



Diese Veranstaltung wird aufgezeichnet und als Medien-Cast über KIT - ILIAS bereit gestellt

Nur zur KIT-internen vorlesungsbegleitenden Nutzung, Weitergabe & anderweitige Verwendung ist untersagt

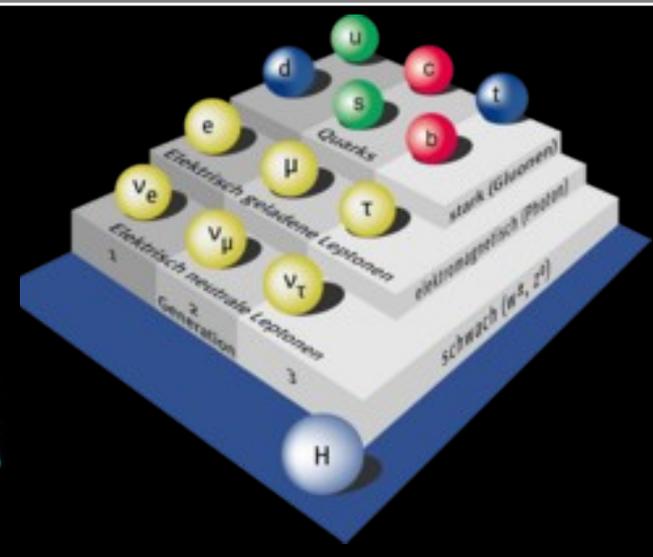
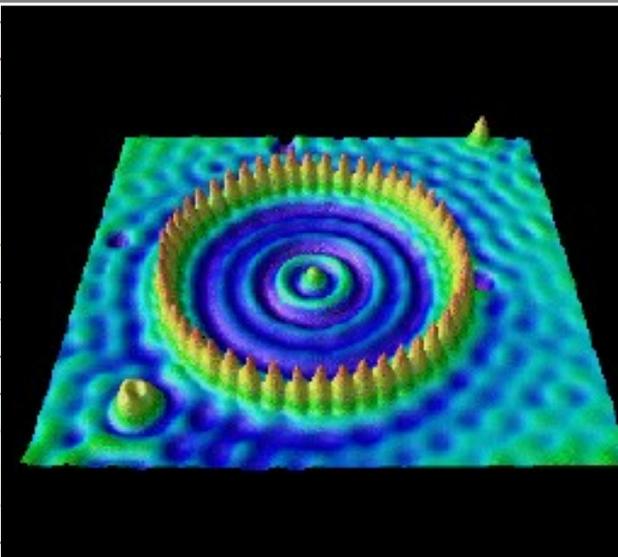
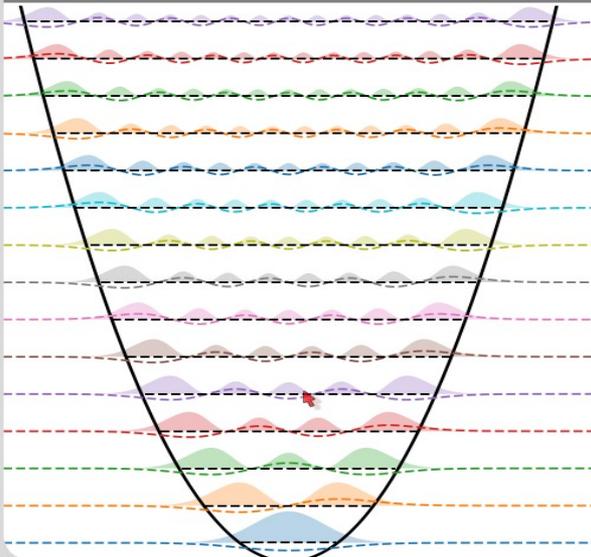
# Vorlesung **Moderne Physik (L)**

## Wärmekapazität und Elektronen im Festkörper

**Günter Quast**

Fakultät für Physik  
Institut für Experimentelle Teilchenphysik

SS '20



**Klausurprüfung** für Geophysik und Meteorologie:

in der aktuellen Situation werden (große) Klausurprüfungen am KIT zentral koordiniert.

Für Mod. Phys. (L) habe ich

Di. oder Mi. 9:00 – 12:00 am 4./5. oder 11./12. August

als Termine beantragt.

Es wird im Herbst eine lt. Prüfungsordnung vorgeschriebene Nachklausur geben.

**Anmeldung zur Prüfung in Campus ist erforderlich** und wird freigeschaltet, wenn die Vorleistungen eingetragen sind.

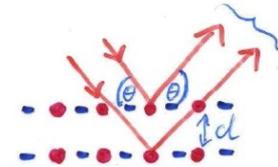
Auch zur Verbuchung der Vorleistung („Übungsschein“) ist die Anmeldung im Campus-System erforderlich.

**Falls noch nicht geschehen, bitte umgehend erledigen !**

**Termine für Mündliche Prüfungen** für Lehramt werden individuell vereinbart. Terminblöcke sind für Mitte August und Ende September vorgesehen.

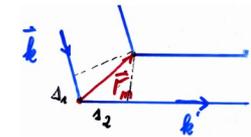
- Bragg-Reflexion

- Beugung an hintereinander liegenden Ebenen von Streuzentren
- Einfallswinkel = Ausfallswinkel UND  $2d \sin \theta = n \cdot \lambda$   $n = 1, 2, \dots$ 
  - \*  $d$ : Ebenen-Abstand
  - \*  $\theta$ : Einfallswinkel



- Laue-Bedingung

- Abstand zweier Streuzentren gegeben durch Gittervektor  $\vec{r}_m$
- der Gangunterschied ist gegeben durch  $\Delta = \Delta_1 + \Delta_2 = -\frac{\vec{k}}{k} \cdot \vec{r}_m + \frac{\vec{k}'}{k'} \cdot \vec{r}_m$
- konstruktive Interferenz für  $\Delta = n \lambda$ ,  $n$  ganzzahlig  
oder  $\Delta \vec{k} = \vec{k}' - \vec{k} = n \cdot 2\pi$ ,  $n$  ganzzahlig
- Vektoren  $\Delta \vec{k}$ , die diese Bedingung erfüllen, nennt man "reziproke Gittervektoren"  $\vec{G}^*$ , konstruktive Interferenz ergibt sich, falls die Änderung des Wellenvektors einem reziproken Gittervektor entspricht,  $\Delta \vec{k} = \vec{G}^*$
- das reziproke Gitter erhält man durch Fourier-Transformation des Gitters im Ortsraum
- alternativ kann man die Laue-Bedingung schreiben als  $\vec{k} \cdot \vec{G}^* + \frac{1}{2} G^{*2} = 0$ ;  
Dies ist eine Ebenengleichung in der Hesse-Normalform; die Wellenvektoren  $\vec{k}$ , für die konstruktive Interferenz beobachtet wird, liegen also auf den Mittelebenen der Verbindungslinien von reziproken Gitterpunkten!



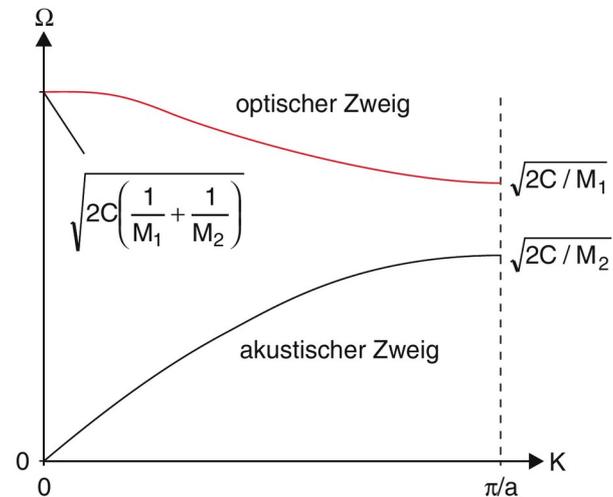
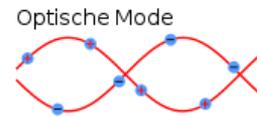
- die Bragg- und Laue-Bedingungen sind äquivalent;  
jeder Ebenenschar im Kristall entspricht genau ein Punkt im reziproken Gitter

– Gitter bildet System von gekoppelten (harmonischen) Oszillatoren

– Energieaufnahme in Quanten („Phononen“),  $E_{Phonon} = \hbar\omega$ ,  $p_{Phonon} = \frac{\hbar}{\lambda} = \hbar k$

– Dispersion:  $\omega(k) \approx v_{Schall} \cdot k$  (für kleine  $k$ )

\* für  $k \approx \frac{\pi}{a}$  bilden sich stehende Wellen,  $\frac{\partial\omega}{\partial k} = 0$



# Inhaltsübersicht VL Moderne Physik

- 1) Einführung
- 2) Wiederholung wichtiger Konzepte der klassischen Physik
- 3) Spezielle Relativitätstheorie
- 4) Schlüsselexperimente und Grundlagen der Quantenphysik
- 5) Die Schrödingergleichung
- 6) Anwendungen der Schrödingergleichung
- 7) Das Wasserstoff-Atom
- 8) Atome mit mehreren Elektronen
- 9) Wechselwirkung von Licht und Materie
- 10) **Grundlagen der Festkörperphysik**
- 11) Kern- und Teilchenphysik
- 12) Ausblick

# Anwendung Gitterschwingungen: Wärmekapazität

Zunächst nur Beitrag des Gitters (Elektronenbeitrag später)

Benötigte Wärmezufuhr zur  
Temperaturänderung eines Stoffes

$$c_V = \frac{\Delta Q}{m\Delta T}$$

Wärmezufuhr

Temperaturänderung

# Anwendung Gitterschwingungen: Wärmekapazität

Zunächst nur Beitrag des Gitters (Elektronenbeitrag später)

Benötigte Wärmezufuhr zur  
Temperaturänderung eines Stoffes

$$c_V = \frac{\Delta Q}{m\Delta T}$$

Wärmezufuhr

Temperaturänderung

- **Thermodynamik:** innere Energie  $U = \langle E \rangle$  (z.B. Erwartungswert der kin. Energie einzelner Atome)

↓  
Spezifische Wärmekapazität:

# Anwendung Gitterschwingungen: Wärmekapazität

Zunächst nur Beitrag des Gitters (Elektronenbeitrag später)

Benötigte Wärmezufuhr zur  
Temperaturänderung eines Stoffes

$$c_V = \frac{\Delta Q}{m\Delta T}$$

Wärmezufuhr

Temperaturänderung

- **Thermodynamik:** innere Energie  $U = \langle E \rangle$  (z.B. Erwartungswert der kin. Energie einzelner Atome)

↓  
Spezifische Wärmekapazität:

$$c_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V=const.}$$

# Anwendung Gitterschwingungen: Wärmekapazität

Zunächst nur Beitrag des Gitters (Elektronenbeitrag später)

Benötigte Wärmezufuhr zur  
Temperaturänderung eines Stoffes

$$c_V = \frac{\Delta Q}{m \Delta T}$$

Wärmezufuhr

Temperaturänderung

- **Thermodynamik:** innere Energie  $U = \langle E \rangle$  (z.B. Erwartungswert der kin. Energie einzelner Atome)

↓  
Spezifische Wärmekapazität:

$$c_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V=const.}$$

## Erinnerung:

klassisch für Kristalle mit  
3 Translationsfreiheitsgraden:

**Dulong-Petit-Gesetz:**  $c_V = 3 R = 3 N k_B$

# Anwendung Gitterschwingungen: Wärmekapazität

Zunächst nur Beitrag des Gitters (Elektronenbeitrag später)

Benötigte Wärmezufuhr zur  
Temperaturänderung eines Stoffes

$$c_V = \frac{\Delta Q}{m \Delta T}$$

Wärmezufuhr

Temperaturänderung

- **Thermodynamik:** innere Energie  $U = \langle E \rangle$  (z.B. Erwartungswert der kin. Energie einzelner Atome)

↓  
Spezifische Wärmekapazität:

$$c_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V=const.}$$

## Erinnerung:

klassisch für Kristalle mit  
3 Translationsfreiheitsgraden:

**Dulong-Petit-Gesetz:**  $c_V = 3 R = 3 N k_B$

ok für Raumtemperatur, aber

experimentell  $c_V \propto T^3$  für  $T \rightarrow 0$

# Wärmekapazität

**Erinnerung:** klassische Vorgehensweise

N Atome im Festkörper  $\rightarrow$  3N Schwingungsmoden  
mit je kinetischer und potentieller Energie (Faktor 2)  $\rightarrow$

# Wärmekapazität

**Erinnerung:** klassische Vorgehensweise

N Atome im Festkörper  $\rightarrow$  3N Schwingungsmoden  
mit je kinetischer und potentieller Energie (Faktor 2)  $\rightarrow$

$$U(T) = n_f \cdot N \left[ \frac{1}{2} k_B T \right] = 2 \cdot 3N \cdot k_B T = 3Nk_B T$$

# Wärmekapazität

**Erinnerung:** klassische Vorgehensweise

N Atome im Festkörper  $\rightarrow$  3N Schwingungsmoden

mit je kinetischer und potentieller Energie (Faktor 2)  $\rightarrow$

$$U(T) = n_f \cdot N \left[ \frac{1}{2} k_B T \right] = 2 \cdot 3N \cdot k_B T = 3N k_B T \quad \Rightarrow \quad c_v = \frac{dU}{dT} = 3N k_B$$

# Wärmekapazität

**Erinnerung:** klassische Vorgehensweise

N Atome im Festkörper  $\rightarrow$  3N Schwingungsmoden

mit je kinetischer und potentieller Energie (Faktor 2)  $\rightarrow$

$$U(T) = n_f \cdot N \left[ \frac{1}{2} k_B T \right] = 2 \cdot 3N \cdot k_B T = 3N k_B T \quad \Rightarrow \quad c_v = \frac{dU}{dT} = 3N k_B$$

Analog zum Problem der Schwarzkörper-Strahlung postulierte Albert Einstein dass analog auch Schwingungsenergie nur in **Quanten**  $E_{\text{vib}} = \hbar \Omega_{\text{vib}}$  vom Festkörper aufgenommen bzw. abgegeben werden können.

# Wärmekapazität

**Erinnerung:** klassische Vorgehensweise

N Atome im Festkörper  $\rightarrow$  3N Schwingungsmoden

mit je kinetischer und potentieller Energie (Faktor 2)  $\rightarrow$

$$U(T) = n_f \cdot N \left[ \frac{1}{2} k_B T \right] = 2 \cdot 3N \cdot k_B T = 3N k_B T \quad \Rightarrow \quad c_v = \frac{dU}{dT} = 3N k_B$$

Analog zum Problem der Schwarzkörper-Strahlung postulierte Albert Einstein dass analog auch Schwingungsenergie nur in **Quanten**  $E_{\text{vib}} = \hbar \Omega_{\text{vib}}$  vom Festkörper aufgenommen bzw. abgegeben werden können.

Stark vereinfachend nahm Einstein an, dass alle Gitterbausteine mit der gleichen Frequenz  $\Omega_{\text{vib}}$  schwingen. Er erhielt das Ergebnis:

# Wärmekapazität

**Erinnerung:** klassische Vorgehensweise

N Atome im Festkörper  $\rightarrow$  3N Schwingungsmoden

mit je kinetischer und potentieller Energie (Faktor 2)  $\rightarrow$

$$U(T) = n_f \cdot N \left[ \frac{1}{2} k_B T \right] = 2 \cdot 3N \cdot k_B T = 3N k_B T \Rightarrow c_v = \frac{dU}{dT} = 3N k_B$$

Analog zum Problem der Schwarzkörper-Strahlung postulierte Albert Einstein dass analog auch Schwingungsenergie nur in **Quanten**  $E_{\text{vib}} = \hbar \Omega_{\text{vib}}$  vom Festkörper aufgenommen bzw. abgegeben werden können.

Stark vereinfachend nahm Einstein an, dass alle Gitterbausteine mit der gleichen Frequenz  $\Omega_{\text{vib}}$  schwingen. Er erhielt das Ergebnis:

$$U = 3N \frac{\hbar \Omega_{\text{vib}}}{\exp\left(\frac{\hbar \Omega_{\text{vib}}}{k_B T}\right) - 1}$$

Rechnung ganz analog  
zu Einsteins Herleitung  
des Planck'schen  
Strahlungsgesetzes

# Wärmekapazität

**Erinnerung:** klassische Vorgehensweise

N Atome im Festkörper  $\rightarrow$  3N Schwingungsmoden  
mit je kinetischer und potentieller Energie (Faktor 2)  $\rightarrow$

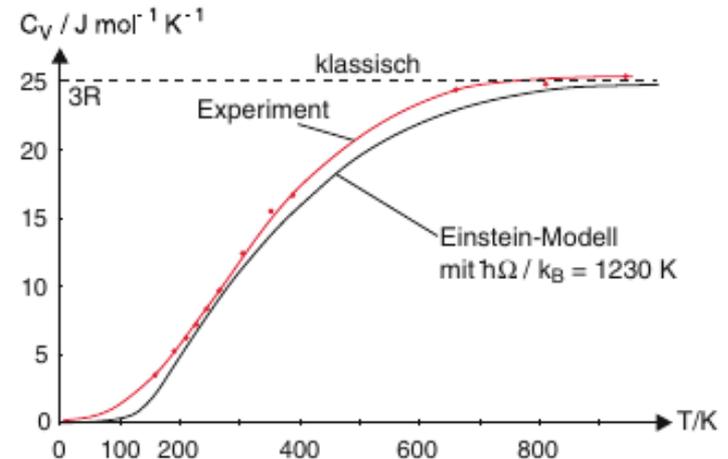
$$U(T) = n_f \cdot N \left[ \frac{1}{2} k_B T \right] = 2 \cdot 3N \cdot k_B T = 3N k_B T \Rightarrow c_v = \frac{dU}{dT} = 3N k_B$$

Analog zum Problem der Schwarzkörper-Strahlung postulierte Albert Einstein dass analog auch Schwingungsenergie nur in **Quanten**  $E_{\text{vib}} = \hbar\Omega_{\text{vib}}$  vom Festkörper aufgenommen bzw. abgegeben werden können.

Stark vereinfachend nahm Einstein an, dass alle Gitterbausteine mit der gleichen Frequenz  $\Omega_{\text{vib}}$  schwingen. Er erhielt das Ergebnis:

$$U = 3N \frac{\hbar\Omega_{\text{vib}}}{\exp\left(\frac{\hbar\Omega_{\text{vib}}}{k_B T}\right) - 1}$$

Rechnung ganz analog zu Einsteins Herleitung des Planck'schen Strahlungsgesetzes



# Wärmekapazität

**Erinnerung:** klassische Vorgehensweise

N Atome im Festkörper  $\rightarrow$  3N Schwingungsmoden  
mit je kinetischer und potentieller Energie (Faktor 2)  $\rightarrow$

$$U(T) = n_f \cdot N \left[ \frac{1}{2} k_B T \right] = 2 \cdot 3N \cdot k_B T = 3N k_B T \Rightarrow c_v = \frac{dU}{dT} = 3N k_B$$

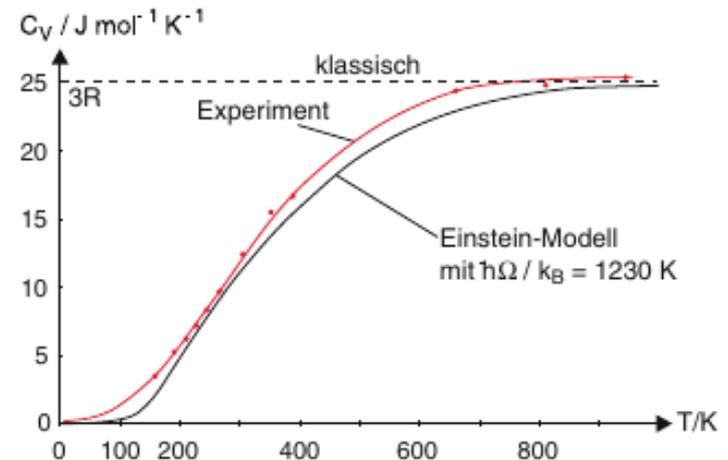
Analog zum Problem der Schwarzkörper-Strahlung postulierte Albert Einstein dass analog auch Schwingungsenergie nur in **Quanten**  $E_{\text{vib}} = \hbar\Omega_{\text{vib}}$  vom Festkörper aufgenommen bzw. abgegeben werden können.

