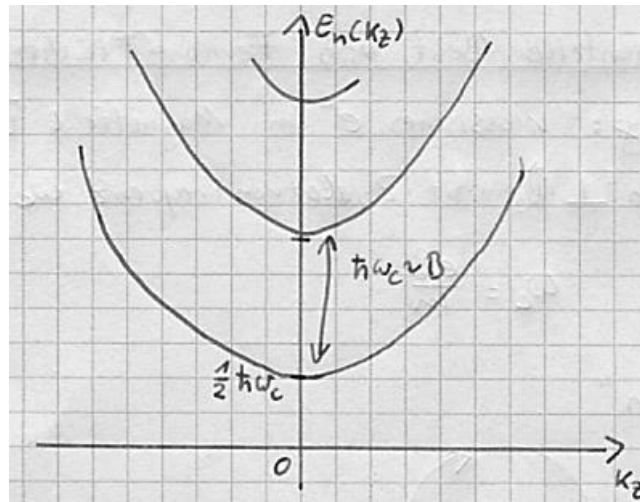
$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hbar^2 \widehat{k_x}^2 + (\hbar \widehat{k_y} + e \cdot B_z \cdot x)^2 + \hbar^2 \widehat{k_z}^2 \right)$$

mit der Koordinatentransformation

$$x = q - \frac{1}{m\omega_c} \hbar \widehat{k_y} \quad \left(\frac{\partial x}{\partial q} = 1 \Rightarrow \widehat{k_x} = \widehat{k_q} \right)$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 q^2}_{\text{1D harmonischer Oszillator}} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial z^2}}_{\text{freie Bewegung in z-Richtung (} \|\vec{B}\| \text{)}}$$

$$\Rightarrow E_n(k_z) = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

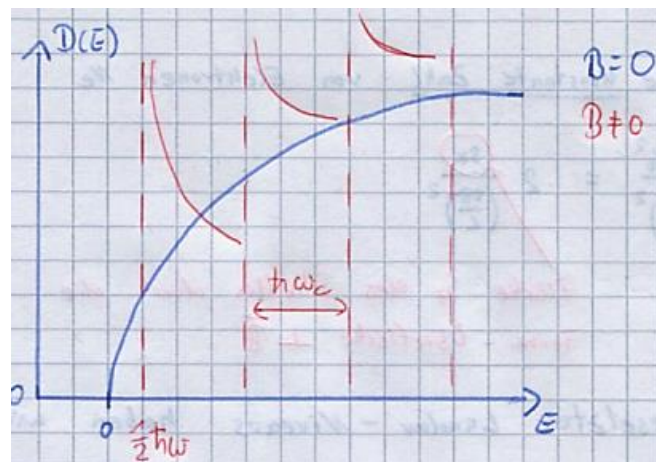


Landau-Niveaus oder Landau-Leiter

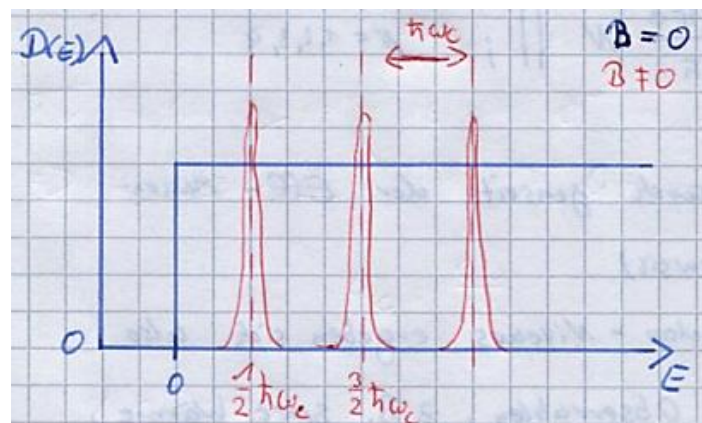
BEISPIEL: $B = 10T, m = 9,1 \cdot 10^{-31}kg$

$\Rightarrow \hbar\omega_c = 1,2meV \ll E_F$ bei Metallen

ZUSTANDSDICHTE $D(E)$ IN 3D



ZUSTANDSDICHTE $D(E)$ IN 2D:



BEISPIEL: $B = 10T, m = 9,1 \cdot 10^{-31}kg$

$$\Rightarrow \hbar\omega_c = 1,2meV \ll E_F$$

Hierbei haben wir die Zeeman-Aufspaltung vernachlässigt.

$B = 0$:

$$D(E) = const. = \frac{2mL^2}{\hbar^2 2\pi}$$

$B \neq 0$: Alle Zustände im Energieintervall der breite $\hbar\omega_c$ „kondensieren“ auf einem Landau-Niveau, d.h.

$$\hbar\omega_c \cdot D(E) = \hbar\omega_c \cdot \frac{2mL^2}{\hbar^2 2\pi} = \hbar \cdot \frac{eB}{\hbar} \cdot \frac{2mL^2}{\hbar^2 2\pi} = L^2 \cdot \underset{\text{Spin}}{2} \cdot \underbrace{\frac{eB}{\hbar}}_{\text{materialunabhängig}} = N \in \mathbb{N}$$

$\hat{=}$ Entartungsgrad des Landau-Niveaus

Der Kristall habe eine *konstante Zahl* von Elektronen N_e

$$N_e = \underset{\text{Spin}}{2} \cdot \frac{\pi k_F^2}{(2\pi)^2} =: 2 \cdot \frac{S_F}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2}$$

Fläche S_F des Schnittes durch die Fermi-Oberfläche $\perp \vec{B}$

Bei N vollständig besetzten Landau-Niveaus haben wir

$$N \cdot \cancel{\frac{2}{L^2}} \cdot 2 \cdot \frac{eB}{\hbar} = 2 \cdot \frac{S_F}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{B_N} = \frac{1}{S_F} \cdot \frac{2\pi e}{\hbar} \cdot N \quad N = 1,2,3,4$$

Diese Beziehung bleibt auch jenseits der Effektiv-Massennäherung gültig (ohne Beweis). Vollständig besetzte Landau-Niveaus ergeben sich also periodisch in $\frac{1}{B} \Rightarrow$ *alle Observablen*, z.B. spezifische Wärme, magnetisches Moment oder elektrische Leitfähigkeit, oszillieren periodisch mit $\frac{1}{B}$.

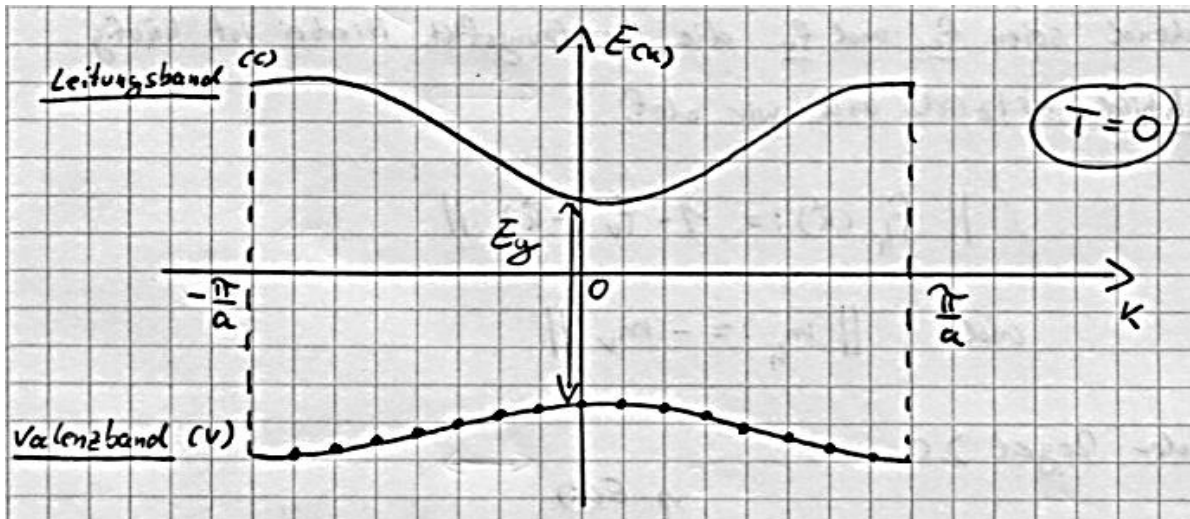
$\hat{=}$ *de Haas van Alphen Oszillationen*

Messe Periode $\Rightarrow S_F$

5. HALBLEITER UND ISOLATOREN

5.1 EINFÜHRUNG

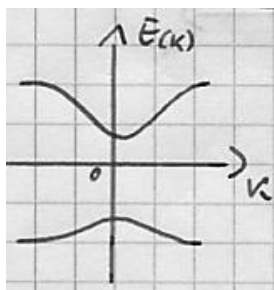
DEFINITION: Das höchste besetzte Band ist vollständig besetzt bei $T = 0$



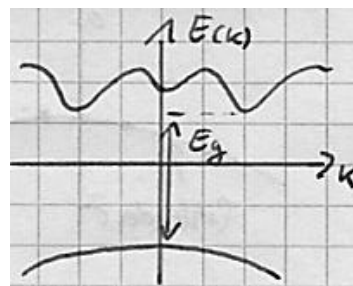
Bandlücke E_g

⇒ bei $T = 0$ ist ein Halbleiter elektrisch isolierend.

Wir unterscheiden *direkte* und *indirekte* Halbleiter.



direkt



indirekt

BEISPIELE:

	$E_g (T = 0)$	Typ
Si	1,17eV	indirekt
GeAs	1,52eV	direkt
CdS	2,58eV	direkt
Te	0,53eV	direkt

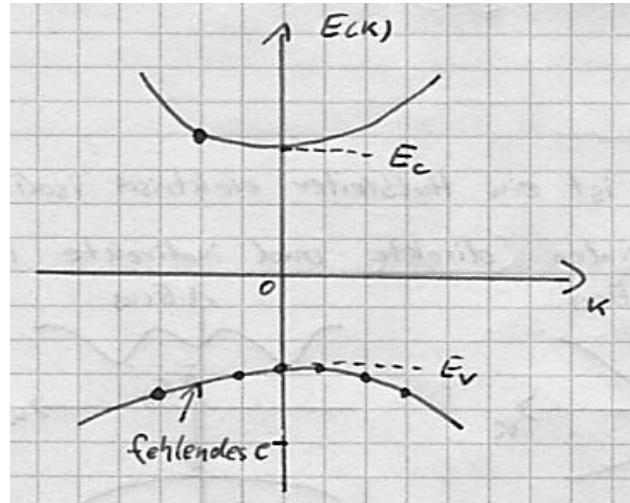
Wir wollen im Folgenden wieder die Effektivmassennäherung für die Leitungsbandelektronen verwenden und Valenzbandelektronen mit den Massen $m_c > 0$ und $m_v < 0$; $|m_v| \gg |m_c|$.

Entsprechend seien f_c und f_v die Besetzungsfunktionen. Hierbei ist häufig das Lochbild nützlich und wir definieren

$$f_h(\vec{k}) := 1 - f_v(-\vec{k})$$

$$m_h := -m_v$$

m_h in der Regel > 0



Bestimme das chemische Potential

$$N_c = \sum_{\vec{k}, \sigma} f_c(\vec{k})$$

! N_c jetzt Zahl der e^- im Leitungsband

$$N_h = \sum_{\vec{k}, \sigma} f_h(\vec{k})$$

Zahl der Löcher, d.h. fehlende e^- im Valenzband

$$\Rightarrow N_c = N_h$$

$$N_c = \sum_{\vec{k}, \sigma} f_c(\vec{k}) = \int_{E_c}^{\infty} D_c(E) f_c(E) \cdot dE$$

ZUR ERINNERUNG: (Metalle)

$$D(E) = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} \quad E \geq 0$$

$$\Rightarrow D_c(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c}{\hbar^2} \right) \sqrt{E - E_c} \quad E \geq E_c$$

Analog für die Löcher

$$D_h(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_h}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_h - E}$$

$$\Rightarrow N_c = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{E - E_c} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{k_B T}} + 1} dE$$

! Für normale Temperatur wird nur ein sehr kleiner Bruchteil der e^- vom Valenz- in das Leitungsband aktiviert
 $\Rightarrow f$ wird *Boltzmann-Verteilung*

$$\Rightarrow N_c = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu - E_c}{k_B T}} \cdot \int_0^{\infty} \sqrt{\tilde{E}} \cdot e^{-\frac{\tilde{E}}{k_B T}} \cdot d\tilde{E}$$

substituiere $x = \frac{\tilde{E}}{k_B T}$

$$\Rightarrow N_c = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu - E_c}{k_B T}} (k_B T)^{\frac{3}{2}} \cdot \underbrace{\int_0^{\infty} \sqrt{x} \cdot e^{-x} \cdot dx}_{\frac{\sqrt{\pi}}{2}}$$

analog für Löcher

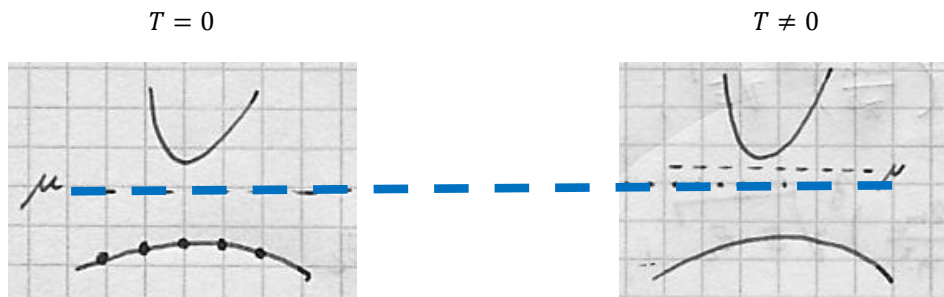
$$\Rightarrow N_h = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_h}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\mu - E_v}{k_B T}} (k_B T)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Gleichsetzen für $N_c = N_h$

$$\Rightarrow m_c^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{\mu - E_c}{k_B T}} = m_h^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{\mu - E_v}{k_B T}}$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} k_B T \cdot \ln \left(\frac{m_h}{m_c} \right)$$

$\Rightarrow E_i \hat{=} \textit{intrinsische Fermi-Energie}$



oder für die Dichte

$$n_c := \frac{N_c}{V} \quad n_h := \frac{N_h}{V}$$

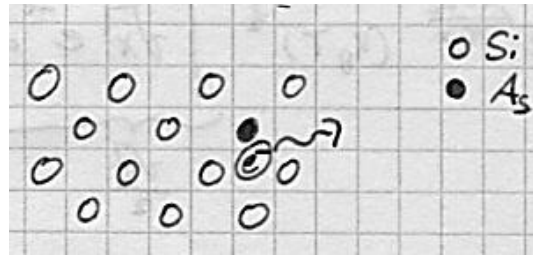
$$\Rightarrow n_c \cdot n_h = 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar} \right)^3 (m_c m_h)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$$

$\Rightarrow n_i^2 \hat{=} \textit{intrinsische Ladungskonzentration}$

gehört zur intrinsischen Fermi-Energie

! Hängt *nicht* vom chemischen Potential ab!