Stark vereinfachend nahm Einstein an, dass alle Gitterbausteine mit der gleichen Frequenz  $\Omega_{\text{vib}}$  schwingen. Er erhielt das Ergebnis:

$$U = 3N \frac{\hbar\Omega_{\text{vib}}}{\exp\left(\frac{\hbar\Omega_{\text{vib}}}{k_B T}\right) - 1}$$

Rechnung ganz analog zu Einsteins Herleitung des Planck'schen Strahlungsgesetzes

Damit geht die Wärmekapazität tatsächlich mit T gegen Null, beschreibt aber die experimentellen Daten nicht perfekt !



# Wärmekapazität (2)

Wir haben mittlerweile alle Werkzeuge, um Einsteins Rechnung zu verbessern  
(wie es schon Debye getan hat)

# Wärmekapazität (2)

Wir haben mittlerweile alle Werkzeuge, um Einsteins Rechnung zu verbessern  
(wie es schon Debye getan hat)

Erinnerung Vorlesung Quantenstatistik:  $\langle E \rangle = \int dE E \cdot D(E) \cdot f(T, E)$

# Wärmekapazität (2)

Wir haben mittlerweile alle Werkzeuge, um Einsteins Rechnung zu verbessern  
(wie es schon Debye getan hat)

Erinnerung Vorlesung Quantenstatistik:  $\langle E \rangle = \int dE E \cdot D(E) \cdot f(T, E)$

Die Zustandsdichte berechnen wir über die Zahl der Moden stehender Wellen im Volumen V:

mögliche Wellenvektoren:  $\vec{k}_n^2 = \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$

# Wärmekapazität (2)

Wir haben mittlerweile alle Werkzeuge, um Einsteins Rechnung zu verbessern  
(wie es schon Debye getan hat)

Erinnerung Vorlesung Quantenstatistik:  $\langle E \rangle = \int dE E \cdot D(E) \cdot f(T, E)$

Die Zustandsdichte berechnen wir über die Zahl der Moden stehender Wellen im Volumen V:

mögliche Wellenvektoren:  $\vec{k}_n^2 = \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$

für Phononen gibt es zwei transversale  
und eine longitudinale Mode → Faktor 3

# Wärmekapazität (2)

Wir haben mittlerweile alle Werkzeuge, um Einsteins Rechnung zu verbessern  
(wie es schon Debye getan hat)

Erinnerung Vorlesung Quantenstatistik:  $\langle E \rangle = \int dE E \cdot D(E) \cdot f(T, E)$

Die Zustandsdichte berechnen wir über die Zahl der Moden stehender Wellen im Volumen  $V$ :

mögliche Wellenvektoren:  $\vec{k}_n^2 = \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$

für Phononen gibt es zwei transversale  
und eine longitudinale Mode → Faktor 3

→ Zahl der Zustände:  $Z(|\vec{k}|) = 3 \cdot \frac{1}{6\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

# Wärmekapazität (2)

Wir haben mittlerweile alle Werkzeuge, um Einsteins Rechnung zu verbessern  
(wie es schon Debye getan hat)

Erinnerung Vorlesung Quantenstatistik:  $\langle E \rangle = \int dE E \cdot D(E) \cdot f(T, E)$

Die Zustandsdichte berechnen wir über die Zahl der Moden stehender Wellen im Volumen V:

mögliche Wellenvektoren:  $\vec{k}_n^2 = \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$

für Phononen gibt es zwei transversale  
und eine longitudinale Mode → Faktor 3

→ Zahl der Zustände:  $Z(|\vec{k}|) = 3 \cdot \frac{1}{6\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V = 3 \frac{V}{6\pi^2} \frac{\omega_k^3}{v_p^3}$

# Wärmekapazität (2)

Wir haben mittlerweile alle Werkzeuge, um Einsteins Rechnung zu verbessern  
(wie es schon Debye getan hat)

Erinnerung Vorlesung Quantenstatistik:  $\langle E \rangle = \int dE E \cdot D(E) \cdot f(T, E)$

Die Zustandsdichte berechnen wir über die Zahl der Moden stehender Wellen im Volumen V:

mögliche Wellenvektoren:  $\vec{k}_n^2 = \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$

für Phononen gibt es zwei transversale  
und eine longitudinale Mode → Faktor 3

→ Zahl der Zustände:  $Z(|\vec{k}|) = 3 \cdot \frac{1}{6\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V = 3 \frac{V}{6\pi^2} \frac{\omega_k^3}{v_p^3}$

vereinfachende Annahme:  $v_p^{\text{long}} = v_p^{\text{trans}}$

ggf. mitteln:  $\left\langle \frac{1}{v_p} \right\rangle = \frac{1}{3} \left( \frac{2}{v_p^{\text{trans}}} + \frac{1}{v_p^{\text{long}}} \right)$

# Wärmekapazität (2)

Wir haben mittlerweile alle Werkzeuge, um Einsteins Rechnung zu verbessern  
(wie es schon Debye getan hat)

Erinnerung Vorlesung Quantenstatistik:  $\langle E \rangle = \int dE E \cdot D(E) \cdot f(T, E)$

Die Zustandsdichte berechnen wir über die Zahl der Moden stehender Wellen im Volumen V:

mögliche Wellenvektoren:  $\vec{k}_n^2 = \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$

für Phononen gibt es zwei transversale  
und eine longitudinale Mode → Faktor 3

→ Zahl der Zustände:  $Z(|\vec{k}|) = 3 \cdot \frac{1}{6\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V = 3 \frac{V}{6\pi^2} \frac{\omega_k^3}{v_p^3}$

vereinfachende Annahme:  $v_p^{\text{long}} = v_p^{\text{trans}}$

ggf. mitteln:  $\left\langle \frac{1}{v_p} \right\rangle = \frac{1}{3} \left( \frac{2}{v_p^{\text{trans}}} + \frac{1}{v_p^{\text{long}}} \right)$

→ Zustandsdichte:  $D(E) = E(\omega_k(E)) = \frac{dZ}{d\omega_k} = \frac{3}{2} \frac{V}{\pi^2} \frac{\omega_k}{v_p^3}$

# Wärmekapazität (3)

**Normierung:** insgesamt gibt es  $3N$  Zustände für  
Frequenzen zwischen 0 und einer maximalen Frequenz,  
der **Debye-Frequenz**  $\omega_D$

**Normierung:** insgesamt gibt es  $3N$  Zustände für Frequenzen zwischen 0 und einer maximalen Frequenz, der **Debye-Frequenz**  $\omega_D$

$$\int_0^{\omega_D} D(\omega_k) d\omega_k = 3N$$

# Wärmekapazität (3)

**Normierung:** insgesamt gibt es  $3N$  Zustände für Frequenzen zwischen 0 und einer maximalen Frequenz, der **Debye-Frequenz**  $\omega_D$

$$\int_0^{\omega_D} D(\omega_k) d\omega_k = 3N \quad \rightarrow \quad \omega_D = v_p \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N}{V}}$$

# Wärmekapazität (3)

**Normierung:** insgesamt gibt es  $3N$  Zustände für Frequenzen zwischen 0 und einer maximalen Frequenz, der **Debye-Frequenz**  $\omega_D$

$$\int_0^{\omega_D} D(\omega_k) d\omega_k = 3N \quad \rightarrow \quad \omega_D = v_p \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N}{V}}$$

→ **Zustandsdichte:**  $D(\omega_k) = \frac{9N}{\omega_D^3} \omega_k^2$

# Wärmekapazität (3)

**Normierung:** insgesamt gibt es  $3N$  Zustände für Frequenzen zwischen 0 und einer maximalen Frequenz, der **Debye-Frequenz**  $\omega_D$

$$\int_0^{\omega_D} D(\omega_k) d\omega_k = 3N \rightarrow \omega_D = v_p \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N}{V}}$$

→ **Zustandsdichte:**  $D(\omega_k) = \frac{9N}{\omega_D^3} \omega_k^2$

Für Phononen wählen wir die **Bose-Einstein-Verteilung** zur Berechnung der

**inneren Energie**  $U = \langle E \rangle = \int dE E \cdot D(E) \cdot f_{\text{BE}}(T, E)$

# Wärmekapazität (3)

**Normierung:** insgesamt gibt es  $3N$  Zustände für Frequenzen zwischen 0 und einer maximalen Frequenz, der **Debye-Frequenz**  $\omega_D$

$$\int_0^{\omega_D} D(\omega_k) d\omega_k = 3N \rightarrow \omega_D = v_p \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N}{V}}$$

→ **Zustandsdichte:**  $D(\omega_k) = \frac{9N}{\omega_D^3} \omega_k^2$

Für Phononen wählen wir die **Bose-Einstein-Verteilung** zur Berechnung der

**inneren Energie**  $U = \langle E \rangle = \int dE E \cdot D(E) \cdot f_{\text{BE}}(T, E) = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} d\omega_k \frac{\omega_k^2 \cdot (\hbar\omega_k)}{\exp(\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}) - 1}$

# Wärmekapazität (3)

**Normierung:** insgesamt gibt es  $3N$  Zustände für Frequenzen zwischen 0 und einer maximalen Frequenz, der **Debye-Frequenz**  $\omega_D$

$$\int_0^{\omega_D} D(\omega_k) d\omega_k = 3N \rightarrow \omega_D = v_p \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N}{V}}$$

→ **Zustandsdichte:**  $D(\omega_k) = \frac{9N}{\omega_D^3} \omega_k^2$

Für Phononen wählen wir die **Bose-Einstein-Verteilung** zur Berechnung der

**inneren Energie**  $U = \langle E \rangle = \int dE E \cdot D(E) \cdot f_{BE}(T, E) = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} d\omega_k \frac{\omega_k^2 \cdot (\hbar\omega_k)}{\exp(\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}) - 1}$

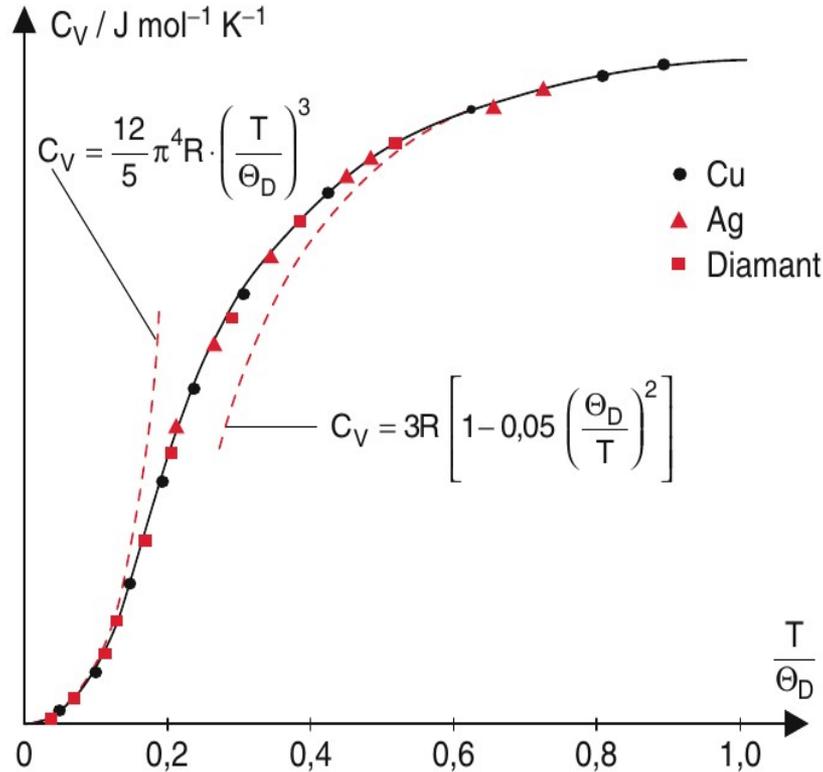
**Berechnung der Wärmekapazität**

$$c_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{9Nk_B T}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} d\omega_k \frac{\omega_k^2 \left(\frac{\hbar\omega_D}{k_B T}\right)^2 \exp\left(\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}\right) - 1\right)^2}$$

$\frac{\hbar\omega_D}{k_B} =: \Theta_D$  nennt man Debye-Temperatur

# Wärmekapazität (4)

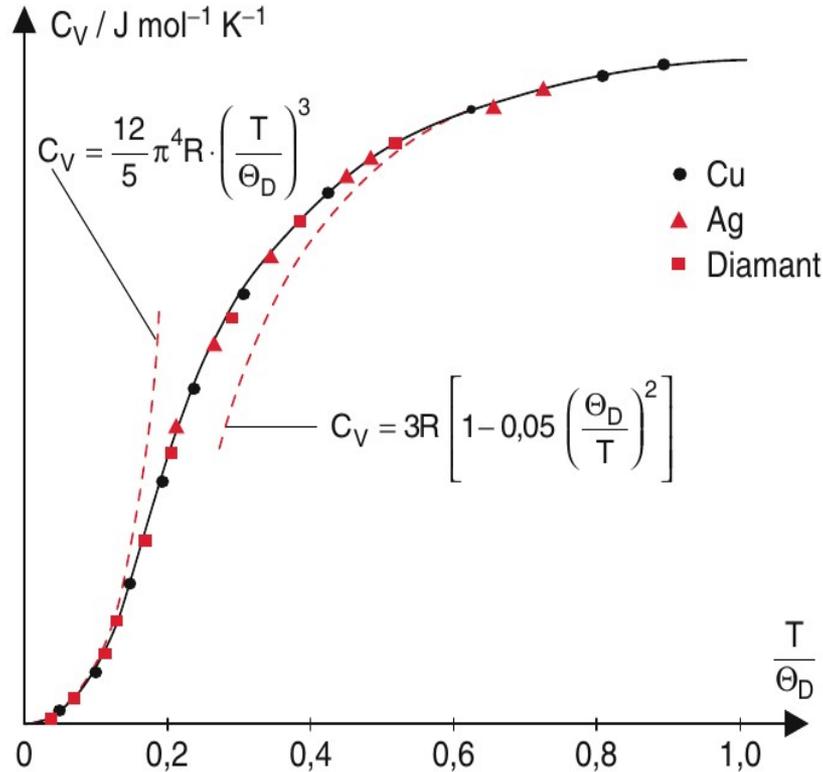
$\frac{\hbar\omega_D}{k_B} =: \Theta_D$  nennt man Debye-Temperatur



$C_V(T)$  im Debye-Modell  
mit experimentellen Werten

# Wärmekapazität (4)

$\frac{\hbar\omega_D}{k_B} =: \Theta_D$  nennt man Debye-Temperatur

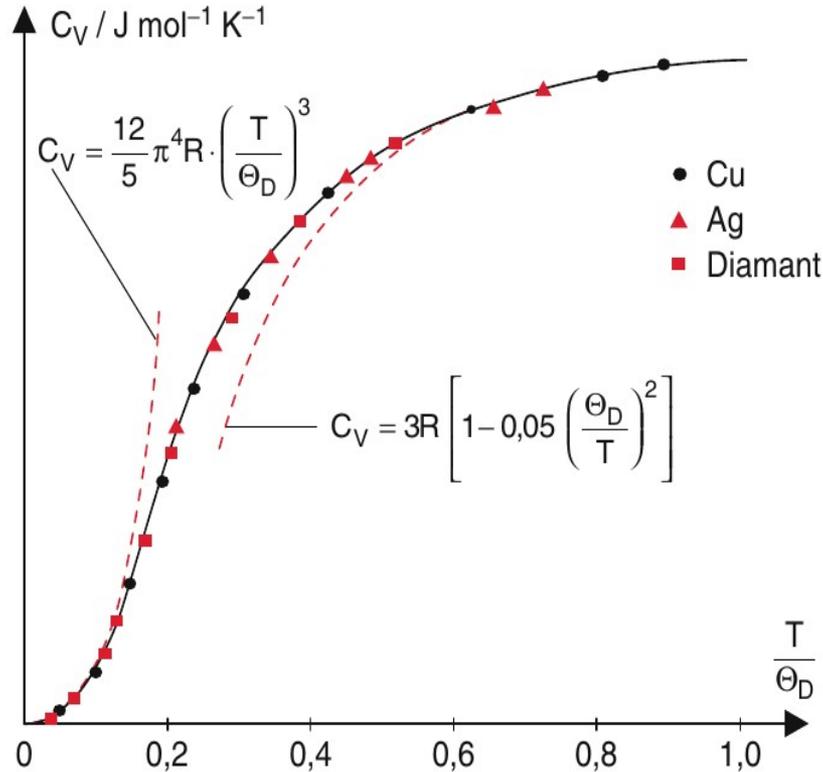


$C_V(T)$  im Debye-Modell  
mit experimentellen Werten

**korrektes Verhalten für  $T \rightarrow 0 \text{ K}$  und  $T \rightarrow \infty$**

# Wärmekapazität (4)

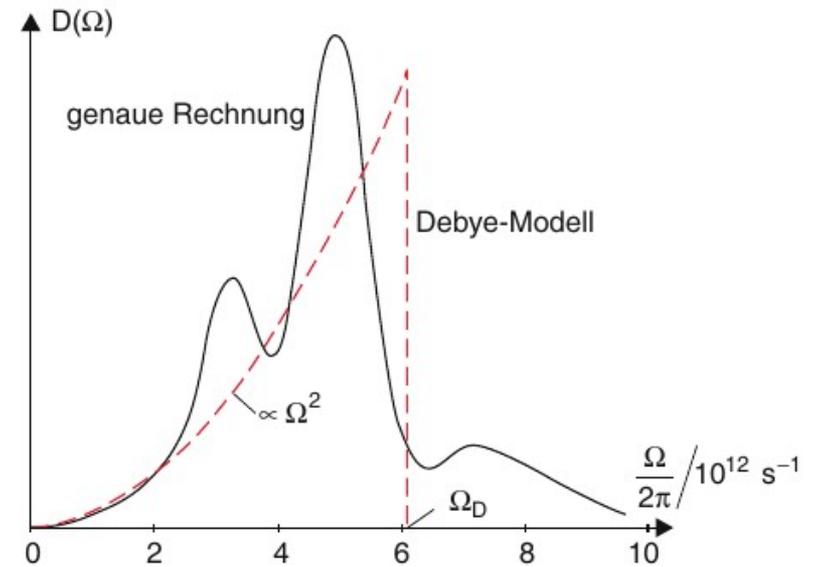
$\frac{\hbar\omega_D}{k_B} =: \Theta_D$  nennt man Debye-Temperatur



$C_V(T)$  im Debye-Modell  
mit experimentellen Werten

**korrektes Verhalten für  $T \rightarrow 0$  K und  $T \rightarrow \infty$**

In der Realität ist die Zustandsdichte komplizierter als im Debye-Modell angenommen:



Zustandsdichte und Debye-Frequenz für NaCl, verglichen mit dem aus gemessenen Kraftkonstanten berechneten Verlauf

## 10.6 Elektronen im Festkörper

## Elektronen bestimmen viele Eigenschaften von Stoffen

Elektronen ...