DOTIERTE HALBLEITER:

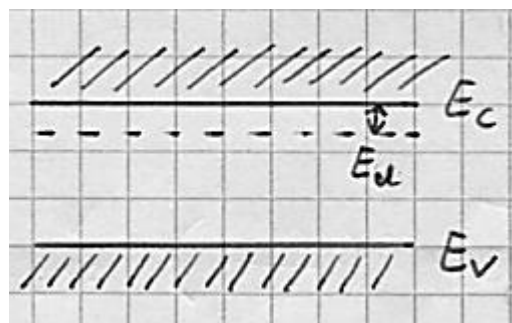


da Arsen ein Element der Hauptgruppe V ist, wurde ein zusätzliches e^- eingebaut $\Rightarrow$ *Donator*

Die Bindungsenergie des Elektrons

$$E_d = \frac{e^4 m_c}{2(4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar)^2} \ll \text{Rydberg-Energie des H-Atoms}$$

- a) Elektronen des Si schirmen Kernladung fast ab $\Rightarrow Z_{eff} = 1$
- b) $m_c \ll m_0$ für „freies“ Elektron
- c) $\epsilon \gg 1$, typischerweise $\epsilon \approx 10$



ZAHLENBEISPIELE: E_d Donatoren

	<i>P</i>	<i>As</i>	<i>Sb</i>
<i>Si</i>	45meV	49meV	39meV
<i>Ge</i>	12meV	13meV	10meV

ZAHLENBEISPIELE: Akzeptoren

	<i>B</i>	<i>Al</i>	<i>In</i>
<i>Si</i>	45meV	57meV	16meV
<i>Ge</i>	10meV	10meV	11meV

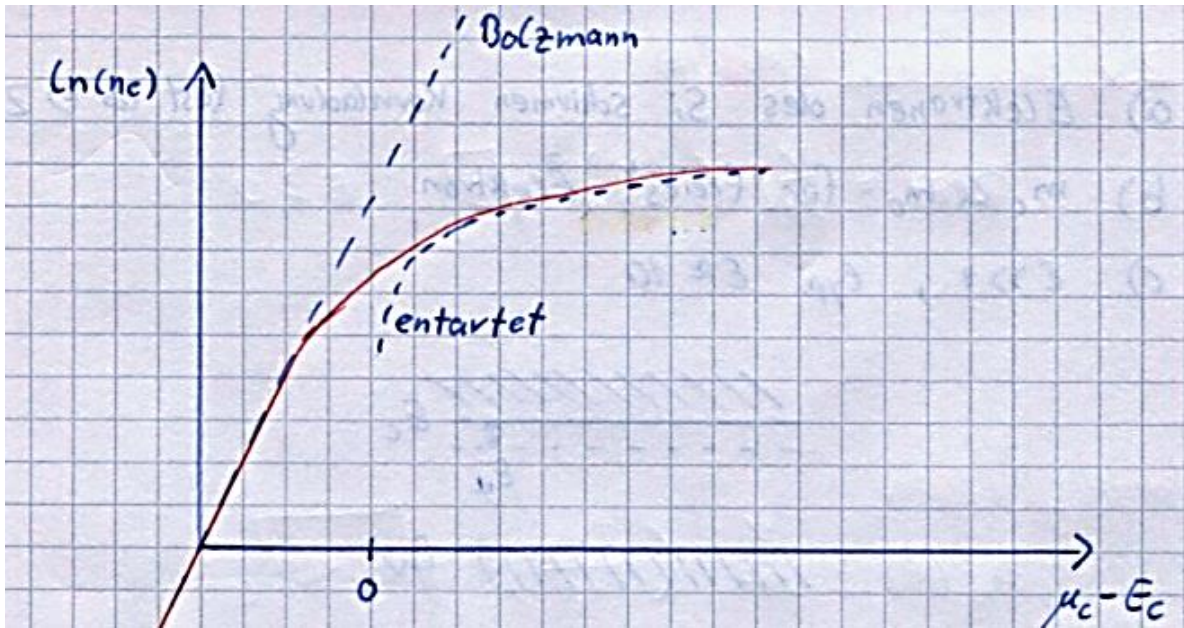
! Bild nur für niedrige Dotierkonzentrationen richtig ($10^{15} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Bei höheren Konzentrationen bilden sich Bänder, die mit dem Leitungsband überlappen können $\hat{=}$ *Mott-Übergang* $\Rightarrow$ *metallisches* Verhalten, d.h. $\sigma(T=0) \neq 0$, typischerweise $10^{17} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Bei diesen Dichten kann die Boltzmann-Näherung

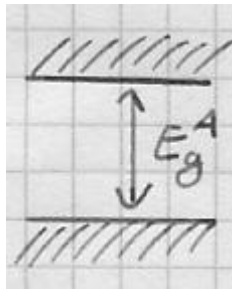
$$n_e \sim e^{\frac{\mu_e - E_c}{k_B T}}$$

nicht mehr angewendet werden. Näherung des „entarteten“ e^- -Gases“ wie bei Metallen

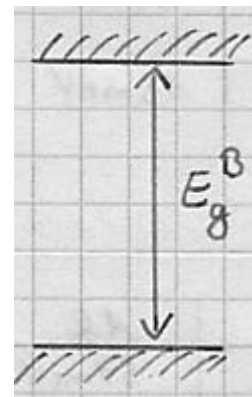
$$n_e \sim (\mu_e - E_c)^{\frac{3}{2}}$$



HALBLEITERSTRUKTUREN

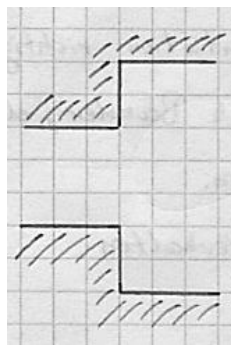


Halbleiter A



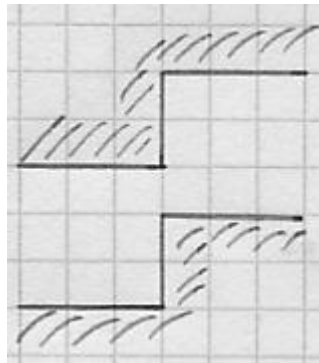
Halbleiter B

TYP I:



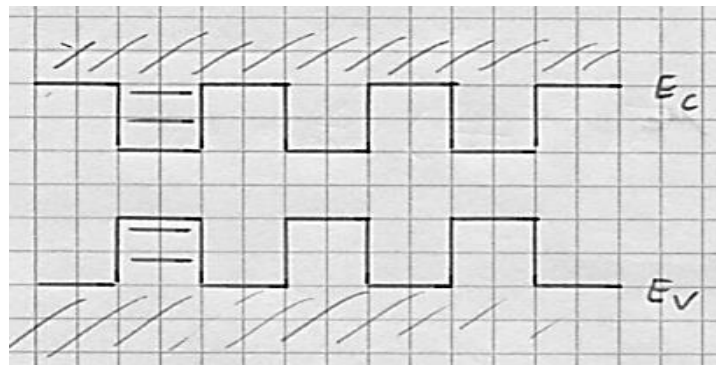
Beispiele: $GaAs/Al_{1-x}Ga_xAs$

TYP II:



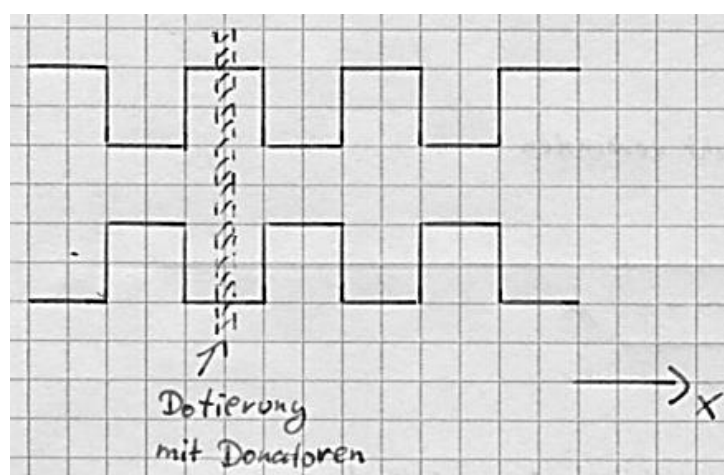
Beispiele: $\text{InP}/\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$

HETEROSTRUKTUREN



$\hat{=}$ „Teilchen-im-Topf“-Problem

MODULATIONSDOTIERTE HETEROSTRUKTUREN



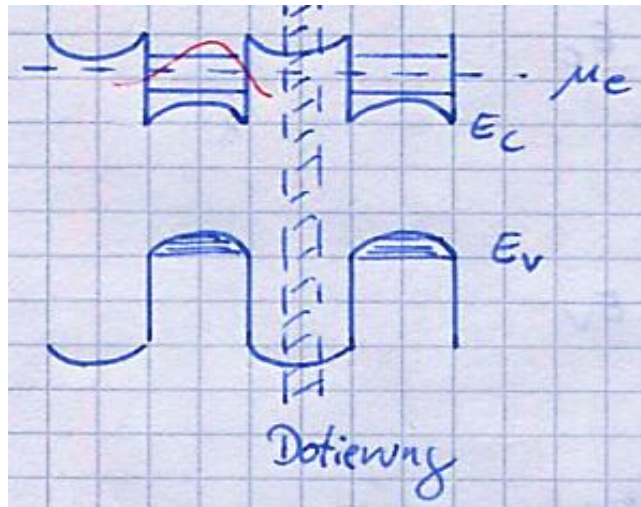
$\Rightarrow e^-$ bewegen sich in Potentialtöpfen $\Rightarrow$ negative Ladung $\Rightarrow$ positive Ladung bleibt zurück in Barrieren

POISSON-GLEICHUNG:

$$\Delta \phi = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} \rho$$

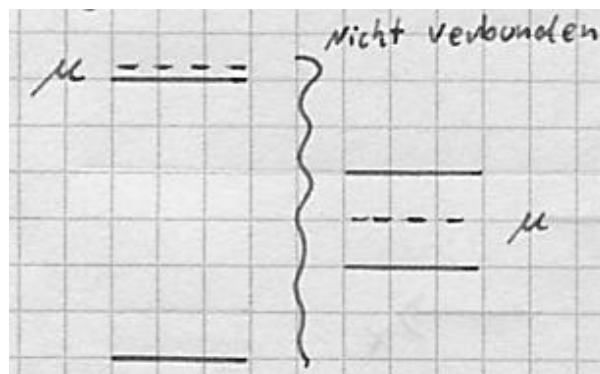
POTENTIALTÖPFE:

$\rho < 0 \Rightarrow$ Krümmung von ϕ ist positiv $\Rightarrow$ potentielle Energie $V = -e\phi$ weist *negative Krümmung* auf



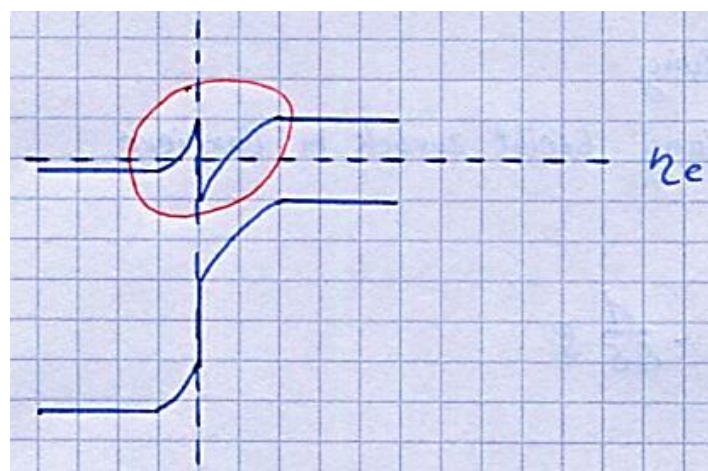
! *Räumliche Trennung* von freien e^- und Donatorrümpfen. $\Rightarrow$ hohe Beweglichkeit

ANDERE MÖGLICHKEIT



Halbleiter A, dotiert

Halbleiter B, undotiert



$\Rightarrow$ hochbewegliche 2D Elektronengase (Siehe Quanten-Hall-Effekt)

5.2 TRANSPORT DURCH ELEKTRONEN UND LÖCHER

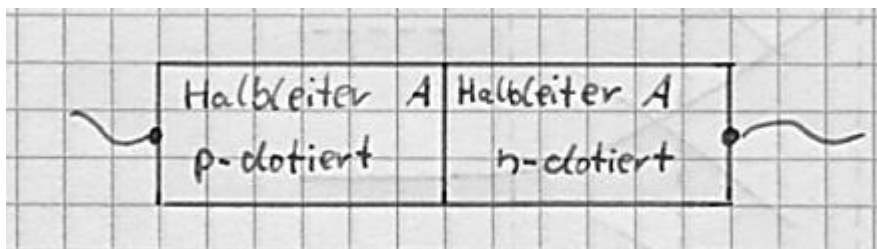
Transportgleichungen siehe Kapitel 4.6.

$$1) \quad \vec{j} = \vec{j}_e + \vec{j}_h \\ \vec{w} = \vec{w}_e + \vec{w}_h$$

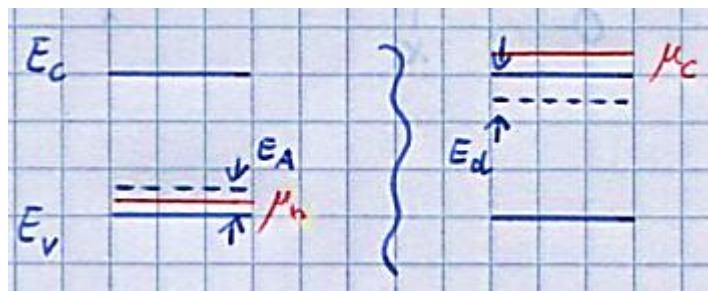
Die Relaxationszeiten τ sind im Allgemeinen unterschiedlich. Wegen der Beweglichkeit $\tilde{\mu} = \frac{e\tau}{m}$ tragen die e^- oft mehr bei zum Transport.

- 2) Durch die Dichteabhängigkeit aller Transportgrößen sind sie im Halbleiter stärker temperaturabhängig als bei Metallen.

5.3 DER PN-ÜBERGANG



VOR KONTAKT

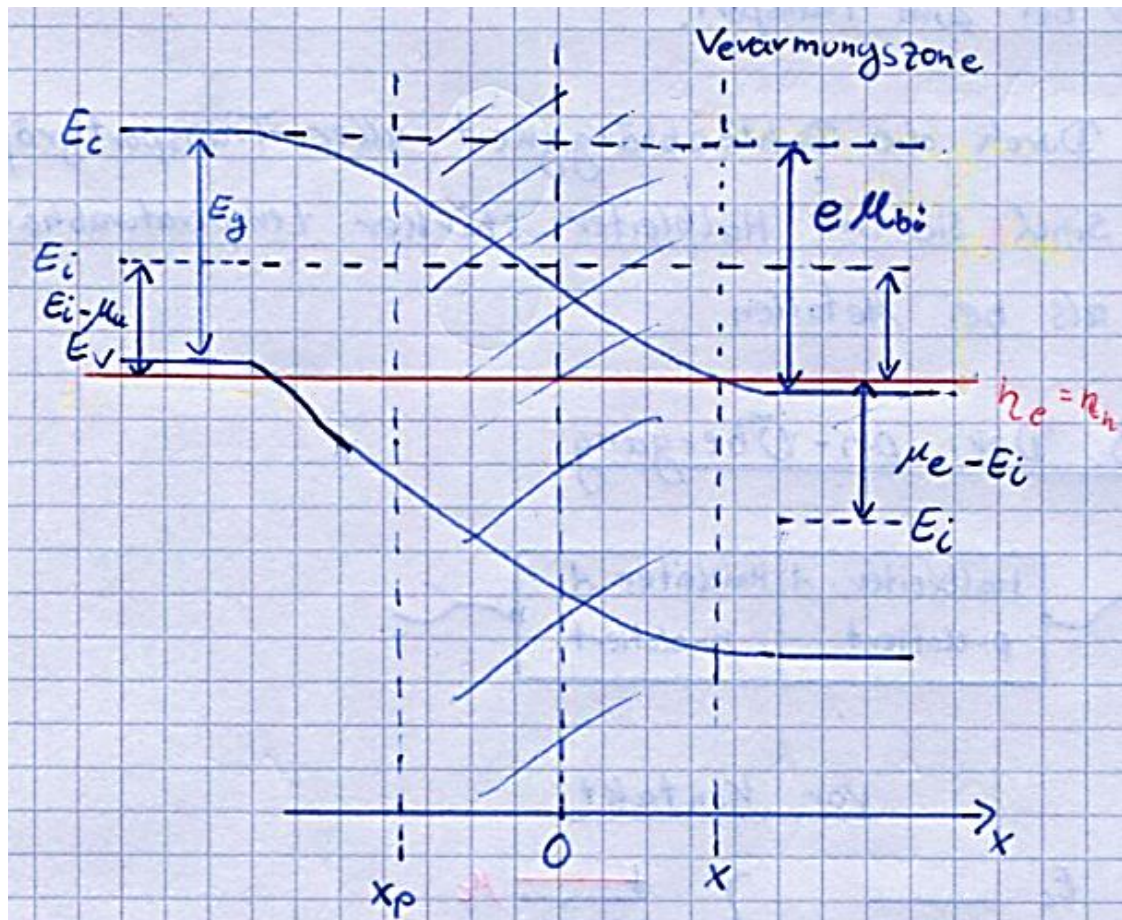


A) $U = 0$

Es gilt $\vec{j} = \vec{j}_e + \vec{j}_h = 0$. Im stationären Zustand gilt weiterhin $\vec{j}_e = \vec{j}_h = 0$ (sonst würden sich mehr und mehr e^- - h -Paare an einer Seite ansammeln).

Mit (siehe Kapitel 4.6)

$$\begin{aligned} \vec{j}_e &= \sigma \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{\eta_e}{e} \right) = n_e \cdot e \cdot \tilde{\mu}_e \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{\eta_e}{e} \right) = n_e \cdot \tilde{\mu} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{\mu_e - e\phi}{e} \right) = 0 \\ &= \underbrace{+n_e \cdot e \cdot \tilde{\mu} \cdot \left(-\frac{\vec{\nabla}(\phi)}{e} \right)}_{\text{Driftstrom}} + \underbrace{n_e \tilde{\mu}_e \cdot \vec{\nabla}(\mu_e)}_{\text{Diffusionsstrom}} = 0 \end{aligned}$$



Bestimmung der sogenannten EINGEBAUTEN SPANNUNG U_{bi} :

$$eU_{bi} = (E_i - \mu_h) + (\mu_e - E_i)$$

$x = +\infty$:

$$n_D = n_e = n_i e^{\frac{\mu_e - E_i}{k_B T}}$$

$x = -\infty$:

$$n_A = n_h = n_i e^{\frac{E_i - \mu_h}{k_B T}}$$

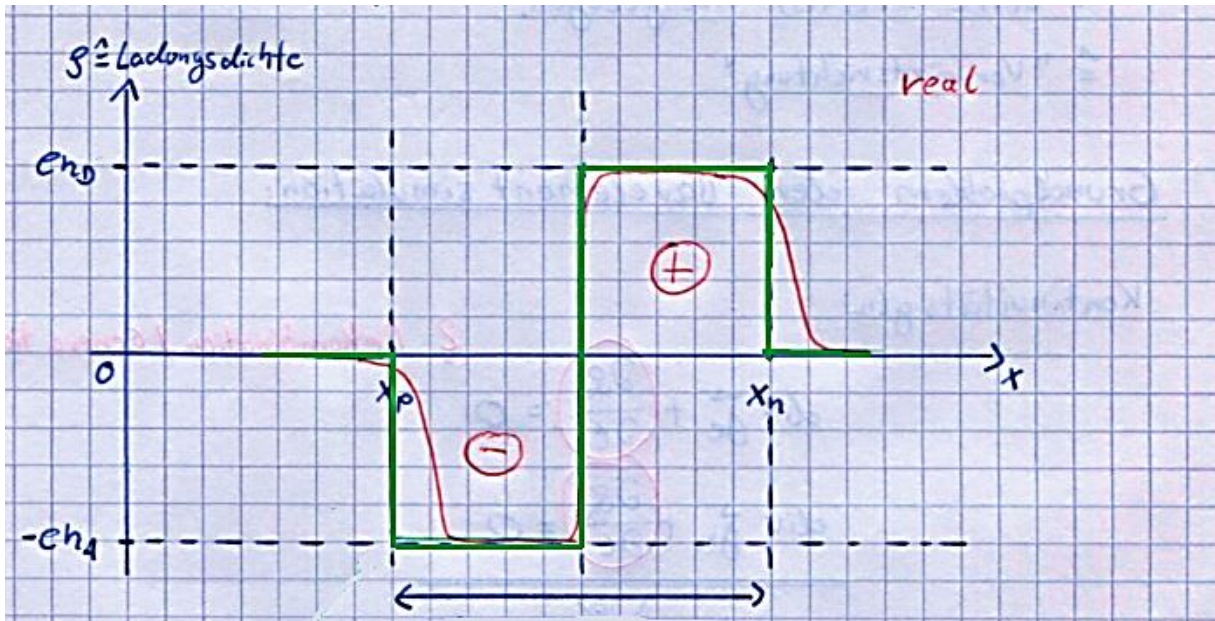
$$\Rightarrow \begin{cases} (\mu_e - E_i) = k_B T \cdot \ln\left(\frac{n_D}{n_i}\right) \\ (E_i - \mu_h) = k_B T \cdot \ln\left(\frac{n_A}{n_i}\right) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{k_B T}{e} \cdot \ln\left(\frac{n_D \cdot n_A}{n_i^2}\right)$$

$\hat{=}$ eingebaute Spannung

Grob gilt

$$U_{bi} = \frac{E_g}{e}$$



$$\Delta x = x_n - x_p$$

≙ Breite der Verarmungszone

Idealisiert: „abrupt depletion layer approximation“

Lösung der Poissonsgleichung + Randbedingungen + Ladungsneutralität:

$$\Rightarrow \Delta x = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon}{e} \cdot \frac{n_A + n_D}{n_A \cdot n_D} \cdot U_{bi}}$$

BEISPIEL: $n_A = n_D = n \Rightarrow \Delta x \sim \frac{1}{\sqrt{n}}$

d.h. Δx wird mit steigender Dotierung kleiner

$$n_A = n_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

$$\epsilon = 12,6 \quad U_{bi} = 1V$$

$$\Rightarrow \Delta x = 52 \text{ nm}$$

B) $U \neq 0$

$U > 0 \equiv$ „+ an p-Seite“ und „- an n-Seite“, d.h. bei fast gehaltener p-Seite (links) wird die n-Seite (rechts) hochgezogen. $\equiv$ „Vorwärtsrichtung“

GRUNDPROBLEM DER BAUELEMENTSIMULATION:

KONTINUITÄTSGLEICHUNG:

$$\text{div } \vec{J}_e + \frac{\partial \rho_e}{\partial t} = 0$$

$$\text{div } \vec{j}_h + \frac{\partial \rho_h}{\partial t} = 0$$

? → Rekombination/Generation

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \Rightarrow \vec{j} = \text{const.}$$

$\underbrace{\quad}_{=0}$

mit

$$\vec{j}_e = e \cdot \underbrace{n_e}_{=n_e(\mu_e)} \cdot \vec{\mu}_e \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{\tilde{\eta}_e}{e} \right)^{(\mu_e - e\phi)}$$

POISSON-GLEICHUNG:

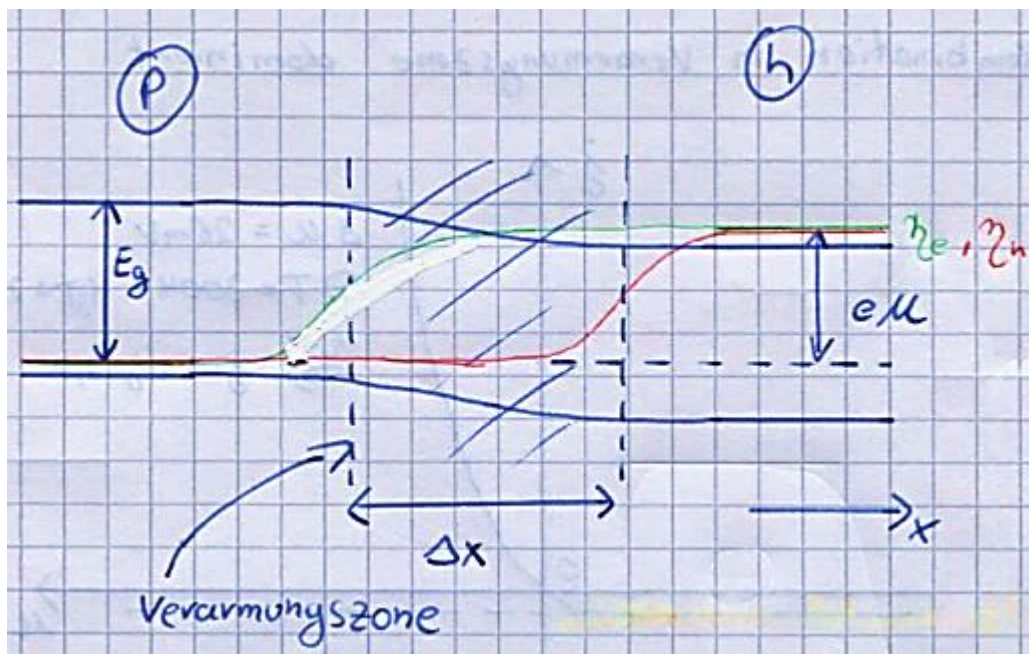
$$\Delta \phi = - \frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon}$$

RANDBEDINGUNGEN:

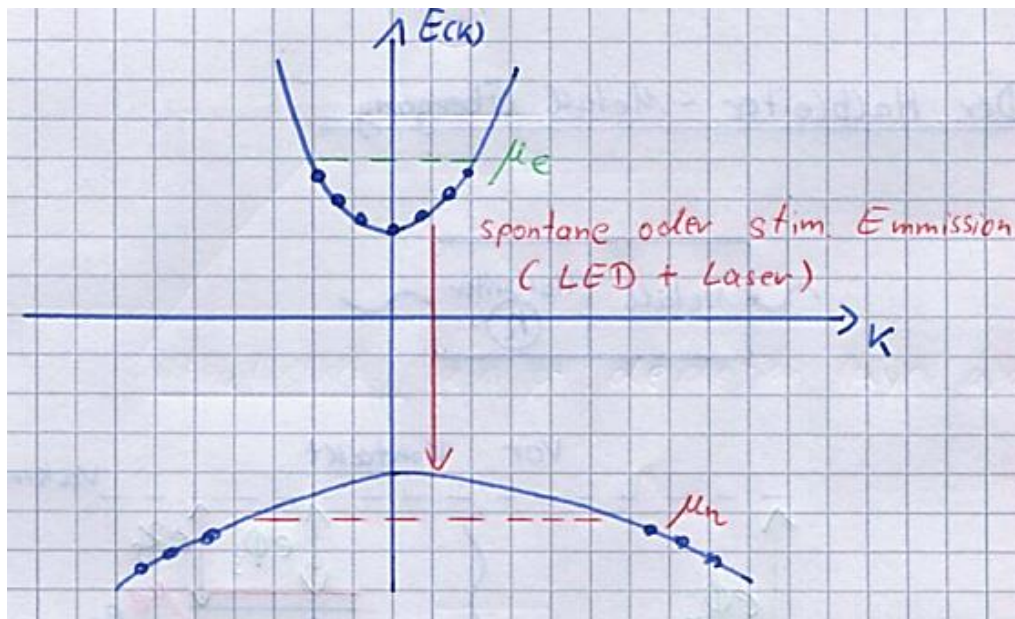
$$-eU = \underbrace{\eta_e(-\infty)}_p - \underbrace{\eta_e(+\infty)}_n$$

! Selbstkonsistente Lösung ! im Allgemeinen nicht analytisch exakt möglich.

QUALITATIV: $U > 0$



IM $\vec{k}$ -RAUM:



BREITE DER VERARMUNGSZONE Δx :

ersetze $U_{bi} \rightarrow U_{bi} - U$, ansonsten analog zu $U = 0$

$$\Rightarrow \Delta x = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon}{e} \cdot \frac{n_A + n_D}{n_A \cdot n_D} \cdot (U_{bi} - U)}$$

für $U < U_{bi}$, sonst Diode „kaputt“

In Vorwärtsrichtung schrumpft die Verarmungszone.

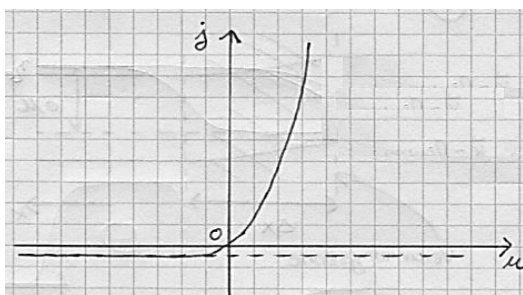
Die Strom-Spannungskennlinie $j(U)$ folgt der *Shockley-Diodenformel*

$$j(U) = j_s \left(e^{\frac{eU}{\eta k_B T}} - 1 \right)$$

mit dem „Idealitätsfaktor“ η und der temperaturabhängigen Sättigungsstromdichte $j_s = j_s(T)$

- $\eta = 1$: keine Rekombination in Verarmungszone
- $\eta = 2$: Rekombination in Verarmungszone dominiert

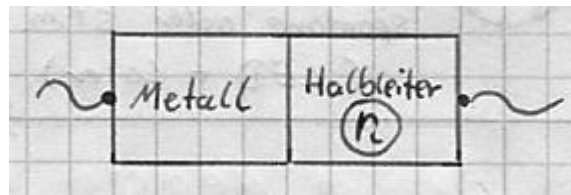
GRAFISCH:



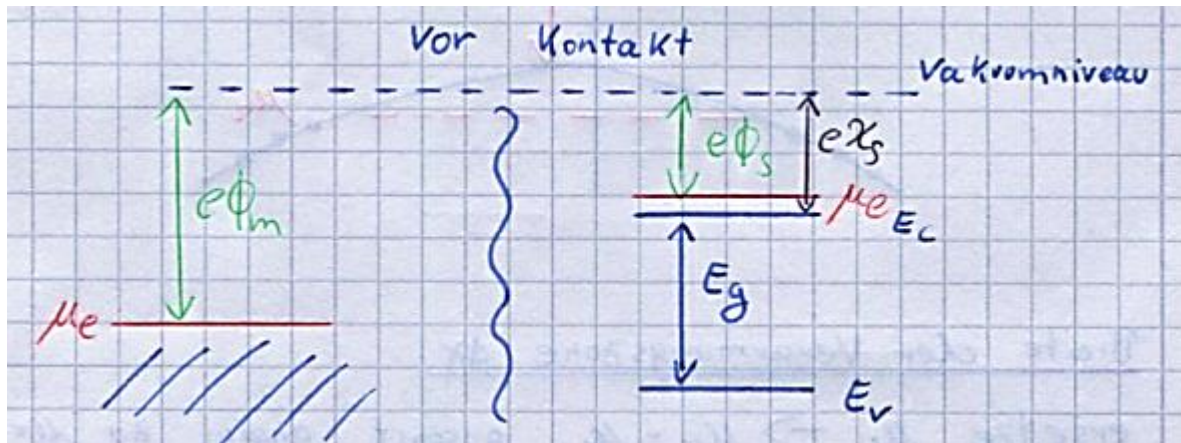
$$\Delta U = 26 \text{ mV} @ T = 300 \text{ K} \Rightarrow k_B T = 26 \text{ meV}$$

$$\xrightarrow{\eta=1} j \rightarrow j \cdot e = j \cdot 2,7$$

5.4 DER HALBLEITER-METALL-ÜBERGANG



VOR KONTAKT



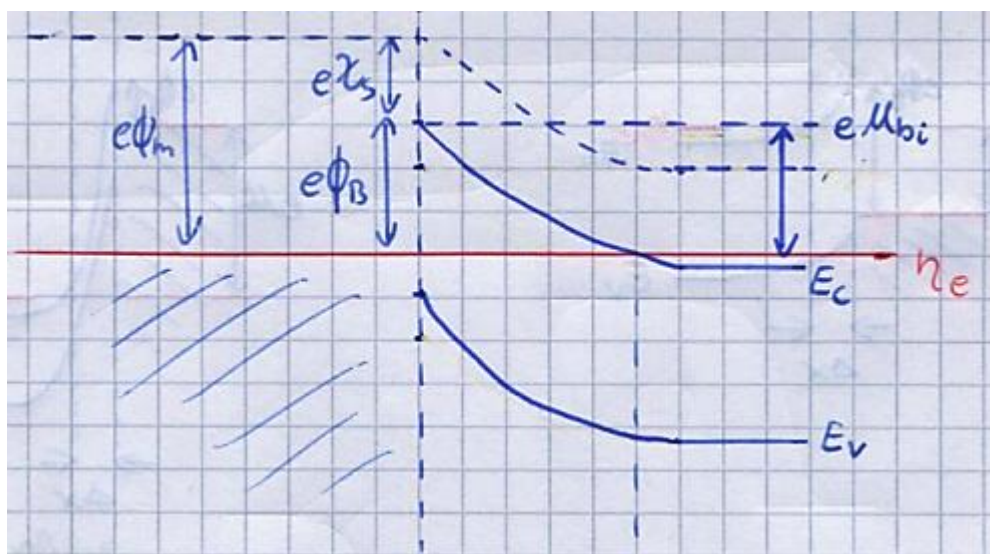
- $e\phi_m \hat{=}$ Austrittsarbeit des Metalls
- $e\phi_s \hat{=}$ Austrittsarbeit des Halbleiters
- $e\chi_s \hat{=}$ Elektronenaffinität

A) EXTERNE SPANNUNG $U = 0$

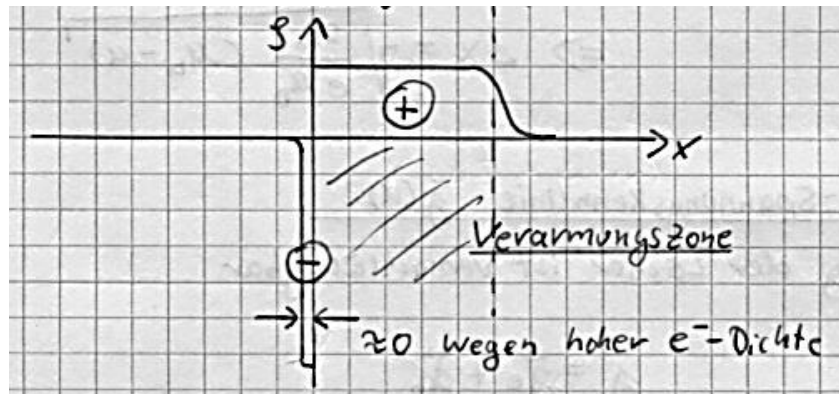
$$\Rightarrow \eta_e = \text{const}$$

! Vakuumniveau stetig!