- ... sind verantwortlich für die Bindung der Gitterbausteine
- **mechanische Eigenschaften** von Festkörpern (Festigkeit, Verformbarkeit, ...)
- **optische Eigenschaften** (Reflexion und Absorption von Licht)

## Elektronen bestimmen viele Eigenschaften von Stoffen

## Elektronen ...

- ... sind verantwortlich für die Bindung der Gitterbausteine
- **mechanische Eigenschaften** von Festkörpern (Festigkeit, Verformbarkeit, ...)
- **optische Eigenschaften** (Reflexion und Absorption von Licht)

- ... sind Ladungsträger und bestimmen elektrische Eigenschaften

**wichtige Messgrößen:**

- elektrischer Leitwert  $\sigma$  bzw. spezifischer Widerstand  $\rho$ , es gibt Leiter und Isolatoren (und „Halbleiter“)
- Dichte der Ladungsträger  $n_e$

## Elektronen bestimmen viele Eigenschaften von Stoffen

## Elektronen ...

- ... sind verantwortlich für die Bindung der Gitterbausteine
- mechanische Eigenschaften von Festkörpern (Festigkeit, Verformbarkeit, ...)
- optische Eigenschaften (Reflexion und Absorption von Licht)

- ... sind Ladungsträger und bestimmen elektrische Eigenschaften

## wichtige Messgrößen:

- elektrischer Leitwert  $\sigma$  bzw. spezifischer Widerstand  $\rho$ , es gibt Leiter und Isolatoren (und „Halbleiter“)
- Dichte der Ladungsträger  $n_e$

- ... sind zahlreicher als Gitterbausteine

und sollten daher die thermischen Eigenschaften bestimmen:

## wichtige Messgrößen:

- spezifische Wärmekapazität  $c_v$
- Wärmeleitwert  $\kappa$  und Zusammenhang mit der elektrischen Leitfähigkeit

Wiedemann-Franz'sches Gesetz (1853):  $\kappa/\sigma \propto T$

# Elektronen im Festkörper (2)

Wir wissen schon viel über das Elektron:

# Elektronen im Festkörper (2)

Wir wissen schon viel über das Elektron:

- als Fermion mit Spin  $\frac{1}{2}$  unterliegt es dem Pauli-Prinzip
- Anordnung in Schalen um den Atomkern bestimmt chemische Eigenschaften und Struktur der Bindung in Festkörpern
- statistisches Verhalten vieler Elektronen beschrieben durch Fermi-Dirac-Verteilung , Zustandsdichte bestimmt durch Welleneigenschaften  
(s. V14: „Elektronengas“)

# Elektronen im Festkörper (2)

Wir wissen schon viel über das Elektron:

- als Fermion mit Spin  $\frac{1}{2}$  unterliegt es dem Pauli-Prinzip
- Anordnung in Schalen um den Atomkern bestimmt chemische Eigenschaften und Struktur der Bindung in Festkörpern
- statistisches Verhalten vieler Elektronen beschrieben durch Fermi-Dirac-Verteilung , Zustandsdichte bestimmt durch Welleneigenschaften  
(s. V14: „Elektronengas“)

Grundlegendes Verständnis der Rolle von Elektronen im Festkörper mit Hilfe zweier Modelle:

- 1) Fermi-Gas freier Elektronen
- 2) Überlagerung und Aufspaltung atomarer Zustände Gitter

# Elektronen im Festkörper (2)

Wir wissen schon viel über das Elektron:

- als Fermion mit Spin  $\frac{1}{2}$  unterliegt es dem Pauli-Prinzip
- Anordnung in Schalen um den Atomkern bestimmt chemische Eigenschaften und Struktur der Bindung in Festkörpern
- statistisches Verhalten vieler Elektronen beschrieben durch Fermi-Dirac-Verteilung, Zustandsdichte bestimmt durch Welleneigenschaften (s. V14: „Elektronengas“)

Grundlegendes Verständnis der Rolle von Elektronen im Festkörper mit Hilfe zweier Modelle:

- 1) Fermi-Gas freier Elektronen
- 2) Überlagerung und Aufspaltung atomarer Zustände Gitter

**Vollständige Beschreibung:**

Stationäre Schrödingergleichung mit periodischen Randbedingungen

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}) \rightarrow |\psi(\vec{r})|^2 = |\psi(\vec{r} + \vec{R})|^2$$

→ **Bloch-Wellen** als Lösungen (s. später)

# Elektronen im Festkörper: Experimente

Bestimmung des Anteils von Elektronen,

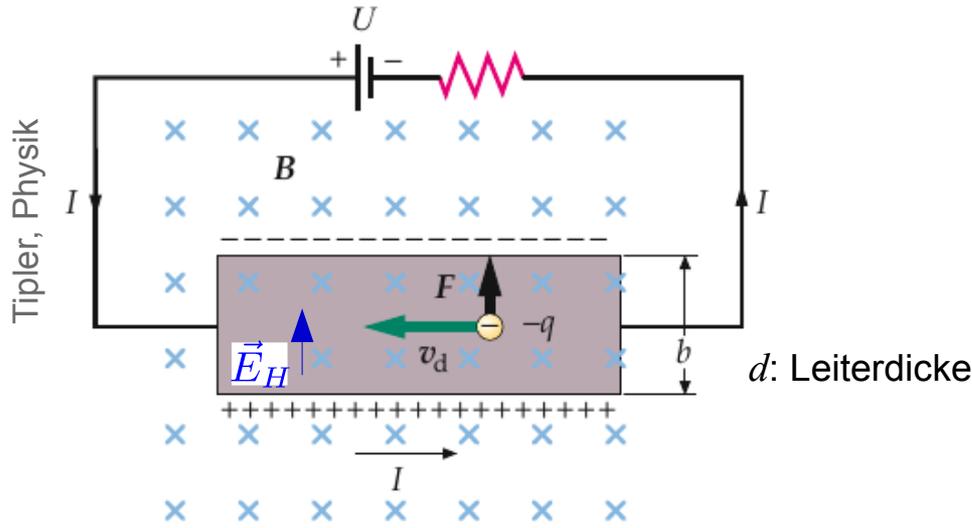
die an der Leitung des elektrischen Stroms beteiligt sind:

**Messung der Elektronendichte  $n_e$  mittels Hall-Effekt**

# Elektronen im Festkörper: Experimente

Bestimmung des Anteils von Elektronen,  
die an der Leitung des elektrischen Stroms beteiligt sind:

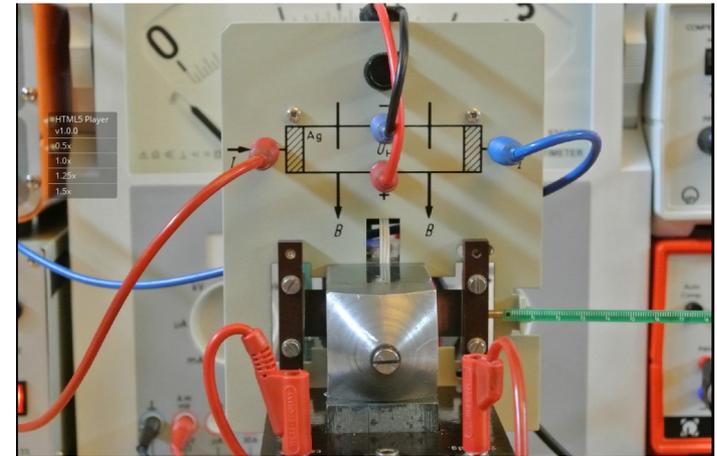
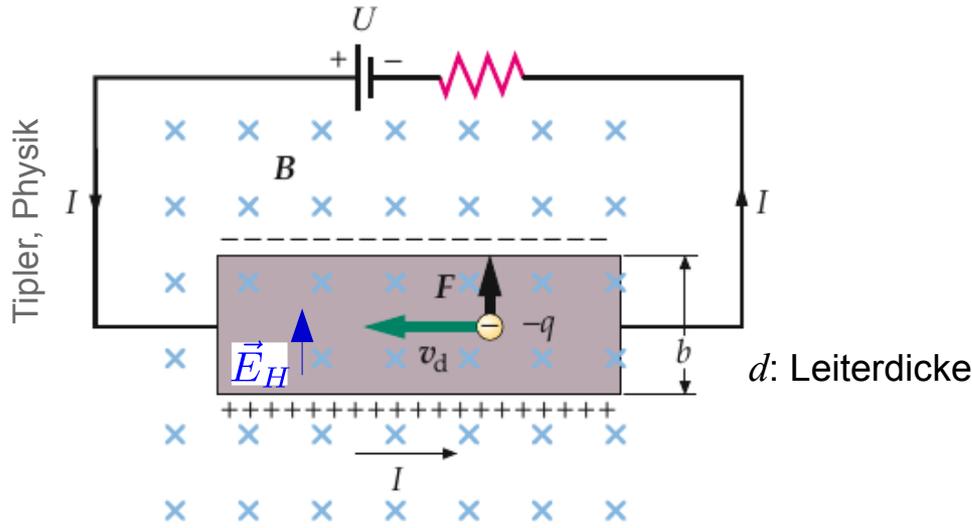
## Messung der Elektronendichte $n_e$ mittels Hall-Effekt



# Elektronen im Festkörper: Experimente

Bestimmung des Anteils von Elektronen,  
die an der Leitung des elektrischen Stroms beteiligt sind:

## Messung der Elektronendichte $n_e$ mittels Hall-Effekt

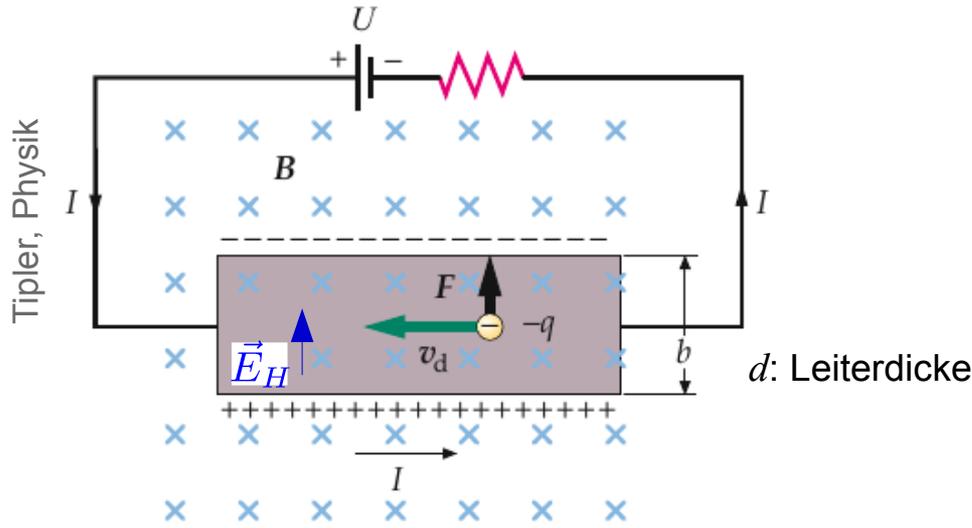


<https://videportal.uni-freiburg.de/video/E-435-hall-effekt-silber>

# Elektronen im Festkörper: Experimente

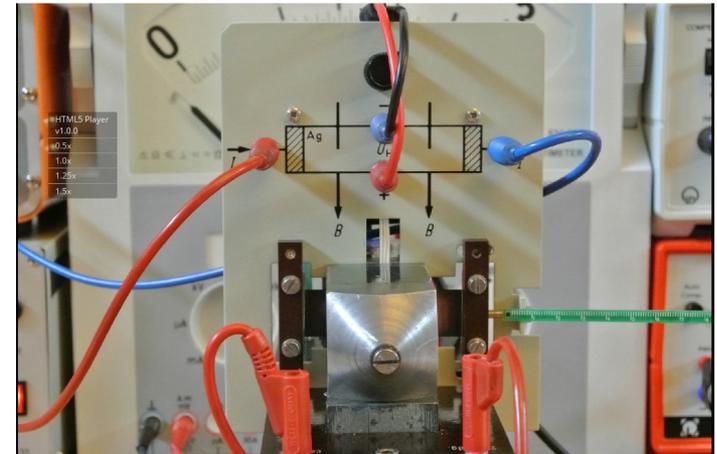
Bestimmung des Anteils von Elektronen,  
die an der Leitung des elektrischen Stroms beteiligt sind:

## Messung der Elektronendichte $n_e$ mittels Hall-Effekt



$$q \cdot |\vec{v}_d \times \vec{B}| = q \cdot |\vec{E}_H|, U_H = |\vec{E}_H| \cdot b$$

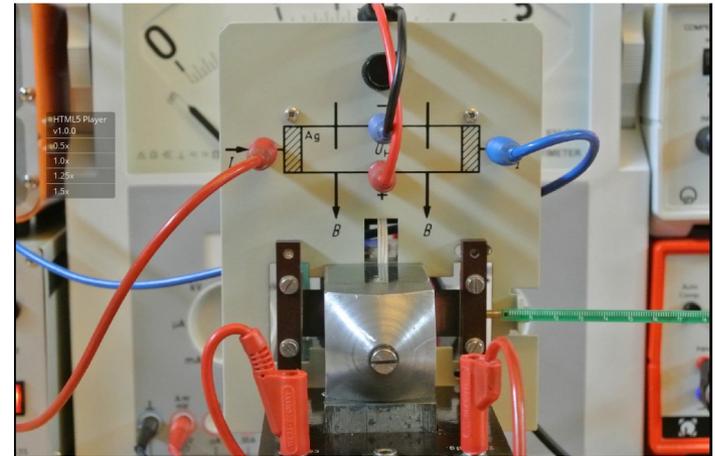
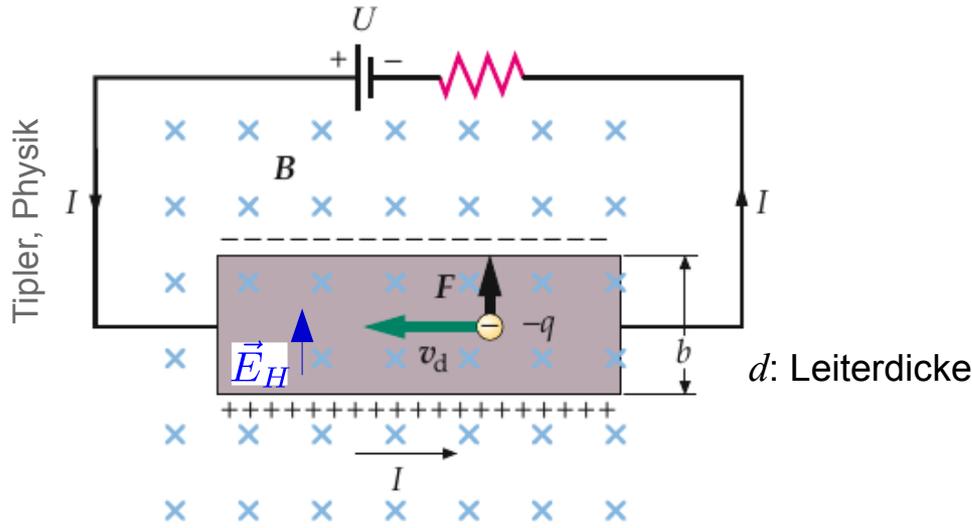
$$I = q \cdot n_e \cdot v_d \cdot A, A = b \cdot d$$



# Elektronen im Festkörper: Experimente

Bestimmung des Anteils von Elektronen,  
die an der Leitung des elektrischen Stroms beteiligt sind:

## Messung der Elektronendichte $n_e$ mittels Hall-Effekt



<https://videportal.uni-freiburg.de/video/E-435-hall-effekt-silber>

$$q \cdot |\vec{v}_d \times \vec{B}| = q \cdot |\vec{E}_H|, U_H = |\vec{E}_H| \cdot b$$

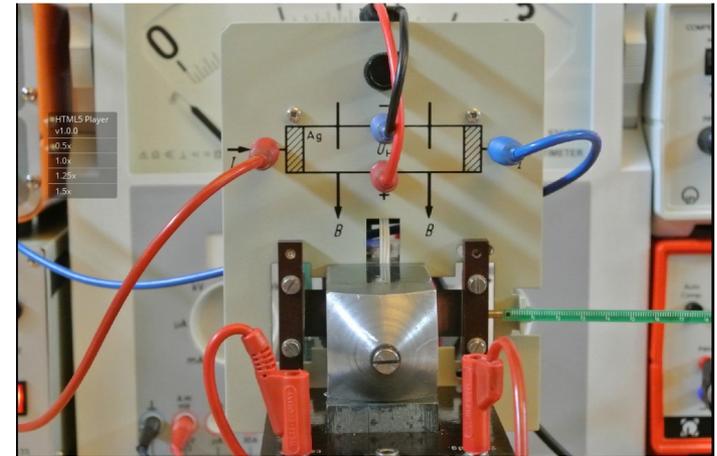
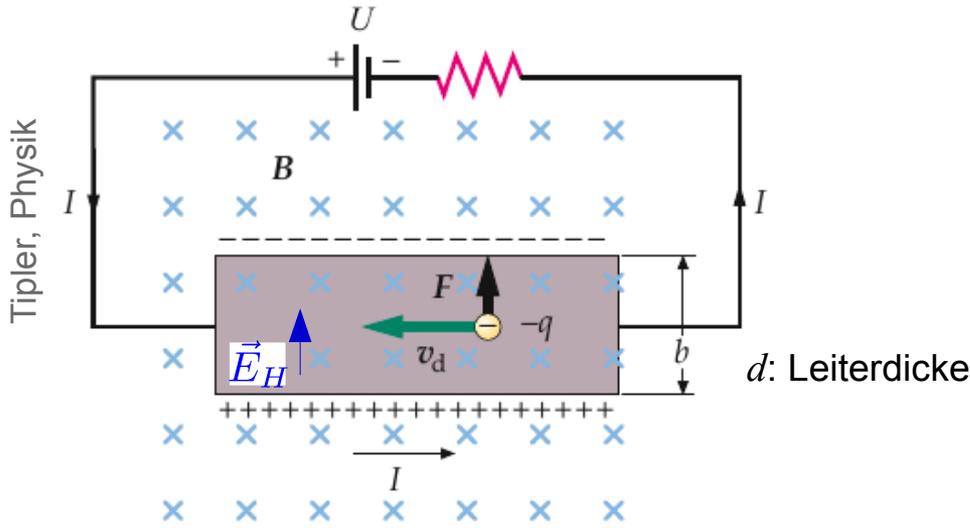
$$I = q \cdot n_e \cdot v_d \cdot A, A = b \cdot d$$

$$\Rightarrow n_e = \frac{I B}{d e U_H}$$

# Elektronen im Festkörper: Experimente

Bestimmung des Anteils von Elektronen,  
die an der Leitung des elektrischen Stroms beteiligt sind:

## Messung der Elektronendichte $n_e$ mittels Hall-Effekt



<https://videoportal.uni-freiburg.de/video/E-435-hall-effekt-silber>

$$q \cdot |\vec{v}_d \times \vec{B}| = q \cdot |\vec{E}_H|, U_H = |\vec{E}_H| \cdot b$$

$$I = q \cdot n_e \cdot v_d \cdot A, A = b \cdot d$$

$$\Rightarrow n_e = \frac{I B}{d e U_H}$$

### Beispiel Silber:

Teilchendichte Silber  $n_{Ag} = 5.86 \cdot 10^{28} / \text{m}^3$

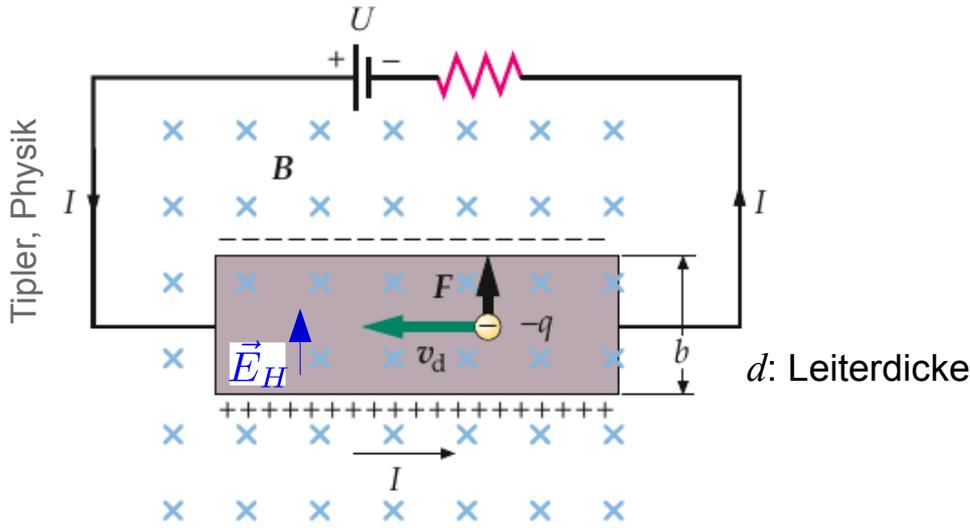
Ladungsträgerdichte  $n_e = 5.85 \cdot 10^{28} / \text{m}^3$

→ 1 Elektron / Atom !

# Elektronen im Festkörper: Experimente

Bestimmung des Anteils von Elektronen,  
die an der Leitung des elektrischen Stroms beteiligt sind:

## Messung der Elektronendichte $n_e$ mittels Hall-Effekt



$$q \cdot |\vec{v}_d \times \vec{B}| = q \cdot |\vec{E}_H|, U_H = |\vec{E}_H| \cdot b$$

$$I = q \cdot n_e \cdot v_d \cdot A, A = b \cdot d$$

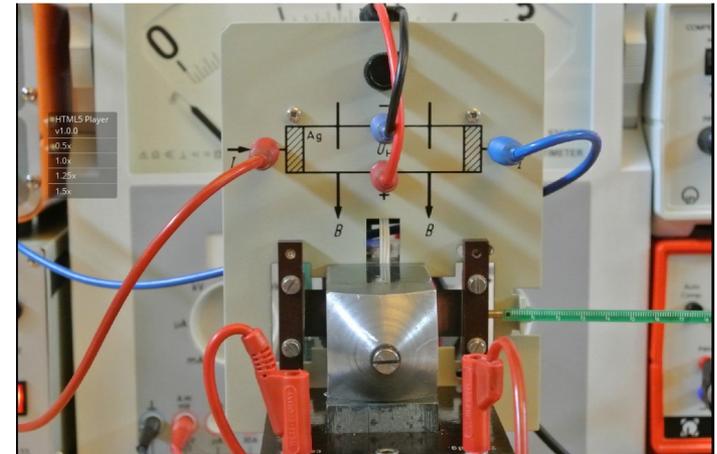
$$\Rightarrow n_e = \frac{I B}{d e U_H}$$

### Beispiel Silber:

Teilchendichte Silber  $n_{Ag} = 5.86 \cdot 10^{28} / \text{m}^3$

Ladungsträgerdichte  $n_e = 5.85 \cdot 10^{28} / \text{m}^3$

→ 1 Elektron / Atom !