QUALITATIV:



mit der *Barrierenhöhe* $e\phi_B = e(\phi_m - \chi_s)$



mit der *eingebauten Spannung* U_{bi}

$$eU_{bi} = e\phi_B + (\eta_e - E_c)$$

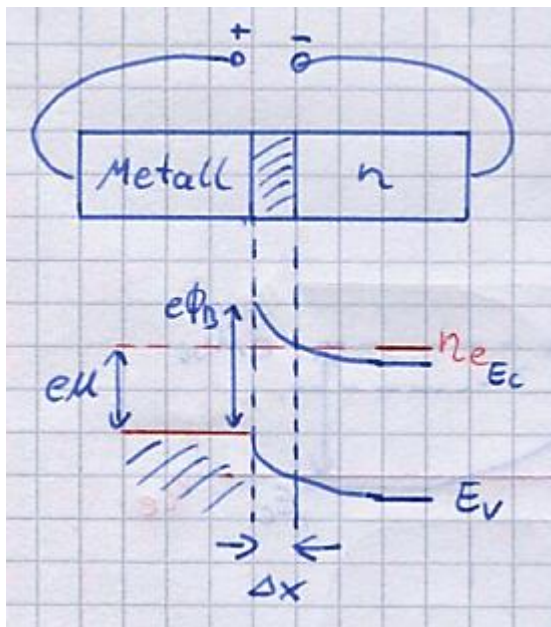
mit der *Schottky-Barriere* $e\phi_B$

BREITE DER VERARMUNGSZONE Δx (analog p^+n Diode, d.h. $n_A \gg n_D$)

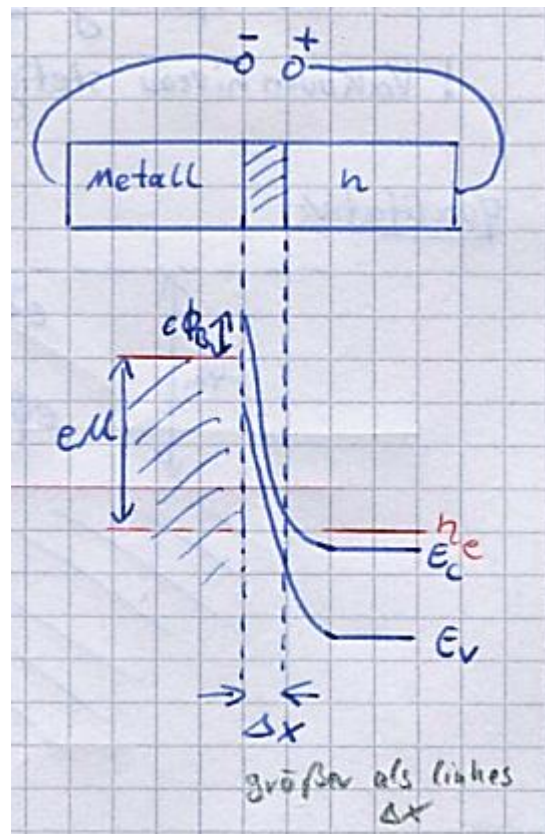
$$\Delta x = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon}{en_D} \cdot U_{bi}}$$

B) $U \neq 0$

$U > 0$



$U < 0$



analog zum pn -Übergang: $U_{bi} \rightarrow U_{bi} - U$

$$\Rightarrow \Delta x = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon}{en_D} \cdot (U_{bi} - U)}$$

STROM-SPANNUNGSKENNLINIE $j(U)$

Beitrag der Löcher ist vernachlässigbar.

$$\vec{j} = \vec{j}_e + \vec{j}_h$$

Elektronen die aus dem Metall kommen sehen für $U = 0$ und $U \neq 0$ die *Potentialbarriere* $e\phi_B$. Elektronen die aus dem Halbleiter kommen sehen die Potentialbarriere $(e\phi_B - eU)$.

$$U = 0: \quad j = 0 = j_e^{m \rightarrow s} + j_e^{s \rightarrow m}$$

mit $j_e^{s \rightarrow m} = c \cdot n_e$, c : Proportionalitätskonstante und n_e an Grenzfläche

$$\text{und } n_e = n_i e^{\frac{\mu_e - E_i}{k_B T}} =: n_c e^{\frac{\mu_e - E_c}{k_B T}}$$

$$\Rightarrow j_e^{s \rightarrow m} U = 0 \quad \Rightarrow j_e^{m \rightarrow s} = c n_e e^{\frac{e\phi_B}{k_B T}}$$

$U = 0$ und $U \neq 0$

Der Strom $j_e^{s \rightarrow m}$ ist hingegen spannungsabhängig weil die Barriere $= e\phi_B - eU$ ist.

$$\Rightarrow j_e^{s \rightarrow m} = c \cdot n_e \cdot e^{-\frac{e\phi_B - eU}{k_B T}}$$

mit der *Sättigungsstromdichte* $j_s := c \cdot n_e \cdot e^{-\frac{e\phi_B}{k_B T}}$ folgt:

$$\Rightarrow j = j_e^{m \rightarrow s} + j_e^{s \rightarrow m} = j_s \left(e^{+\frac{eU}{k_B T}} - 1 \right)$$

Das *reale* Verhalten kommt *diesem* idealen Verhalten *sehr nahe*.

Für viele Anwendungen ist das Schottky-Verhalten $j(U)$ unerwünscht. Man möchte ohmsches Verhalten mit *kleinem spezifischem Widerstand* R_c

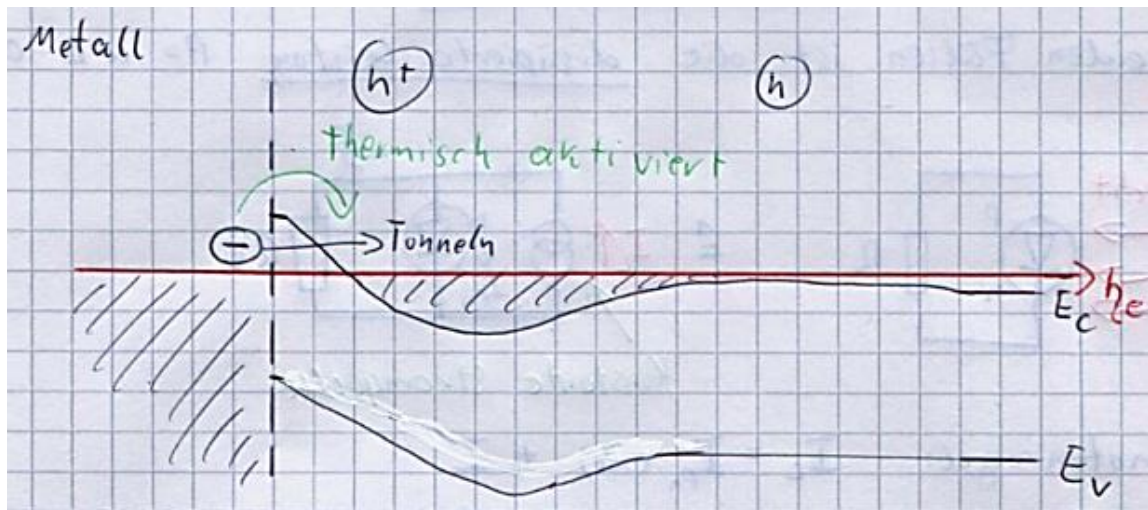
$$j = \frac{U}{R_c}; [R_c] = \Omega m^2$$

mit Diodenformel für $\frac{eU}{k_B T} \ll 1$

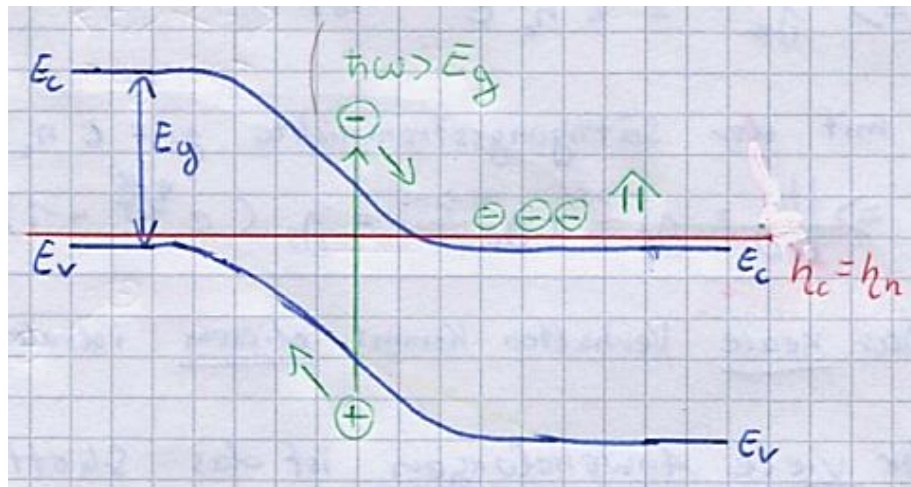
$$\Rightarrow R_c \sim e^{+\frac{e\phi_B}{k_B T}}$$

d.h. man möchte kleinen Barrierenhöhen ϕ_B . Wählt man weiterhin hohe n -Dotierung wird Δx klein ($\Delta x \sim \frac{1}{\sqrt{N_D}}$) und *quantenmechanisches Tunneln* wird möglich.

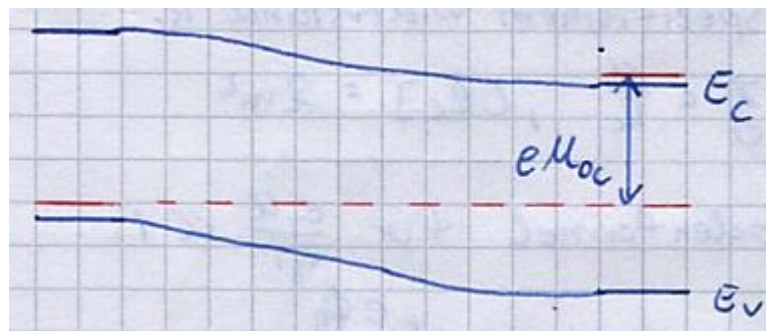
Oft Metall- n^+ - n Kontakt



5.5 HALBLEITER-SOLARZELLEN

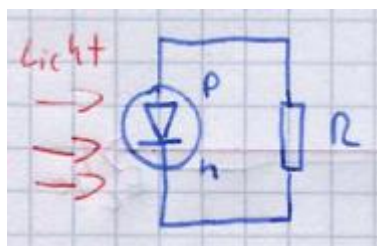


mit Einstrahlen von Licht

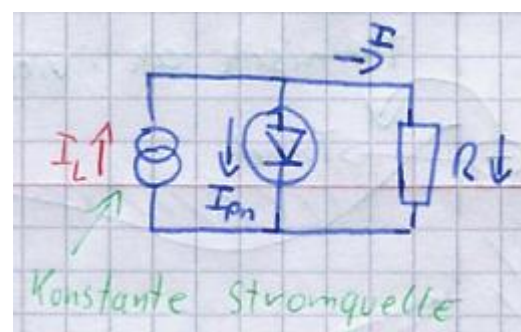


$\hat{=}$ Vorwärtsrichtung, $U > 0$

Bei konstanter Beleuchtung ergibt sich bei *offenen Klemmen* („open circuit“, oc) die Spannung U_{oc} . Schließt man den pn -Übergang kurz („short circuit“, sc), d.h. $U = 0$, ergibt sich der *Kurzschlussstrom* I_{sc} . In beiden Fällen ist die *dissipierte Leistung* $P = I \cdot U = 0$



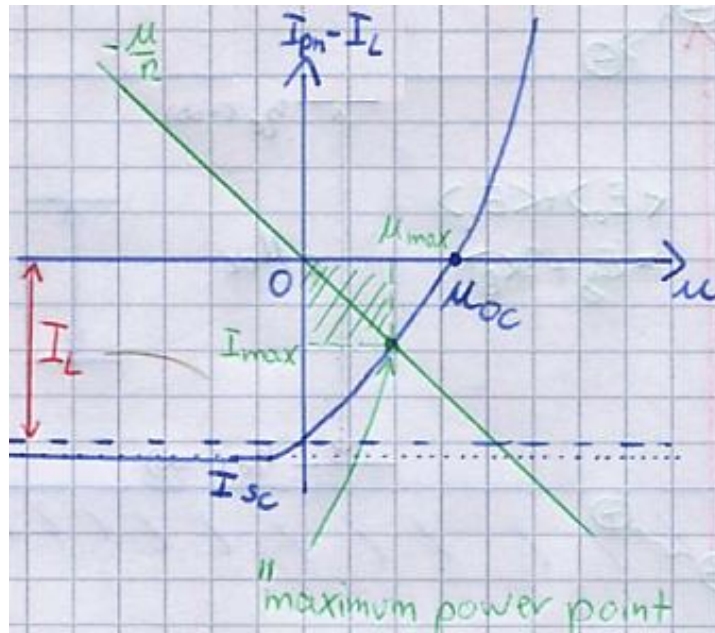
$\hat{=}$



KNOTENREGEL:

$$I_L = I_{pn}(U) + I = I_{pn}(U) + \frac{U}{R}$$

$$\Rightarrow I_{pn}(U) - I_L = -\frac{U}{R}$$



Wäre die Kennlinie rechteckig, so könnte die Leistung

$$P = U_{oc} \cdot I_{sc}$$

entnommen werden. Für einen bestimmten Verbraucher R resultiert die maximale Leistung

$$P_{max} = U_{max} \cdot I_{max}$$

Die Konversionseffizienz reduziert sich also um den „Füllfaktor“ FF

$$FF := \frac{U_{max} \cdot I_{max}}{U_{oc} \cdot I_{sc}}$$

Für eine ideale Solarzelle (keine parasitären Kontaktwiderstände) gilt typischerweise

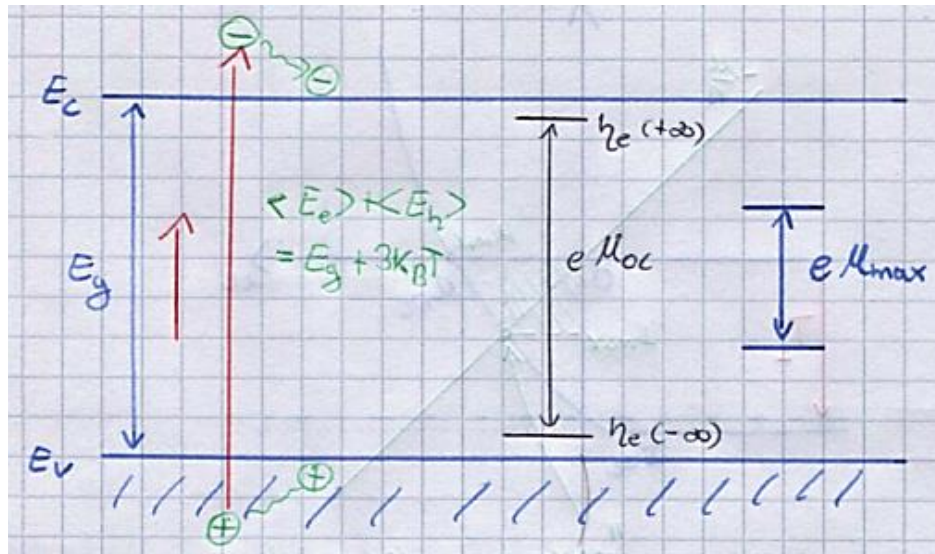
$$FF = 0,8 - 0,9$$

Der Gesamtwirkungsgrad η der Solarzelle lässt sich darstellen wie

$$\eta = \eta_{abs} \cdot \eta_{thermalisierung} \cdot \eta_{thermodynamisch} \cdot FF$$

Für eine *gute Si-Solarzelle* gilt

$$\eta = 0,74 \cdot 0,67 \cdot 0,64 \cdot 0,89 = 0,28 = 28\%$$



- Der *Absorptionswirkungsgrad* η_{abs} beschreibt, dass nicht jedes Photon absorbiert wird (nur $\hbar\omega \geq E_g$).
Bemerkung: Für $\eta_{abs} = 1$ möchte man $E_g = 0$.
- Der *Thermalisierungswirkungsgrad* $\eta_{thermal}$ beschreibt, dass die e^- und h bei ihrer Thermalisierung Energie abgeben an das Kristallgitter (Phononen).
Bemerkung: Für $\eta_{thermal}$ möchte man $\hbar\omega = E_g$ also großes $E_g \rightarrow$ Widerspruch $\eta_{abs} = 1 \Rightarrow \exists$ optimales E_g (nahe Si).
- Der *thermodynamische Wirkungsgrad* η_{thermo} beschreibt, dass nicht die gesamte (verbliebene) Elektronenenergie in Form von chemischer Energie $= -eU_{oc}$ zur Verfügung steht.
- Der *Füllfaktor* FF beschreibt, dass auf Grund der Form der Diodenkennlinien nicht die gesamte chemische Energie in elektrisch nutzbare Leistung umgewandelt werden kann.

5.6 KOHÄRENTER TRANSPORT

Zur Erinnerung: Boltzmann-Transport

freie Weglänge $\ll$ Bauelementabmessung L

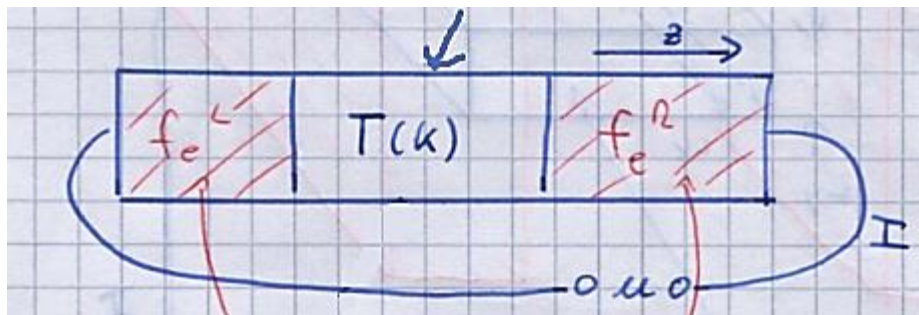
„MESOSKOPISCHER TRANSPORT“:

Gitterkonstante $a \ll L \ll$ freie Weglänge

NÄHERUNG: Streuung vernachlässigen

$\Rightarrow$ Teilchen bewegen sich gemäß der Schrödingergleichung. Aber! Messung des Stroms zerstört Kohärenz!
Widerspruch?