<https://videportal.uni-freiburg.de/video/E-435-hall-effekt-silber>

**Anmerkung:** bei einigen Materialien beobachtet man einen „anormalen Hall-Effekt“ (negative Hall-Spannung)

Positive Ladungsträger !?

# **Stromleitung: Geschwindigkeit der Ladungsträger**

# Stromleitung: Geschwindigkeit der Ladungsträger

Aus dem Strom und der Ladungsträgerdichte lässt sich die (mittlere) Geschwindigkeit der Ladungsträger berechnen:

$$|I| = |\vec{j}| \cdot A = |-e| \cdot n_e \cdot v_d \cdot A$$

# Stromleitung: Geschwindigkeit der Ladungsträger

Aus dem Strom und der Ladungsträgerdichte lässt sich die (mittlere) Geschwindigkeit der Ladungsträger berechnen:

$$|I| = |\vec{j} \cdot A| = |-e| \cdot n_e \cdot v_d \cdot A \quad \rightarrow \quad v_d = \frac{I}{e n_e A}$$

# Stromleitung: Geschwindigkeit der Ladungsträger

Aus dem Strom und der Ladungsträgerdichte lässt sich die (mittlere) Geschwindigkeit der Ladungsträger berechnen:

$$|I| = |\vec{j}| \cdot A = |-e| \cdot n_e \cdot v_d \cdot A \quad \rightarrow \quad v_d = \frac{I}{e n_e A}$$

Beispiel Kupferdraht , Radius 0.8 mm, Stromstärke 1 A

$$n_e = 8.5 \cdot 10^{28} / \text{m}^3$$

# Stromleitung: Geschwindigkeit der Ladungsträger

Aus dem Strom und der Ladungsträgerdichte lässt sich die (mittlere) Geschwindigkeit der Ladungsträger berechnen:

$$|I| = |\vec{j}| \cdot A = |-e| \cdot n_e \cdot v_d \cdot A \quad \rightarrow \quad v_d = \frac{I}{e n_e A}$$

Beispiel Kupferdraht , Radius 0.8 mm, Stromstärke 1 A

$$n_e = 8.5 \cdot 10^{28} / \text{m}^3 \quad \rightarrow \quad v_d = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{m/s}$$

# Stromleitung: Geschwindigkeit der Ladungsträger

Aus dem Strom und der Ladungsträgerdichte lässt sich die (mittlere) Geschwindigkeit der Ladungsträger berechnen:

$$|I| = |\vec{j}| \cdot A = |-e| \cdot n_e \cdot v_d \cdot A \quad \rightarrow \quad v_d = \frac{I}{e n_e A}$$

Beispiel Kupferdraht , Radius 0.8 mm, Stromstärke 1 A

$$n_e = 8.5 \cdot 10^{28} / \text{m}^3 \quad \rightarrow \quad v_d = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{ m/s} \quad \text{sehr langsam !}$$

# Stromleitung: Geschwindigkeit der Ladungsträger

Aus dem Strom und der Ladungsträgerdichte lässt sich die (mittlere) Geschwindigkeit der Ladungsträger berechnen:

$$|I| = |\vec{j}| \cdot A = |-e| \cdot n_e \cdot v_d \cdot A \quad \rightarrow \quad v_d = \frac{I}{e n_e A}$$

Beispiel Kupferdraht , Radius 0.8 mm, Stromstärke 1 A

$$n_e = 8.5 \cdot 10^{28} / \text{m}^3 \quad \rightarrow \quad v_d = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{m/s} \quad \text{sehr langsam !}$$

Erinnerung: spezifischer Widerstand  $\rho$ :

Leiter der Länge  $L$  mit Querschnitt  $A$ , Widerstand  $R$ :  $\rho = R \frac{A}{L}$

# Stromleitung: Geschwindigkeit der Ladungsträger

Aus dem Strom und der Ladungsträgerdichte lässt sich die (mittlere) Geschwindigkeit der Ladungsträger berechnen:

$$|I| = |\vec{j}| \cdot A = |-e| \cdot n_e \cdot v_d \cdot A \quad \rightarrow \quad v_d = \frac{I}{e n_e A}$$

Beispiel Kupferdraht , Radius 0.8 mm, Stromstärke 1 A

$$n_e = 8.5 \cdot 10^{28} / \text{m}^3 \quad \rightarrow \quad v_d = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{ m/s} \quad \text{sehr langsam !}$$

Erinnerung: spezifischer Widerstand  $\rho$ :

Leiter der Länge  $L$  mit Querschnitt  $A$ , Widerstand  $R$ :  $\rho = R \frac{A}{L}$

spezifischer Leitwert  $\sigma$  :  $\sigma = 1/\rho = \frac{L}{A R}$

# Stromleitung: Geschwindigkeit der Ladungsträger

Aus dem Strom und der Ladungsträgerdichte lässt sich die (mittlere) Geschwindigkeit der Ladungsträger berechnen:

$$|I| = |\vec{j}| \cdot A = |-e| \cdot n_e \cdot v_d \cdot A \quad \rightarrow \quad v_d = \frac{I}{e n_e A}$$

Beispiel Kupferdraht , Radius 0.8 mm, Stromstärke 1 A

$$n_e = 8.5 \cdot 10^{28} / \text{m}^3 \quad \rightarrow \quad v_d = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{ m/s} \quad \text{sehr langsam !}$$

Erinnerung: spezifischer Widerstand  $\rho$ :

Leiter der Länge  $L$  mit Querschnitt  $A$ , Widerstand  $R$ :  $\rho = R \frac{A}{L}$

spezifischer Leitwert  $\sigma$  :  $\sigma = 1/\rho = \frac{L}{A R}$

$\rho$  bzw.  $\sigma$  sind Materialkonstanten und hängen von der Temperatur ab

# Stromleitung: Geschwindigkeit der Ladungsträger

Aus dem Strom und der Ladungsträgerdichte lässt sich die (mittlere) Geschwindigkeit der Ladungsträger berechnen:

$$|I| = |\vec{j}| \cdot A = |-e| \cdot n_e \cdot v_d \cdot A \quad \rightarrow \quad v_d = \frac{I}{e n_e A}$$

Beispiel Kupferdraht , Radius 0.8 mm, Stromstärke 1 A

$$n_e = 8.5 \cdot 10^{28} / \text{m}^3 \quad \rightarrow \quad v_d = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{ m/s} \quad \text{sehr langsam !}$$

Erinnerung: spezifischer Widerstand  $\rho$ :

Leiter der Länge  $L$  mit Querschnitt  $A$ , Widerstand  $R$ :  $\rho = R \frac{A}{L}$

spezifischer Leitwert  $\sigma$  :  $\sigma = 1/\rho = \frac{L}{A R}$

$\rho$  bzw.  $\sigma$  sind Materialkonstanten und hängen von der Temperatur ab

Mikroskopisches Ohm'sches Gesetz folgt aus  $I = U/R$  mit  $U = |\vec{E}| \cdot L$  :

$$\vec{j} = \vec{E} \cdot \sigma$$

Pause

und Zeit für Fragen ?

# Elektronen im Festkörper: Experimente

## Messung des Elektronbeitrags zu Wärmekapazität

klassische Erwartung:  $U_e = \frac{3}{2}N_e k_B T \rightarrow c_v^e = \frac{3}{2}N_e k_B$

# Elektronen im Festkörper: Experimente

## Messung des Elektronbeitrags zu Wärmekapazität

klassische Erwartung:  $U_e = \frac{3}{2}N_e k_B T \rightarrow c_v^e = \frac{3}{2}N_e k_B$

**Viel zu groß**, wird experimentell nicht beobachtet !

# Elektronen im Festkörper: Experimente

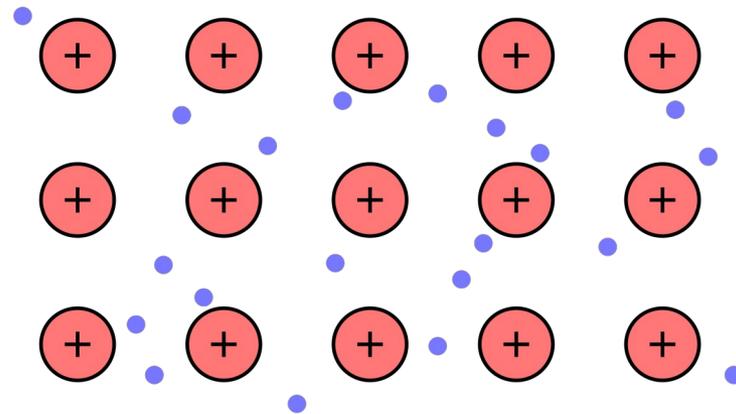
## Messung des Elektronbeitrags zu Wärmekapazität

klassische Erwartung:  $U_e = \frac{3}{2}N_e k_B T \rightarrow c_v^e = \frac{3}{2}N_e k_B$

Viel zu groß, wird experimentell nicht beobachtet !

Besseres Bild aus Messung der Hall-Konstanten:

nur 1 Elektron/Atom



# Elektronen im Festkörper: Experimente

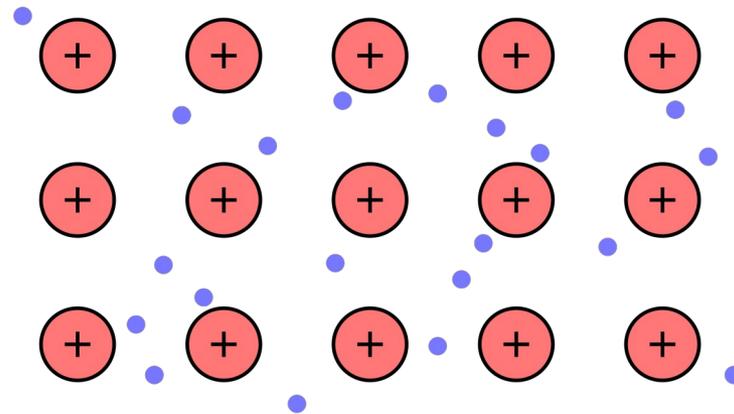
## Messung des Elektronbeitrags zu Wärmekapazität

klassische Erwartung:  $U_e = \frac{3}{2}N_e k_B T \rightarrow c_v^e = \frac{3}{2}N_e k_B$

**Viel zu groß**, wird experimentell nicht beobachtet !

Besseres Bild aus Messung der Hall-Konstanten:

nur 1 Elektron/Atom



→  $c_v^e = \frac{3}{2}N_{\text{Atom}}k_B$ , ist aber auch noch zu groß !

# Elektronen im Festkörper: Experimente

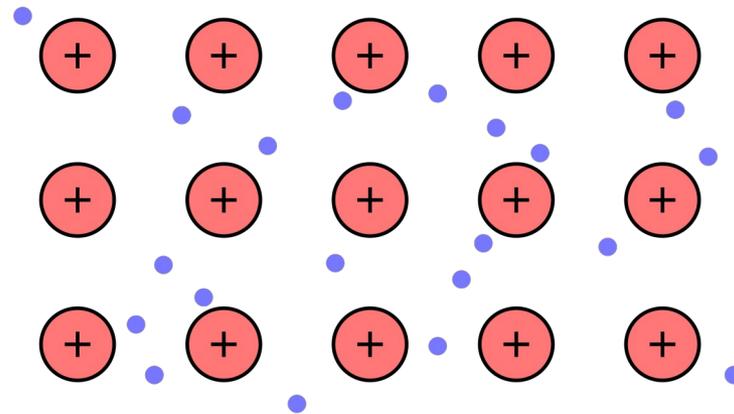
## Messung des Elektronbeitrags zu Wärmekapazität

klassische Erwartung:  $U_e = \frac{3}{2}N_e k_B T \rightarrow c_v^e = \frac{3}{2}N_e k_B$

**Viel zu groß**, wird experimentell nicht beobachtet !

Besseres Bild aus Messung der Hall-Konstanten:

nur 1 Elektron/Atom



$\rightarrow c_v^e = \frac{3}{2}N_{\text{Atom}}k_B$ , ist aber auch noch zu groß !

Korrekte Vorgehensweise:

**Behandlung der freien Elektronen als Fermi-Gas** (s. V 14)

# Erinnerung: Fermi-Gas

## Vorlesung 14, Quantenstatistik

**Zahl der Zustände:**  $Z_e(|\vec{k}|) = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \vec{n}^3 = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{|\vec{k}|^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

# Erinnerung: Fermi-Gas

## Vorlesung 14, Quantenstatistik

**Zahl der Zustände:**  $Z_e(|\vec{k}|) = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \vec{n}^3 = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{|\vec{k}|^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e}$$

# Erinnerung: Fermi-Gas

## Vorlesung 14, Quantenstatistik

**Zahl der Zustände:**  $Z_e(|\vec{k}|) = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \vec{n}^3 = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{|\vec{k}|^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} \Rightarrow |\vec{k}|^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E$$

# Erinnerung: Fermi-Gas

## Vorlesung 14, Quantenstatistik

**Zahl der Zustände:**  $Z_e(|\vec{k}|) = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \vec{n}^3 = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{|\vec{k}|^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} \Rightarrow |\vec{k}|^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E, \text{ damit ist } |\vec{k}|^3 = \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$$

# Erinnerung: Fermi-Gas

## Vorlesung 14, Quantenstatistik

**Zahl der Zustände:**  $Z_e(|\vec{k}|) = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \vec{n}^3 = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{|\vec{k}|^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} \Rightarrow |\vec{k}|^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E, \text{ damit ist } |\vec{k}|^3 = \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$$

Einsetzen in  $Z_e(k)$  ergibt:  $Z_e(E) = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$

# Erinnerung: Fermi-Gas

## Vorlesung 14, Quantenstatistik

**Zahl der Zustände:**  $Z_e(|\vec{k}|) = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \vec{n}^3 = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{|\vec{k}|^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} \Rightarrow |\vec{k}|^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E, \text{ damit ist } |\vec{k}|^3 = \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$$

Einsetzen in  $Z_e(k)$  ergibt:  $Z_e(E) = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$

**Zustandsdichte** durch Differentiation:

$$D_e(E) = \frac{\partial Z_e(E)}{\partial E} = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{3}{2} \sqrt{E} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 4\pi \cdot (2m_e)^{3/2} \cdot \sqrt{E}$$

# Erinnerung: Fermi-Gas

## Vorlesung 14, Quantenstatistik

**Zahl der Zustände:**  $Z_e(|\vec{k}|) = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \vec{n}^3 = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{|\vec{k}|^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} \Rightarrow |\vec{k}|^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E, \text{ damit ist } |\vec{k}|^3 = \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$$

Einsetzen in  $Z_e(\mathbf{k})$  ergibt:  $Z_e(E) = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$

**Zustandsdichte** durch Differentiation:

$$D_e(E) = \frac{\partial Z_e(E)}{\partial E} = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{3}{2} \sqrt{E} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 4\pi \cdot (2m_e)^{3/2} \cdot \sqrt{E}$$

# Erinnerung: Fermi-Gas

## Vorlesung 14, Quantenstatistik

**Zahl der Zustände:**  $Z_e(|\vec{k}|) = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \vec{n}^3 = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{|\vec{k}|^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} \Rightarrow |\vec{k}|^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E, \text{ damit ist } |\vec{k}|^3 = \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$$

Einsetzen in  $Z_e(\mathbf{k})$  ergibt:  $Z_e(E) = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$

**Zustandsdichte** durch Differentiation:

$$D_e(E) = \frac{\partial Z_e(E)}{\partial E} = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{3}{2} \sqrt{E} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 4\pi \cdot (2m_e)^{3/2} \cdot \sqrt{E}$$

**Besetzungszahl** gemäß Fermi-Dirac-Verteilung:  $n_e(E, T) = D_e(E) \cdot f_{FD}(E, T)$

---

# Erinnerung: Fermi-Gas

## Vorlesung 14, Quantenstatistik

**Zahl der Zustände:**  $Z_e(|\vec{k}|) = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \vec{n}^3 = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{|\vec{k}|^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} \Rightarrow |\vec{k}|^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E, \text{ damit ist } |\vec{k}|^3 = \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$$

Einsetzen in  $Z_e(\mathbf{k})$  ergibt:  $Z_e(E) = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$

**Zustandsdichte** durch Differentiation:

$$D_e(E) = \frac{\partial Z_e(E)}{\partial E} = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{3}{2} \sqrt{E} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 4\pi \cdot (2m_e)^{3/2} \cdot \sqrt{E}$$

**Besetzungszahl** gemäß Fermi-Dirac-Verteilung:  $n_e(E, T) = D_e(E) \cdot f_{FD}(E, T)$

---

Rechnung analog Phonon-Beitrag, Normierung auf  $N_e$  Zustände:

$$c_v^e = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \int dE E \cdot D_e(E) \cdot f_{FB}(T, E)$$

# Erinnerung: Fermi-Gas

## Vorlesung 14, Quantenstatistik

**Zahl der Zustände:**  $Z_e(|\vec{k}|) = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \vec{n}^3 = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{|\vec{k}|^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} \Rightarrow |\vec{k}|^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E, \text{ damit ist } |\vec{k}|^3 = \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$$

Einsetzen in  $Z_e(\mathbf{k})$  ergibt:  $Z_e(E) = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$

**Zustandsdichte** durch Differentiation:

$$D_e(E) = \frac{\partial Z_e(E)}{\partial E} = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{3}{2} \sqrt{E} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 4\pi \cdot (2m_e)^{3/2} \cdot \sqrt{E}$$

**Besetzungszahl** gemäß Fermi-Dirac-Verteilung:  $n_e(E, T) = D_e(E) \cdot f_{FD}(E, T)$

---

Rechnung analog Phonon-Beitrag, Normierung auf  $N_e$  Zustände:

$$c_v^e = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \int dE E \cdot D_e(E) \cdot f_{FB}(T, E)$$

# Erinnerung: Fermi-Gas

## Vorlesung 14, Quantenstatistik

**Zahl der Zustände:**  $Z_e(|\vec{k}|) = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \vec{n}^3 = 2 \cdot \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \frac{|\vec{k}|^3}{(\pi/L)^3} = \frac{1}{3\pi^2} |\vec{k}|^3 \cdot V$

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} \Rightarrow |\vec{k}|^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E, \text{ damit ist } |\vec{k}|^3 = \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$$

Einsetzen in  $Z_e(\mathbf{k})$  ergibt:  $Z_e(E) = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$

**Zustandsdichte** durch Differentiation:

$$D_e(E) = \frac{\partial Z_e(E)}{\partial E} = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{3}{2} \sqrt{E} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 4\pi \cdot (2m_e)^{3/2} \cdot \sqrt{E}$$

**Besetzungszahl** gemäß Fermi-Dirac-Verteilung:  $n_e(E, T) = D_e(E) \cdot f_{FD}(E, T)$

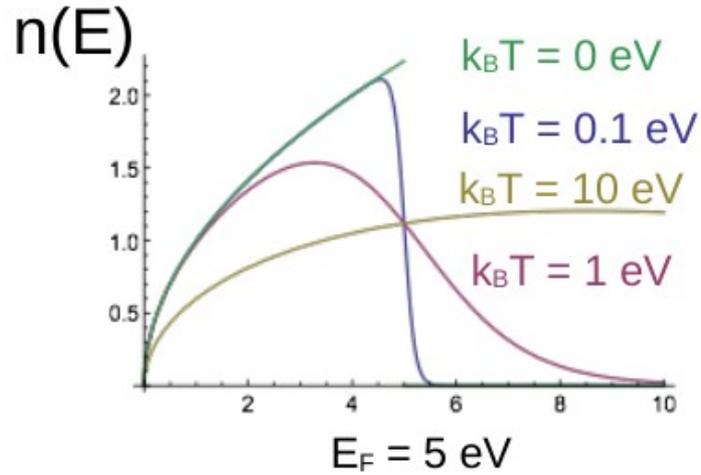
---

Rechnung analog Phonon-Beitrag, Normierung auf  $N_e$  Zustände:

$$c_v^e = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \int dE E \cdot D_e(E) \cdot f_{FD}(T, E) = \dots = \underbrace{\frac{3}{2} N_e k_B}_{\text{klass. Erw.}} \underbrace{\left( \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{k_B T}{E_F} \right)}_{\text{Korrekturfaktor}}$$

# Wärmekapazität Elektronengas

Besetzungszahl



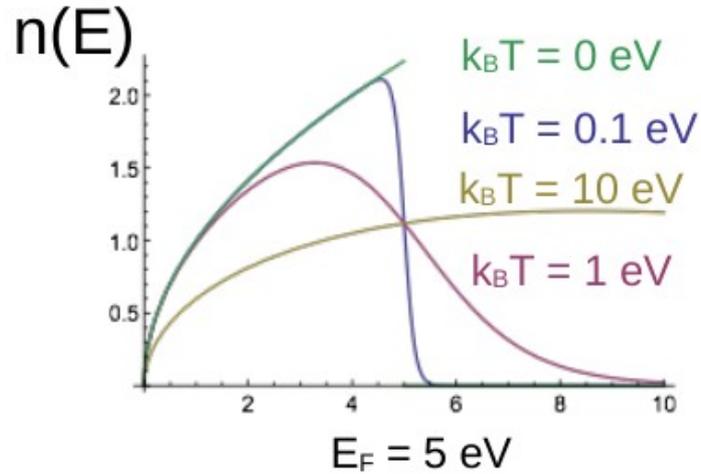
$$c_v^e = \underbrace{\frac{3}{2} N_e k_B}_{\text{klass. Erw.}} \underbrace{\left( \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{k_B T}{E_F} \right)}_{\text{Korrekturfaktor } f_F} = \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} \cdot N_e k_B$$

geht linear mit  $T \rightarrow 0$

z. B.  $T = 300 \text{ K}$ ,  $E_F = 3 \text{ eV}$ :  $f_F = 3\%$

# Wärmekapazität Elektronengas

Besetzungszahl



$$c_v^e = \underbrace{\frac{3}{2} N_e k_B}_{\text{klass. Erw.}} \underbrace{\left( \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{k_B T}{E_F} \right)}_{\text{Korrekturfaktor } f_F} = \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} \cdot N_e k_B$$

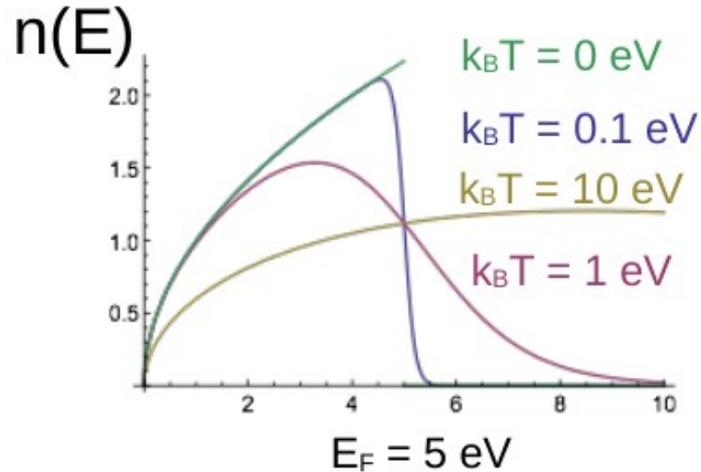
geht linear mit  $T \rightarrow 0$

z. B.  $T = 300$  K,  $E_F = 3$  eV:  $f_F = 3\%$

→ Nur Elektronen mit  $E \sim E_F$  tragen bei !

# Wärmekapazität Elektronengas

Besetzungszahl



$$c_v^e = \underbrace{\frac{3}{2} N_e k_B}_{\text{klass. Erw.}} \underbrace{\left( \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{k_B T}{E_F} \right)}_{\text{Korrekturfaktor } f_F} = \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} \cdot N_e k_B$$

geht linear mit  $T \rightarrow 0$

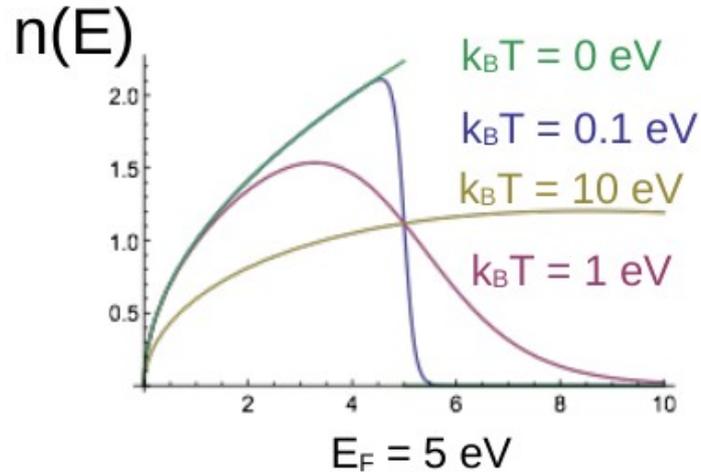
z. B.  $T = 300$  K,  $E_F = 3$  eV:  $f_F = 3\%$

→ Nur Elektronen mit  $E \sim E_F$  tragen bei !

Die Ursache für die deutlich geringere Wärmekapazität von Metallen als erwartet ist das **Pauli-Prinzip** !

# Wärmekapazität Elektronengas

Besetzungszahl



$$c_v^e = \underbrace{\frac{3}{2} N_e k_B}_{\text{klass. Erw.}} \underbrace{\left( \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{k_B T}{E_F} \right)}_{\text{Korrekturfaktor } f_F} = \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} \cdot N_e k_B$$

geht linear mit  $T \rightarrow 0$

z. B.  $T = 300 \text{ K}$ ,  $E_F = 3 \text{ eV}$ :  $f_F = 3\%$

→ Nur Elektronen mit  $E \sim E_F$  tragen bei !

Die Ursache für die deutlich geringere Wärmekapazität von Metallen als erwartet ist das **Pauli-Prinzip** !

Definitionen:

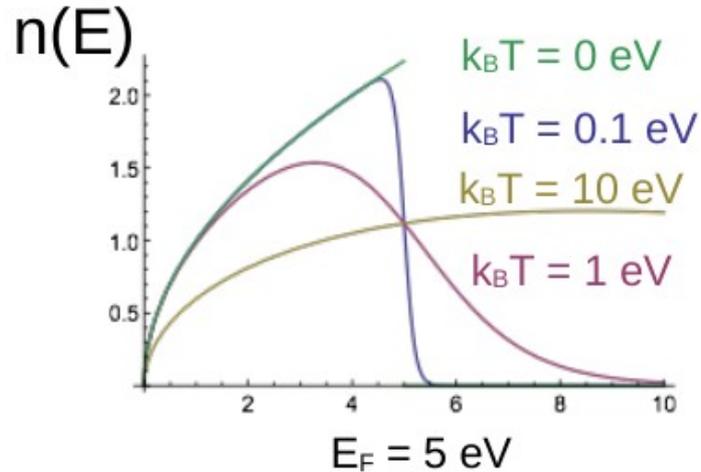
Fermi-Temperatur:  $T_F = E_F / k_B$

Fermi-Impuls  $p_f = \sqrt{2m_e E_F}$

Fermi-Geschwindigkeit:  $v_f = p_f / m_e$

# Wärmekapazität Elektronengas

Besetzungszahl



$$c_v^e = \underbrace{\frac{3}{2} N_e k_B}_{\text{klass. Erw.}} \underbrace{\left( \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{k_B T}{E_F} \right)}_{\text{Korrekturfaktor } f_F} = \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} \cdot N_e k_B$$

geht linear mit  $T \rightarrow 0$

z. B.  $T = 300 \text{ K}$ ,  $E_F = 3 \text{ eV}$ :  $f_F = 3\%$

→ Nur Elektronen mit  $E \sim E_F$  tragen bei !

Die Ursache für die deutlich geringere Wärmekapazität von Metallen als erwartet ist das **Pauli-Prinzip** !

Definitionen:

Fermi-Temperatur:  $T_F = E_F / k_B$

Fermi-Impuls  $p_f = \sqrt{2m_e E_F}$

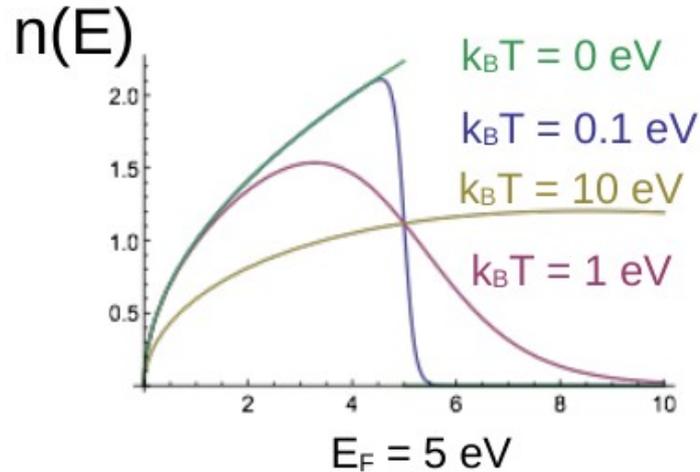
Fermi-Geschwindigkeit:  $v_f = p_f / m_e$

z. B.  $T = 300 \text{ K}$ ,  $E_F = 3 \text{ eV}$ :  $v_f = 1030 \text{ km/s}$

Geschwindigkeit von Elektronen an der „Fermi-Kante“

# Wärmekapazität Elektronengas

Besetzungszahl



$$c_v^e = \underbrace{\frac{3}{2} N_e k_B}_{\text{klass. Erw.}} \underbrace{\left( \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{k_B T}{E_F} \right)}_{\text{Korrekturfaktor } f_F} = \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} \cdot N_e k_B$$

geht linear mit  $T \rightarrow 0$

z. B.  $T = 300 \text{ K}$ ,  $E_F = 3 \text{ eV}$ :  $f_F = 3\%$

→ Nur Elektronen mit  $E \sim E_F$  tragen bei !

Die Ursache für die deutlich geringere Wärmekapazität von Metallen als erwartet ist das **Pauli-Prinzip** !

Definitionen:

Fermi-Temperatur:  $T_F = E_F / k_B$

Fermi-Impuls  $p_f = \sqrt{2m_e E_F}$

Fermi-Geschwindigkeit:  $v_f = p_f / m_e$

z. B.  $T = 300 \text{ K}$ ,  $E_F = 3 \text{ eV}$ :  $v_f = 1030 \text{ km/s}$

sehr schnell !

Geschwindigkeit von Elektronen an der „Fermi-Kante“

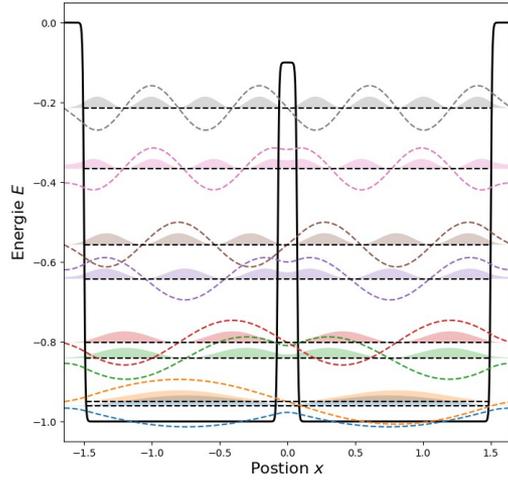
# Materialkonstanten

## Elektrondichten und Fermi-Energien einiger Metalle

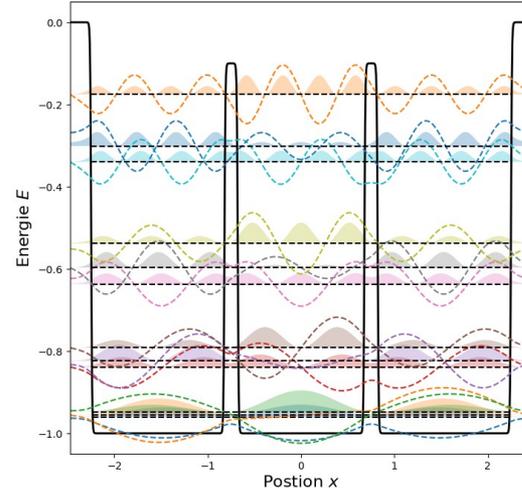
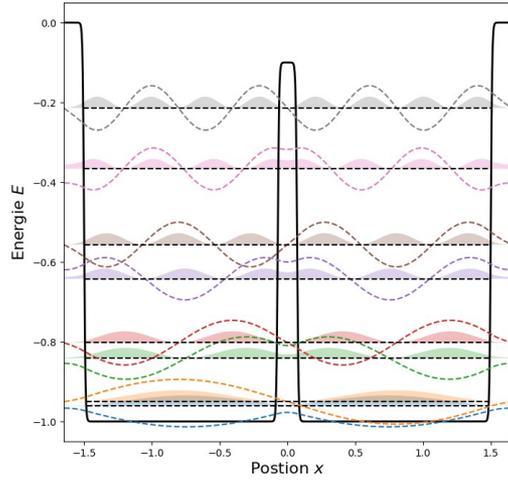
	Element	$(n_e/V)/\text{cm}^3$	$E_F/\text{eV}$
Al	Aluminium	$18,10 \cdot 10^{22}$	11,70
Ag	Silber	$5,86 \cdot 10^{22}$	5,50
Au	Gold	$5,90 \cdot 10^{22}$	5,53
Cu	Kupfer	$8,47 \cdot 10^{22}$	7,03
Fe	Eisen	$17,00 \cdot 10^{22}$	11,20
K	Kalium	$1,40 \cdot 10^{22}$	2,11
Li	Lithium	$4,70 \cdot 10^{22}$	4,75
Mg	Magnesium	$8,60 \cdot 10^{22}$	7,11
Mn	Mangan	$16,50 \cdot 10^{22}$	11,00
Na	Natrium	$2,65 \cdot 10^{22}$	3,24
Sn	Zinn	$14,80 \cdot 10^{22}$	10,20
Zn	Zink	$13,20 \cdot 10^{22}$	9,46

# Bändermodell

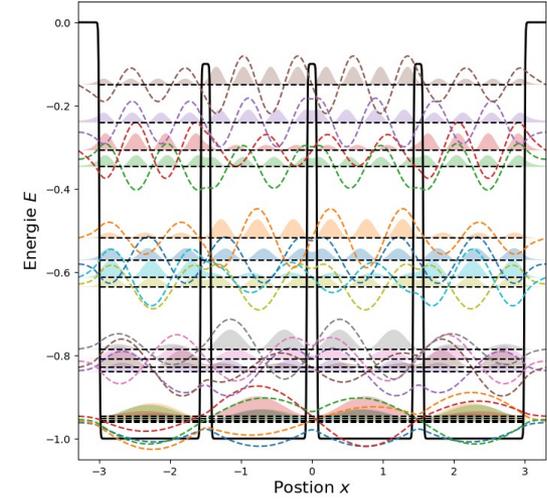
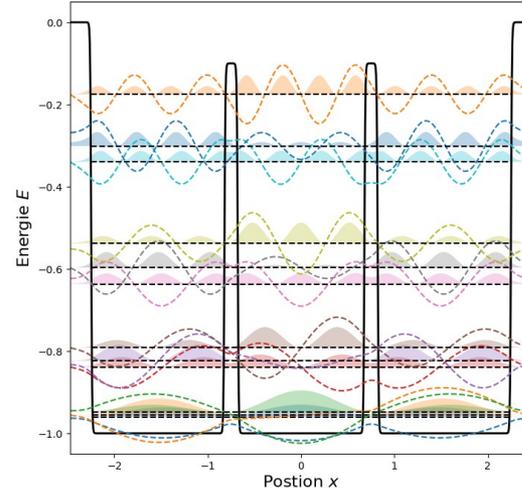
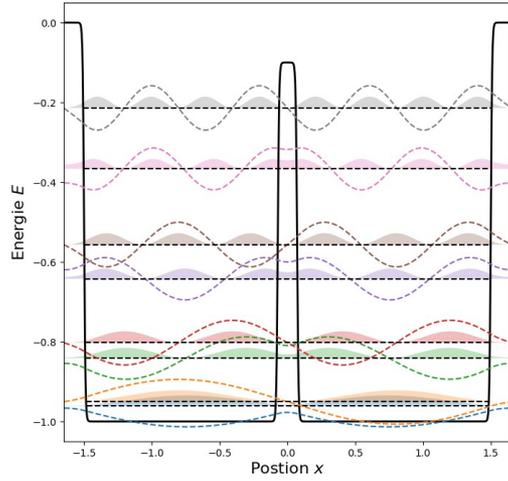
# Mehrere Potentiale $\rightarrow$ Gitterpotential



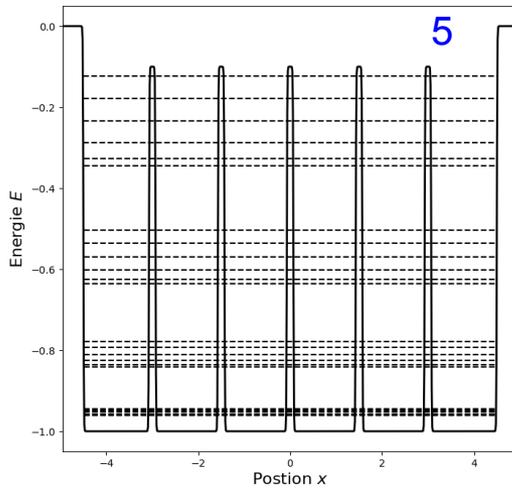
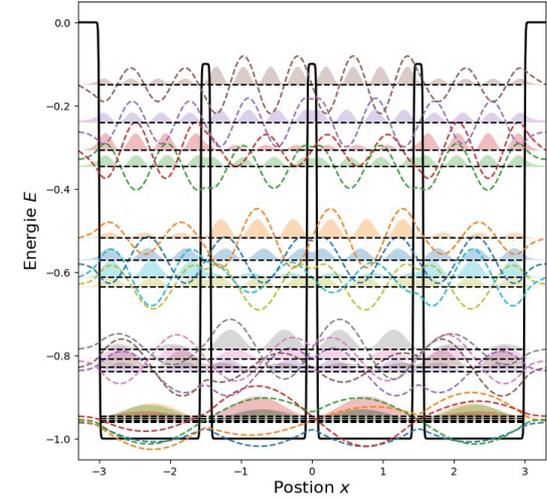
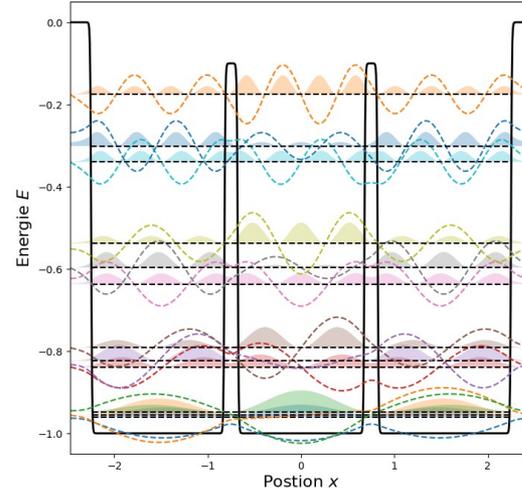
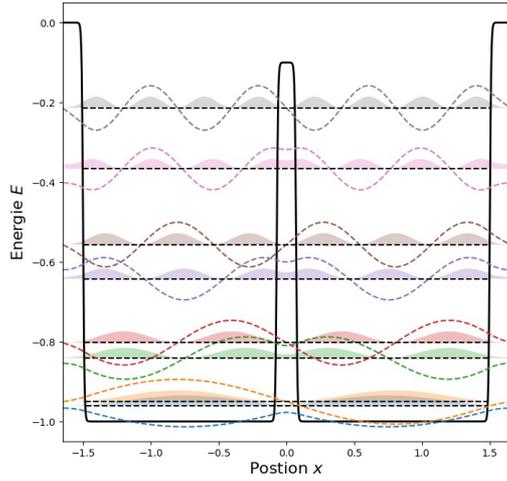
# Mehrere Potentiale $\rightarrow$ Gitterpotential