Quantenmechanischer Transmissionskoeffizient



Kontakte mit Fermiverteilungsfunktion f_e^L und f_e^R

- Strom von links nach rechts ($k_z \geq 0$)

$$\sim f_e^L(\vec{k})^{\dagger} \cdot T(\vec{k})$$

- Strom von rechts nach links

$$\sim f_e^R(\vec{k}) \cdot T(\vec{k})$$

Folglich:

$$\vec{J}_e = -\frac{e}{V} \left(\sum_{\vec{k}, k_z \geq 0, \sigma} \vec{v}_e \cdot f_e^L(\vec{k}) \cdot T(\vec{k}) + \sum_{\vec{k}, k_z \leq 0, \sigma} \vec{v}_e \cdot f_e^R(\vec{k}) \cdot T(\vec{k}) \right)$$

Für effektive 1D-Probleme gilt $T(\vec{k}) = T(k_z)$

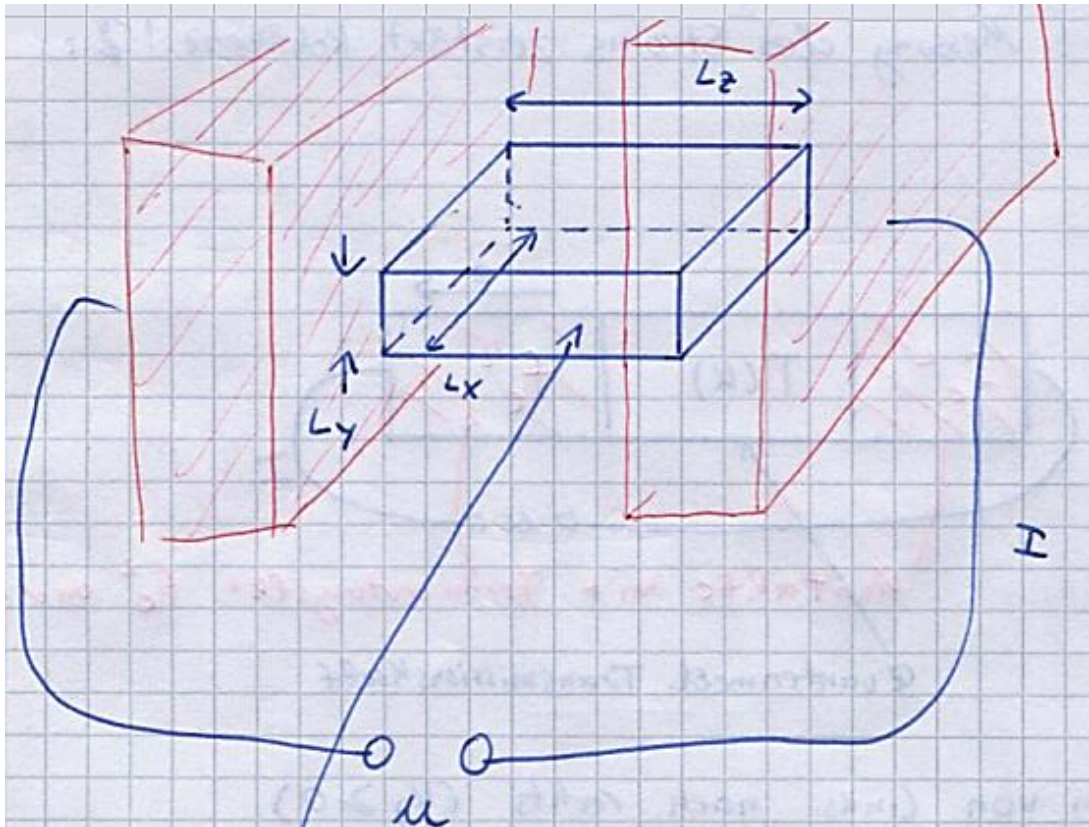
Für Bauelemente mit 2 Kontakten und für $\vec{B} = 0$ gilt $T(k_z) = T(-k_z)$

$$\Rightarrow \vec{J}_e = -\frac{e}{V} \sum_{\vec{k}, k_z \geq 0, \sigma} \vec{v}_e \cdot (f_e^L(\vec{k}) - f_e^R(\vec{k})) \cdot T(\vec{k})$$

$$\vec{J}_e = -\frac{e}{V} \sum_{\vec{k}, \sigma} \vec{v}_e \cdot f_e(\vec{k})$$

[†] besetzter Anfangszustand

Beispiel: dünner Draht zwischen zwei Kontakten



$$\text{Hamilton-Operator } \hat{H} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + V_x(x) + V_y(y)$$

Es bleibt eine freie 1D-Bewegung in z-Richtung mit der Energie E_z . E sei die Gesamtenergie. $\vec{j}_e$ hat nur Komponenten $\neq 0$ in z-Richtung:

$$\begin{aligned} j_e^z &= -\frac{e}{V} \cdot \sum_{k_x, k_y} \sum_{k_z \geq 0, \sigma} v_e^2 \left(f_e^L(\vec{k}) - f_e^R(\vec{k}) \right) \cdot \underbrace{T(\vec{k})}_{\text{Annahme: } =1} \\ &= -\frac{e}{V} \cdot \sum_{k_x, k_y} \int_0^\infty \underbrace{\frac{1}{2}}_{\text{mit Spin}} \cdot \underbrace{D_e(E_z) \cdot V_e^z(E_z)}_{\boxed{1}} \cdot \left(f_e^L(E) - f_e^R(E) \right) \cdot dE_z \end{aligned}$$

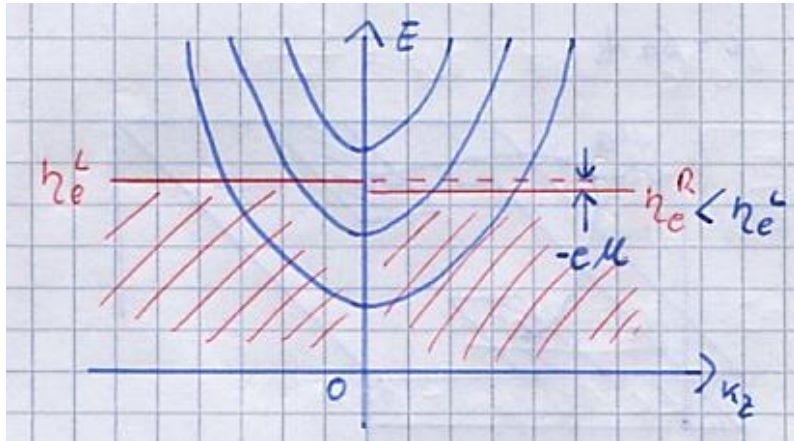
mit $D_e(E_z) = \frac{L_z \cdot 2\sqrt{2m}}{h \cdot \sqrt{E_z}}$ sowie $E_l = 0$ und $V_e^z(E_z) = \sqrt{\frac{2E_z}{m}}$

$$\boxed{1}: D_e(E_z) \cdot V_e^z(E_z) = \frac{4L_z}{h}$$

! Keine Funktion von Materialparametern

Im Limes tiefer Temperaturen werden die Fermi-Verteilungsfunktionen Sprungfunktionen mit

$$f_e^L(E) = \theta(\eta_e^L - E) \quad f_e^R(E) = \theta(\eta_e^R - E)$$



$(\eta_e^L - \eta_e^R) \ll \text{Subbandabstand, d.h. kleine } U$

$\sum_{k_x k_y} (f_e^L - f_e^R) =: N \hat{=} \text{Anzahl der beitragenden Subbänder}$

$$j_e^z = -\frac{e}{V} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{4L_z}{h} \cdot N \cdot \underbrace{\int_{\eta_e^R}^{\eta_e^L} dE_z}_{\eta_e^L - \eta_e^R = -eU}$$

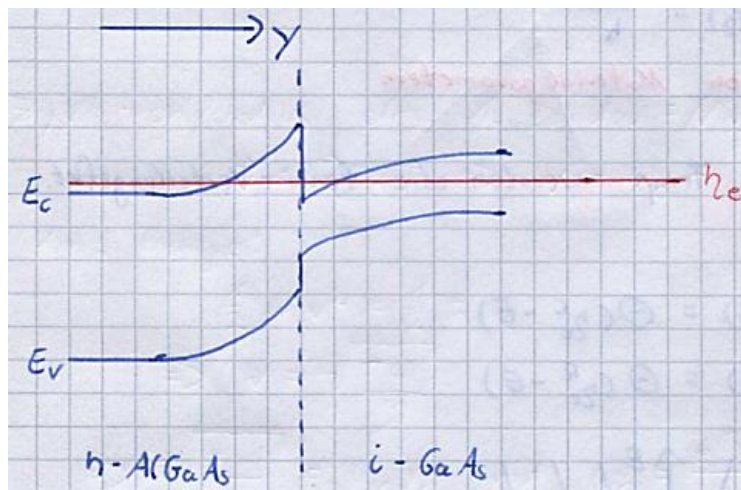
mit dem Strom $I = L_x L_y \cdot j_e^z$ und $V = L_x L_y L_z$

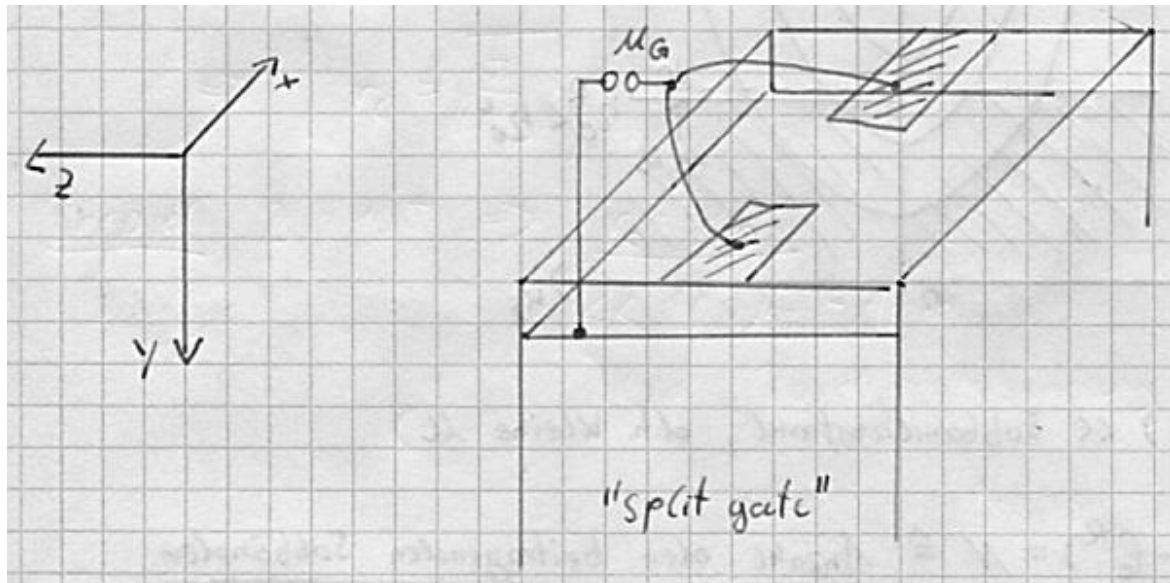
$$\Rightarrow I = \underbrace{\overset{\text{Spinentartung}}{2}}_{=\frac{1}{R}=G \hat{=} \text{Leitwert}} \cdot \frac{e^2}{h} \cdot N \cdot U \quad N \in \mathbb{N}$$

$\Rightarrow \text{Leitwert ist quantisiert}$

$$\frac{e^2}{h} \approx (25,8128 \dots k\Omega)^{-1}$$

$\Rightarrow \text{Jedes Subband tragt } \frac{e^2}{h} \text{ zum Leitwert bei}$

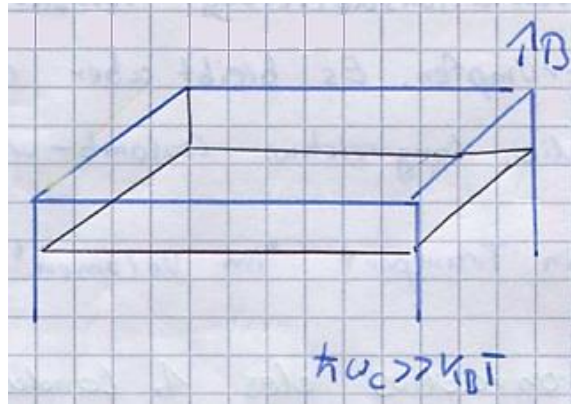




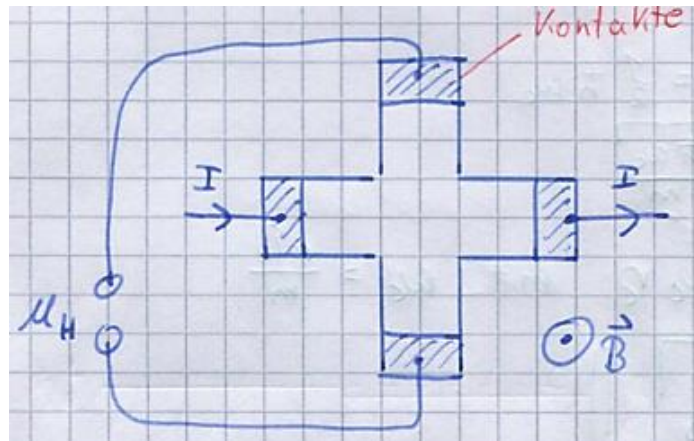
5.7 QUANTEN-HALL-EFFEKT

2D Elektronengas wie in Kapitel 5.6

Seitenansicht:



Aufsicht (schematisch):



Zur Erinnerung: klassischer Hall-Effekt

$$U_H = \frac{B}{en_e^{2D}} \cdot I =: R_H \cdot I$$

mit der Flächenladungsdichte n_e^{2D} mit $[n_e^{2D}] = \frac{1}{m}$

$$\Rightarrow R_H = \frac{B}{2n_e^{2D}}$$

In Hochreinen Proben, bei tiefen Temperaturen und hohen Magnetfeldern beobachtet man

$$R_H = \frac{\hbar}{e^2} \cdot \frac{1}{\nu}$$

→ 5.6

wobei gilt:

- $\nu = N \in \mathbb{N}$ bei normalem Quanten-Hall-Effekt
- $\nu = \frac{N}{M}$ mit $N, M \in \mathbb{N}$ bei fraktionalem Quanten-Hall-Effekt

Die Modulationsdotierung reduziert Stöße mit Donatorrümpfen. Es bleibt aber ein Unordnungspotential durch die langreichweiten Coulomb-Wechselwirkung

⇒ kein Transport „im Vakuum“.

ZYKLOTRONRADIUS DES 1. LANDAU-NIVEAUS:

$$\vec{v} = \vec{\omega}_c \times \vec{r} \Rightarrow v = \omega_c \cdot r$$

kinetische Energie:

$$\frac{1}{2} m D^2 = \frac{1}{2} \hbar \omega_c$$

$$\Rightarrow v = \sqrt{\frac{\hbar \omega_c}{m}}$$

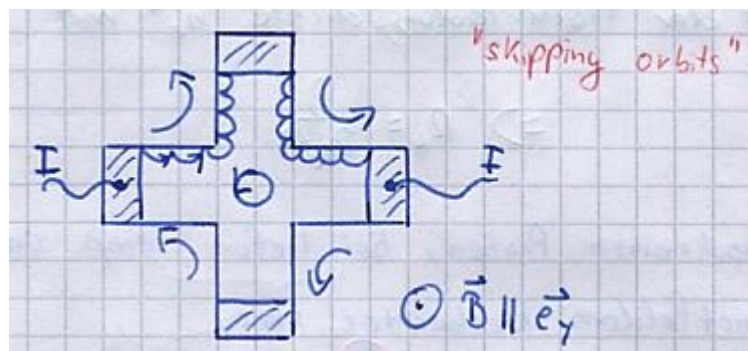
$$\Rightarrow \sqrt{\frac{\hbar \omega_c}{m}} = \omega_c \cdot r_c \text{ mit } \omega_c = \frac{eB}{m}$$

$$\Rightarrow r_c = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$$

BEISPIEL: $B = 10T$

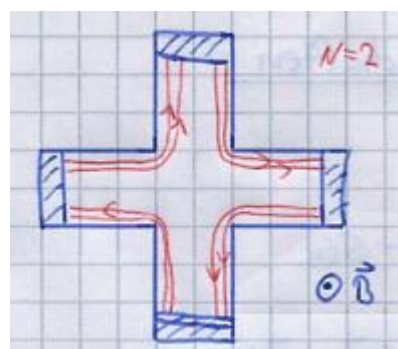
$$\Rightarrow r_c = 8nm$$

≪ $100\mu m - 1mm$ typische Bauelementabmessungen



In y-Richtung Quantisierung durch Heterostruktur, lateral durch Landau-Niveaus.

Quantenmechanisch entspricht dies einer bestimmten Zahl von *Randkanälen* $N \in \mathbb{N}$.



! *Rückstreuung* wird durch große Separation der Randkanäle *stark unterdrückt*!

! Spin-Entartung wird durch den Zeeman-Effekt aufgehoben!

ZUR ERINNERUNG: (KAPITEL 4.7)

In $2D$ hat jedes Landau-Niveau

$L^2 \cdot 2^1 \cdot \frac{eB}{h}$ Zustände

ELEKTRONENDICHTE IN $2D$:

$$n_e^{2D} = \nu \cdot \frac{eB}{h}$$

mit dem Füllfaktor ν und dem klassischen Hall-Widerstand:

$$R_H = \frac{B}{en_e^{2D}} = \frac{h}{e^2} \cdot \frac{1}{\nu} = \frac{h}{e^2} \cdot \frac{1}{N}$$

Die quantisierten Werte entsprechen also vollständig gefüllten Landau-Niveaus $\Leftrightarrow \nu \in \mathbb{N}$

¹ durch Spin-Entartung

6. MAGNETISCHE EIGENSCHAFTEN

6.1 EINFÜHRUNG

MAKROSKOPISCHE MAXWELL-GLEICHUNGEN

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$$

mit der Magnetisierung $\vec{M}$

$$[M] = \frac{\text{magnetisches Dipolmoment}}{\text{Volumen}} = \frac{Am^2}{m^3} = \frac{A}{m}$$

$\vec{M}$ hängt von $\vec{B}$ bzw. $\vec{H}$ ab. Im einfachsten Fall ist $\vec{M}$ proportional

$$\vec{M} = \chi \vec{H}$$

mit der magnetischen Suszeptibilität χ , $[\chi] = 1$

$$\Rightarrow \vec{B} = \mu_0 \cdot (\vec{H} + \chi \vec{H}) = \mu_0(1 + \chi) \vec{H} =: \mu_0 \mu \vec{H}$$

6.2 PARA- UND DIAMAGNETISMUS

Ein klassischer Drehimpuls $\vec{L}$ ist mit einem magnetischen Moment $\vec{\mu}$ verknüpft (siehe Moderne Physik I)

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \cdot \vec{L} =: -g \cdot \mu_B \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar}$$

mit dem g -Faktor $g = 1$ und dem *Bohrschen Magneton* μ_B

$$\mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2m}$$

Die Energie des magnetischen Moments $\vec{\mu}$ im $\vec{B}$ -Feld $\parallel \hat{e}_z$

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

quantenmechanisch ist die z-Komponente des Drehimpulses quantisiert

$$L_z = m \cdot \hbar \quad m = -l, \dots, 0, \dots, +l$$

damit wird

$$\mu_z = -g \cdot \mu_B \cdot m$$

Für den *quantenmechanischen Spin* $\vec{S}$ ist es ähnlich

$$\vec{\mu} = -\underset{=2}{g} \cdot \mu_B \cdot \frac{\vec{S}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \mu_z = -g \cdot \mu_B \cdot \left(\pm \frac{1}{2}\right)$$

Hier gibt es nur zwei Einstellmöglichkeiten, nämlich $\uparrow$ und $\downarrow$ mit Energie

$$E = \pm \mu_B \cdot B$$

N sei die Gesamtzahl der Spins im Volumen V , $N_\uparrow$ sei die Zahl der Spins $\uparrow$ (magnetisches Moment $\downarrow$), $N_\downarrow$ sei die Zahl der Spins $\downarrow$ (magnetisches Moment $\uparrow$).