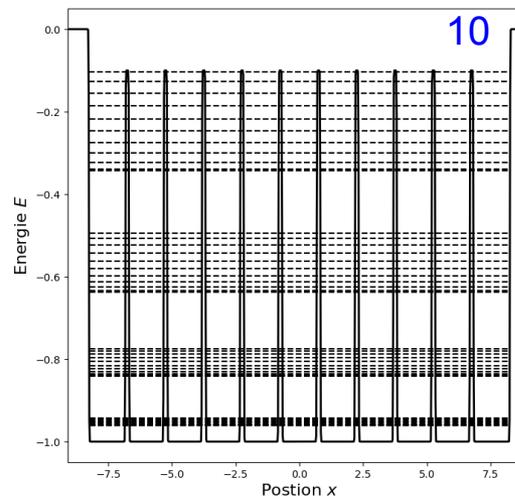
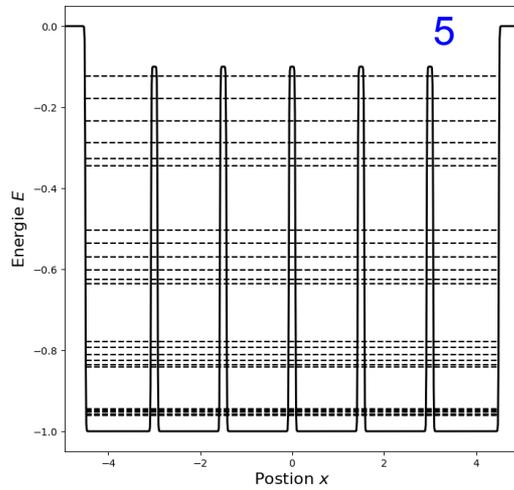
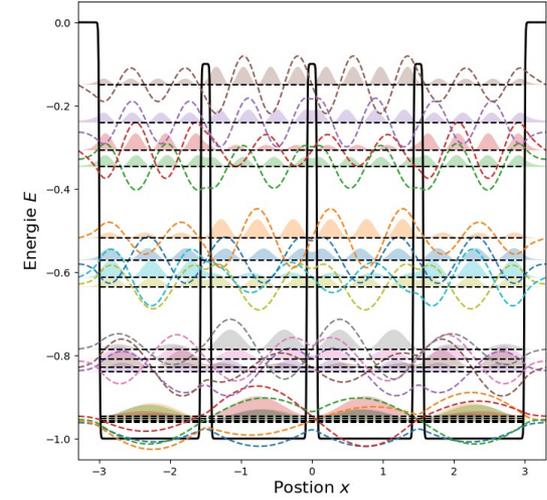
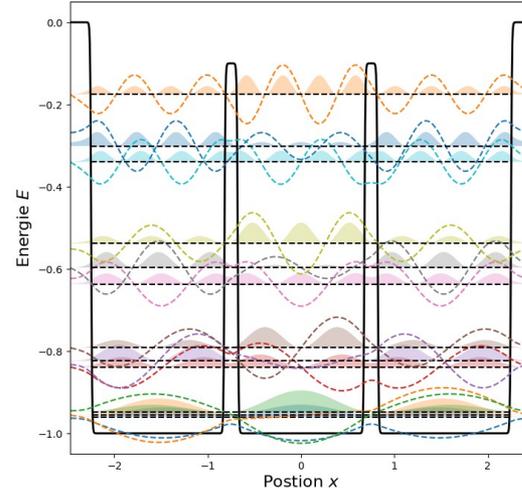
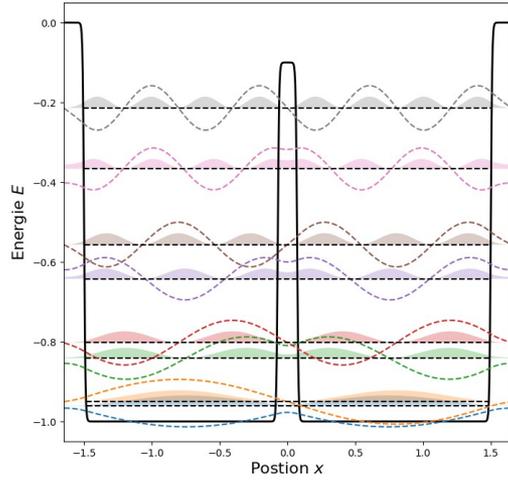
# Mehrere Potentiale $\rightarrow$ Gitterpotential



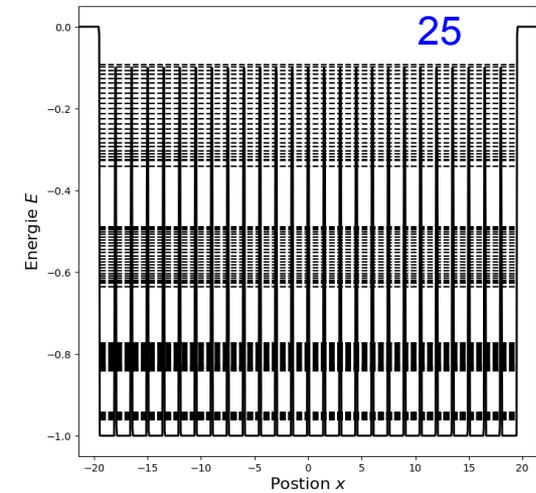
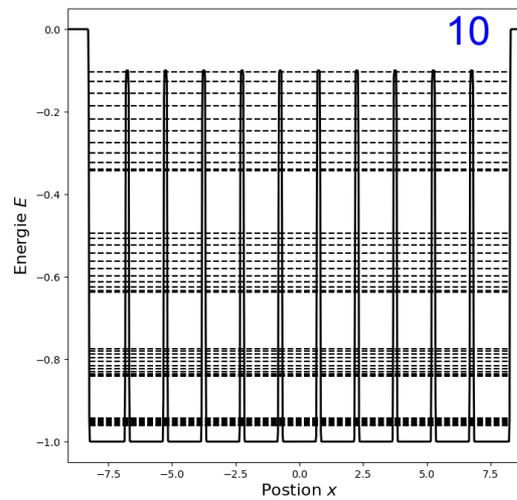
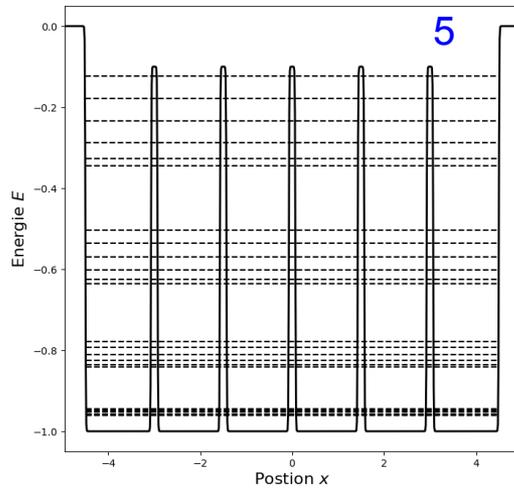
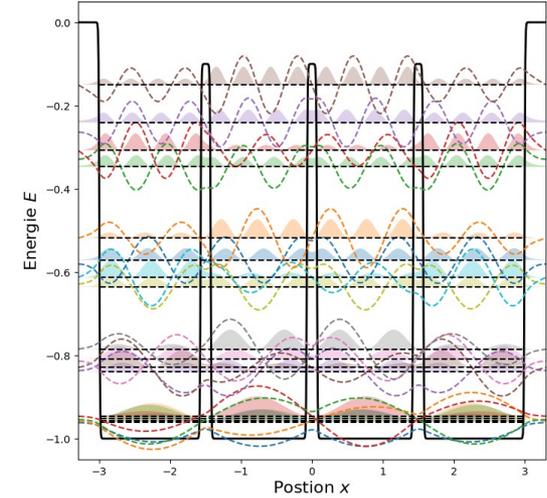
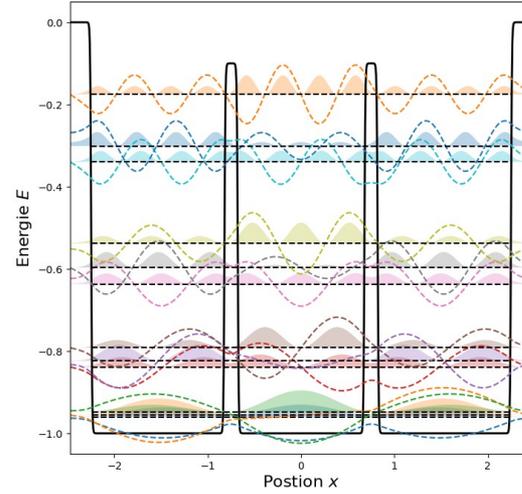
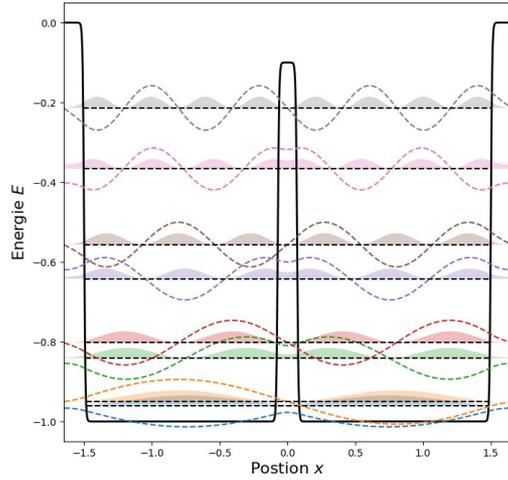
# Mehrere Potentiale $\rightarrow$ Gitterpotential



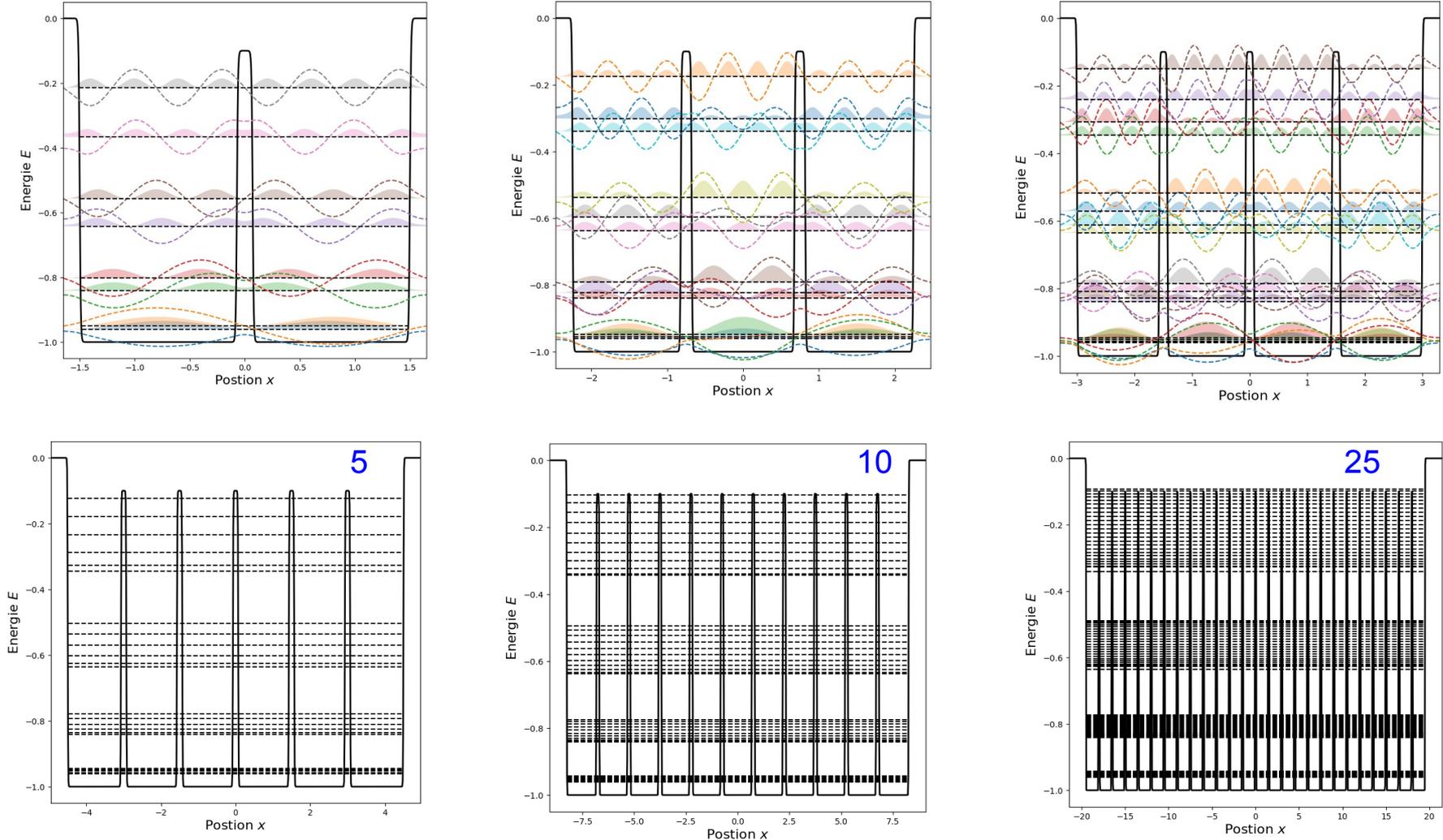
# Mehrere Potentiale $\rightarrow$ Gitterpotential



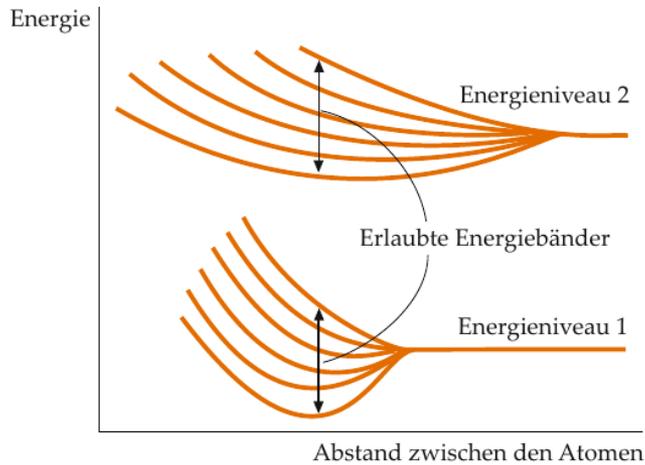
# Mehrere Potentiale $\rightarrow$ Gitterpotential



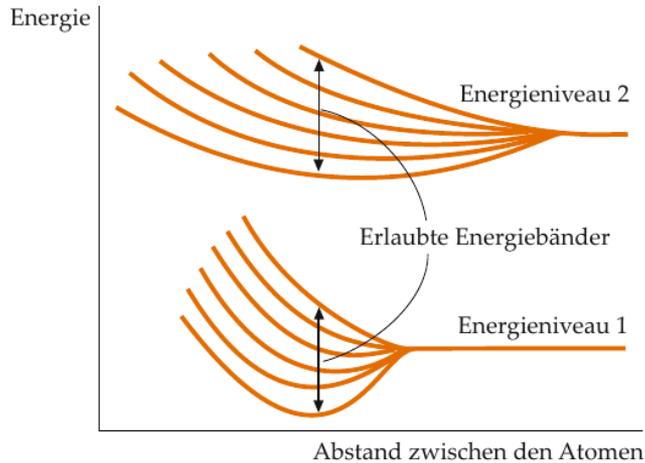
# Mehrere Potentiale $\rightarrow$ Gitterpotential



Es bilden sich „Bänder“ erlaubter Zustände um die atomaren Niveaus – jedes Band hat so viele Zustände, wie es Atome gibt.



Atomare Niveaus spalten im Festkörper aus  $N$  Atomen zu Bändern erlaubter Zustände auf. Dabei spaltet jedes Niveau  $N$ -fach auf.



Atomare Niveaus spalten im Festkörper aus  $N$  Atomen zu Bändern erlaubter Zustände auf. Dabei spaltet jedes Niveau  $N$ -fach auf.

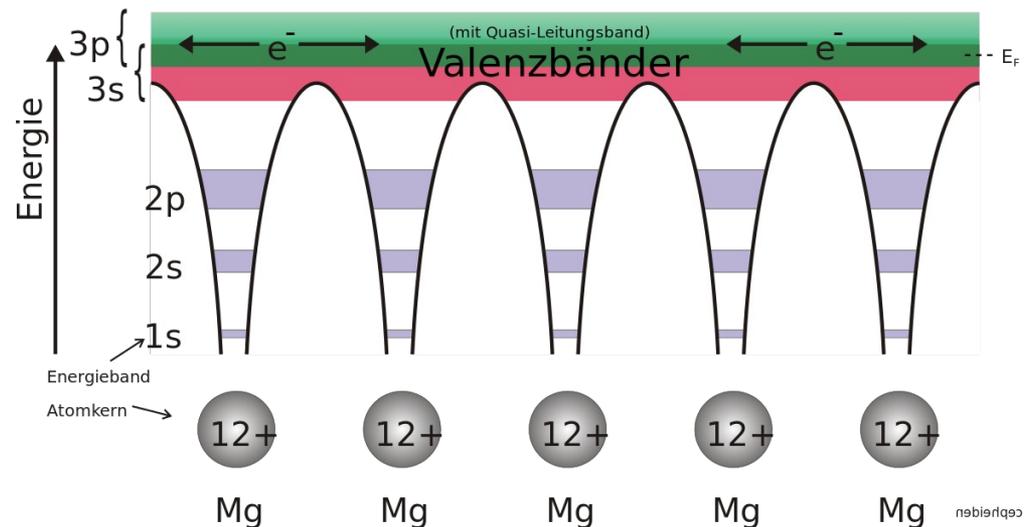
## Beispiel Magnesium:

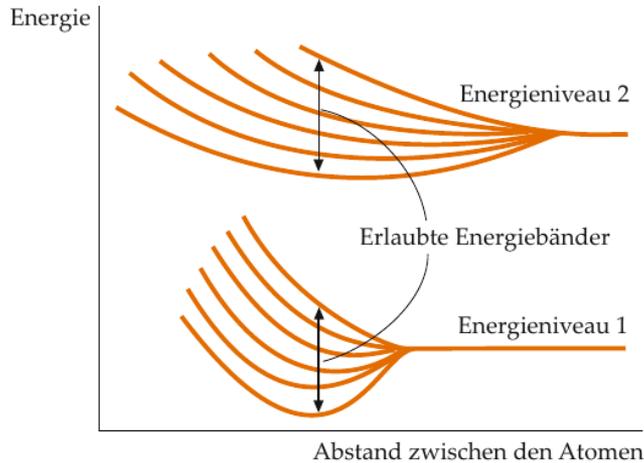
aus 3s- und 3p- Niveaus entstehende Bänder

überlappen →

$8 \cdot N$  Zustände, davon

$2 \cdot N$  Zustände mit Elektronen besetzt





Atomare Niveaus spalten im Festkörper aus  $N$  Atomen zu Bändern erlaubter Zustände auf. Dabei spaltet jedes Niveau  $N$ -fach auf.