Wir betrachten zunächst Elektronenspins *in tief liegenden Orbitalen*, d.h. große effektive Masse $\Rightarrow$ klassisches Verhalten $\Rightarrow$ Boltzmann-Statistik

$$e^{-\frac{E}{k_B T}} \cong \text{Boltzmann-Faktor}$$

$$\frac{N_\downarrow}{N} = \frac{e^{+\frac{\mu_B \cdot B}{k_B T}}}{e^{+\frac{\mu_B \cdot B}{k_B T}} + e^{-\frac{\mu_B \cdot B}{k_B T}}} \quad \frac{N_\uparrow}{N} = \frac{e^{-\frac{\mu_B \cdot B}{k_B T}}}{e^{+\frac{\mu_B \cdot B}{k_B T}} + e^{-\frac{\mu_B \cdot B}{k_B T}}}$$

$$\Rightarrow M_z = M = \frac{N_\downarrow - N_\uparrow}{V} \cdot \mu_B$$

$$\Rightarrow M = \frac{N}{V} \cdot \mu_B \cdot \tanh\left(\frac{\mu_B \cdot B}{k_B T}\right)$$



Betrachte Limes $\frac{\mu_B \cdot B}{k_B T} \ll 1 \Rightarrow \tanh(x) \approx x$

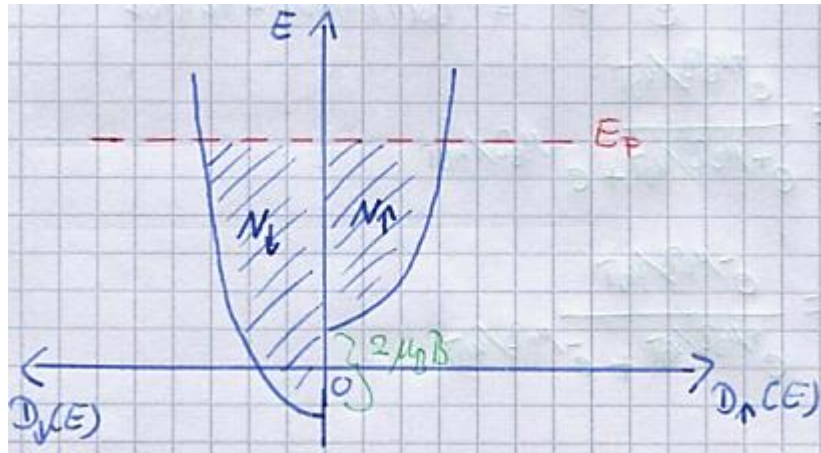
$$\Rightarrow M = \frac{N}{V} \mu_B \cdot \frac{\mu_B \cdot B}{k_B T} =: \frac{1}{\mu_0} \chi \cdot B$$

$$\chi = \mu_0 \cdot \frac{N}{V} \cdot \frac{\mu_B^2}{k_B T} =: \frac{C^I}{T}$$

Curie-Gesetz

^I C : Curie-Konstante

Betrachte jetzt *Elektronenspins der Leitungsbandelektronen* (z.B. in einem Metall). Hier kommt die *Fermi-Statistik* zum Tragen.



$B = 0$: (siehe Kapitel 4.1)

$$N_e = \int_0^{\infty} f(E) \cdot D(E) dE = N_{\downarrow} + N_{\uparrow}$$

$B \neq 0$:

$$N_{\downarrow} = \frac{1}{2} \int_{-\mu_B \cdot B}^{\infty} f(E) \cdot D(E + \mu_B \cdot B) dE$$

KURZE ZUSAMMENFASSUNG:

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \cdot \vec{L} = -g \cdot \mu_B \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar} \quad \mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2m} \quad \epsilon = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Spin

$$\epsilon = \pm \mu_B \cdot B$$

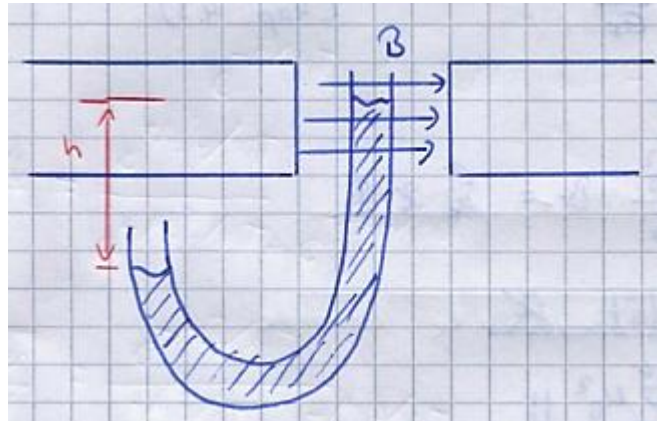


$$\vec{M} = \chi \cdot \vec{B} \quad \chi = \frac{C}{T} \quad C = \mu_B \cdot \frac{N}{V} \cdot \frac{\mu_B^2}{k_B T}$$

PARAMAGNETISMUS $\chi > 0$

$$\mu = (1 + \chi) \Rightarrow B = \mu_0 \cdot \mu \cdot H \quad \mu > 1$$

¹ da wir den Spin mit in $D(E)$ definiert hatten



NÄHERUNG: $\epsilon_F \gg k_B T \Rightarrow$ „tiefe“ Temperaturen $\hat{=}$ Raumtemperatur

$$N_{\downarrow} \approx \frac{1}{2} \int_{-\mu_B}^{\epsilon_F} D(\underbrace{\epsilon + \mu_B B}_{=: \tilde{\epsilon}}) d\epsilon = \frac{1}{2} \int_0^{\epsilon_F + \mu_B B} D(\tilde{\epsilon}) d\tilde{\epsilon} = \frac{1}{2} \left(\int_0^{\epsilon_F} D(\tilde{\epsilon}) d\tilde{\epsilon} + \underbrace{\int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \mu_B B} D(\tilde{\epsilon}) d\tilde{\epsilon}}_{D(\epsilon_F) \cdot \mu_B \cdot B} \right)$$

analog $N_{\uparrow}$:

$$N_{\uparrow} \approx \frac{1}{2} \left(\int_0^{\epsilon_F} D(\tilde{\epsilon}) d\tilde{\epsilon} - \underbrace{\int_{\epsilon_F - \mu_B B}^{\epsilon_F} D(\tilde{\epsilon}) d\tilde{\epsilon}}_{D(\epsilon_F) \cdot \mu_B \cdot B} \right)$$

$$M_Z = M = \frac{N_{\downarrow} - N_{\uparrow}}{V} \cdot \mu_B = \frac{\mu_B^2 D(\epsilon_F)}{V} \cdot B$$

und mit $D(\epsilon_F) = \frac{3}{2} \cdot \frac{N_e}{\epsilon_F}$ (Kapitel 4.3) sowie $k_B T_F := \epsilon_F$

$$\Rightarrow M = \frac{3 \cdot \frac{N}{V} \cdot \mu_B^2}{2k_B T_F} \cdot B = \frac{1}{\mu_0} \cdot \chi \cdot B$$

folgt die *Suszeptibilität* χ :

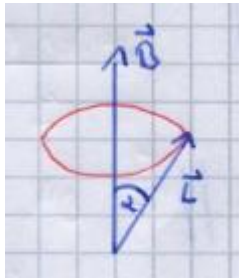
$$\chi = \mu_0 \cdot \frac{3 \cdot \frac{N}{V} \cdot \mu_B^2}{2k_B T_F}$$

Betrachte jetzt *Diamagnetismus* auf Grund des Bahndrehimpulses (nach klassischer Physik)

$$\dot{\vec{L}} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

Analog zum Kreisel resultiert eine Präzessionsbewegung mit der Präzessionsfrequenz bzw. *Lamorfrequenz* ω_L

$$\omega_L = \frac{|\dot{\vec{L}}|}{|\vec{L}| \cdot \sin \alpha}$$



$$\vec{L} \parallel -\vec{\mu}$$

$$\Rightarrow \omega_L = \frac{|\vec{\mu} \times \vec{B}|}{|\vec{L}| \cdot \sin \alpha} = \frac{|\vec{\mu}| \cdot B \cdot \sin \alpha}{|\vec{L}| \cdot \sin \alpha} = \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot B = \frac{e\hbar}{2m} \cdot B$$

$$\Rightarrow \omega_L = \frac{e \cdot B}{2m}$$

Lamorfrequenz

! Präzessionsbewegung ist für $\vec{L}$ und $-\vec{L}$ gleich!

ANNAHMEN:

- Atom habe abgeschlossene Schalen ($\Rightarrow$ kein Paramagnetismus)
- ω_L sei klein im Vergleich zur „Orbitalbewegung“
- Z sei die Kernladungszahl

$$I = \frac{\text{Ladung}}{\text{Zeiteinheit}} = -\frac{Z \cdot e}{\frac{2\pi}{\omega_L}} = -\frac{Z \cdot e^2 \cdot B}{4 \cdot \pi \cdot m}$$

$$\mu = \text{Strom} \times \text{Fläche} \quad (\vec{B} \parallel \hat{e}_z)$$

$$= I \cdot \pi \cdot \langle x^2 + y^2 \rangle$$

mit $\langle x^2 + y^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle = 2\langle x^2 \rangle$ und $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 + z^2 \rangle = 3\langle x^2 \rangle$ folgt

$$\Rightarrow \mu = -\frac{Z \cdot e^2 \cdot B}{4m} \cdot \frac{2}{3} \cdot \langle r^2 \rangle$$

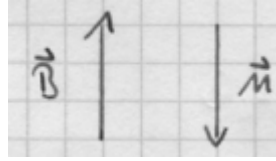
Damit wird die Magnetisierung

$$M = \frac{N}{V} \cdot \mu = -\frac{N}{V} \cdot \frac{Ze^2}{6m} \cdot B \cdot \langle r^2 \rangle$$

$$= \frac{1}{\mu_0} \cdot \chi \cdot B$$

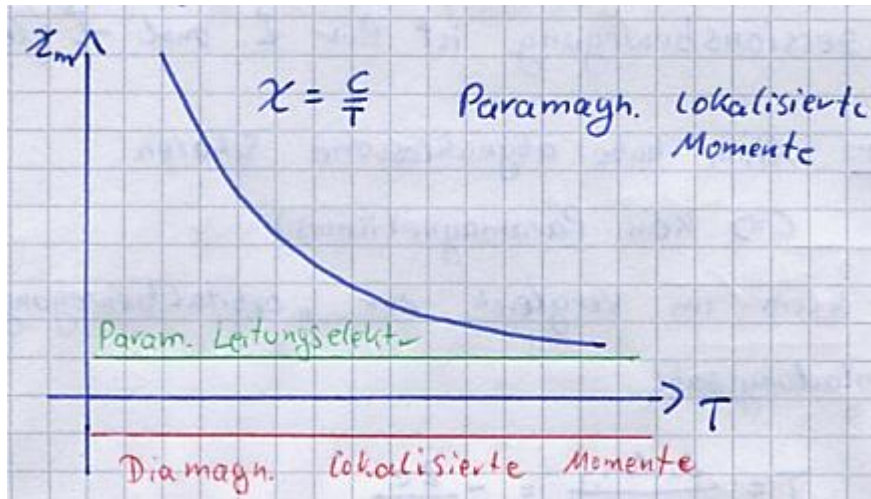
$$\Rightarrow \chi = -\frac{\mu_0 \cdot \frac{N}{V} \cdot Ze^2}{6m} \cdot \langle r^2 \rangle$$

Langevin-Diamagnetismus



Diamagnetismus tritt in allen Festkörpern auf, er ist jedoch *sehr* schwach. Falls paramagnetische Beiträge existieren, dominieren dies in der Regel.

ZUSAMMENFASSUNG 6.2



6.3 FERRO- UND ANTIFERROMAGNETISMUS

Beim Paramagnetismus und Diamagnetismus galt $\vec{B} = 0 \Leftrightarrow \vec{M} = 0$

? $\exists \vec{M} \neq 0$ für $\vec{B} = 0$, d.h. spontane Magnetisierung

ANSCHAULICH:

Ein Spin erzeugt Magnetfeld $\leadsto$ anderer Spin wird ausgerichtet $\leadsto$ dieser erzeugt seinerseits Magnetfeld,...

HEURISTISCHER ANSATZ:

$$\vec{B} = \vec{B}_0^I + \vec{B}_L^{II}$$

mit $B_L = \lambda \vec{M}$

$$1) \text{ hohe Temperaturen, D.H. } \mu_B B \ll k_B T \Rightarrow \vec{M} = \frac{1}{\mu_0} \cdot \tilde{\chi}^{III} \cdot \vec{B}$$

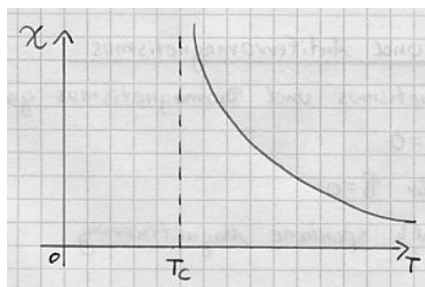
$$\Leftrightarrow \vec{M} = \frac{1}{\mu_0} \cdot \tilde{\chi} \cdot (\vec{B}_0 + \vec{B}_L) = \frac{1}{\mu_0} \cdot \tilde{\chi} \cdot (\vec{B}_0 + \lambda \cdot \vec{M})$$

$$\Leftrightarrow \vec{M} = \frac{\frac{1}{\mu_0} \cdot \tilde{\chi} \cdot \vec{B}_0}{1 - \lambda \cdot \frac{\tilde{\chi}}{\mu_0}}$$

$$\Rightarrow \chi = \mu_0 \cdot \frac{M}{B_0} = \frac{\tilde{\chi}}{1 - \lambda \cdot \frac{\tilde{\chi}}{\mu_B}} = \frac{\frac{C^2}{T}}{1 - \frac{\lambda}{\mu_B} \cdot \frac{C^2}{T}} = \frac{C^2}{T - \frac{\lambda}{\mu_0}} =: \frac{C}{T - T_C}$$

$$\chi = \frac{C}{T - T_C} \quad T_C = \frac{\lambda}{\mu_B} \cdot C$$

Curie-Weiß-Gesetz



Genauere Rechnungen für Temperaturen nahe T_C ergeben:

$$\chi \sim \frac{1}{(T - T_C)^{1.33}}$$

^I externes Feld

^{II} internes Feld, „Lokalfeld“, „Molekularfeld“

^{III} paramagnetische Suszeptibilität (ohne Lokalfeld)

In der Molekularfeldtheorie erhält man

$$\lambda = \frac{T_C}{C} = \frac{3k_B T}{N g^2 \cdot S(S+1) \cdot \mu_B^2}$$

BEISPIEL: Eisen

$$T_C \cong 1000 K \quad g = 2 \quad S = 1$$

$$\Rightarrow \lambda \cong 5000$$

Sättigungsmagnetisierung: $M_S \approx 0,17 T$

$$\Rightarrow B_L \approx 10^3 T$$

Das Lokalfeld B_L ist sehr viel stärker als das tatsächliche Feld von den magnetischen Atomen im Kristall. Das Lokalfeld kann näherungsweise als Folge der *Austauschwechselwirkung* benachbarter Spins $\vec{S}_i$ und $\vec{S}_j$ aufgefasst werden.

ENERGIETERM: (Heisenberg-Modell)

$$U = -2J \cdot \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

mit dem Austauschintegral J (Überlapp der Ladungsverteilungen)

Die Ladungsverteilung (Ortswellenfunktion²) hängt von der Orientierung der Spins zueinander ab.