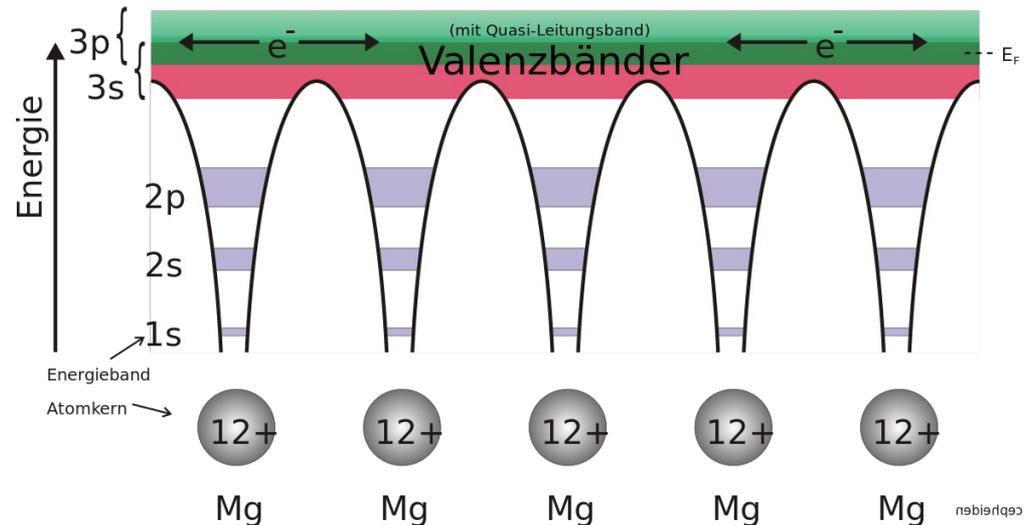
## Beispiel Magnesium:

aus 3s- und 3p- Niveaus  
entstehende Bänder

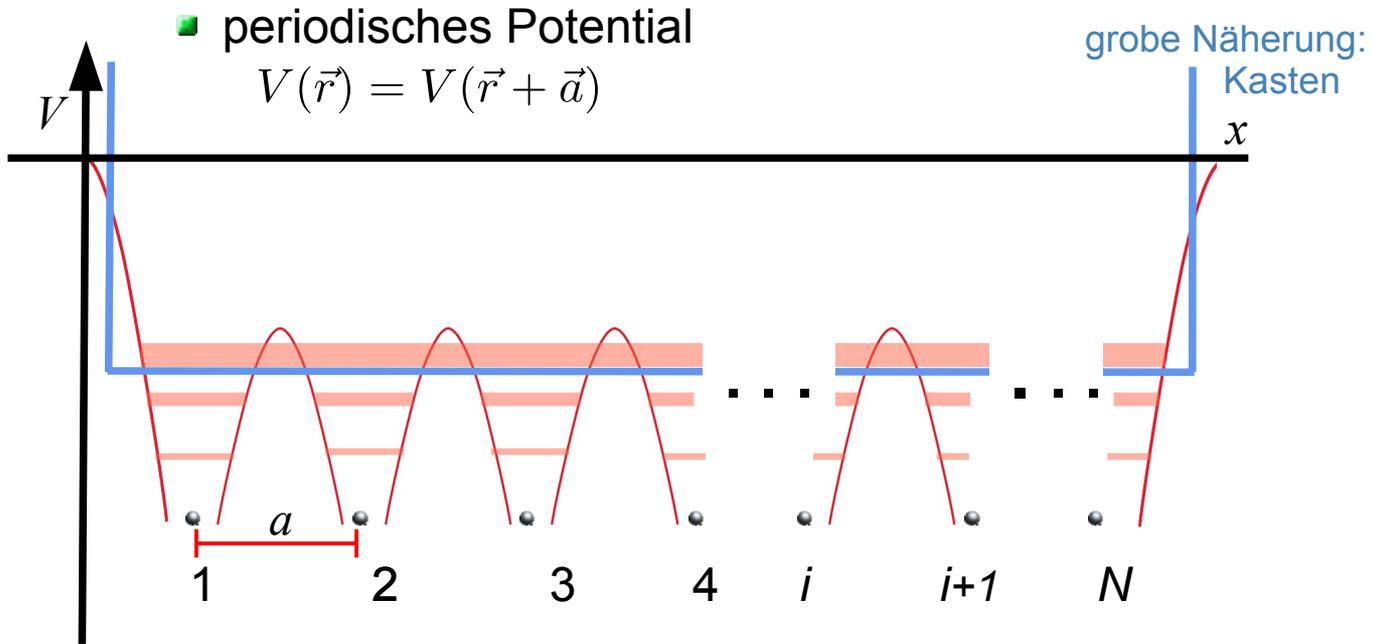
überlappen →

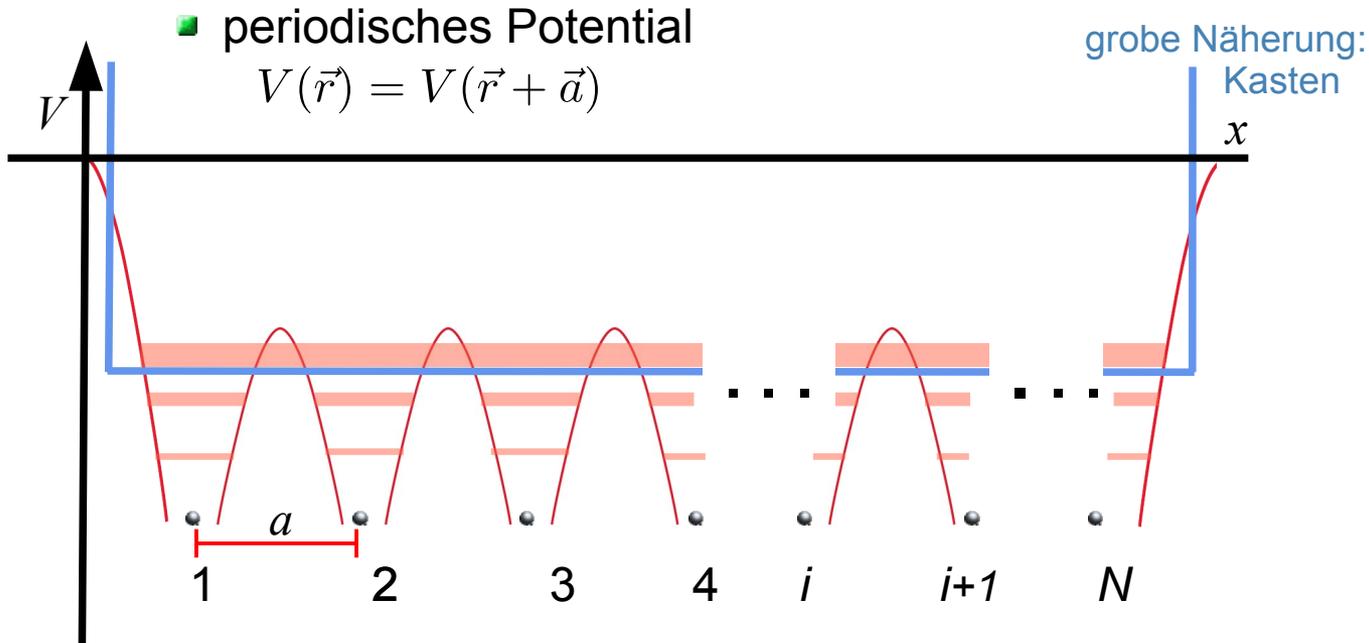
$8 \cdot N$  Zustände, davon

$2 \cdot N$  Zustände mit  
Elektronen besetzt



- In Bändern mit feinen Zuständen sind Elektronen leicht beweglich.
- Elektronen aus vollständig besetzten Bändern benötigen zunächst Energie, um in ein Band mit freien Zuständen zu gelangen.



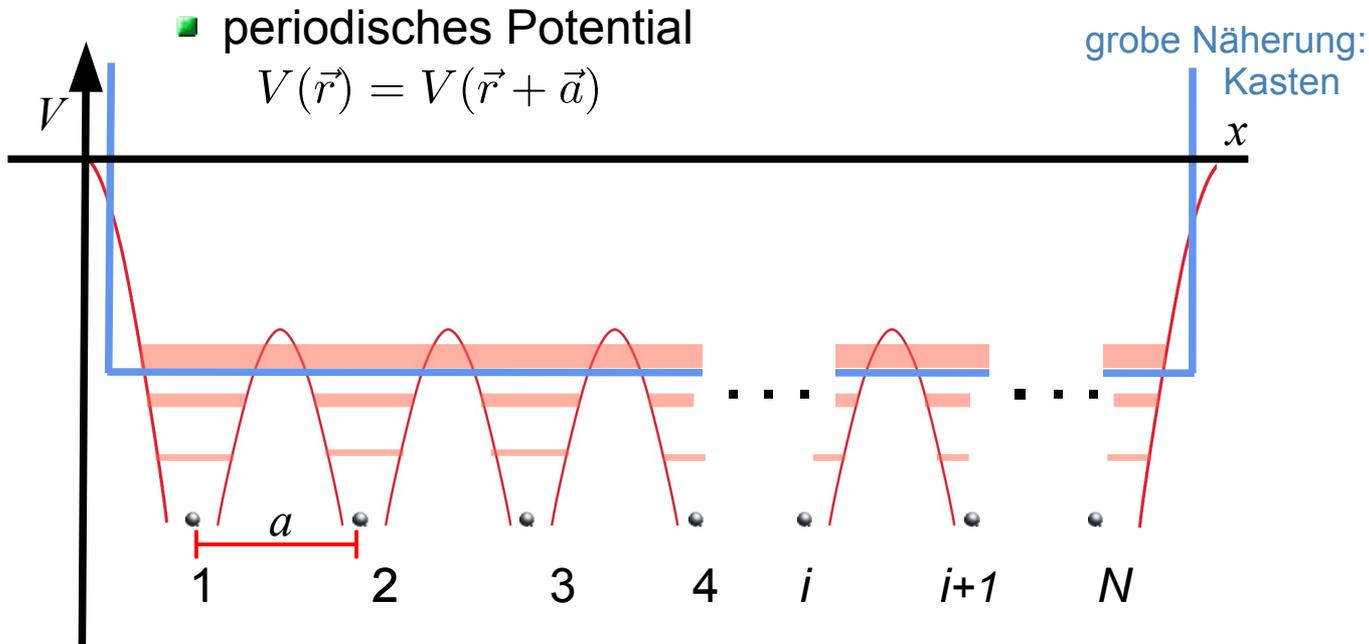


- Lösung mit Hilfe der stationären Schrödinger-Gleichung  $\hat{H}\psi(i) = E\psi(\vec{r}_i)$  mit

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + \sum_i V(\vec{r}_i) + \sum_{i,j} V^{ee}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

für periodische Randbedingungen

mit dem Ansatz

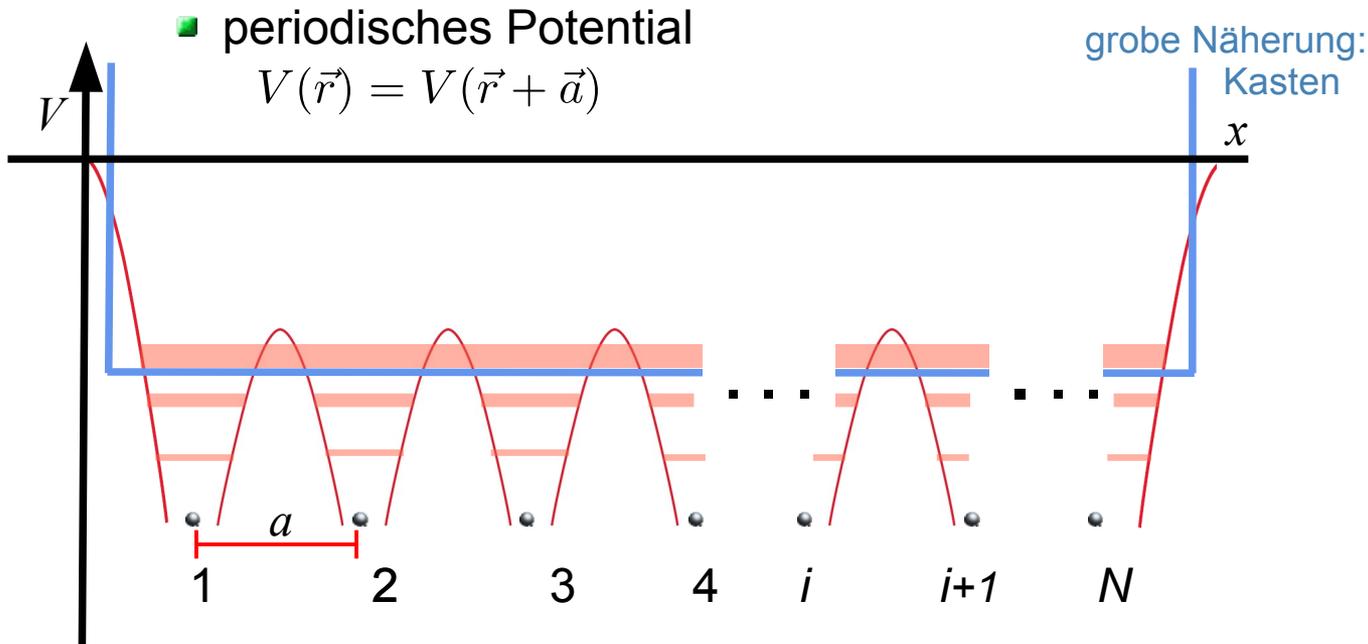


- Lösung mit Hilfe der stationären Schrödinger-Gleichung  $\hat{H}\psi(\vec{r}_i) = E\psi(\vec{r}_i)$  mit

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + \sum_i V(\vec{r}_i) + \sum_{i,j} V^{ee}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

für periodische Randbedingungen

mit dem Ansatz  $\psi(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$  mit  $u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{a})$

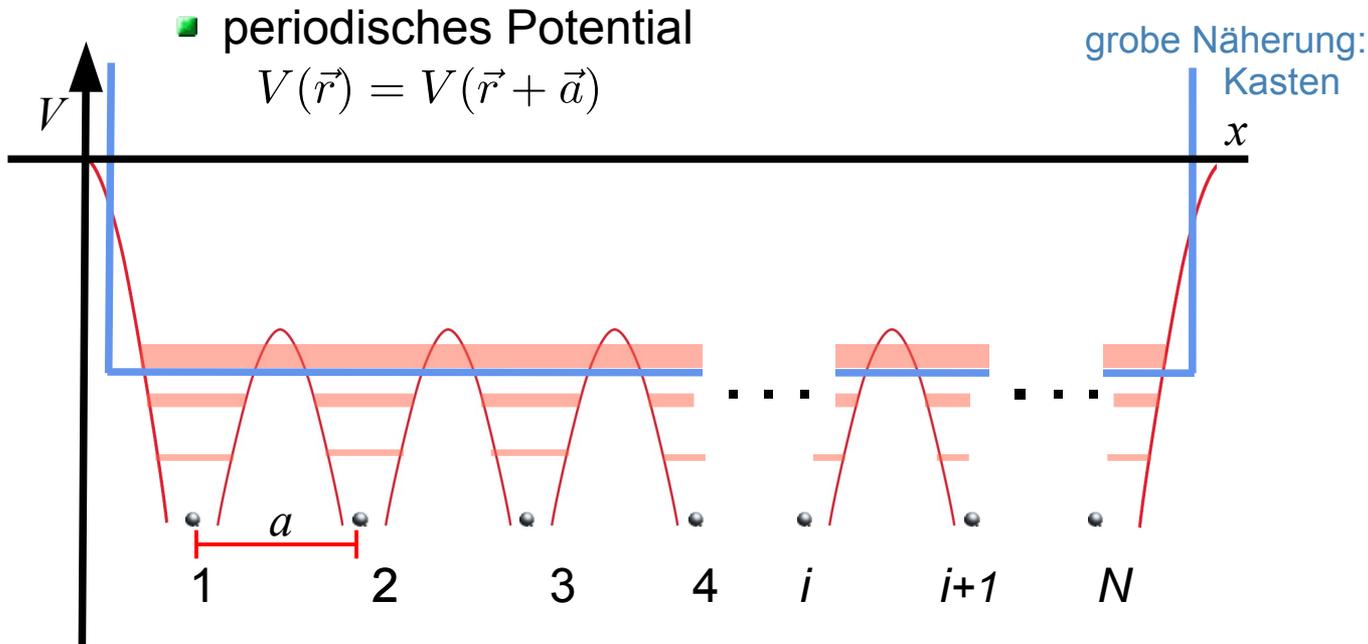


- Lösung mit Hilfe der stationären Schrödinger-Gleichung  $\hat{H}\psi(i) = E\psi(\vec{r}_i)$  mit

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + \sum_i V(\vec{r}_i) + \sum_{i,j} V^{ee}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

für periodische Randbedingungen

mit dem Ansatz  $\psi(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$  mit  $u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{a})$  „Bloch-Theorem“



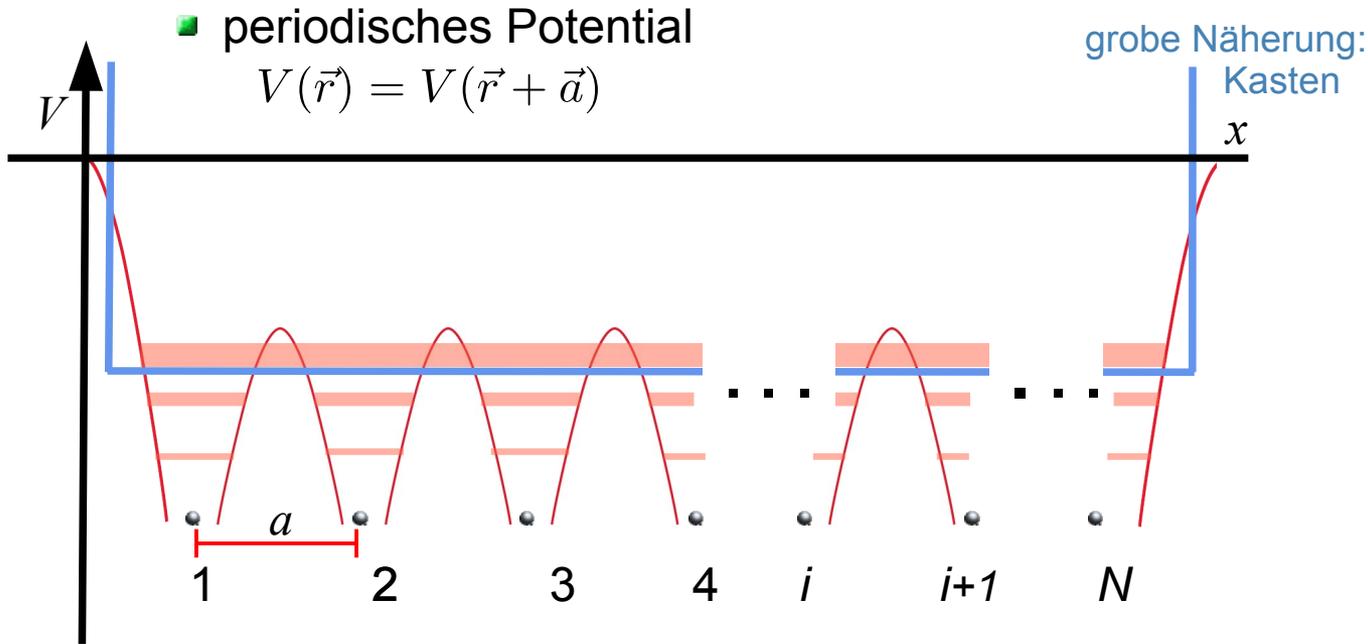
- Lösung mit Hilfe der stationären Schrödinger-Gleichung  $\hat{H}\psi(\vec{r}_i) = E\psi(\vec{r}_i)$  mit

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + \sum_i V(\vec{r}_i) + \sum_{i,j} V^{ee}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

für periodische Randbedingungen

mit dem Ansatz  $\psi(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$  mit  $u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{a})$  „Bloch-Theorem“

- dieser Ansatz erfüllt  $|\psi(\vec{r})|^2 = |\psi(\vec{r} + \vec{a})|^2$ , d.h. die beobachteten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten sind periodisch



- Lösung mit Hilfe der stationären Schrödinger-Gleichung  $\hat{H}\psi(\vec{r}_i) = E\psi(\vec{r}_i)$  mit

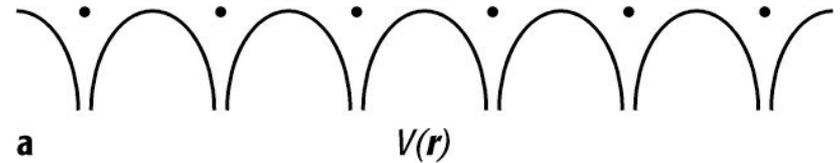
$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + \sum_i V(\vec{r}_i) + \sum_{i,j} V^{ee}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

für periodische Randbedingungen

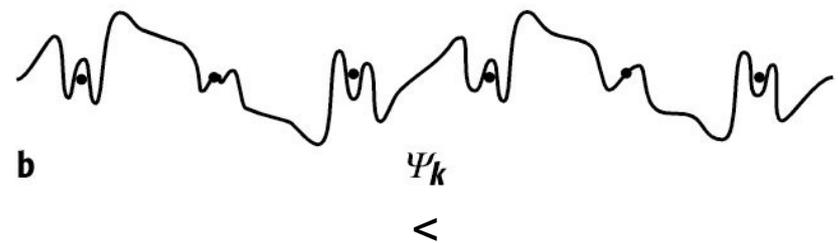
mit dem Ansatz  $\psi(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$  mit  $u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{a})$  „Bloch-Theorem“

- dieser Ansatz erfüllt  $|\psi(\vec{r})|^2 = |\psi(\vec{r} + \vec{a})|^2$ , d.h. die beobachteten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten sind periodisch
- die Berechnung der Lösungen ist recht aufwändig; man nennt sie „Bloch-Funktionen“

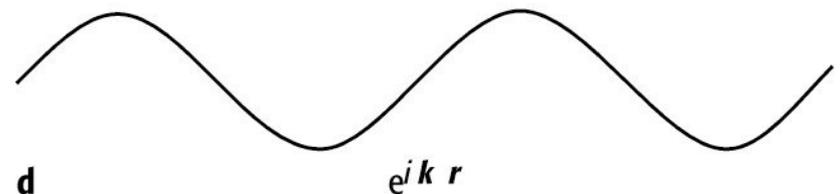
- Beispiele von Lösungen („Bloch-Funktionen“)



Lösung mit **geringer**  
Aufenthaltswahrscheinlichkeit  
zwischen den Gitterstellen