TEMPERATURABHÄNGIGKEIT DER SÄTTIGUNGSMAGNETISIERUNG

$$\mu_0 B \Rightarrow k_B T$$

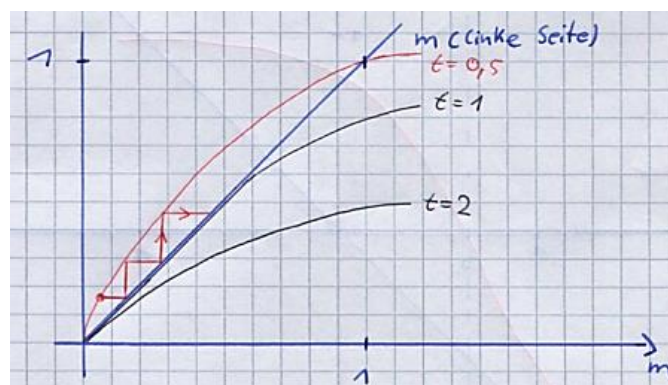
Näherung $\vec{M} \approx \chi \vec{B}$ nicht mehr möglich, daher vollständig ($s = \frac{1}{2}$)

$$M = \frac{N}{V} \cdot \mu_B \cdot \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)$$

A) $B_0 = 0 \Rightarrow \vec{B} = \lambda \vec{M}$. Setze $m = \frac{\mu_B}{N} \cdot M$ und $t = \frac{k_B}{N \mu_B^2 \lambda} \cdot T$:

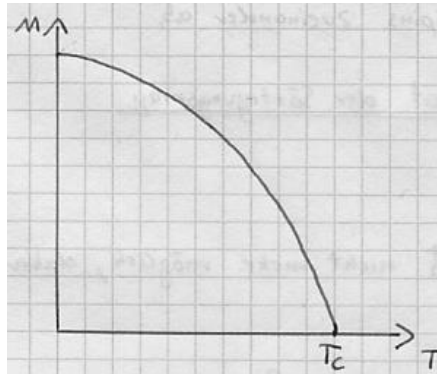
$$\Rightarrow m = \tanh\left(\frac{m}{t}\right)$$

GRAFISCHE LÖSUNG:



Bei Steigung > 1 ist $m = 0$ eine instabile Lösung (Banachscher Fixpunktsatz).

Temperaturabhängigkeit ($B_0 = 0$)

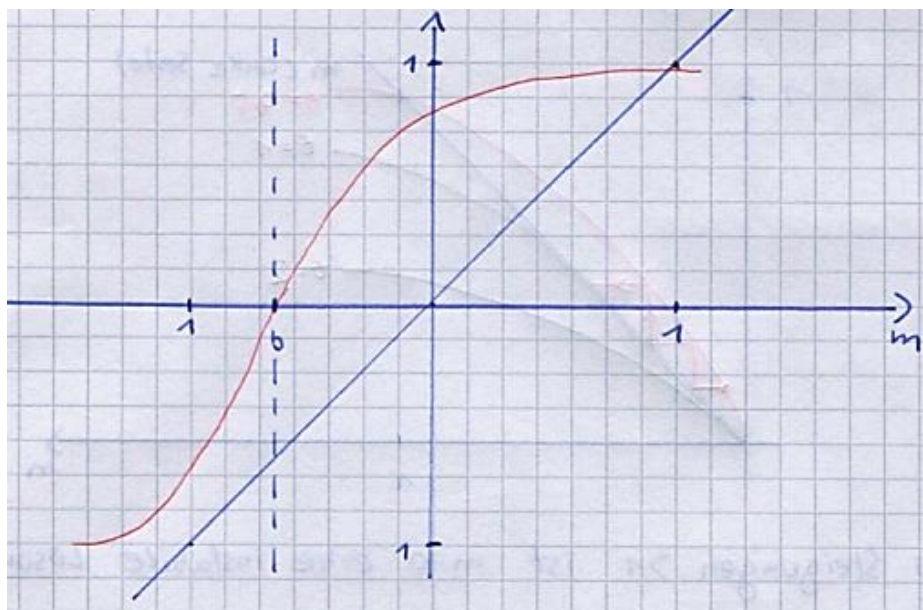


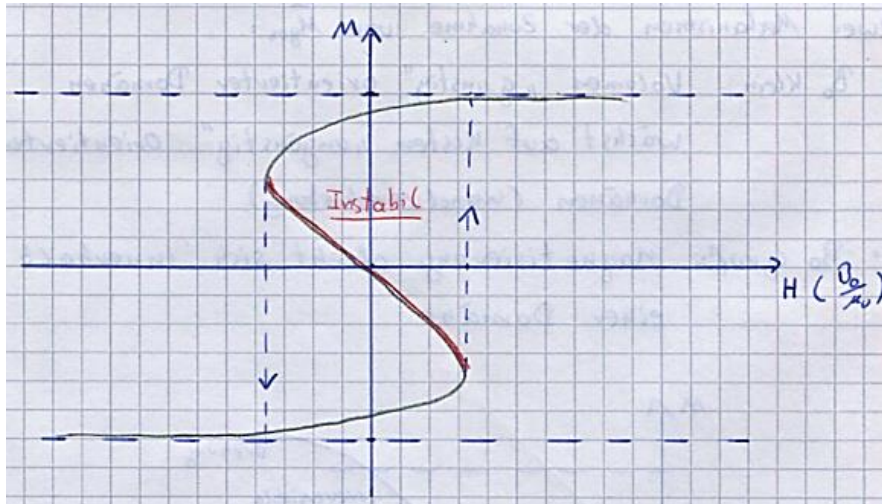
Phasenübergang 2. Ordnung beim Übergang ferromagnetisch/paramagnetisch.

b) $B_0 \neq 0$. Setze $b = \frac{\mu_B}{N} \cdot B_0$

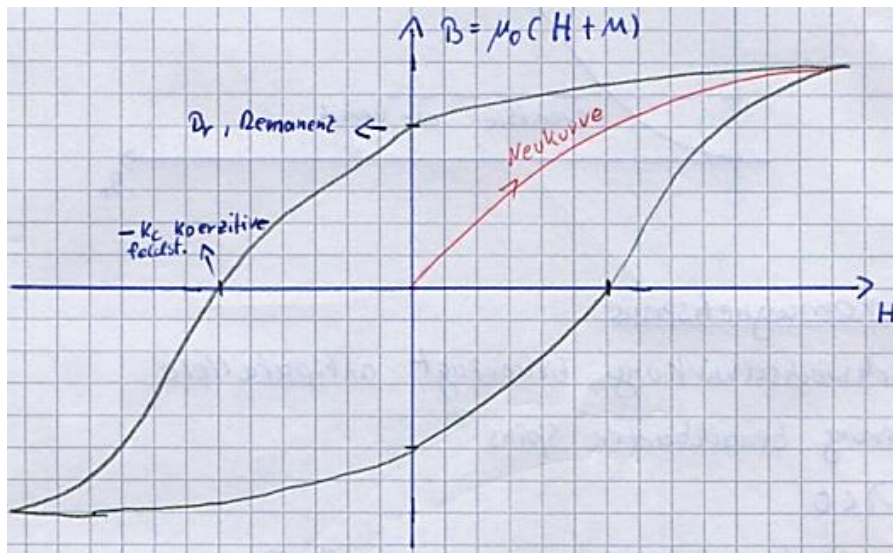
$$\Rightarrow m = \tanh\left(\frac{m + b}{t}\right)$$

GRAFISCHE LÖSUNG:





IM EXPERIMENT:



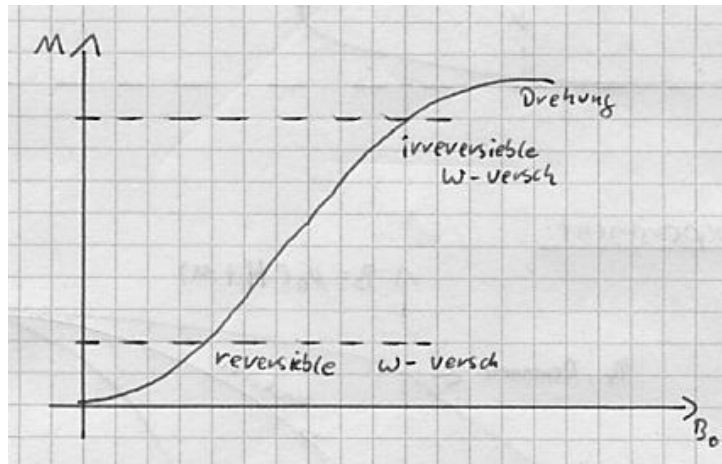
Aufzuwendende Energie pro Zyklus ist proportional zur eingeschlossenen Fläche der Hysterese.

FERROMAGNETISCHE DOMÄNEN

Die gesamte Magnetisierung $\vec{M}_{ges}$ setzt sich zusammen aus einer Anzahl kleiner Bereiche (Domänen, Weißsche Bezirke), innerhalb derer die lokale Magnetisierung $\vec{M}_{lok}$ gesättigt ist. Die Richtungen von $\vec{M}_{lok}$ verschiedener Domänen müssen nicht parallel sein.

Zwei Mechanismen der Zunahme von $\vec{M}_{ges}$:

- B_0 klein: Volumen „günstig“ orientierter Domänen wächst auf Kosten „ungünstig“ orientierter Domänen (Wandverschiebungen).
- B_0 groß: Magnetisierung dreht sich innerhalb einer Domäne.



ANTIFERROMAGNETISMUS

Austauschwechselwirkung bevorzugt antiparallele Orientierung benachbarter Spins

$$\lambda < 0$$

Austauschintegral

$J > 0$
 $\uparrow\uparrow\uparrow$
 Ferromagnetismus

$J < 0$
 $\uparrow\downarrow\downarrow$
 Antiferromagnetismus

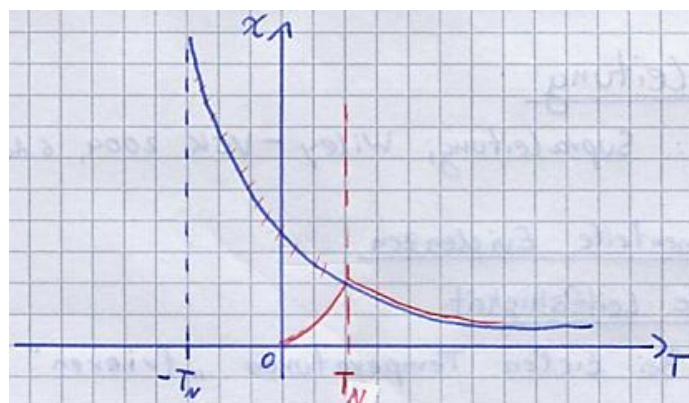
1) HOHE TEMPERATUREN, $\mu_B B \ll k_B T$

wie gehabt:

$$\chi = \frac{C}{T - \underbrace{\frac{\lambda}{\mu_0} C}_{>0}}$$

$$\chi = \frac{C}{T + T_N} \quad T_N = -\frac{\lambda}{\mu_0} \cdot C$$

Néel-Temperatur

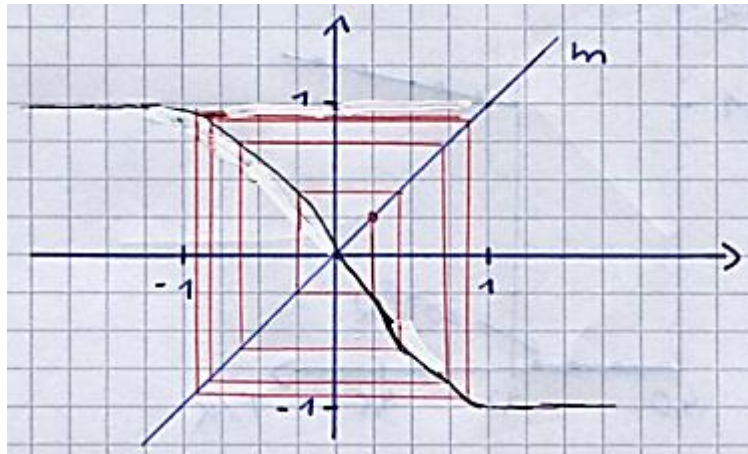


2) „TIEFE“ TEMPERATUREN, $\mu_B B \geq k_B T$

wie gehabt ($B_0 = 0$)

$$M = \frac{N}{V} \mu_B \cdot \tanh\left(\frac{\mu_B}{k_B T} \cdot \lambda \cdot M\right)$$

$$\Rightarrow m = -\tanh\left(\frac{m}{|t|}\right)$$

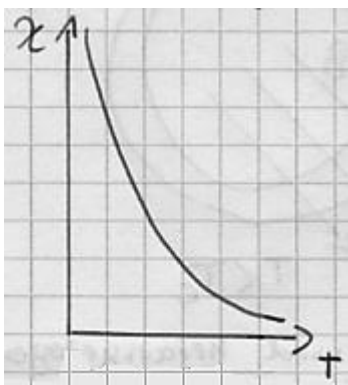


Bei welcher Temperatur findet der Phasenübergang statt?

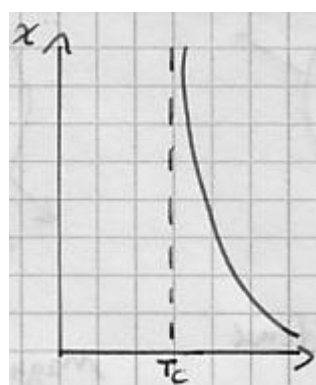
$$|t| = 1 \quad \Rightarrow \quad M = -\frac{N}{V} \cdot \underbrace{\frac{\mu_B^2}{k_B}}_{\frac{C}{T}} \cdot \frac{\lambda}{T} \cdot M$$

$$\Rightarrow T = -\frac{C \cdot \lambda}{\mu_B} = T_N$$

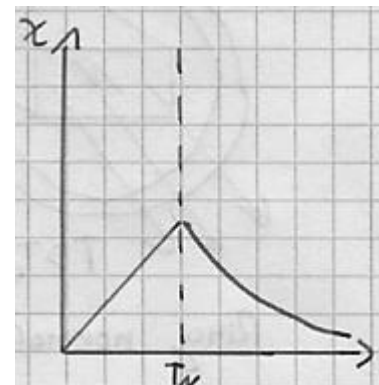
ZUSAMMENFASSUNG



Paramagnetismus



Ferromagnetismus



Antiferromagnetismus

7. SUPRALEITUNG

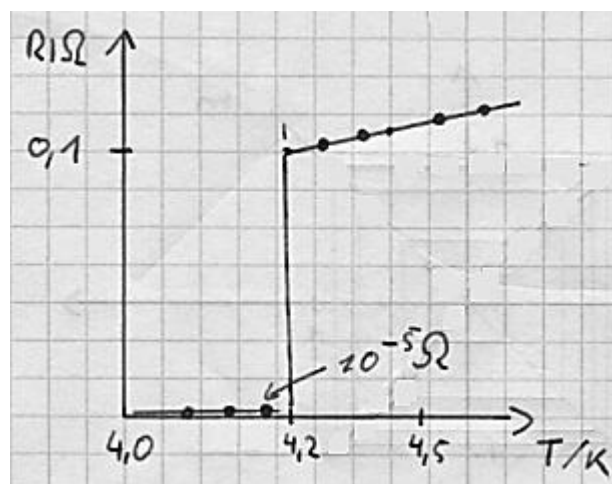
W. Buckel: Supraleitung; Wiley-VCK 2004, 6. Auflage

7.1 EXPERIMENTELLE EVIDENZEN

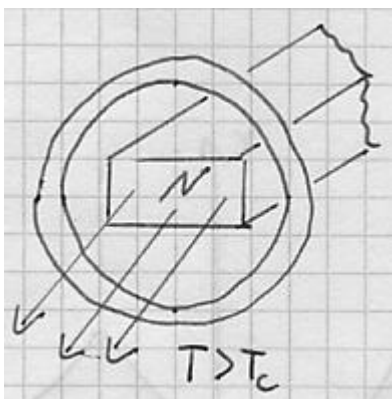
- ELEKTRISCHE LEITFÄHIGKEIT

ERWARTUNG: Bei tiefen Temperaturen „frieren“ die Schwingungsfreiheitsgrade des Gitters ein, wodurch die Streuung der Elektronen an Phononen stark abnimmt, $\rho(T) \sim T^5$. Es verbleibt ein Restwiderstand durch Verunreinigungen und Fehlstellen.

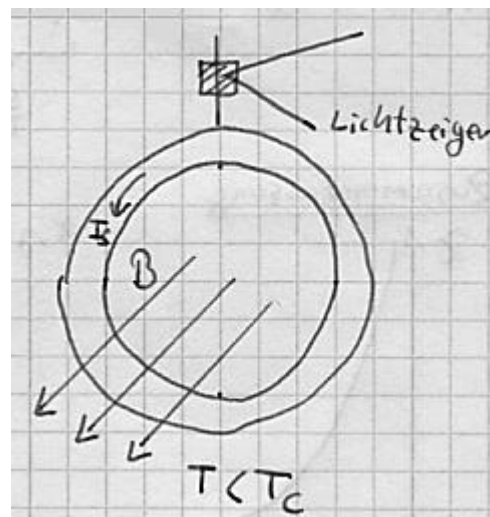
BEOBACHTUNG (KAMERLINGH-ONNES, 1911):



Der elektrische Widerstand $\rho = \sigma^{-1}$ von vielen Metallen und Legierungen verschwindet sprunghaft unterhalb einer kritischen Temperatur T_C .



$T > T_C$: Ring normalleitend



$T < T_C$: Magnet wird herausgezogen und induziert Strom

$$I(t) = I_0 \cdot e^{-\frac{R}{L}t}$$

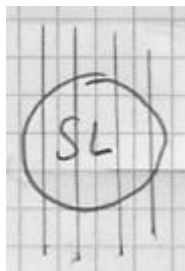
ERGEBNIS: Widerstand sinkt bei T_S um mindestens 14 Größenordnungen!