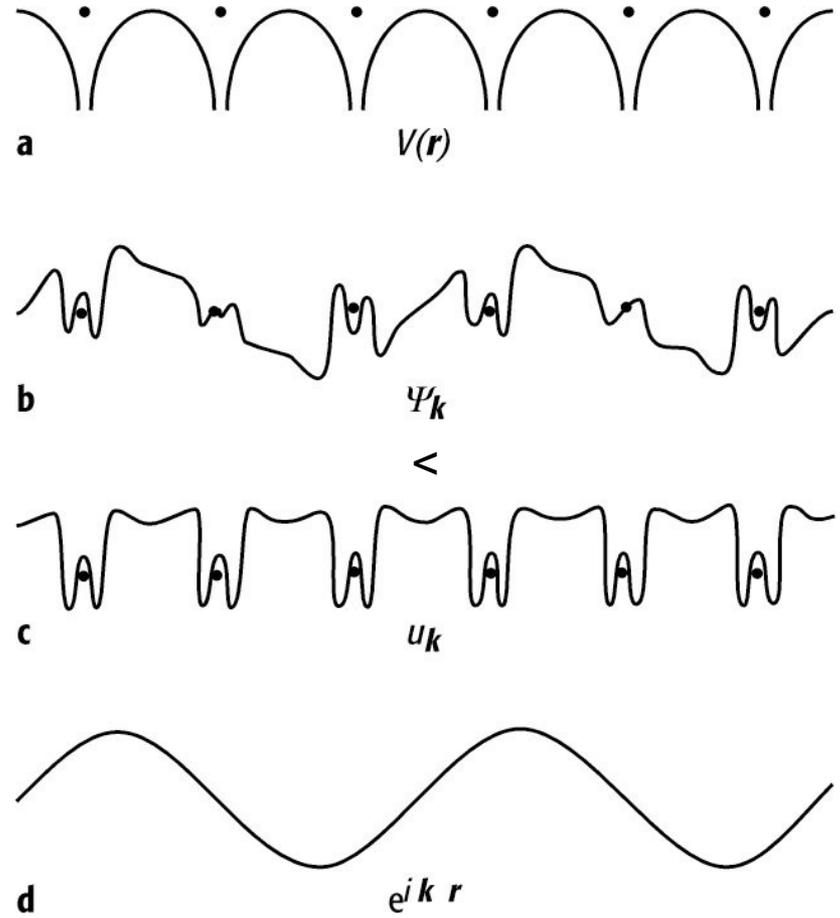
Lösung mit **hoher**  
Aufenthaltswahrscheinlichkeit  
zwischen den Gitterstellen



- Beispiele von Lösungen („Bloch-Funktionen“)

Lösung mit **geringer**  
Aufenthaltswahrscheinlichkeit  
zwischen den Gitterstellen

Lösung mit **hoher**  
Aufenthaltswahrscheinlichkeit  
zwischen den Gitterstellen

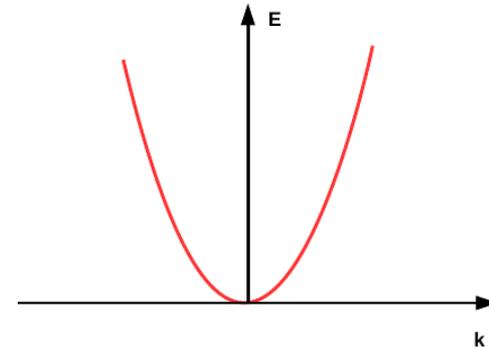


→ Energieaufspaltung weg. unterschiedlicher Beiträge des Potentials

- Für **kleine Werte des Wellenvektors** ist  $u(k) \sim$  konstant, d.h.

- die Wellenfunktion ist bestimmt durch die ebene Welle,
- Details des Potentials spielen keine Rolle
- die Elektronen sind quasi frei

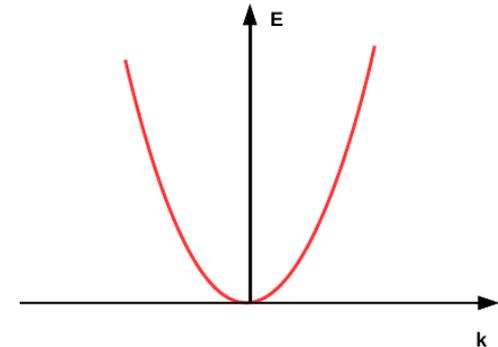
– Dispersionsrelation  $\hbar\omega(k) = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$



- Für **kleine Werte des Wellenvektors** ist  $u(k) \sim$  konstant, d.h.

- die Wellenfunktion ist bestimmt durch die ebene Welle,
- Details des Potentials spielen keine Rolle
- die Elektronen sind quasi frei

- Dispersionsrelation  $\hbar\omega(k) = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

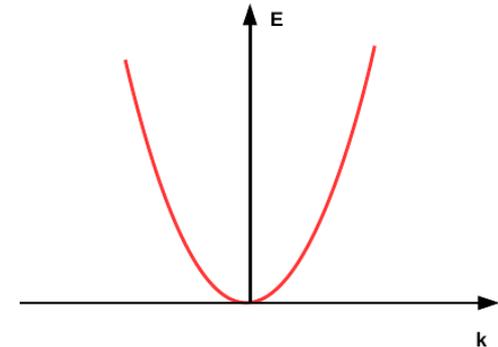


- Für **Werte des Wellenvektors** an der Grenze der Brillouin-Zone,  $k \sim \pi/a$ ,

- Für **kleine Werte des Wellenvektors** ist  $u(k) \sim$  konstant, d.h.

- die Wellenfunktion ist bestimmt durch die ebene Welle,
- Details des Potentials spielen keine Rolle
- die Elektronen sind quasi frei

- Dispersionsrelation  $\hbar\omega(k) = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

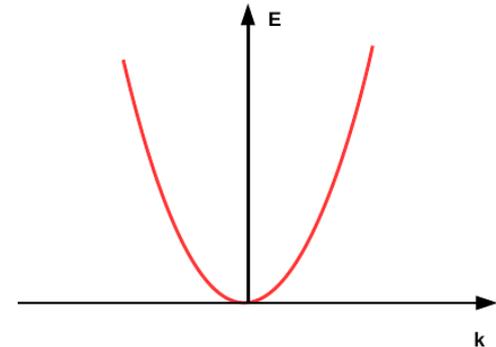


- Für **Werte des Wellenvektors** an der Grenze der Brillouin-Zone,  $k \sim \pi/a$ ,
- Laue- bzw. Bragg-Bedingung für die Elektronen erfüllt

- Für **kleine Werte des Wellenvektors** ist  $u(k) \sim$  konstant, d.h.

- die Wellenfunktion ist bestimmt durch die ebene Welle,
- Details des Potentials spielen keine Rolle
- die Elektronen sind quasi frei

- Dispersionsrelation  $\hbar\omega(k) = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

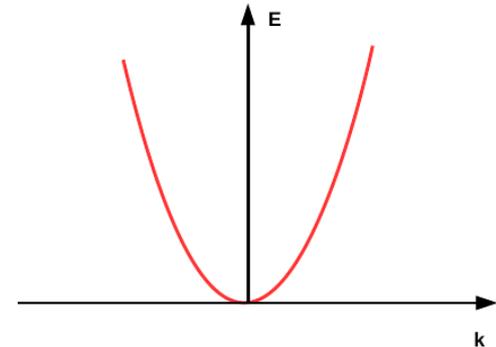


- Für **Werte des Wellenvektors** an der Grenze der Brillouin-Zone,  $k \sim \pi/a$ ,
  - Laue- bzw. Bragg-Bedingung für die Elektronen erfüllt
  - Reflexion der Elektronen, d.h. stehende Wellen

- Für **kleine Werte des Wellenvektors** ist  $u(k) \sim$  konstant, d.h.

- die Wellenfunktion ist bestimmt durch die ebene Welle,
- Details des Potentials spielen keine Rolle
- die Elektronen sind quasi frei

- Dispersionsrelation  $\hbar\omega(k) = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

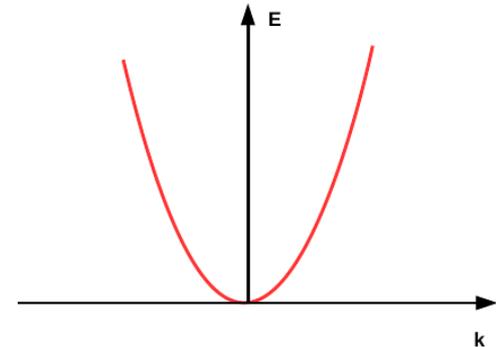


- Für **Werte des Wellenvektors** an der Grenze der Brillouin-Zone,  $k \sim \pi/a$ ,
  - Laue- bzw. Bragg-Bedingung für die Elektronen erfüllt
    - Reflexion der Elektronen, d.h. stehende Wellen
  - **Ansatz:** Überlagerung von nach rechts und links laufenden ebenen Wellen:

- Für **kleine Werte des Wellenvektors** ist  $u(k) \sim$  konstant, d.h.

- die Wellenfunktion ist bestimmt durch die ebene Welle,
- Details des Potentials spielen keine Rolle
- die Elektronen sind quasi frei

- Dispersionsrelation  $\hbar\omega(k) = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

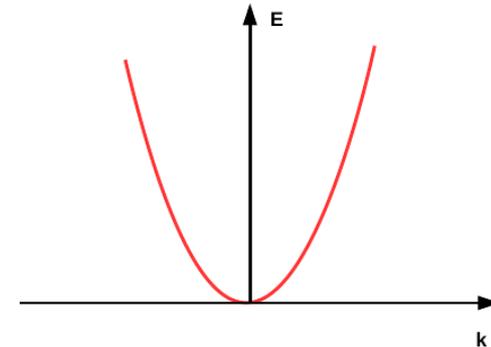


- Für **Werte des Wellenvektors** an der Grenze der Brillouin-Zone,  $k \sim \pi/a$ ,
  - Laue- bzw. Bragg-Bedingung für die Elektronen erfüllt
    - Reflexion der Elektronen, d.h. stehende Wellen
  - **Ansatz:** Überlagerung von nach rechts und links laufenden ebenen Wellen:  
$$\psi_{\pm} \propto \exp(ikx) \pm \exp(-ikx)$$

- Für **kleine Werte des Wellenvektors** ist  $u(k) \sim$  konstant, d.h.

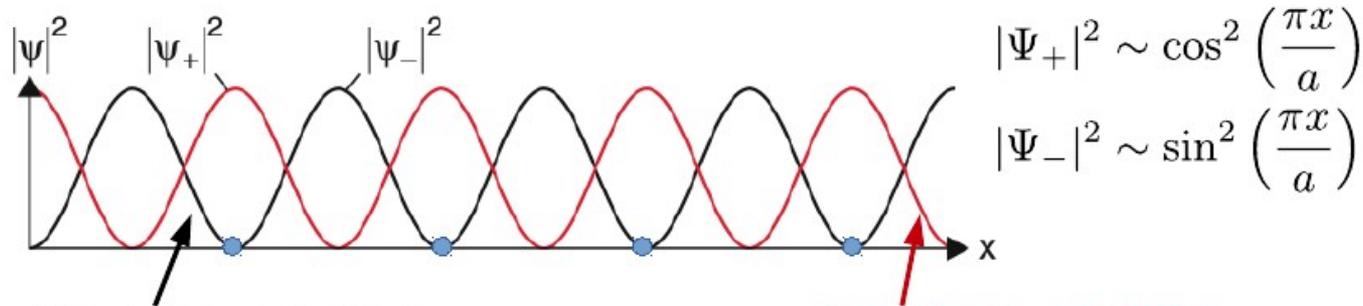
- die Wellenfunktion ist bestimmt durch die ebene Welle,
- Details des Potentials spielen keine Rolle
- die Elektronen sind quasi frei

– Dispersionsrelation  $\hbar\omega(k) = E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$



- Für **Werte des Wellenvektors** an der Grenze der Brillouin-Zone,  $k \sim \pi/a$ ,
- Laue- bzw. Bragg-Bedingung für die Elektronen erfüllt
- Reflexion der Elektronen, d.h. stehende Wellen
- **Ansatz:** Überlagerung von nach rechts und links laufenden ebenen Wellen:

$$\psi_{\pm} \propto \exp(ikx) \pm \exp(-ikx)$$



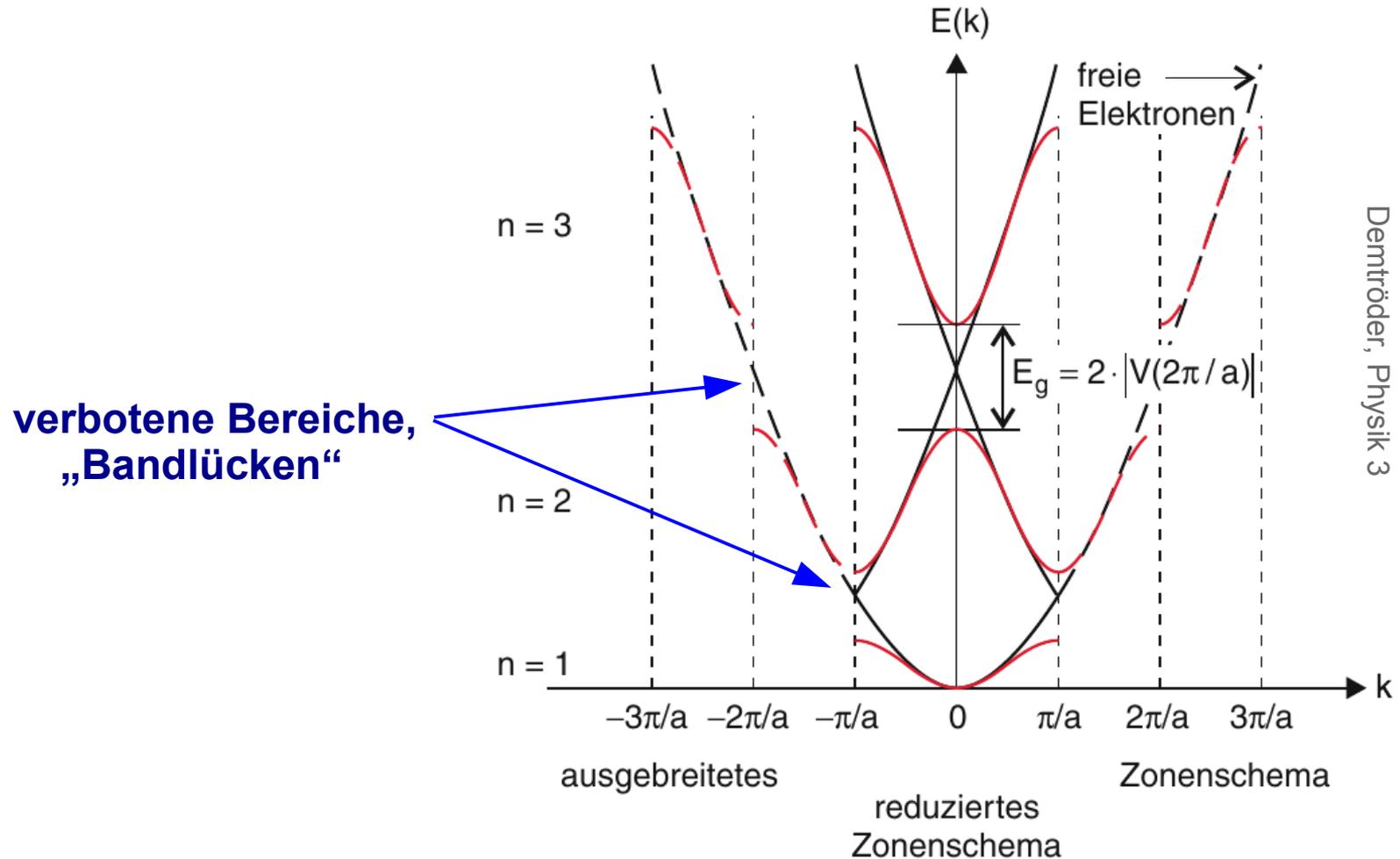
$$|\Psi_+|^2 \sim \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

$$|\Psi_-|^2 \sim \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

Minimale Wahrscheinlichkeit an Gitterpunkten, schwächer gebunden, höhere Energie

Maximale Wahrscheinlichkeit an Gitterpunkten, stärker gebunden, niedrigere Energie

- **Dispersionsrelation anders** als für freie Elektronen  
Laue- bzw. Bragg-Bedingung für die Elektronen erfüllt

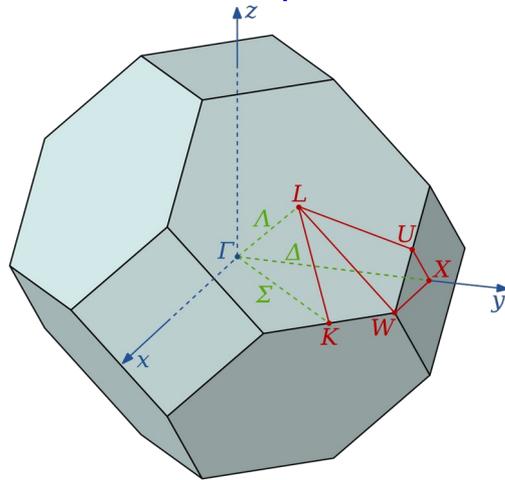


Energieverlauf  $E(k)$  von Elektronen im periodischen Potential mit Periode  $a$

# Reale Bandstruktur

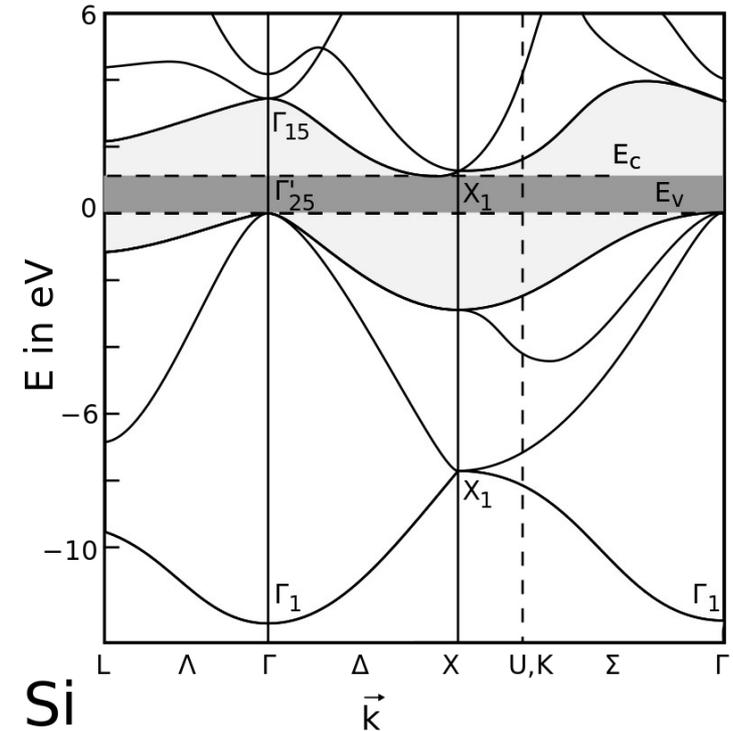
In realen (3d-) Gittern muss die Richtung angegeben werden, entlang derer die Elektron-Energie variiert

Erste Brillouin-Zone eines fcc-Gitters; die Struktur des reziproken Gitters ist bcc.



## Richtungen:

- $\Gamma$  : Zentrum der Brillouin-Zone
- L : Zentrum einer hexagonalen Fläche
- X : Zentrum einer quadratischen Fläche
- W : Eckpunkt
- K : Kantenmitte



Bandstruktur von Silizium im Reduzierten Zonenschema

## Wir halten fest:

- Gitter ändert den Zusammenhang zwischen Energie  $E$  und Wellenvektor  $k$  in der Nähe der Grenzen einer Brillouin-Zone
- an den Rändern der Brillouin-Zone ist  $dE/dk$  gleich null
- dort tritt eine Energielücke für erlaubte Zustände auf, die man auf die Reflexion der Elektronenwelle an der Zonengrenze zurückführen kann
- die Energielücke ist umso größer, je kleiner die räumliche Periode ist; insbesondere kann sie im 3d-Gitter in unterschiedlichen Richtungen verschieden groß sein.

## Wir halten fest:

- Gitter ändert den Zusammenhang zwischen Energie  $E$  und Wellenvektor  $k$  in der Nähe der Grenzen einer Brillouin-Zone
- an den Rändern der Brillouin-Zone ist  $dE/dk$  gleich null
- dort tritt eine Energielücke für erlaubte Zustände auf, die man auf die Reflexion der Elektronenwelle an der Zonengrenze zurückführen kann
- die Energielücke ist umso größer, je kleiner die räumliche Periode ist; insbesondere kann sie im 3d-Gitter in unterschiedlichen Richtungen verschieden groß sein.

## Nomenklatur :

- das letzte besetzte Band heißt „**Valenzband**“ ,  
das erste Band mit freien Zuständen heißt „**Leitungsband**“

Ende Vorlesung 17

und Zeit für Fragen ?