- SUPRALEITER SIND IDEALE DIAMAGNETEN, D.H. $\chi = -1$

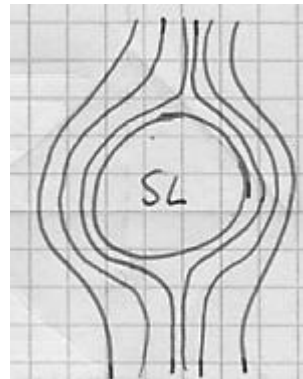
⚡ VORSTELLUNG: Vorhandene Magnetfelder werden beim Übergang in den supraleitenden Zustand „eingefroren“. **FALSCH!**

- MEISSNER-OCHSENFELD-EFFEKT (1933)

Bei Abkühlung unter T_S werden vorhandene B -Felder aus dem Inneren des Supraleiters *verdrängt*.



$T > T_c$



$T < T_c$

⇒ Das Ohmsche Gesetz ist nicht mehr gültig!

Beweis: Supraleiter sei ein idealer Leiter mit $\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E}$ mit $\sigma \rightarrow \infty$

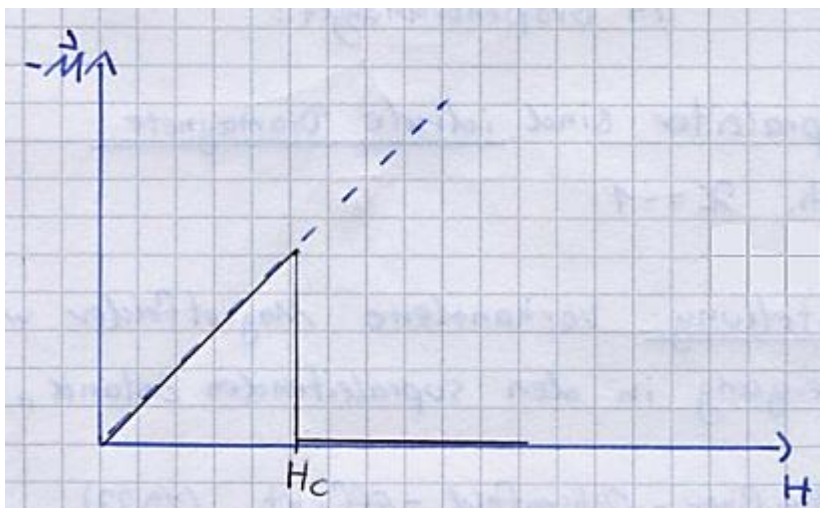
$$\xrightarrow{j \text{ endlich}} \vec{E} = 0$$

$$\xrightarrow{\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\dot{\vec{B}}} \dot{\vec{B}} = 0 \Rightarrow \vec{B} = \text{const. (im Supraleiter)}$$

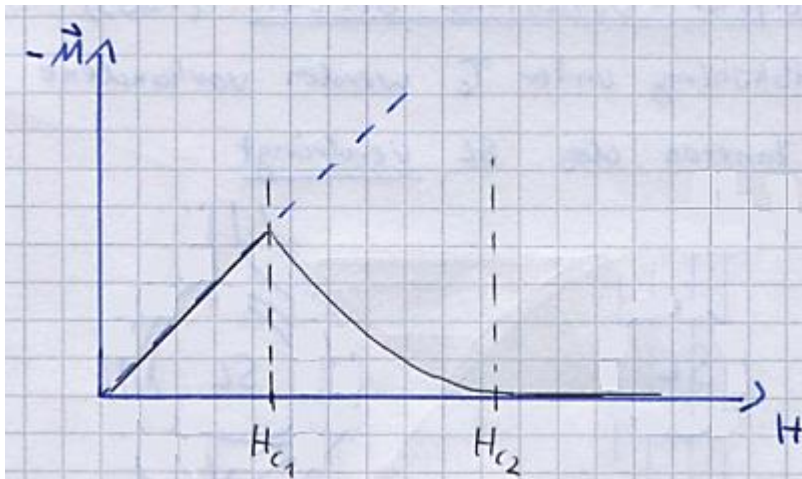
⚡ Experiment

- ES EXISTIEREN SUPRALEITER 1. ART UND 2. ART

Oberhalb einer kritischen Magnetfeldstärke $H_c(T)$ bricht die Supraleitung zusammen.



Supraleiter 1. Art



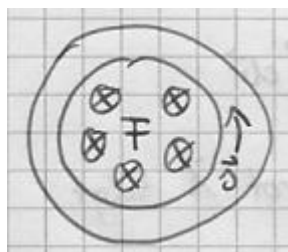
Supraleiter 2. Art

Einzelne Flusslinien des angelegten B -Feldes durchdringen den Supraleiter für $H_{c2} > H > H_{c1}$. Längs dieser Linien ist die Supraleitung aufgehoben (Flussschläuche). Zwischen H_{c1} und H_{c2} wächst die Zahl der Flussschläuche bis für $H > H_{c2}$ keine Supraleitung mehr existiert (Shubikov-Phase). Jeder Flussschlauch ist mit einem elementaren Flussquant von

$$\phi_0 = 2,07 \cdot 10^{-15} \text{ Tm}^2 = \frac{h}{2e}$$

verknüpft!

- DER MAGNETISCHE FLUSS $\phi = \int_T \vec{B} \cdot d\vec{f}$ DURCH EINEN „DICKEN“ SUPRALEITENDEN RING IST QUANTISIERT



$$\phi = L \cdot I$$

$$\phi = n \cdot \phi_0 \quad n \in \mathbb{Z}$$

$$\text{mit } \phi_0 = \frac{h}{2e} \text{ (Fluxoid)}$$

Hinweis auf *makroskopische* Wellenfunktion in der Paare von e^- eine Rolle spielen!

- ISOTOPENEFFEKT

Die Sprungtemperatur T_c hängt von der Kernmasse der Gitteratome ab.

$$T_c \sim \frac{1}{\sqrt{M}}$$

Folgerung: Kopplung an Phononen spielt eine wichtige Rolle.

7.2 THEORETISCHE ANSÄTZE

Schlussfolgerung aus der Quantisierung des Magnetischen Flusses:

IDEE: makroskopische Wellenfunktion (kohärent) mit Wellenvektor $\vec{k}$ erfüllt Quantisierungsbedingung.

$$n \cdot 2\pi = \oint_{\text{Ring}} \vec{k} \cdot d\vec{r}$$

KANONISCHER IMPULS:

$$\overrightarrow{p_{kan}} = m\vec{v} + q\vec{A} = \hbar\vec{k}$$

mit Vektorpotential $\vec{A} \Leftarrow \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$

$$\Rightarrow n \cdot 2\pi = \frac{m}{\hbar} \cdot \oint \vec{v} \cdot d\vec{r} + \frac{q}{\hbar} \cdot \oint \vec{A} \cdot d\vec{r}$$

Mit $\vec{J}_s = 1 \cdot n_s \cdot \vec{v}$ und $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ folgt

$$n \cdot \frac{\hbar}{q} = \frac{m}{q^2 \cdot n_s} \cdot \oint \vec{J}_s \cdot d\vec{r} + \int_T \vec{B} \cdot d\vec{f} = \mu_0 \lambda_L^2 \cdot \underbrace{\oint \vec{J}_s \cdot d\vec{r}}_{\approx 0} + \phi$$

Mit $q = 2e^-$ und der Londonschen Eindringtiefe $\lambda_L = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 \cdot q^2 \cdot n_s}}$

Supraleiter ohne „Loch“ (kein Ring) $\Rightarrow n = 0$

$$\Rightarrow \mu_0 \cdot \lambda_L^2 \cdot \oint \vec{J}_s \cdot d\vec{r}$$

<Hier fehlt noch etwas, wird noch ergänzt>

Stokesscher Satz

$$\Rightarrow \vec{B} = -\mu_0 \lambda_L^2 \cdot \vec{\nabla} \times \vec{J}_s$$

oder

$$\vec{J}_s = -\frac{1}{\mu_0 \cdot \lambda_L^2} \cdot \vec{A}$$

2. Londonsche Gleichung (1935)

((London-Eichung, d.h. $\text{div } \vec{A} = 0$; $A_n = 0$) mit Normalkomponente A_n auf Oberfläche des Supraleiters)

$\Rightarrow$ ersetzt ohmesches Gesetz

BEMERKUNG:

Bewegung der e^- beschreiben wir jetzt durch $\vec{j}$, d.h. $\vec{M} = 0$ ($\vec{B} = \mu_0 \cdot \vec{H}$). Mit

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j} + \underbrace{\vec{D}}_{=0}$$

$$\Rightarrow \vec{\nabla} \times \vec{B} = -\frac{1}{\lambda_L^2} \vec{A} \quad |\vec{\nabla} \times$$

$$\Rightarrow \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \frac{1}{\lambda_L^2} \underbrace{\vec{\nabla} \times \vec{A}}_{=\vec{B}} = \underbrace{\text{grad}(\text{div}(\vec{B}))}_{=0} - \underbrace{\text{div}(\text{grad}(\vec{B}))}_{=0}$$

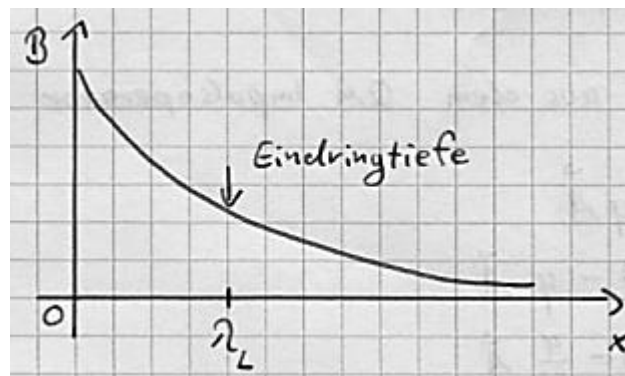
$$\Rightarrow \Delta \vec{B} = +\frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B}$$

BEISPIEL: 1D



$$\Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} B = \frac{1}{\lambda_L^2} B$$

$$\Rightarrow B(x) = B(0) \cdot e^{\pm \frac{x}{\lambda_L}}$$



- ⇒ Erklärung des Meißner-Effekts
- ⇒ Meißner-Effekt tritt bei sehr dünnen Proben nicht auf
- ⇒ typische λ_L = einige 10nm

2) WARUM VERHALTEN SICH DIE e^- SO ANDERS?

⇒ BCS-Theorie: Bardeen, Cooper und Shrieffer formulierten eine Theorie der Elektron-Phonon-Wechselwirkung, die zu einer effektiv anziehenden Wechselwirkung führt (Analogie zu Kugeln auf einer Gummihaut).

⇒ Es bilden sich Cooper-Paare, ein $e^- \uparrow$ paart sich mit einem $e^- \downarrow$ zum Gesamtspin 0. Diese Paare verhalten sich wie *Bosonen*.

3) KÖNNEN WIR HIERMIT DIE FLUSSQUANTISIERUNG VERSTEHEN?

Ansatz für bes. Wellenfunktion:

$$\psi(\vec{r}) = \sqrt{n_c} \cdot e^{i\theta(\vec{r})}$$

$n_c \neq n_c(\vec{r})$ ist Dichte der Cooper-Paare $= |\psi|^2$

mit der Stromdichte $\vec{j}$ (aus QM), dabei ist q die Ladung eines Cooper-Paares

$$\vec{j} = q \cdot \psi^* \cdot \vec{v} \psi$$

$\vec{v}$ erhalten wir aus dem quantenmechanischen Impulsoperator

$$\begin{aligned} \hat{p} &\rightarrow \hat{p} - q\vec{A} = -i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A} \\ \Rightarrow \hat{v} &= -\frac{i\hbar}{m}\vec{\nabla} - \frac{q}{m}\vec{A} \\ \Rightarrow \vec{j} &= q \cdot \sqrt{n_c} \cdot e^{-i\theta(\vec{r})} \left(-\frac{i\hbar}{m}\vec{\nabla} - \frac{q}{m}\vec{A} \right) \cdot \sqrt{n_c} \cdot e^{i\theta(\vec{r})} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \vec{j} = \frac{qn_c}{m} \cdot (\hbar\vec{\nabla}\theta - q\vec{A}) \quad |\vec{\nabla} \times$$

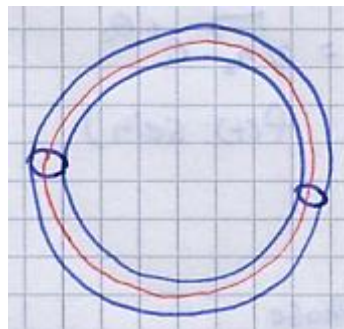
$$\text{rot}(\vec{j}) = -\frac{q^2 n_c}{m} \cdot \text{rot}(\vec{A})$$

mit London-Gleichung (Rotation)

$$\Rightarrow \text{rot}(\vec{j}) = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \cdot \text{rot}(\vec{A})$$

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

BEISPIEL: „dicker“ supraleitender Ring



Integrationsweg

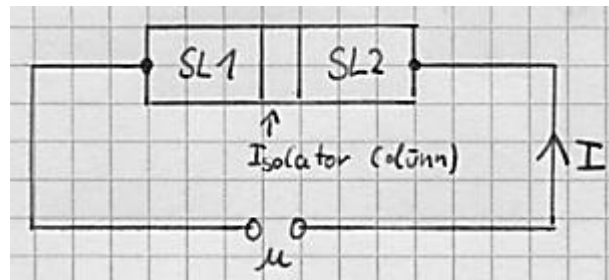
Im Inneren: $\vec{j} = 0$

$$\begin{aligned} \Rightarrow 0 &= \oint \frac{qn_c}{m} (\hbar\vec{\nabla}\theta - q\vec{A}) d\vec{r} \\ \Rightarrow \frac{qn_c}{m} \cdot \underbrace{\oint \vec{\nabla}\theta d\vec{r}}_{=n \cdot 2\pi; n \in \mathbb{Z}} &= \frac{q^2 n_c}{m} \cdot \underbrace{\oint \vec{\nabla} \times \vec{A} \cdot d\vec{F}}_{\text{magnetischer Fluss } \Phi} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Phi = n \cdot \frac{h}{q} = n \cdot \frac{h}{2e}$$

¹ Wegen Eindeutigkeit von $\psi(\vec{r}_0)$

7.3 DER JOSEPHSON-KONTAKT



Falls die beiden Supraleiter isoliert wären, dann würde gelten:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \hat{H} \psi_1 = E_1 \psi_1 + \hbar T \psi_2$$

$$i\hbar \cdot \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \hat{H} \psi_2 = E_2 \psi_2 + \hbar T \psi_1$$

$T \triangleq$ Tunnelrate, $[T] = \frac{1}{s}$ Phänomenologisch: $T = f(\text{Isolatordichte})$

ANSATZ: (analog Flussquantisierung)

$$\underbrace{\psi_1 = \sqrt{n_1} e^{i\theta_1} \quad \psi_2 = \sqrt{n_2} e^{i\theta_2}}_{\text{alle Größen: } f(t)}$$

EINSETZEN: ...

Zerlegen in Amplitude und Phase

$$\Rightarrow \frac{1}{2} \dot{n}_1 = 2T \sqrt{n_1 n_2} \cdot \sin(\theta_2 - \theta_1)$$

$$\dot{\theta}_1 = -T \cdot \sqrt{\frac{n_2}{n_1}} \cdot \cos(\theta_2 - \theta_1) - \frac{E_1}{\hbar}$$

$$\frac{1}{2} \dot{n}_2 = 2T \sqrt{n_1 n_2} \cdot \sin(\theta_1 - \theta_2)$$

$$\dot{\theta}_2 = -T \cdot \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} \cdot \cos(\theta_1 - \theta_2) - \frac{E_2}{\hbar}$$

Es gelte $n_1 = n_2$

Teilchenstrom $\sim$ elektrischem Strom $\sim \dot{n}_1 = -\dot{n}_2$

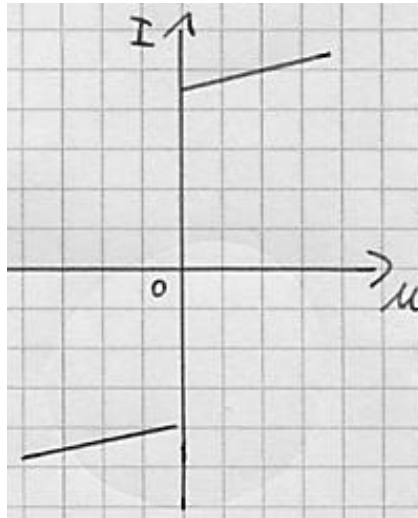
$$\frac{\partial}{\partial t} (\theta_2 - \theta_1) = -\frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

1) GLEICHSTROM JOSEPHSON-EFFEKT

d.h. keine externe Spannung $E_2 - E_1 = 0$

$$\Rightarrow \theta_2 - \theta_1 = \text{const.}$$

- ⇒ $\dot{n}_1 = -\dot{n}_2 = \text{const} \neq 0$ i. A.
- ⇒ Strom ohne externe Spannung ($U = 0$)
- ⇒ Aufladung



2) WECHSELSTROM-JOSEPHSON-EFFEKT

externe Spannung: $E_2 - E_1 = -2e \cdot U$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\theta_2 - \theta_1) &= \frac{2eU}{\hbar} \\ \Rightarrow (\theta_2 - \theta_1) &= \frac{2eU}{\hbar} \cdot t + \phi_0 \\ \Rightarrow \frac{1}{2}\dot{n}_1 &= 2Tn_1 \cdot \sin\left(\frac{2eU}{\hbar} \cdot t + \phi_0\right) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow I = I_0 \cdot \sin\left(\frac{2eU}{\hbar} \cdot t + \phi_0\right)$$

- ⇒ Oszillation des Stroms bei konstanter angelegter Spannung
- ⇒ Präzisionsbestimmung von $\frac{e}{\hbar}$
- ⇒ z.B. $U = 1\text{mV} \Rightarrow 0,5\text{THz}$ Frequenz